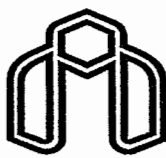


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

عبدالله بن محمد



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد (گرایش حالت جامد)

بررسی خواص ترابری الکتریکی در نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق

استاد راهنما: دکتر حسین عشقی

تحقیق و نگارش: فاطمه شریعتمدار طهرانی

شهریور ۱۳۸۵

چکیده

در دههٔ اخیر، موضوع بسیاری از تحقیقات تجربی و نظری به مواد نیمرسانای نیتروژن دار رقیق اختصاص یافته است. در این مواد ویژگی‌های منحصربه‌فردی مشاهده شده است. از جمله آنها می‌توان به کاهش شدید گاف نواری با افزایش درصد بسیار کوچکی (کمتر از ۵ درصد) نیتروژن به ماده اشاره نمود. همچنین با افزایش همین مقدار اندک نیتروژن افت چشمگیری در تحرک الکترونی و تراکم حامل‌های بار دیده می‌شود. هدف ما بررسی این رفتارها در نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ (غالباً به روش MBE رشد یافته‌اند) و یافتن علل این مشاهدات به کمک تجزیه و تحلیل داده‌های گزارش شده است.

از تحلیل نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی دریافتیم سازوکار پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای در دمای اتاق سازوکار غالب در این ماده است که خبر از تشکیل خوشه‌های نیتروژنی به صورت نامنظم در لایه رشد یافته می‌دهد. علاوه بر این تشکیل تراکم بالای از دررفتگی‌ها و تله‌ها، که حاصل انطباق نظریه‌ها بر داده‌های تجربی تحرک در دماهای پایین است، به علت کاهش بسیار شدید تحرک الکترونی در نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ رقیق نسبت به نمونه‌های بدون نیتروژن باشد. سرانجام شکل‌گیری ترازهای به دام‌اندازنده (تله‌ها) توسط نیتروژن در گاف نواری، سبب کاهش محسوسی در تراکم حامل‌های بار آزاد می‌شود. تراکم این ترازها بستگی به مقدار کسر مولی نیتروژن در نمونه دارد.

فهرست مطالب

| | |
|----|--|
| ۱ | مقدمه..... |
| ۲ | فصل اول: مروری بر مقالات |
| ۷ | مراجع |
| ۱۱ | فصل دوم: ساختار نواری GaN_xAs_{1-x} |
| ۱۱ | ۱-۲ گاف نواری و پارامتر خمش |
| ۱۶ | ۱-۱-۲ مدل Band Anti – Crossing |
| ۱۸ | ۲-۱-۲ مدل k.p |
| ۱۹ | ۳-۱-۲ روش شبه پتانسیل |
| ۲۰ | ۲-۲ جرم مؤثر الکترون |
| ۲۳ | مراجع |
| ۲۶ | فصل سوم: نظریه ترابری حامل‌ها در میدان پایین |
| ۲۷ | ۱-۳ نظریه پراکندگی و سازوکارهای مؤثر در تحرک |
| ۲۸ | ۱-۱-۳ پراکندگی ناخالصی یونیده |
| ۲۹ | ۲-۱-۳ پراکندگی فونونی قطبی - نوری |
| ۳۰ | ۳-۱-۳ پراکندگی پیزو الکترونیک |
| ۳۰ | ۴-۱-۳ پراکندگی فونونی آکوستیک |
| ۳۱ | ۵-۱-۳ پراکندگی آلیاژی کتره‌ای |
| ۳۲ | ۶-۱-۳ پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای |
| ۳۲ | ۷-۱-۳ پراکندگی ناخالصی‌های خنثی |

- ۳-۱-۸ پراکندگی دررفتگی ۳۳
- ۳-۲-۲ تعیین تراکم و نوع بار حامل‌های جریان ۳۴
- ۳-۲-۱ نظریه تراکم حامل‌ها در نیمرسانای GaNAs ۳۵
- ۳-۲-۲ توزیع آماری بار در نیمرسانا ۳۵
- ۳-۲-۳ تراکم الکترون و حفره در تعادل گرمایی ۳۷
- ۳-۲-۴ توزیع تعادلی الکترون‌ها و حفره‌ها در یک نیمرسانای آرایش شده ۴۰
- ۳-۲-۵ معادله خنثایی بار و تراکم‌های الکترون و حفره ۴۴
- ۴۵ مراجع
- فصل چهارم: بررسی خواص ترابری الکتریکی در GaN_xAs_{1-x} نوع n با کسر مولی نیتروژن پایین ($0 < x < 0.02$)**
- ۴-۱-۱ وابستگی دمایی تحرک الکترونی ۴۸
- ۴-۱-۱-۱ تغییرات تحرک الکترونی بر حسب تابعی از دما با روش‌های رشد متفاوت ۴۸
- ۴-۱-۲ تغییرات تحرک الکترونی بر حسب تابعی از دما در
- نمونه‌هایی با xهای متفاوت ۵۳
- ۴-۲-۲ تأثیر غلظت نیتروژن بر تحرک الکترونی GaN_xAs_{1-x} در دمای اتاق ۵۵
- ۴-۳-۳ بستگی الکترونی در GaN_xAs_{1-x} به x در دمای اتاق ۵۹
- ۴-۴-۴ بستگی دمایی تراکم الکترونی در GaN_xAs_{1-x} ۶۲
- ۴-۵-۴ تأثیر بازپخت در تحرک و تراکم الکترونی ۶۳
- ۴-۶-۴ نقش آرایش در تحرک و تراکم الکترونی ۶۶
- ۴-۷-۴ نتیجه‌گیری ۶۸
- ۷۰ مراجع

مقدمه

برای شناخت کامل یک نیمرسانا باید خواص مختلف آن شامل خواص الکتریکی، مکانیکی، شیمیایی، اپتیکی، مغناطیسی و... مورد بررسی قرار گیرند. در این رساله هدف ما آشنایی با خواص ترابری الکتریکی نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($0 < x < 0.05$) است که کاربرد وسیعی در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مانند آشکارسازهای با طول موج بالا ($1.7 - 1.3 \mu\text{m}$) دارند. در فصل اول مروری بر مقالات خواهیم داشت. از آنجائی که ساختار نواری یک نیمرسانا از مهمترین مشخصه‌های آن است، در فصل دوم به توصیف ساختار نواری $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ رقیق پرداخته و تئوری‌های ارائه شده در این مورد را نیز ذکر خواهیم کرد. فصل سوم به سازوکارهای پراکندگی غالب و نیز نظریه تراکم حاملها در این ماده پرداخته و روابط نظری حاکم بر آنها را معرفی می نمائیم. بررسی خواص ترابری الکتریکی در نمونه های مختلف $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ از جمله تحرک و تراکم الکترونی در فصل ۴ مطرح شده است که به تحلیل داده های تجربی پرداخته ایم. در این فصل همچنین تأثیر عواملی مانند بازیخت سریع و آرایش نیز بر روی خواص ترابری الکتریکی بررسی شده است.

فصل اول

مروری بر مقالات

نیمرساناها از مهمترین و کاربردی ترین مواد هستند که در صنایع فوتونیک و اپتوالکترونیک نقش عمده ای ایفا می کنند. این به علت ویژگی خاص این مواد است بطوریکه تراکم و نوع حاملها در آنها قابل کنترل هستند و می توان از آنها برای طراحی قطعات با اهداف مشخص استفاده نمود. طی دههٔ اخیر، بخش وسیعی از پژوهشها و مطالعات روی ترکیبات نیمرسانای گروه III-V نظیر GaP و GaAs معطوف شده است که حاوی مقدار اندکی (با نیتروژن کمتر از ۵ درصد) نیتروژن باشند. معلوم شده است که در این مواد، گاف نواری بطور قابل توجهی کاهش می یابد [۱]. این یک رفتار غیرعادی است و با نیمرساناهای آلیاژی معمول تفاوت زیادی دارد. به این ترکیبات نیمرساناهای جدید، اصطلاحاً نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق (Dilute Nitride Semiconductor) گفته می شود.

نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق III-V-N به صورت آلیاژهای سه تایی مانند: GaNAs، InAsN، GaNP و ... و چهارتایی مانند: AlGaNaS، InGaAsN و ... رشد داده می شوند. ساختار این مواد نیز می تواند بصورت کپه ای (Bulk) یا دوبعدی (QW) باشد.

مسئله مورد توجه ما در این پایان نامه بررسی خواص ترابری الکتریکی در نیمرسانای Ga_nAs_{1-x} کپه ای (Bulk) با رسانندگی نوع n می باشد. در این ماده وقتی درصد نیتروژن وارد شده

پائین باشد، (رفتارهای غیرطبیعی مشاهده شده است، که از آن جمله می‌توان به موارد ذیل اشاره نمود:

- بزرگی قابل ملاحظه پارامتر خمش.
- افزایش جرم مؤثر الکترون.
- کاهش تراکم و تحرک الکترونی.

روشهای رشد: نمونه های GaN_xAs_{1-x} به روش‌های مختلفی رشد داده می‌شوند، از آن جمله انواع روش‌های MBE^1 شامل $RFMBE^2$ ، $MOMBE^3$ ، همچنین $MOCVD^4$ ، $MOVPE^5$ و CBE^6 ، بطوری که روش MBE روش مرسوم‌تری است. زیرلایه مورد استفاده عموماً $GaAs$ و یا Si است [۱۲-۳]. رشد این لایه‌ها غالباً در دماهای نه‌چندان بالا انجام می‌شود [۵ و ۱۳]. مثلاً اگرچه در روش MBE برای رشد $GaAs$ دمای رشد $600^\circ C$ است، برای رشد لایه‌ای از $GaNAs$ دمایی در حدود $500^\circ C$ استفاده می‌شود [۱۴ و ۱۵]. معمولاً برای آرایش نمونه‌ها بصورت نوع n از Si و برای آرایش نمونه به صورت نوع p ، از Be استفاده می‌شود [۳۶-۳۷]. بنا به گزارشات مختلف [۳] نمونه‌های رشد داده شده با وجود هیچگونه آلاینده خواسته‌ای رسانندگی نوع n را از خود نشان داده‌اند. محدوده تغییرات غلظت نیتروژن از صفر تا حدود ۲٪ است. در صورت بالاتر رفتن غلظت نیتروژن از این مقدار به علت بزرگتر بودن ثابت شبکه $GaNAs$ نسبت به زیر لایه $GaAs$ ، در لایه رشد یافته کرنش و دررفتگی‌هایی ایجاد می‌شود که می‌تواند بر خواص الکتریکی و اپتیکی قطعه حاصل از این لایه‌ها تأثیر بگذارد [۳۶].

ساختار نواری: با توجه به اندازه گیری های جذبی، معلوم شده است که GaN_xAs_{1-x} دارای گاف

نواری مستقیم است [۱۷-۱۵ و ۱۳ و ۱۱]. اما از مطالعه دیگری که انجام شده است نتیجه بدست آمده

-
- 1- Molecular Beam Epitaxy
 - 2- Radio Frequency Molecular Beam Epitaxy
 - 3- Metal – Organic Molecular Beam Epitaxy
 - 4- Metal – Organic Chemical – Vapor Deposition
 - 5- Phase Epitaxy Metal – Organic Vapor
 - 6- Chemical Beam Epitaxy

بدین صورت است که تا مرز $x = 0.255$ گاف نواری مستقیم و از آن به بعد غیر مستقیم است [۱۸].

برخلاف آلیاژهای نیمرسانای III-As که گاف نواری آنها غالباً با محاسبه میانگین خطی - وزنی گاف های نواری اجزاء بدست می آید، در نیتروژن دارهای رقیق تغییرات گاف نواری با یک خمش بزرگ همراه است که ناشی از تفاوت قابل ملاحظه به لحاظ اندازه اتمی و نیز الکترونگاتیویته نیتروژن با اتمهای جایگزین شده As است. مقدار این پارامتر در مورد $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ بین $16 - 26 \text{ eV}$ بوده و شدیداً وابسته به غلظت نیتروژن است و با افزایش نیتروژن مقدار آن کم می شود [۱۹]. این در حالی است که در آلیاژهای نیمرسانای مرسوم، مقدار پارامتر خمش کمتر از 1 eV و ثابت است [۲۰ و ۲۱].

برای مثال گاف نواری GaAs در دمای اتاق تنها با افزایش 1% نیتروژن از 1.42 eV به 1.25 eV تنزل پیدا می کند. علاوه بر خمش بزرگ گاف نواری، اضافه شدن نیتروژن به مقدار ناچیز با کاهش ثابت شبکه ماده نیز همراه است. این امر برخلاف آلیاژهای معمولی III-V است که با کاهش ثابت شبکه، گاف نواری افزایش می یابد [۱۹].

نظریه BAC (Band Anti - Crossing) این نحوه رفتار گاف نواری را در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ بخوبی پیش بینی می کند. بنابر این نظریه با افزایش نیتروژن به GaAs، نوار رسانش GaAs به دو زیرنوار غیرسهمی شکافته می شود [۲۵] و تأثیر چندانی بر نوار ظرفیت ندارد [۲۴ و ۲۲]. مدل BAC که توضیح ساده و قابل تحلیلی برای محاسبه خواص الکتریکی و اپتیکی آلیاژهای III-V-N بدست می دهد توسط Shan و همکارانش [۲۷] توسعه یافته است.

جرم مؤثر الکترون: همانگونه که گفته شد در نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق، قرارگیری نیتروژن در شبکه GaAs سبب اختلال در نوار رسانش می گردد که این خود به تغییر جرم مؤثر الکترون می انجامد [۱۹]. مشاهدات تجربی نشان می دهند که با اضافه شدن 1% نیتروژن در GaAs، جرم

مؤثر الکترون از $m_0/0.67$ به $m_0/1$ افزایش می یابد [۲۳]. لازم به ذکر است که این نیز رفتاری غیر طبیعی است، زیرا در نیمرساناهای معمولی با کاهش گاف نواری، جرم مؤثر الکترون نیز کاهش می یابد [۴۰]. علاوه بر نظریه BAC نظریه دیگری موسوم به $k \cdot p$ نیز پیش بینی می کند که با افزایش نیتروژن در GaNAs رقیق، جرم مؤثر الکترون افزایش می یابد، بطوریکه با افزایش x تا ۱٪ آهنگ تغییرات بسیار به سرعت صورت گرفته و از آن پس روند آن بسیار کند می شود [۱۹].

تحرك الکترون: از آنجا که تحرك الکترونی متأثر از دو عامل است، سازوکارهای پراکندگی الکترون و جرم مؤثر الکترون، با وارد شدن نیتروژن به GaAs اختلال بزرگی در نوار رسانش ایجاد می شود که به پراکندگی قوی آلیاژی^۱ منجر می گردد. بنابر گزارشات محققین [۲۹ و ۳۲] بنظر می آید این پراکندگی سازوکار غالب پراکندگی الکترونی در سیستم GaNAs باشد. در GaAs، در دمای اتاق تحرك الکترونی تقریباً $8500 \text{ cm}^2 / V \cdot s$ گزارش شده است [۳۹ و ۱۹]، در حالیکه در نمونه های GaNAs با افزایش مقدار ناچیزی نیتروژن، تحرك الکترونی به سرعت به مقدار $100-400 \text{ cm}^2 / V \cdot s$ کاهش می یابد [۲۹ و ۳۲]. این تفاوت می تواند به نوع توزیع فضائی نیتروژن در سیستم GaNAs و نیز کیفیت رشد نمونه ها مربوط باشد [۳]. در GaNAs پیش بینی های نظری حاکی از آن است که منشأ این پراکندگی علاوه بر اتمهای منفرد نیتروژن، جفتهای N-N و بویژه خوشه های نیتروژنی باشد [۳۳]. مطالعات تجربی نشان داده اند وابستگی دمایی تحرك الکترونی در نمونه های مورد مطالعه در بازه دمایی ۱۰۰-۴۰۰ K بسیار ضعیف بوده و می توان از وابستگی دمایی آن صرف نظر کرد [۳۳ و ۳۴]. بدین ترتیب با توجه به تأثیر نیتروژن هم در افزایش پراکندگی الکترونی و هم در افزایش جرم مؤثر آنها، روی هم رفته تحرك الکترونی کاهش شدیدی پیدا می کند.

تراکم الکترونی: اندازه گیری های تجربی Adamcyk [۴] با روش مقاومت ویژه، نشانگر آن بوده اند که با افزایش غلظت نیتروژن در GaNAs، تراکم حاملها کاهش می یابد. این امر به تشکیل ترازهای

به دام اندازه‌نده (trap) در گاف نواری نسبت داده شده‌اند [۴]. اندازه‌گیری‌های Ishikawa [۳۹] حاکی از آن است که وابستگی دمایی تراکم الکترونی در GaNAs رقیق بسیار ناچیز بوده و تقریباً مقدار ثابتی در کل گستره دمایی مابین ۷۷-۱۰۰K دارد [۳۶].

کاربردها: کاهش شدید گاف نواری در آلیاژهای نیتروژن‌دار رقیق در بازه کوچکتر از ۵ درصد منجر به کاربردهای فراوانی در الکترونیک، اپتوالکترونیک و مخابرات نوری شده است که از آن جمله می‌توان به مواردی نظیر LED ها، لیزرهای با طول موج بلند ($1.7\mu\text{m} - 1.3\mu\text{m}$) (MID-IR)، سلولهای خورشیدی با بازدهی بالا، آشکارسازهای نوری و همچنین ترانزیستورهای دوقطبی چندپیوندی ناهمگن^۱ (HBTs) اشاره نمود [۴۰].

- 1- M. Weyers, M. Sato, H. Ando, Jpn. J. Appl. Phys. **31**, L853 (1992)
- 2- F. Masia, et al., '*Early manifestation of localization effects in diluted Ga(AsN)*', Appl. Phys. Lett. **82**, 4474 (2003)
- 3- A. Hashimoto, et al., '*Hall electron mobility versus N spatial distribution in III-V-N systems*', J. Cryst. Growth. **278**, 532-537 (2005)
- 4- M. Adamcyk, '*Epitaxial Growth Of Dilute Nitride-Arsenide Compound Semiconductors By Molecular Beam Epitaxy*', PhD Thesis, University Of British Columbia, (2002)
- 5- C. W. Tu, et al. '*Material properties of dilute nitrides: Ga(In)NAs and Ga(In)NP*' J. Cryst. Growth. **228**, 7-11 (2006)
- 6- G. Pozina, I. Ivanov, B. Monemar, J. V. Thordson, G. Andersson, '*Properties of molecular-beam epitaxy-growth GaNAs from optical spectroscopy*' J. Appl. Phys. **84**, 3830 (1998)
- 7- I. A. Buyanova et al. '*Hydrogen-induced improvements in optical quality of GaNAs alloys*' Appl. Phys. Lett. **84**, 3662 (2003)
- 8- F. Dimroth, et al. '*Influence of Sb, Bi, Ti, and B on the incorporation of N in GaAs*' J. Appl. Phys. **91**, 3687 (2002)
- 9- S. Ahmed, et al. '*Implantation induced electrical isolation of sulphur doped GaN_xAs_{1-x} layers*', Nucl. Instr. And Meth in Phys. Res. B **237**, 102 (2005)
- 10- H. F. Liu et al., '*Temperature Dependence of Raman Spectrum of GaNAs Ternary Alloys Grown by Molecular Beam Epitaxy*', Thin solid films (2005) in press

- 11- J. D. Perkins et al., '*Nitrogen-Activated Transition Level Repulsion and Band Gap Reduction in GaN_xAs_{1-x} with x<0.03*'. Phys. Rev. Lett. **82**, 3312 (1999)
- 12- J. Salzman, H. Temkin, '*III-V-N compounds for infrared applications*', Material Science and Engineering **B50**, 148 (1997)
- 13- W. G. Bi, C. W. Tu, '*Bowing parameter of the band-gap energy of GaN_xAs_{1-x}*', Appl. Phys. Lett. **70**, 1608 (1997)
- 14- R. Mouillet et al. '*Role of nitrogen in the mobility drop of electrons in modulation doped GaAsN/AlGaAs heterostructures*', Solid State Communications **126**, 333 (2003)
- 15- M. Sato, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **395**, 285 (1996)
- 16- M. Kondow, K. Uomi, K. Hosomi, T. Mozume, Jpn. J. Appl. Phys. **33**, L1056 (1994)
- 17- W. G. Bi, C. W. Tu, Appl. Phys. Lett. **70**, 1608-1616 (1997)
- 18- A. Gueddim, et al. '*dependence of electronic properties on nitrogen concentration in GaN_xAs_{1-x} dilute alloy*', Journal of Physics and Chemistry of Solid **67**, 1618 (2006)
- 19- I. A. Buyanova, W. M. Chen, *Physics and Application of Dilute Nitrides*, Taylor & Francis Books. INC (2004)
- 20- P. R. C. Kent, A. Zunger, '*Theory of electronic structure evolution in GaNAs and GaPN alloys*', Phys. Rev. B **64**, 115208 (2001)
- 21- I. A. Buyanova, W. M. Chen, B. Monemar, '*Electronic properties of Ga(In)NAs alloys*', MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **6**, 2 (2001)
- 22- P. Krispin, et al. J. Appl. Phys. **89(11)**, 6294-6301 (2001)
- 23- C. Skierbiszewski, et al. '*Effective mass and conduction band dispersion of GaAsN/GaAs quantum wells*', Physica E **13**, 1078-1081 (2002)

- 24- I. Vurgaftman, J.R. Meyer, '*Band parameters for nitrogen-containing semiconductors*', Appl. Phys. Rev. **94**, 3675 (2003)
- 25- W. Walukiewicz, '*Narrow band gap group III-nitride alloys*', Physica E **20**, 300-307 (2003)
- 26- J. A. Var Vechten, T. K. Bergstresser, Phys. Rev. B **8**, 3351 (1970)
- 27- W. Shan, et al. Phys. Rev. Lett. **82**, 1221 (1999)
- 28- S. Fahy, E. P. O'Reilly, '*Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors*', Physica E **21**, 881-885 (2004)
- 29- C. Skierbiszewski, Semicond. Sci. Technol. **17**, 803 (2002)
- 30- J. F. Geisz, D. J. Friedman, Semicond. Sci. Technol. **17**, 769 (2002)
- 31- J. F. Geisz, et al., J. Cryst. Growth **195**, 401 (1998)
- 32- W. Li, et al., Phys. Rev. B **64**, 113308 (2001)
- 33- S. Fahy, E. P. O'Reilly, '*Intrinsic limits on electron mobility in dilute nitride semiconductors*', Appl. Phys. Lett. **83**, 3731 (2003)
- 34- D. L. Young, J. F. Geisz, T. J. Coutts, '*Nitrogen-induced decrease of the electron effective mass in GaN_xAs_{1-x} thin film measured by thermomagnetic transport phenomena*', Appl. Phys. Lett. **82**, 1236 (2003)
- 35- R. J. Kaplar, et al. J. Appl. Phys. **90(7)**, 3405-3408 (2001)
- 36- E. Strohm, '*Optical and Electrical Properties Of Dilute Nitride GaN_xAs_{1-x} Alloys*', master of science thesis, University Of British Columbia (2002)
- 37- C. W. Tu, W. M. Chen, I. A. Buyanova, J. S. Hwang, J. Cryst. Growth **288**, 7 (2006)

- 38- F. Ishikawa, G. Mussler, K.-J. Friedland, H. Kostial, K. Hagenstein, '*Impact of N-induced potential fluctuations on the electron transport in Ga(As,N)*', Appl. Phys. Lett. **87**, 262112 (2005)
- 39- J. Singh, '*Semiconductor Optoelectronics*', McGraw-Hill, Inc. (1995)
- 40- N. Balkan, IEE Proc. Optoelectron. **150**, No. 1 (2003)

فصل دوم

ساختار نواری GaN_xAs_{1-x}

۱-۲ گاف نواری و پارامتر خمش

آلیاژسازی یکی از روشهای کاربردی بسیار معمول برای اصلاح خواص مواد نیمرسانا برای کاربردهای خاص است. در بسیاری از موارد، پارامترهای نیمرساناهای آلیاژی، با روابط ساده ای بر حسب پارامترهای مربوط به اجزاء تشکیل دهنده بدست می آید [۱]. برای مثال گاف نواری یک آلیاژ دوتایی از نیمرساناهای A و B که به نسبت کسر مولی x با یکدیگر به صورت کتره ای در شبکه بلوری ترکیب شده باشند (A_xB_{1-x}) با رابطه زیر داده می شود [۲]:

$$E_{alloy}^g(x) = xE_A^g + (1-x)E_B^g \quad (1-2)$$

این رابطه «قانون وگارد»^۱ نام دارد. در رابطه فوق E_{alloy}^g گاف نواری نیمرسانای آلیاژی، E_A^g و E_B^g به ترتیب گافهای نواری نیمرساناهای پایه است. همانطور که دیده می شود رابطه (۱-۲) یک عبارت خطی بر حسب x است. اما در بعضی آلیاژها یک جمله اضافی نیز در این رابطه وارد می شود. مثلاً برای GaN_xAs_{1-x} داریم [۱ و ۵ و ۹-۷]:

$$E_g(GaN_xAs_{1-x}) = xE_g(GaN) + (1-x)E_g(GaAs) - bx(1-x) \quad (2-2)$$

1 - Vegard's Law

علت وارد شدن پارامتر b این است که آلیاژها غالباً به صورت ایده آل یعنی آلیاژ کتره‌ای^۱ رشد پیدا نکرده و اغلب خوشه‌هایی^۲ در آلیاژ تشکیل می‌شوند. برای مثال شکل‌گیری آلیاژ کتره‌ای GaN_xAs_{1-x} بدین معنی است که در اطراف اتم Ga به احتمال $x\%$ اتم‌های نیتروژن و به احتمال $(1-x)\%$ اتم‌های As وجود داشته باشند. اما همواره چنین اتفاقی نمی‌افتد و معمولاً مقداری بی‌نظمی در قرارگیری اتمها در شبکه بلوری وجود دارد. بدین ترتیب بزرگی مقدار ضریب b نشانگر بی‌نظمی بیشتر در ماده آلیاژی است.

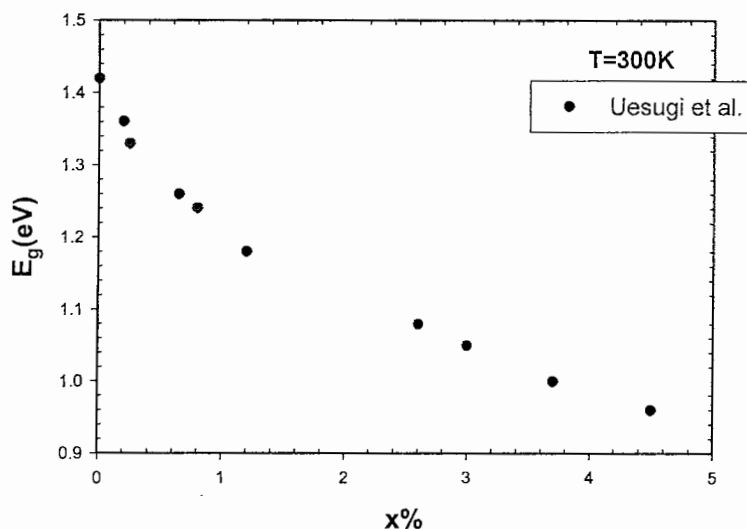
با توجه به توضیحات فوق می‌توان دریافت که در مورد ماده GaN_xAs_{1-x} با توجه به بزرگی مقدار پارامتر خمش آن (جدول ۱-۲)، رشد بلور با بی‌نظمی شدید همراه است. افزایش شدید پارامتر خمش در GaN_xAs_{1-x} به دو عامل نسبت داده می‌شود:

۱- کوچک بودن اندازه اتمهای نیتروژن نسبت به اتمهای As (شعاع اتم نیتروژن 0.068 nm و 0.121 nm در مقایسه با شعاع اتم آرسنیک 0.121 nm)

۲- الکترون‌گاتیوتیة بالای نیتروژن ($3/04$) در مقایسه با اتمهای As ($2/18$) [۱۴-۱۰ و ۱۶].

کاهش شدید گاف نواری در x های کوچکتر با سرعت بیشتری صورت می‌گیرد. شکل (۱-۲) تغییرات E_g را بر حسب x در GaN_xAs_{1-x} در دمای اتاق نشان می‌دهد که حاصل از داده‌های تجربی [۳۰] است و حاکی از کاهش سریع گاف نواری ماده مورد نظر ما در x های کوچک ($0 < x < 1$) است که خود به معنی تشکیل تجمعات خوشه‌ای نیتروژن در لایه می‌باشد و با افزایش بیشتر x تا حدود 5% به مرور کاهش می‌یابد.

1 - Random Alloy
2 - Clusters



شکل (۱-۲): تغییرات گاف نواری GaN_xAs_{1-x} بر حسب مقدار نیتروژن (x) [۳۰].

Tisch و همکارانش [۱۶] یک مطالعه دقیق روی خمش در GaNAs داشته‌اند. مطالعه آنها با استفاده از اندازه‌گیری‌های گذار اپتیکی^۱ در دمای اتاق بوده است. مقدار اندازه‌گیری شده برای پارامتر خمش برای مقدار بسیار کم نیتروژن، $x < 0.001$ ، حدود 0.40 eV و در محدوده $0.05 < x < 0.08$ حدود 0.75 eV بدست آمده است. آنها از معادله زیر استفاده کردند:

$$b(x) = b_0 + b_1 e^{-x/x_1} + b_2 e^{-x/x_2} \quad (3-2)$$

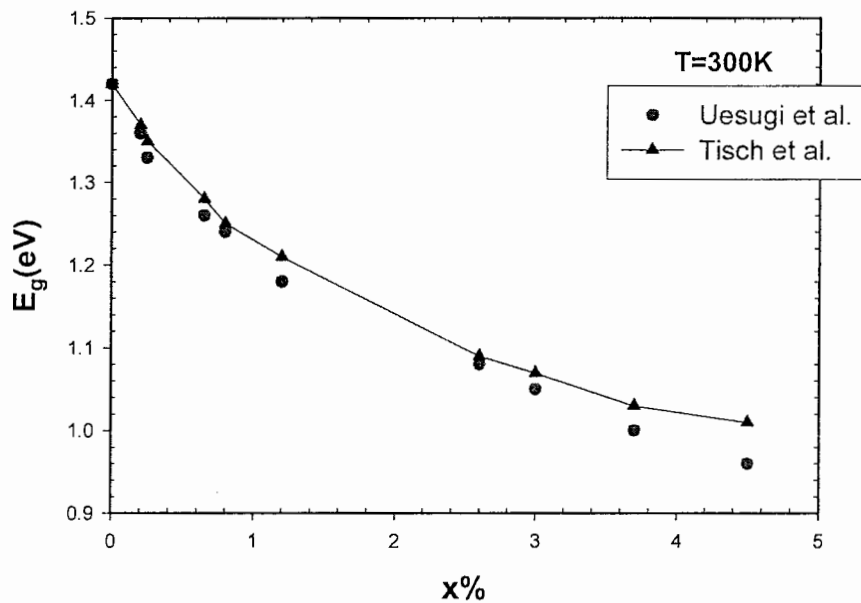
با انطباق این معادله روی داده‌های تجربی گاف نواری مقادیر ثابت بصورت زیر بدست آمده‌اند:

$$b_0 = 0.75 \text{ eV} \quad x_1 = 0.26 \%$$

$$b_1 = 21.1 \text{ eV} \quad x_2 = 3.3 \%$$

$$b_2 = 15.9 \text{ eV}$$

در شکل (۲-۲)، خط پر خمش گاف نواری حاصل از معادله (۳-۲) را نشان می‌دهد.



شکل (۲-۲): گاف نواری انرژی GaN_xAs_{1-x} بر حسب غلظت نیتروژن (x).

چندین توضیح برای کاهش شدید گاف نواری در آلیاژهای GaNAs در xهای کوچک ارائه شده است. محاسبات نظری نشان می‌دهند که ترازهای انرژی عناصر با الکترونگاتیوی بالا (مانند نیتروژن) سبب ایجاد یک تراز بالای نوار رسانش و نزدیک لبه آن می‌شود. در GaNAs مکان ترازهای نیتروژن، 0.23 eV بالاتر از لبه نوار رسانش GaAs ذکر شده است [۱]. افزایش بیشتر نیتروژن در GaNAs تا حد آلیاژی سبب ضعیف شدن برهم‌کنش بین ترازهای نیتروژن و نوار رسانش شده و باعث کاهش سرعت تغییرات گاف نواری می‌گردد [۱]. به منظور توجیه کاهش گاف نواری در مواد نیتروژن‌دار رقیق در سالهای اخیر چندین نظریه بیان شده است که به بیان برخی از آنها می‌پردازیم.

۱-۱-۲ مدل Band Anti-Crossing (BAC)

مدل BAC توسط Shan و همکارانش معرفی شد [۱۷]. این مدل وابستگی آلیاژ GaN_xAs_{1-x} را به تأثیر نیتروژن، از طریق شکافتگی نوار رسانش توضیح می‌دهد. شکافتگی به علت اختلال ایجاد شده توسط نیتروژن رخ می‌دهد که با افزایش تراکم نیتروژن، بیشتر می‌شود. شکل ۲-۳ (الف) رفتار برهم‌کنشی بین حالت جایگزیده نیتروژن های منفرد و نوار رسانش GaAs را نشان می‌دهد. نوارهای رسانش جدید با E_- و E_+ نشان داده می‌شوند. حالت انرژی ایجاد شده توسط نیتروژن، E_N با یک انرژی ثابت به صورت خط چین نشان داده شده است که ناشی از طبیعت جایگزیده حالت الکترونی نیتروژن می‌باشد. بدین ترتیب بر اثر برهم‌کنش این تراز و نوار رسانش GaAs، $E_M(k)$ ، نوارهای انرژی E_- و E_+ شکل می‌گیرد. شرط این برهم‌کنش وجود تقارن بین حالت‌های توابع موج وابسته به این تراز و نوار رسانش می‌باشد. مدل BAC فقط شکافتگی نوار رسانش را توضیح می‌دهد و بطور موفقیت آمیزی، افزایش جرم مؤثر را نیز پیش‌بینی می‌کند [۱۸-۱۹].

مزیت مدل BAC این است که یک بیان تحلیلی ساده برای جدایی نوارهای رسانش و وابستگی جرم مؤثر به مقدار نیتروژن (x) ارائه می‌کند. نوارهای جدید E_- و E_+ از معادله زیر بدست می‌آیند:

$$E_{\pm}(k) = \frac{1}{2} \left\{ [E_M(k) + E_N] \pm \sqrt{(E_N - E_M(k))^2 + 4xV^2} \right\} \quad (۲-۴)$$

که در آن:

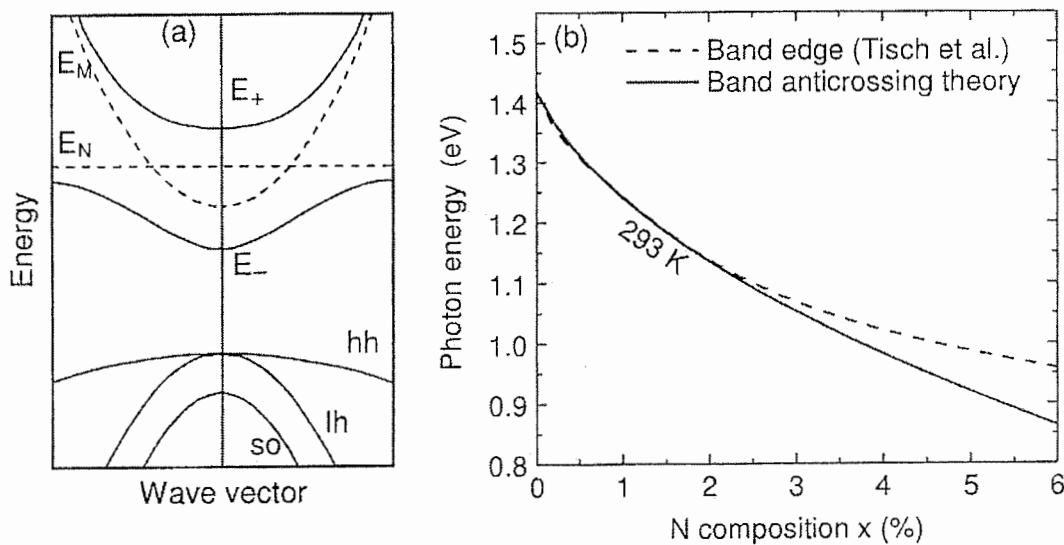
E_N انرژی حالت‌های نیتروژن جایگزیده :

$E_M(k)$ نوار رسانش میزبان :

V پارامتر جفت شدگی :

x کسر مولی نیتروژن :

همه انرژیها نسبت به بالای نوار ظرفیت بلور میزبان مختل نشده، اندازه گیری می شوند. در شکل ۳-۲ (الف) خط پر، گاف نواری GaN_xAs_{1-x} بر حسب تابعی از ترکیب نیتروژن را نشان می دهد که از معادله (۴-۲) بدست آمده است. مقادیر استفاده شده برای E_N و V به ترتیب $1/65$ eV و $2/7$ eV می باشند و مقدار $E_M(0) = 1/42$ eV که همان گاف نواری GaAs است. منحنی خط چین در شکل ۳-۲ (ب) گاف نواری GaN_xAs_{1-x} که توسط Tisch و همکارانش [۱۶] اندازه گیری شده است را نشان می دهد.



شکل ۳-۲ (الف) نمایش شماتیک از مدل BAC در مورد GaN_xAs_{1-x} . (ب) محاسبات نظری مبتنی بر BAC و اندازه گیریهای تجربی [۱۶] گاف انرژی نواری GaN_xAs_{1-x} بر حسب تابعی از مقدار نیتروژن (x).

همانگونه که پیداست به ازای $x < 0.3$ مدل BAC با نتایج تجربی همخوانی بسیار خوبی را نشان می دهد و در x های بزرگتر اختلاف به مرور بزرگ و بزرگتر می شود. مدل BAC پیش بینی می کند که گاف نواری در نزدیکی $x \approx 0.3$ به صفر می رسد، در حالیکه نتایج تجربی حاکی از آن است که کمترین مقدار گاف نواری به ازای $x = 0.40$ به 300 meV می رسد [۱۶]. بدین ترتیب به نظر

می‌آید مدل BAC تا گستره $x < 0.03$ پیش‌بینی مناسبی داشته ولی در مقادیر بالاتر x چنین نیست [۱۹].

تأثیر حضور اتمهای نیتروژن بر گاف نواری را می‌توان در حالت‌های زیر مورد بررسی قرار داد:

(۱) اتمهای منفرد، غیر منفعل و جایگزین شده

(۲) جفت‌های N-N

(۳) اتمهای نیتروژن که بوسیله اتمهای هیدروژن منفعل شده‌اند.

هم نظریه و هم آزمایش‌ها در حد فوق رقیق ($x < 0.01$) نشان داده‌اند که در GaN_xAs_{1-x} حضور هر اتم نیتروژن منفرد و جانشین شده یک تراز ناراستی در بالای لبه نوار رسانش ایجاد می‌کند. (حدود $1/65$ eV بالاتر از قله نوار ظرفیت GaAs)، در حالی که جفت‌های N-N یک تراز در نزدیکی لبه نوار رسانش ایجاد می‌کند ($1/51$ eV بالاتر از قله نوار ظرفیت). در مدل BAC این ترازهای ناراستی، با لبه نوار رسانش مربوط به ماده میزبان (GaAs) برهم‌کنش کرده به کاهش گاف نواری می‌انجامد. این کاهش با زیادتر شدن غلظت نیتروژن‌های منفرد سرعت بیشتری پیدا می‌کند [۲۰]. در روش‌های رشدی که گاز هیدروژن مشارکت دارد، پیوندهای N-H تشکیل شده که تأثیر حالت‌های مربوط به نیتروژن را از بین می‌برد و گاف انرژی به مقدار اولیه مربوط به GaAs بر می‌گردد [۲۱-۲۰].

۲-۱-۲ مدل $k.p$:

مدل BAC انگیزه‌ای برای توسعه روش $k.p$ ۱۰ نواری شد [۲۲ و ۲۳]. تئوری $k.p$

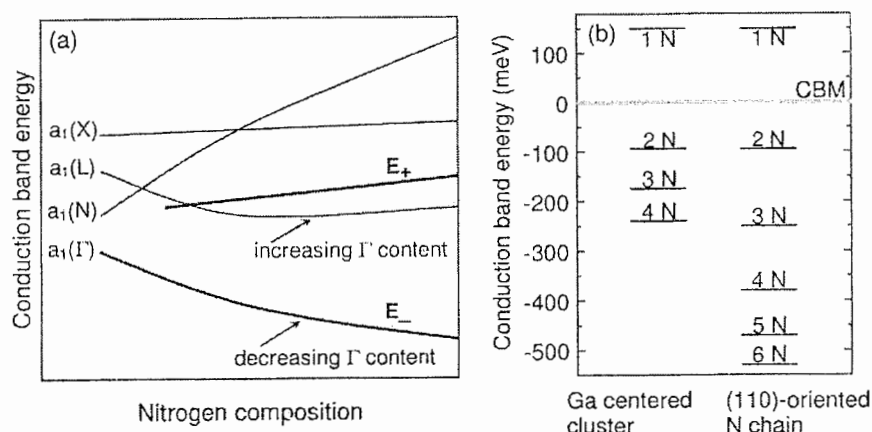
پراکندگی نوارها را با یک بردار موج کوچک k ، دقیقاً توصیف می‌کند. این روش بطور وسیعی برای مطالعه ساختارهای چاه کوانتومی و آلیاژهای نیمرسانای III - V به کار گرفته می‌شود.

روشهای ۶ نواری و ۸ نواری $k.p$ برای توصیف جفت شدگی بین حالت‌های نوار ظرفیت و نوار رسانش استفاده می‌شود. در روش $k.p$ با ۱۰ نوار، برهم‌کنش بین حالت‌های اسپینی که بوسیله نیتروژن ایجاد شده‌اند و نوار رسانش (آن گونه که در مدل BAC مطرح شد) در نظر گرفته می‌شود. روش ۱۰ نواری $k.p$ یک توصیف دقیق از حالت‌های انرژی در چاه‌های کوانتومی GaNAs ارائه می‌دهد [۱۹].

۳-۱-۲ روش شبه پتانسیل (مدل EPM):

روش شبه پتانسیل، یک مدل نظری میکروسکوپی است که برای محاسبه تابع موج و نوارهای انرژی نیمرساناها به کار می‌رود. روش تجربی شبه پتانسیل (EPM) برای پیش‌بینی وابستگی خمش گاف نواری به ترکیب نیتروژن و حالت‌های الکترونی جایگزیده در GaNAs به کار می‌رود [۲۴].

این روش از یک ابرشبکه تناوبی برای توصیف ساختار اتمی سیستم مورد مطالعه بهره می‌گیرد. تفاوت اصلی بین مدل BAC و EPM در منشأ نوار E_+ است. در مدل BAC، نوار E_+ ناشی از برهم‌کنش نوار رسانش و حالت جایگزیده نیتروژن است در حالیکه در روش EPM، نوارهای E_- و E_+ از اختلاط حالت‌های $a_1(X)$ و $a_1(L)$ و $a_1(\Gamma)$ که مربوط به موقعیت ته نوار رسانش در مکان‌های X ، L و Γ در منطقه بریلوئن هستند، با سهم ناچیز حالت نیتروژن ($a_1(N)$)، ناشی می‌شود. شکل (۲-۵) یک بیان شماتیک از محاسبات EPM را در محدوده $x=0-0.1$ نشان می‌دهد [۲۴]. Mattila و همکارانش [۲۵] نشان دادند که انرژی تراز نیتروژن به سرعت با افزایش غلظت آن، بالا می‌رود و آن گونه که در مدل BAC فرض شده بود، ثابت نمی‌ماند.



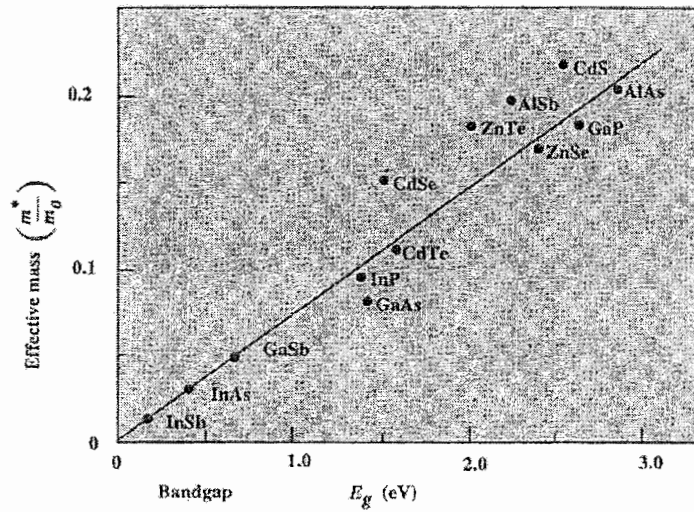
شکل (۲-۵): (الف) طرح شماتیک نوارهای رسانش GaNAs در نظریه شبه پتانسیل بر حسب تابعی از مقدار نیتروژن. (ب) انرژیهای حالت‌های خوشه‌ای نیتروژن در GaAs که به روش شبه پتانسیل محاسبه شده‌اند.

۲-۲ جرم مؤثر الکترون

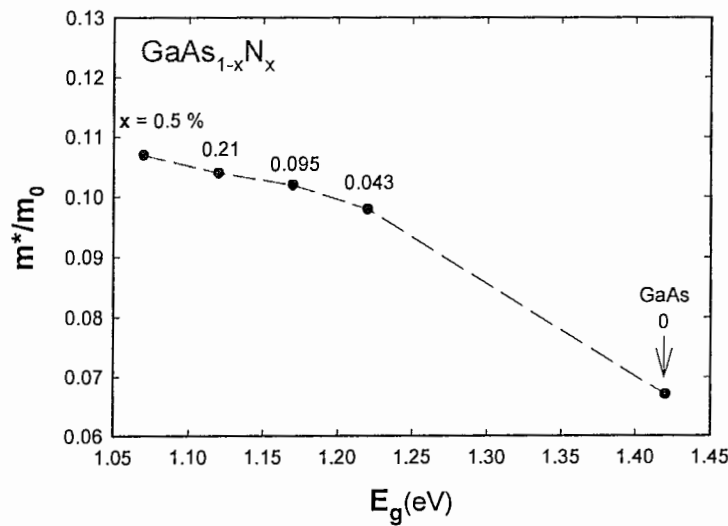
جرم مؤثر حامل‌های بار از مهمترین پارامترها در یک نیمرساناست که در بزرگی تحرک حاملها تأثیر بسزایی داشته و این خود از جمله پارامترهای بسیار مهم در کاربردهای قطعات نیمرسانا در الکترونیک و اپتوالکترونیک می‌باشد.

در نیمرساناهای نیتروژن دار رقیق وارد کردن نیتروژن به نیمرسانای متداول III-V نوار رسانش را مختل کرده و در نتیجه بر جرم مؤثر الکترونهای رسانشی تأثیر می‌گذارد. محاسبات نظری و اندازه گیری‌های تجربی مختلفی برای تعیین m_e^* به کار رفته‌اند. اما مقادیر بدست آمده برای آن در محدوده وسیعی قرار می‌گیرند، برخلاف آنچه برای خمش گاف نواری اتفاق افتاده بود [۱].

در نیمرساناهای معمولی و نیز آلیاژهای نیمرسانا با افزایش گاف نواری، جرم مؤثر نیز افزایش می‌یابد (شکل ۲-۶)؛ اما در GaN_xAs_{1-x} با افزایش گاف نواری جرم مؤثر کاهش می‌یابد (شکل ۲-۷). این امر ناشی از اختلال نوار رسانش در این ماده است [۱].



شکل (۶-۲) تغییرات جرم مؤثر الکترون بر حسب گاف نواری در آلیاژهای نیمرسانای معمولی [۲].



شکل (۷-۲) تغییرات جرم مؤثر الکترون در GaN_xAs_{1-x} بر حسب گاف نواری [۳۱].

مدل BAC یک بیان ساده برای جرم مؤثر الکترون ارائه می‌دهد. با استفاده از معادله (۴-۲)

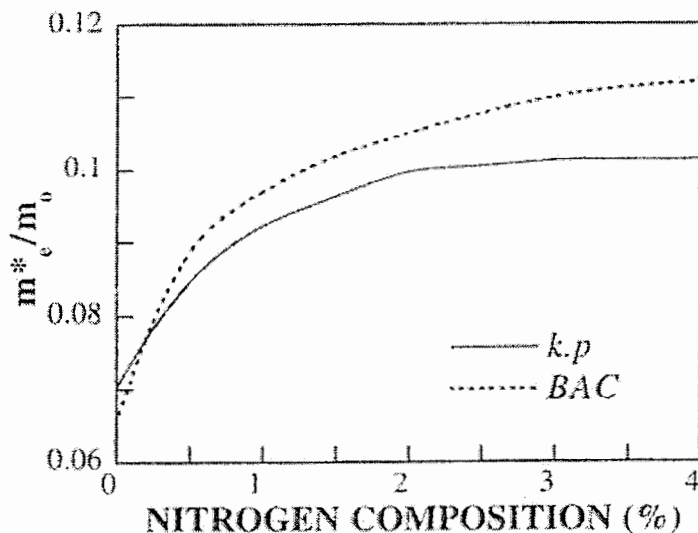
و روابط مربوط به جرم مؤثر نتیجه نهایی بصورت زیر ساده می‌شود:

$$m^* = m_M \left(1 + \frac{xV^2}{(E_N - E_-)^2} \right) \quad (۵-۲)$$

که m_M جرم مؤثر الکترون در بلور میزبان است.

شکل (۸-۲) جرم مؤثر الکترون در GaN_xAs_{1-x} که با معادله (۵-۲) محاسبه شده را نشان می‌دهد. این مدل پیش‌بینی می‌کند که جرم مؤثر الکترون تا ۱٪ از $0.067m_0$ با آهنگ سریعی تا حدود $0.1m_0$ افزایش می‌یابد و از آن پس به مقداری ثابت تقریباً در همین حدود میل می‌کند. پیش‌بینی مدل BAC برای جرم مؤثر را نمی‌توان کاملاً درست پنداشت. اگر چه پیش‌بینی آن برای گاف نواری بسیار خوب است، لکن در پیش‌بینی دقیق جرم مؤثر چندان موفق نمی‌باشد. با وجود این در پیش‌بینی غیرسهمی بودن نوار رسانش و افزایش جرم مؤثر با نتایج تجربی سازگار است [۲۷ و ۲۶ و ۱۸]. مدل $k.p$ با احتساب یک برهم‌کنش اضافی بین حالت‌های نواری و نوار کاملاً غیرسهمی رسانش در مقایسه با مدل BAC، در x های کوچک، یک مقدار اضافی در آن مشاهده می‌شود [۱].

شکل (۸-۲) پیش‌بینی‌های حاصل از مدل BAC و $k.p$ را نشان می‌دهد.



شکل (۸-۲) پیش‌بینی‌های مدل BAC و $k.p$ در مورد جرم مؤثر الکترون در GaN_xAs_{1-x} .

- 1- I. A. Buyavova, W. M. Chen, *Physics And Application Of Dilute Nitrides*, Taylor & Francis Books. INC (2004)
- 2- J. Singh, '*Semiconductor Optoelectronics*', McGraw-Hill, Inc. (1995)
- 3- M. Cardona, '*Optical Properties of the silver and cuprous Hallides*', Phys rev. **129**, 69-78 (1963)
- 4- W. Walukiewicz, '*Narrow band gap group III-nitride alloys*', Physica E **20**, 300-307 (2003)
- 5- P. R. C. Kent, A. Zunger, '*Theory of electronic structure evolution in GaNAs and GaPN alloys*', Phys. Rev. B **64**, 115208-2 (2001)
- 6- J. Toivonen, T. Hakkariainen, M. Sopanen, H. Lipsanen, J. Cryst. Growth **221**, 456 (2000)
- 7- W. G. Bi, C. W. Tu, '*Bowing parameter of the band-gap energy of GaN_xAs_{1-x}*', Appl. Phys. Lett. **70**, 1608 (1997)
- 8- J. Salzman, H. Temkin, '*III-V-N comunds for infrared applications*', Material Science and Engineering **B50**, 148 (1997)
- 9- G. Pozina, I. Ivanov, B. Monemar, J. V. Thordson, G. Andersson, '*Properties of molecular-beam epitaxy-growth GaNAs from optical spectroscopy*' J. Appl. Phys. **84**, 3830 (1998)
- 10- I. A. Buyanova, W. M. Chen, B. Monemar, '*Electronic properties of Ga(In)NAs alloys*', MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **6**, 2 (2001)
- 11- S. H. Wei, A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **76**, 664 (1996)
- 12- P. Vogl, Adv. Electron. Electron Phys. **62**, 101 (1984)

- 13- H. P. Hjalmarson, P. Vogl, D. J. Wolford, J. D. Dow, Phys. Rev. Lett. **44**, 810 (1980)
- 14- A. Lindsay, E.P. O'Reilly, Physica E **340-342**, 434 (2003)
- 15- J. A. Van Vechten, T.K. Bergstresser, Phys. Rev. B **8**, 3351 (1970)
- 16- U. Tisch, E. Finkman, and J. Salzman, '*The anomalous bandgap bowing in GaAsN*', Appl. Phys. Lett. **81**, 463 (2002)
- 17- W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager III, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, and Sarah R. Kurtz, '*Band Anticrossing In GaInNAs Alloys*', Phys. Rev. Lett. **82**, 1221 (1999)
- 18- C. Skierbiszewski, P. Perlin, P. Wisniewski, W. Knap, T. Suski, W. Walukiewicz, W. Shan, K. M. Yu, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, and J. M. Olson, '*Large nitrogen-induced increase of the electron effective mass in $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$* ', Appl. Phys. Lett. **76**, 2409 (2002)
- 19- J. Toivonen, '*Growth and properties of GaNAs structures*', PhD Thesis, Helsinki University of Technology, Espoo, Finland (2003)
- 20- M. Sato, S. J. Pearton, GaN and related materials 32, Gordon and Breach Science Publishers, The Netherlands (1997)
- 21- S. Fahy, E. P. O'Reilly, '*Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors*', Physica E **21** (2004) 881-885
- 22- E. P. O'Reilly and A. Lindsay, '*k.p model of ordered GaN_xAs_{1-x}* ', Phys. Stat. Sol.(b) **216**, 131 (1999)
- 23- E. P. O'Reilly and A. Lindsay, S. Tomic, and M. Kamal-Saadi, '*Tight-Binding and k.p models for the electronic structure of Ga(In)NAs and related alloys*', Semicond. Sci. Technol. **17**, 870 (2002)

- 24- L. Bellaiche, S.-H. Wei, and A. Zunger, '*Localization and percolation in semiconductor alloys: GaAsN vs GaAsP*', Phys. Rev. B **54**, 17568 (1996)
- 25- T. Mattila, su-Huai Wei, and A. Zunger,, '*Localization and anticrossing of electron levels in GaN_xAs_{1-x} alloys*', Phys. Rev. B **60**, R11245 (1999)
- 26- P. N. Hai, W. M. Chen, I. A. Buyanova, H. P. Xin, and C. W. Tu, '*Direct determination of electron effective mass in GaAsN/GaAs quantum wells*', Appl. Phys. Lett. **77**, 1843 (2000)
- 27- C. Skierbiszewski, P. Perlin, P. Wisniewski, T. Suski, J. F. Geisz, K. Hingerl, W. Jantsch, D. E. Marso and W. Walukiewicz, '*Band structure and optical properties of In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x} alloys*', Phys. Rev. B **65**, 035207 (2001)
- 28- C. Skierbiszewski, I. Gorczyca, S. P. Lepkowski, J. Lusacowski, J. Borysiuk, J. Toivonen, '*The electron effective mass at the bottom of the GaAsN conduction band*', Semicond. Sci. Technol. **19**, 1189-1195 (2004)
- 29- I. Vurgaftman, J. R. Meyer, '*Band parameters for nitrogen containing semiconductors*', J. Appl. Phys. **94**, 3675 (2003)
- 30- K. Uesugi, N. Marooka, I. Suemune, Appl. Phys. Lett. **74**, 1254 (1999)
- 31- F. Masia, et al., '*Early manifestation of localization effects in diluted Ga(AsN)*' , Appl. Phys. Lett. **82**, 4474 (2003)

فصل سوم

نظریه ترابری حامل ها در میدان پایین

می‌دانیم شارش خالص الکترونها و حفره‌ها در نیمرسانا تولید جریان الکتریکی می‌کند. فرآیند حرکت این ذرات باردار را ترابری گویند. یکی از سازوکارهای مهم ترابری، حرکت حامل‌ها به علت میدان الکتریکی است که یک جریان سوق ایجاد می‌کند. این جریان تابعی از تراکم الکترونها و حفره‌های متحرک و همچنین سرعت سوق^۱ این حامل‌های بار می‌باشد. بزرگی سرعت سوق متوسط یک حامل بار با شدت میدان الکتریکی متناسب است. ضریب تناسب بین این دو به تحرک^۲ موسوم است.

خواص ترابری یک نیمرسانا تحت تأثیر اتمهای بخشنده و پذیرنده همچنین تراکم حامل‌های آزاد و نیز فرآیندهای پراکندگی^۳ است [۲]. در فصل ۴ خواص ترابری نمونه‌های GaNAs، را در شرایط میدان الکتریکی پایین بررسی می‌کنیم. برای این منظور به بررسی کلی نظریه ترابری در میدان الکتریکی پایین در یک نیمرسانا می‌پردازیم.

1- Drift Velocity

2 - Mobility

3 - Scattering

۳-۱ نظریه پراکندگی و سازوکارهای مؤثر در تحرک

برای تحرک الکترون‌های آزاد در یک نیم‌رسانا داریم:

$$\mu_n = \frac{q\tau}{m_n^*} \quad (۱-۳)$$

که در آن τ زمان میانگین بین دو برخورد متوالی است. برای حفره‌ها نیز چنین رابطه‌ای وجود دارد، پس رسانندگی الکتریکی کل را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p) \quad (۲-۳)$$

سازوکارهای پراکندگی مختلفی تحرک الکترون‌ها و حفره‌ها را کنترل می‌کنند. ما در این رساله به چند عامل مهم از این پراکندگی‌ها که تاثیر بیشتری بر تحرک حامل‌ها در GaNAs دارند می‌پردازیم. از جمله این پراکندگی‌ها، می‌توان به پراکندگی‌های ذاتی شامل پراکندگی فونونی قطبی - نوری^۱، پراکندگی پیزوالکتریک^۲، پراکندگی فونونی آکوستیک^۳ و پراکندگی‌های غیرذاتی شامل پراکندگی ناخالصی یونی^۴ و خنثی^۵، پراکندگی حاصل از دررفتگی‌ها^۶ و نیز پراکندگی آلیاژی اشاره کرد. در این میان پراکندگی‌های ناخالصی یونی، دررفتگی‌ها و پراکندگی آلیاژی از اهمیت بیشتری برخوردار هستند.

برای احتمال پراکندگی (P) می‌توان نوشت:

$$P = \frac{1}{\tau} \quad (۳-۳)$$

این به معنای آن است که هر چه زمان میانگین بین برخوردها (τ) کوچکتر باشد، احتمال پراکندگی بیشتر است. اگر احتمال هر پراکندگی را مستقل از احتمال پراکندگی‌های دیگر در نظر بگیریم، در

1 - Polar Optical phonon Scattering.
2 - Piezoelectric Scattering.
3 - Acoustic Phonon Scattering
4 - Ionized Impurity Scattering
5 - Neutral Impurity Scattering
6 - Dislocation Scattering

این صورت احتمال پراکندگی کل حاصل جمع احتمال وقوع سازوکارهای پراکندگی مختلف خواهد بود [۶]. در این صورت:

$$P = P_1 + P_2 + P_3 + \dots \quad (۴-۳)$$

و یا :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \frac{1}{\tau_3} + \dots \quad (۵-۳)$$

به این ترتیب، با توجه به رابطه (۱-۳) خواهیم داشت:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \frac{1}{\mu_3} + \dots \quad (۶-۳)$$

که رابطه اخیر به قاعده ماتیسین^۱ معروف است. ما در ادامه به معرفی سازوکارهای مختلف پراکندگی که در GaNAs غالباً می‌پردازیم.

۳-۱-۱ پراکندگی ناخالصی یونیده

پراکندگی ناخالصی‌های یونیده در دماهای پایین غالب است، زیرا سرعت گرمایی حامل‌ها در دماهای پایین کمتر بوده و این باعث می‌شود اثر برهم‌کنش کولنی روی حرکت حامل‌ها افزایش یابد. تحرک محدود شده بوسیله ناخالصی یونی با رابطه زیر داده می‌شود [۷]:

$$\mu_1 = \frac{128(2\pi)^{1/2} \epsilon_s^2 (k_B T)^{3/2}}{q^3 (m_n^*)^{1/2} (n + 2N_a)} \left[1n(1+b) - \frac{b}{1+b} \right]^{-1} \quad (۷-۳)$$

که در آن

$$b = \frac{24m_n^* \epsilon_s (k_B T)^{1/2}}{q^2 \hbar^2 n'} \quad (۸-۳)$$

و

$$n' = n + \frac{(N_d - N_a - n)(n + N_a)}{N_d} \quad (۹-۳)$$

1 - Matthiessen

که در این رابطه، N_a و N_d به ترتیب تراکم ناخالصی‌های بخشنده و پذیرنده، ϵ_s ثابت دی الکتریک نسبی، m_n^* جرم مؤثر الکترون، n مقادیر تجربی تراکم الکترونی، q بار الکتریکی الکترون، k_B ثابت بولتزمن، \hbar حاصل نسبت ثابت پلانک بر 2π و T دما بر حسب کلوین است.

۲-۱-۳ پراکندگی فونونی قطبی - نوری

ارنریچ^۱ تحرک محدود شده بوسیله پراکندگی فونونی قطبی - نوری (این پراکندگی در اغلب نیمرساناها در دماهای بالا غالب است) را به صورت فرمول زیر داده است [۸]:

$$\mu_{pop} = 0.199 \left[\frac{T}{300} \right]^{1/2} \left[\frac{q}{\epsilon_c^*} \right]^2 \left[\frac{m_0}{m_n^*} \right]^{3/2} \times (10^{22} M) (10^{23} V_a) (10^{-13} \omega_{Lo}) (e^z - 1) G(z) \quad (10-3)$$

که در آن

$$\epsilon_c^* = \sqrt{M \omega_{Lo}^2 V_a \epsilon_0 \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right)} \quad (11-3)$$

و به بار یونی مؤثر کالن^۲ موسوم است. در این فرمول ϵ_∞ ثابت دی الکتریک نوری (فرکانس بالا) و ϵ ثابت دی الکتریک فرکانس پایین است. M نشان دهنده جرم کاهش یافته نزدیک‌ترین اتم‌های همسایه می‌باشد. کمیت V_a حجم یک سلول واحد است با مقداری برابر $1/8 \times 10^{-22} \text{ cm}^3$ می‌باشد [۹]. دمای فونونی θ_{Lo} برای GaNAs برابر ۴۲۳K گزارش شده است [۱۰]. بدین ترتیب مقدار ω_{Lo} برای GaNAs برابر با $5/5 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$ بدست می‌آید. در رابطه (۱۰-۳) عبارت $G(z)$ تابعی از z با تغییرات آهسته است که z خود نیز تابعی از دما است:

$$z = \frac{\hbar \omega_{Lo}}{k_B T} = \frac{\theta_{Lo}}{T} \quad (12-3)$$

1 - Ehrenreich.

2 - Callen's effective ionic charge.

مقادیر مختلف $G(z)$ بر حسب z در جدول ۳-۱ آمده است [۱۱].

جدول (۳-۱) تابع $G(z)$ ظاهر شده در پراکندگی قطبی - نوری .

| z | $G(z)$ | z | $G(z)$ |
|-----|--------|------|--------|
| 0.0 | 1.0 | 2.5 | 1.041 |
| 0.2 | 0.8957 | 3.0 | 1.194 |
| 0.4 | 0.8102 | 3.5 | 1.353 |
| 0.6 | 0.7524 | 4.0 | 1.495 |
| 0.7 | 0.7340 | 4.5 | 1.621 |
| 0.8 | 0.7219 | 5.0 | 1.733 |
| 1.0 | 0.7146 | 6.0 | 1.919 |
| 1.2 | 0.7263 | 7.0 | 2.065 |
| 1.4 | 0.7528 | 8.0 | 2.188 |
| 1.6 | 0.7909 | 9.0 | 2.2996 |
| 1.8 | 0.8378 | 10.0 | 2.394 |
| 2.0 | 0.8911 | 11.0 | 2.487 |
| 2.2 | 0.9490 | | |

۳-۱-۳ پراکندگی پیزوالکتریک

تحرک محدود شده با پراکندگی پیزوالکتریک با فرمول زیر داده می‌شود [۱۱]:

$$\mu_{pz} = \frac{16(2\pi)^{1/2} \rho v_s^2 \hbar^2 q}{3(qh_{pz} / \epsilon_s)^2 (m_n^*)^{1/2} (k_B T)^{1/2}} \quad (۱۳-۳)$$

که در آن v_s سرعت صوت در ماده، ρ چگالی جرمی و h_{pz} ضریب پیزوالکتریک می‌باشد که مقادیر

مربوطه در GaAs بترتیب برابر $6/59 \times 10^3$ m/s و $5/32$ gr/cm³ و $0/211$ C/m³ می‌باشند [۵].

۳-۱-۴ پراکندگی فونونی آکوستیک

یکی دیگر از سازوکارهای مهم پراکندگی در نیمرساناها، پراکندگی فونونی آکوستیک

می‌باشد. تحرک محدود شده با این سازوکار بوسیله فرمول زیر داده شده است [۱۲]:

$$\mu_{ac} = \frac{2(2\pi)^{1/2} \rho v_s^2 \hbar^4 q}{3E_{ds}^2 (m_n^*)^{5/2} (k_B T)^{3/2}} \quad (14-3)$$

که در این فرمول E_{ds} پتانسیل تغییر شکل^۱ بوده و مقدار آن برای GaAs برابر با ۹/۳ eV می‌باشد [۱۵].

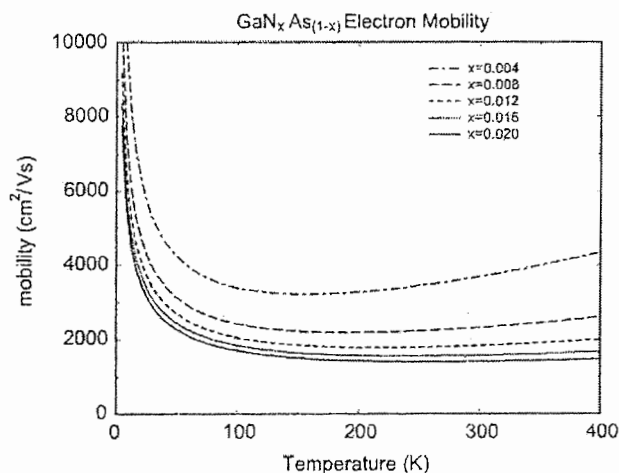
۳-۱-۵ پراکندگی آلیاژی کتره ای^۲

در GaNAs به دست آوردن مدل پیشرفته و دقیقی برای یک آلیاژ بلور کتره ای کار مشکلی است بویژه آنکه اتمهای نیتروژن اختلال نسبتاً بزرگی در ساختار نواری ایجاد می‌کند که منجر به پیدایش پراکندگی قوی الکترونی می‌شود.

با استفاده از فرمولبندی‌های مربوطه تحرک حاملهای نوع n با رابطه زیر مشخص می‌شود [۱۳]:

$$\mu^{-1} = \frac{\sqrt{3m^* k_B T}}{e} \pi \left(\frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left(\frac{dE_C}{dx} \right)^2 a_0^3 x \quad (15-3)$$

که در آن $\frac{dE_C}{dx}$ تغییرات لبه گاف نواری بر حسب غلظت نیتروژن، m^* جرم مؤثر الکترون و a_0 ثابت شبکه GaAs می‌باشد. محاسبات نظری Fahy و همکارانش [۱۳] به ازای مقادیر مختلف x در شکل (۱-۳) نشان داده شده است.

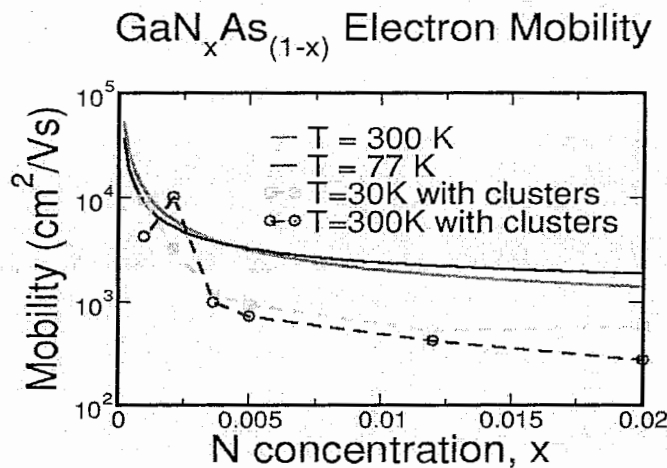


شکل (۱-۳): وابستگی دمایی تحرک الکترونی محاسبه شده بصورت نظری در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با x های متغیر [۱۳].

- 1 - The deformation potential.
- 2 - Random alloy scattering

۳-۱-۶ پراکندگی آلیاژی خوشه ای^۱

از آنجائیکه در بعضی آلیاژها از جمله $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ، توزیع فضائی اتمها تماماً بصورت کتره‌ای صورت نمی‌گیرد و خوشه‌هایی در آلیاژ تشکیل می‌شوند لازم است پراکندگی حاصل از آنها نیز محاسبه شود. این کار توسط O'Reilly و Fahy [۱۴] انجام شده و نتایج محاسبات آنها در شکل (۲-۳) آمده است. در این شکل منحنی‌های خط چین پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای را در دماهای 300 K و 30 K و منحنی‌های خط‌پر، پراکندگی آلیاژی کتره‌ای را برای همین دو نشان می‌دهد. همان‌گونه که پیداست تشکیل خوشه‌های نیتروژنی تحرک الکترونی را به شدت کاهش داده است.



شکل (۲-۳): مقادیر نظری تحرک الکترونی حاصل از پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای و کتره‌ای در سیستم

$\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ در بازه $0 < x < 0.02$ [۱۴].

۳-۱-۷ پراکندگی ناخالصی‌های خنثی

یکی دیگر از عوامل محدود کننده تحرک الکترونی در دماهای پایین پراکندگی ناشی از اتمهای ناخالصی خنثی است که باید در نیمرساناهایی که میزان یونیدگی اتمهای ناخالصی پائین است، حتماً در نظر گرفته شود [۱۰].

1 - Cluster alloy scattering

با توجه به محاسبات نظری Erginsoy [۱۵] می‌توان نشان داد که احتمال پراکندگی بوسیله اتم‌های ناخالصی خنثی با رابطه زیر داده می‌شود [۱۰]:

$$\frac{1}{\tau_N} = 1.22 \times 10^{-7} \varepsilon_r(0) N_N \left(\frac{m}{m^*} \right)^2 \quad (۱۶-۳)$$

که N_N تراکم کل ناخالصی‌های خنثی بر حسب cm^{-3} و $\varepsilon_r(0)$ ثابت دی‌الکتریک می‌باشد که در مورد GaAs مقداری برابر $۱۲/۵۳$ دارد [۱۰].

۳-۱-۸ پراکندگی دررفتگی

یکی دیگر از پراکندگی‌های محدود کنندهٔ تحرک، پراکندگی حاصل از دررفتگی‌هاست، که با رابطهٔ زیر داده شده است [۱۶]:

$$\mu_{dis} = \frac{30\sqrt{2}\pi\varepsilon_r^2\varepsilon_0^2d^2(k_B T)^{3/2}}{q^3 N_{dis} f^2 L_D m^{*1/2}} \quad (۱۷-۳)$$

که در آن N_{dis} چگالی دررفتگی در واحد سطح و d فاصله بین مراکز نقایص در امتداد خط دررفتگی است که با رابطه $d = \frac{2}{\sqrt{N_{dis}\pi}}$ با تراکم دررفتگی‌ها در ارتباط است. f کسری از مراکز است که

اشغال شده‌اند و برابر با یک در نظر می‌گیریم. L_D طول دبای است که با رابطهٔ زیر داده می‌شود:

$$L_D = \sqrt{\varepsilon_r \varepsilon_0 \frac{k_B T}{q^2 n(T)}} \quad (۱۸-۳)$$

بطوریکه $n(T)$ بستگی دمایی تراکم حامل‌ها را نشان می‌دهد.

به این ترتیب با توجه به تحرک‌های محدود شده با پراکندگی‌های مختلف، تحرک کل حاصل از این پراکندگی‌ها را برای GaNAs به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$\frac{1}{\mu(T)} = \frac{1}{\mu_{po}(T)} + \frac{1}{\mu_{ac}(T)} + \frac{1}{\mu_{pz}(T)} + \frac{1}{\mu_{ii}(T)} + \frac{1}{\mu_{dis}(T)} + \frac{1}{\mu_{rand-al}(T)} + \frac{1}{\mu_{cl-al}(T)} + \frac{1}{\mu_N(T)} \quad (۱۹-۳)$$

که در این رابطه، عبارت سمت چپ نشان دهنده پراکندگی کل و جملات سمت راست به ترتیب به سهم‌های پراکندگیهای حاصل از فونون‌های قطبی - نوری، فونونهای اکوستیکی، فونونهای پیزوالکتریکی، ناخالصی‌های یونیده، دررفتگیها، آلیاژی کتره‌ای، آلیاژی خوشه‌ای و ناخالصی‌های خنثی مربوط است.

۳-۲ تعیین تراکم و نوع بار حامل‌های جریان

به منظور به‌کارگیری یک نیم‌رسانا در یک قطعه بخصوص لازم است از تراکم حامل‌های بار در دماهای مختلف، تراکم اتمهای بخشنده و پذیرنده و نیز مکان ترازهای انرژی وابسته به ناخالصی‌های کم عمق در ماده آگاه باشیم. برای تعیین این ویژگیها دو اندازه‌گیری استاندارد وجود دارد، مقاومت ویژه الکتریکی و ضریب هال^۱[۳]. در صورت اطلاع از تراکم حامل‌های آزاد مثلاً تراکم الکترونی (n) و مقاومت ویژه (ρ) ماده می‌توان تحرک آنها را با استفاده از رابطه $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{ne\mu}$ به‌دست آورد[۱۷].

در آزمایش اثر هال به ذرات باردار متحرک با استفاده از میدانهای خارجی الکتریکی و مغناطیسی نیرو وارد می‌شود. به کمک این آزمایش می‌توان تراکم و نوع حامل اکثریت (الکترون‌ها و یا حفره‌ها) را به‌دست آورد. این آزمایش بویژه وقتی روی گستره پهنی از دما انجام شود، برای مشخصه‌یابی آلیشهای کم عمق، ابزار مفید و مورد اعتمادی است[۴].

در آزمایش هال برای تراکم حامل داریم $n = r / eR_H$ که R_H ضریب هال و r فاکتور هال می‌باشد. با توجه به مطالب فوق تحرک هال را می‌توان به کمک رابطه $\mu_H = R_H / \rho$ به‌دست آورد. از آنجا که $\sigma = en\mu$ است (که در آن μ تحرک الکترونی است)، می‌توان نوشت، $\mu = \mu_H / r$. برای نیم‌رسانای

GaNAs فاکتور هال را برابر یک می‌گیرند [۵]. پس می‌توانیم بنویسیم: $\mu = \mu_H$. بنابراین تحرکی که از آزمایش هال بدست می‌آید می‌تواند همان تحرک سوق باشد.

۳-۲-۱ نظریه تراکم حامل‌ها در نیمرسانای GaNAs

برای بررسی خواص ترابری یک نیمرسانا در حضور میدان الکتریکی، تراکم حامل‌های بار آزاد کمیت مهمی به شمار می‌آید. از آنجا که تعداد حامل‌های بار (الکترون‌ها و حفره‌ها) در واحد حجم بسیار زیاد است (حدود $10^{17} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$)، نمی‌توان رفتار هر ذره را به صورت منفرد بررسی کرد. بنابراین باید به رفتار آماری این حامل‌های بار (با توجه به اصل طرد پاولی) در بلور پرداخت.

۳-۲-۲ توزیع آماری بار در نیمرسانا

برای تعیین رفتار آماری ذرات، باید قوانینی که ذرات مورد نظر با توجه به ماهیتشان از آنها پیروی می‌کنند را بدانیم. سه شیوه برای توزیع ذرات در میان حالت‌های انرژی قابل دسترسی وجود دارد.

اولین شیوه، توزیع مبتنی بر تابع احتمال ماکسول-بولتزمن است، در این مورد ذرات قابل تشخیص‌اند و برای تعداد ذراتی که در یک حالت مجاز قرار می‌گیرند، محدودیتی ندارد. توزیع دوم، تابع بوز-انیشتمین می‌باشد که برای ذرات غیرقابل تشخیص است و تعداد ذراتی که در هر حالت کوانتومی قرار می‌گیرند، محدودیتی ندارد. توزیع سوم، تابع احتمال فرمی — دیراک است. در این مورد ذرات غیرقابل تشخیص هستند و در هر حالت کوانتومی تنها یک ذره می‌تواند قرار گیرد. الکترون‌ها در یک بلور از جمله این ذرات بوده و از این قانون تبعیت می‌کنند. با توجه به اهمیت این ذرات برای ما در این رساله به شرح کوتاهی از این تابع می‌پردازیم.

بیشترین احتمال توزیع الکترون‌ها توسط تابع فرمی — دیراک داده می‌شود [۱۷]:

$$\frac{N(E)}{g(E)} = f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \quad (20-3)$$

که در آن E_F انرژی فرمی نامیده می‌شود. $N(E)$ تعداد ذرات در واحد حجم در واحد انرژی و $g(E)$ تعداد حالت‌های کوانتومی در واحد حجم در یکای بازه انرژی است. تابع $f_F(E)$ تابع احتمال یا همان توزیع فرمی – دیراک است و احتمال این که یک حالت کوانتومی در انرژی E به وسیله یک الکترون اشغال شده باشد را به دست می‌دهد.

در $T=0K$ الکترون‌ها در پایین‌ترین حالت‌های انرژی ممکن قرار دارند. در این حالت اگر $E < E_F$ باشد، احتمال اشغال یک حالت کوانتومی برابر یک است و اگر $E > E_F$ باشد احتمال اشغال حالتها برابر صفر است. در $0K$ همه الکترون‌ها زیر انرژی فرمی هستند. حال وضعیتی را در نظر می‌گیریم که دما به بالاتر از $0K$ افزایش یابد. در این وضعیت الکترون‌ها مقدار معینی انرژی گرمایی به دست آورده و تعدادی از آنها به ترازهای انرژی بالاتر برانگیخته می‌شوند. در این شرایط توزیع الکترون‌ها در حوالی انرژی فرمی در میان حالت‌های انرژی قابل دسترس تغییر می‌کند.

اکنون حالتی را در نظر بگیرید که $E - E_F \gg k_B T$ باشد، در این صورت عبارت نمایی در مخرج معادله (20-3) خیلی بزرگتر از یک شده و می‌توان از عدد 1 چشم‌پوشی کرد. به این ترتیب می‌توان تابع توزیع فرمی – دیراک را به تابع ماکسول – بولتزمن تقریب زد:

$$f_F(E) \approx \exp\left[\frac{-(E - E_F)}{k_B T}\right] \quad (21-3)$$

حال در ادامه، با توجه به توابع احتمال شرح داده شده به بررسی توزیع الکترون‌ها و حفره‌ها در حالت تعادل گرمایی در یک نیم‌رسانا می‌پردازیم.

توزیع تعادلی الکترون‌ها در نوار رسانش از حاصلضرب چگالی حالت‌های کوانتومی مجاز در تابع احتمال اشغال آن حالت توسط الکترون به دست می‌آید، یعنی:

$$n(E) = g_c(E) f_F(E) \quad (22-3)$$

که $g_c(E)$ چگالی حالت‌های کوانتومی است. تراکم الکترونی در واحد حجم در نوار رسانش با انتگرال‌گیری از معادله (۳-۲۰) روی کل انرژی نوار رسانش به دست می‌آید. به طور مشابه، توزیع حفره‌ها (در نوار ظرفیت) از حاصلضرب چگالی حالت‌های کوانتومی مجاز در نوار ظرفیت در احتمالی که یک حالت با الکترون اشغال نشده است به دست می‌آید:

$$P(E) = g_v(E)[1 - f_F(E)] \quad (۳-۲۳)$$

که تراکم کل حفره‌ها در واحد حجم با انتگرال‌گیری روی کل انرژی نوار ظرفیت به دست می‌آید [۱۷].

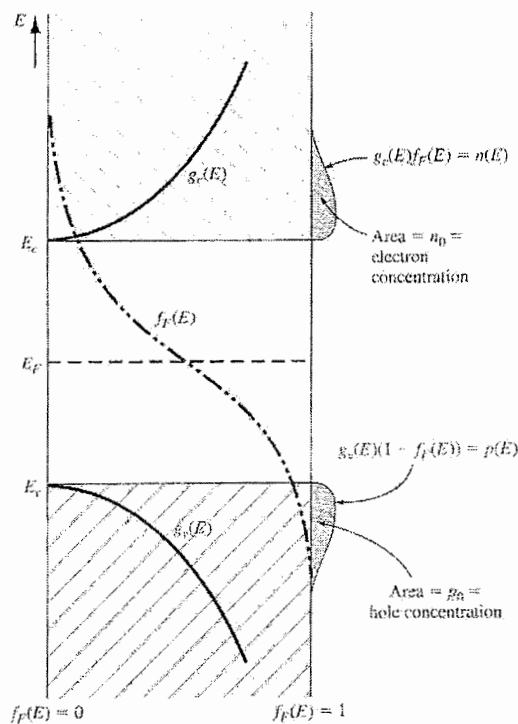
۳-۲-۳ تراکم الکترون و حفره در تعادل گرمایی

برای پیدا کردن تراکم الکترون‌ها و حفره‌ها در شرایط تعادل گرمایی، باید موقعیت انرژی فرمی را نسبت به لبه نوار رسانش (E_C) و یا نوار ظرفیت (E_V) پیدا کرد. در $T=0K$ همه حالت‌های انرژی در نوار رسانش خالی از الکترون هستند، پس انرژی فرمی در وسط انرژیهای E_C و E_V (با فرض یکی بودن جرم‌های مؤثر الکترون و حفره) قرار می‌گیرد [۱۱]. وقتی که دما به بالاتر از صفر کلون افزایش می‌یابد الکترون‌های نوار ظرفیت انرژی گرمایی گرفته و تعدادی از آنها با به دست آوردن انرژی کافی به نوار رسانش می‌روند، که در این صورت جفت‌های الکترون و حفره ایجاد می‌شود.

از آنجا که جرم‌های مؤثر الکترون و حفره به طور دقیق معادل نیستند، چگالی تابع‌های حالت $g_v(E)$ و $g_c(E)$ نسبت به وسط گاف انرژی متقارن نبوده و تراز فرمی برای نیمرسانای ذاتی (نیمرسانایی بدون هیچگونه نقص و دررفتگی که در گاف انرژی هیچ تراز ناخالصی ندارد) به مقدار جزئی از وسط گاف انرژی به گونه‌ای انتقال می‌یابد که چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها با هم برابر شوند [۱۷]. شکل (۳-۳) چگالی تابع حالت‌های $g_c(E)$ در نوار رسانش و $g_v(E)$ در نوار ظرفیت و همچنین تابع احتمالی فرمی — دیراک را برای $T > 0K$ وقتی که E_F به طور تقریبی در وسط گاف انرژی قرار

می‌گیرد، نشان می‌دهد. بعلاوه در این شکل منحنی توزیع تعادلی الکترون‌ها $n(E)$ و حفره‌ها $p(E)$ را می‌توان مشاهده کرد. ناحیه زیر این منحنی‌ها چگالی کل الکترون‌ها را در نوار رسانش و حفره‌ها را در نوار ظرفیت نشان می‌دهد، که از آنها می‌توان فهمید هرگاه $g_v(E)$ و $g_c(E)$ متقارن باشند، انرژی فرمی باید نسبت به وسط گاف نواری در جایی قرار بگیرد که توزیع الکترون و حفره‌ها یکی شود. با فرض اینکه انرژی فرمی در یک نیمرسانای ذاتی در وسط گاف نواری باشد و تراکم الکترون و حفره را به ترتیب برای این نیمرسانا با n و p نشان دهیم، برای الکترون‌ها در نوار رسانش خواهیم داشت $E > E_c$. از تابع احتمال فرمی – دیراک برای تراکم الکترون داریم [۱۱].

$$n = \frac{\left(2^{1/2} m_n^*\right)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \frac{(E - E_c)^{1/2} dE}{1 + \exp[(E - E_F) / k_B T]} \quad (۲۴-۳)$$



شکل (۳-۳): چگالی تابع‌های حالت $g_c(E)$ و $g_v(E)$ و تابع احتمال فرمی – دیراک برای $T > 0K$ با توجه به قرار داشتن E_F در وسط گاف نواری برای نیمرسانای ذاتی [۱۷].

که در آن m_n^* جرم مؤثر الکترون می‌باشد. حال اگر $E_c - E_F \gg k_B T$ باشد آنگاه $E - E_F \gg k_B T$ و تابع فرمی - دیراک را می‌توان به تابع ماکسول - بولتزمن تقریب زد. در این صورت با انتگرال‌گیری و انجام مقادیری عملیات جبری داریم:

$$n = N_c e^{-(E_c - E_F)/k_B T} \quad (۲۵-۳)$$

که در آن $N_c = 2 \left[\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2} \right]^{3/2}$ و یا می‌توانیم بنویسیم:

$$N_c = 2.5 \times 10^{19} \left[\frac{m_n^*}{m_0} \right]^{3/2} \left[\frac{T}{300} \right]^{3/2} (cm^{-3}) \quad (۲۶-۳)$$

که در آن N_c چگالی مؤثر حالت‌ها در لبه نوار رسانش، m_0 جرم سکون الکترون و T دما بر حسب درجه کلوین می‌باشد. به همین ترتیب به طور مشابه برای حفره‌ها داریم:

$$p = N_v e^{(E_v - E_F)/k_B T} \quad (۲۷-۳)$$

که در آن N_v چگالی مؤثر حالت‌ها در نوار ظرفیت و برابر است با:

$$N_v = 2 \left[\frac{2\pi m_p^* k_B T}{h^2} \right]^{3/2} = 2.5 \times 10^{19} \left[\frac{m_p^*}{m_0} \right]^{3/2} \left[\frac{T}{300} \right]^{3/2} (cm^{-3}) \quad (۲۸-۳)$$

که m_p^* جرم مؤثر حفره در نوار ظرفیت است.

برای یک نیمرسانای ذاتی، تراکم الکترون‌ها در نوار رسانش n_i معادل با تراکم حفره‌ها در نوار ظرفیت p_i است. اگر تراز انرژی فرمی برای نیمرسانای ذاتی را با E_{Fi} نشان دهیم، می‌توان نوشت [۱]:

$$n = n_i = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{k_B T} \right] \quad (۲۹-۳)$$

$$p = p_i = N_v \exp \left[\frac{-(E_{Fi} - E_v)}{k_B T} \right] \quad (۳۰-۳)$$

از حاصلضرب این دو معادله داریم:

$$n_i^2 = np = N_c N_v e^{-E_g/k_B T} \quad (۳۱-۳)$$

که E_g انرژی گاف نواری می‌باشد. بنابراین:

$$n_i = 2.5 \times 10^{19} \left[\frac{m_n^* m_p^*}{m_0^2} \right]^{\frac{3}{2}} \left[\frac{T}{300} \right]^{\frac{3}{2}} e^{-E_g/2k_B T} \quad (32-3)$$

بعلاوه برای نیمرسانای ذاتی می‌توانیم بنویسیم $n_i = p_i$ ، با استفاده از این تساوی مکان تراز فرمی (از لبه نوار ظرفیت) مشخص می‌شود [۱]. بدین ترتیب می‌نویسیم:

$$E_{Fi} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_n^*}{m_p^*} \right) \quad (33-3)$$

عبارت اول یعنی $\frac{1}{2}(E_c + E_v)$ به طور دقیق وسط گاف نواری است، پس می‌نویسیم:

$$E_{midgap} = \frac{1}{2}(E_c + E_v) \text{ و خواهیم داشت:}$$

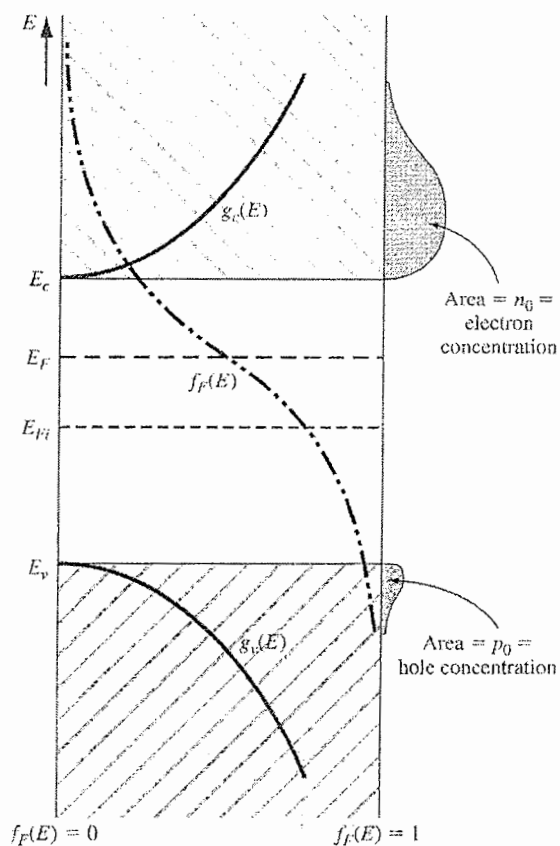
$$E_{Fi} - E_{midgap} = \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_n^*}{m_p^*} \right) \quad (34-3)$$

اگر در نیمرسانایی $m_n^* = m_p^*$ باشد، آنگاه تراز فرمی ذاتی دقیقاً در وسط گاف انرژی قرار می‌گیرد.

۳-۲-۴ توزیع تعادلی الکترون‌ها و حفره‌ها در یک نیمرسانای آلیش شده

به منظور به‌کارگیری نیمرساناها در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی غالباً لازم است ماده مورد نظر را با اتم‌های ناخالصی بخصوص آلیش داد. انجام این کار به تشکیل ترازهای ناخالصی در بین گاف نواری ماده می‌انجامد. حضور ترازهای ناخالصی در گاف انرژی توزیع الکترون‌ها و حفره‌ها را تغییر می‌دهد. علت این تغییر را می‌توان با توجه به تغییر موضع تراز انرژی فرمی نسبت به وسط گاف نواری توضیح داد. شکل‌های (۳-۴) و (۳-۵) تغییر موقعیت تراز فرمی را در حالت‌های $E_F \langle E_{midgap}$ هنگامی که نیمرسانا عمدتاً با اتم‌های بخشنده آلیش شده باشد و $E_F \langle E_{midgap}$ هنگامی که با اتم‌های پذیرنده آلییده شده باشد را نشان می‌دهند. در وضعیت اول که تراکم

الکترون‌ها از حفره‌ها بزرگتر است نیمرسانا نوع n و در حالت دوم که تراکم حفره‌ها از الکترون‌ها بیشتر خواهد بود نیمرسانا را نوع p می‌گویند.

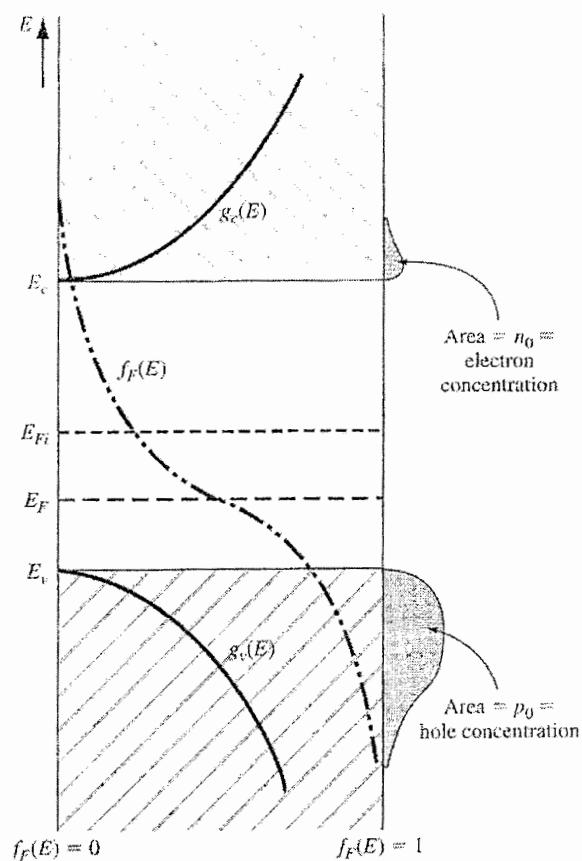


شکل (۳-۴): چگالی تابع حالت، تابع احتمالی فرمی - دیراک با نمایش نواحی تراکم‌های الکترون و حفره وقتی که تراز فرمی بالاتر از وسط گاف قرار دارد [۱۷].

با توجه به مقادیر تراکم ذاتی و تراز فرمی ذاتی می‌توان تراکم الکترون و حفره را در تعادل گرمایی از فرمول‌های زیر به دست آورد [۱]:

$$n = n_i \exp\left[\frac{E_F - E_{Fi}}{k_B T}\right] \quad \text{و} \quad p = n_i \exp\left[-\frac{(E_F - E_{Fi})}{k_B T}\right] \quad (۳-۳۵)$$

به این ترتیب وقتی نیمرسانایی نوع n (یا نوع p) باشد، تراز فرمی به مرور به سمت لبه نوار رسانش (یا ظرفیت) حرکت می‌کند. در مواردی که مقدار $E_C - E_F$ در حدود $k_B T$ یا کمتر باشد تقریب ماکسول - بولتزمن از دقت کافی برخوردار نیست و عبارت ساده مرتبط با چگالی حامل در رابطه (۳-۲۴)، را می‌توان با کمک تغییر متغیرهای زیر حل کرد:



شکل (۳-۵): چگالی تابع حالت، تابع احتمال فرمی دیراک با نمایش نواحی تراکم‌های الکترون و حفره وقتی که تراز فرمی پایین تر از وسط گاف قرار دارد [۱۷].

$$\eta = \frac{E - E_C}{k_B T} \quad ; \quad \eta_F = \frac{E_F - E_C}{k_B T} \quad (۳-۳۶)$$

در این صورت خواهیم داشت:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2} d\eta}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} \quad (37-3)$$

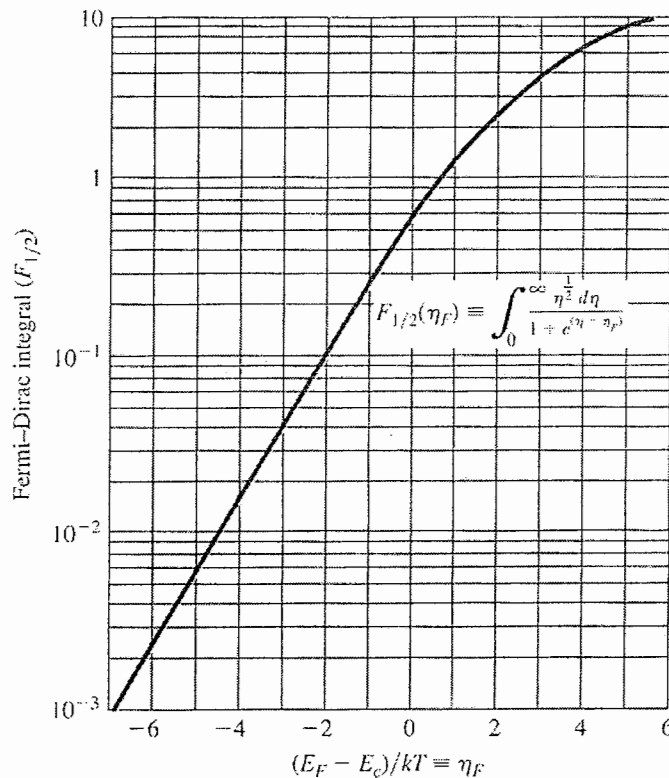
قسمت انتگرالی را انتگرال فرمی - دیراک گویند:

$$F_{1/2}(\eta_F) = \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2} d\eta}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} \quad (38-3)$$

که با توجه به تعریف چگالی مؤثر N_c داریم:

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c F_{1/2}(\eta_F) \quad (39-3)$$

مقادیر انتگرال فرمی - دیراک در شکل (۳-۶) رسم شده است که برای محاسبات می‌توان از آن استفاده کرد. بطور مشابه برای حفره‌ها نیز می‌توان p را به دست آوریم.



شکل (۳-۶): انتگرال فرمی-دیراک $F_{1/2}$ به صورت تابعی از انرژی فرمی [۱۷].

۳-۲-۵ معادله خنثایی بار و تراکم های الکترون و حفره

برای نیمرسانایی با ناخالصی های بخشنده و پذیرنده، معادله توازن بار به صورت زیر نوشته می شود [۱۸].

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad (۴۰-۳)$$

که N_d^+ و N_a^- به ترتیب چگالی پذیرنده و بخشنده یونیده می باشد. اگر نیمرسانای مورد بررسی نوع n باشد، می توان نوشت [۱۱]:

$$2n = (N_d^+ - N_a^-) + \left[(N_d^+ - N_a^-)^2 + 4n_i^2 \right]^{1/2} \quad (۴۱-۳)$$

در صورتی که در دمای مورد نظر تراکم حامل ذاتی در نمونه مورد بررسی بسیار کوچک باشد می توان از آن در معادله فوق صرف نظر کرد که در این صورت خواهیم داشت: $n = N_d^+ - N_a^-$. از طرفی با توجه به انرژی فرمی برای n داشتیم: $n = N_c \exp[-(E_c - E_F)/k_B T]$ همچنین در نیمرسانای نوع n رابطه بین بخشنده های یونیده و تراکم بخشنده کل به صورت زیر است:

$$\frac{N_d^+}{N_d} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \cdot \exp[(E_d - E_F)/k_B T]} \quad (۴۲-۳)$$

با مقداری عملیات جبری روی روابط (۴۰-۳) تا (۴۲-۳) خواهیم داشت:

$$\frac{N_d^+}{N_d} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \cdot \exp[(E_d - E_F)/k_B T] \exp[(E_c - E_F)/k_B T]} \quad (۴۳-۳)$$

و بدین ترتیب برای یک نیمرسانای نوع n تراکم الکترونی از رابطه زیر به دست می آید.

$$n(T) = \frac{N_d}{1 + \frac{n(T)g}{N_c(T)} \exp\left(\frac{\Delta E_d}{k_B T}\right)} - N_a \quad (۴۴-۳)$$

که در روابط فوق g فاکتور تبهگنی و ΔE_d انرژی فعالسازی^۱ الکترون های بخشنده است.

1 - Activation Energy

- 1- J. Singh, '*Semiconductor Optoelectronics*', McGraw-Hill, Inc. (1995)
- 2- D. C. Look, '*Electrical Transport Properties of III-Nitrides*', Materials and Engineering **B**, 50 (1977)
- ۳- اچ. ام. روزنبرگ، ۱۹۹۸، فیزیک حالت جامد، حسین عشقی، حسن عزیزی، چاپ اول، مرکز نشر دانشگاهی
- 4- J. W. Orton, T. Foxon, Rep. Prog. Phys. **61**, 29 (1998)
- 5- D. C. Look, '*Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*', John Wiley & Sons (1989)
- 6- J. S. Blakemore, '*Solid State Physics*', Cambridge University Press (1995)
- 7- H. Brooks, Adv. Electron. Phys. **7**, 85 (1955)
- 8- H. Ehrenreich, J. Phys. Chem. Solid. **8**, 130 (1959)
- 9- S. A. Choulis, et al. Phys. Rev. B **66**, 163321/01 (2002)
- 10- C. M. Wolfe, N. Holonyak, JR., G. E. Stillman, '*Physical properties of Semiconductors*', Prentice Hall (1989)
- 11- H. Markoc, '*Nitride Semiconductors and Devices*', Springer Verlag Berlin Heidelberg New York (1999)
- 12- W. Shockley, '*Electron, Hole in Semiconductors*', Van no Strand. Princeton, NJ (1950)
- 13- S. Fahy, E. P. O'Reilly, '*Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors*', Physica E **21** 881-885 (2004)

- 14- S. Fahy, A. Lindsay, E. P. O'Reilly, '*Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors*', NMRC and Department of Physics, University College Cork, Ireland (2004)
- 15- C. Erginsoy, '*Neutral Impurity Scattering In Semiconductors*', Phys. Rev. **79**, 1013 (1950)
- 16- B. Podor, Phys. Stat. Sol. **16**, 197 (1966)
- 17- D.A. Neamen, '*Semiconductor Physics and Devices*', Third Edition, McGraw. Hill (2003)
- 18- H. Nakamaya, P. Hacke, et al. Jpn. K. Appl. Phys. **35**, L283 (1996)

فصل چهارم

بررسی خواص ترابری الکتریکی در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ نوع n با کسر مولی نیتروژن

پایین ($0 < x < 0.02$)

بررسی خواص ترابری الکتریکی $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ توسط برخی محققان انجام شده است. در بیشتر کارهای انجام شده، در این ماده حتی در شرایط بدون آلاینش خواسته رسانندگی نوع n مشاهده شده است. در برخی نمونه‌ها ماده مورد نظر با عناصری همچون Si و Se آلاینش شده‌اند که باز هم به رسانندگی نوع n منجر شده‌اند [۴ و ۵]. با توجه به نتایج گزارشات گوناگون [۶ - ۴ و ۱] معلوم شده است که اصولاً رشد لایه $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با نیتروژن رقیق و با کیفیت بلوری بالا کاری دشوار است. علت این امر می‌تواند ناشی از وارد کردن نیتروژن به GaAs باشد که نیازمند دمای رشد پائین (حدود 500°C) است و این می‌تواند عاملی برای کاهش کیفیت نمونه رشد یافته باشد.

هدف ما در این فصل بررسی مشخصات وابسته به رسانندگی الکتریکی برخی نمونه‌های رشد داده شده $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ رقیق ($0 < x < 0.02$) است. این خصوصیات شامل تحرک و تراکم الکترونی می‌باشد. نمونه‌های مورد نظر ما با روش‌ها و شرایط مختلف رشد داده شده‌اند. بررسی ما در این فصل مبتنی بر تجزیه و تحلیل داده‌های تجربی گزارش شده و عوامل مؤثر بر این خواص خواهد بود.

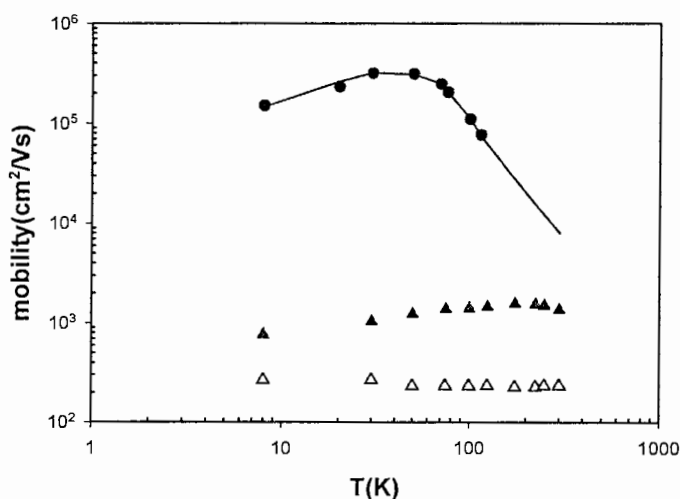
۱-۴ وابستگی دمایی تحرک الکترونی

به منظور بررسی این موضوع نخست (بخش ۴-۱-۱) به مطالعه دو نمونه GaNAs که توسط دو گروه تحقیقاتی متفاوت نمونه‌هایی با روش‌های مختلف و غلظت‌های نیتروژنی نایکسان رشد داده شده‌اند پرداخته و سپس در بخش ۴-۱-۲ تأثیر غلظت نیتروژن را در نمونه‌هایی که در شرایط یکسان رشد یافته‌اند بر وابستگی دمایی تحرک الکترونی مورد توجه قرار خواهیم داد.

۱-۴-۱ تغییرات تحرک الکترونی بر حسب تابعی از دما در نمونه‌های رشد یافته به روش‌های

متفاوت

نخستین نمونه مورد بررسی ما نمونه Hashimoto و همکارانش [۱] است که داده‌های مربوط به تحرک الکترونی نمونه $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با $x=1/4\%$ در گستره دمای $300\text{K} - 10\text{K}$ در شکل ۴-۱ نشان داده شده است. این نمونه به روش RF-MBE بر روی زیر لایه‌ای از GaAs و در دمای 550°C رشد داده شده است. اگر چه به هنگام رشد این نمونه آرایش خواسته‌ای به کار نرفته است، لایه رشد یافته رسانندگی نوع n را از خود نشان داده است. به منظور درک هر چه بیشتر رفتار تحرک الکترونی در این نمونه همانگونه که در این شکل نشان داده شده است تحرک الکترونی وابسته به لایه GaAs رشد یافته با همان شرایط، همچنین لایه‌ای از GaAs با کیفیت بلوری بسیار بالا که توسط Wolfe و همکارانش [۲] رشد یافته نیز جهت مقایسه نشان داده‌ایم.



شکل (۱-۴) وابستگی دمایی تحرک الکترونی. ●: داده های تجربی نمونه GaAs مربوط Wolfe و همکارانش [۲].

▲: داده های تجربی نمونه GaAs مربوط به Hashimoto و همکارانش [۱]. △: داده های تجربی نمونه GaN_xAs_{1-x} با

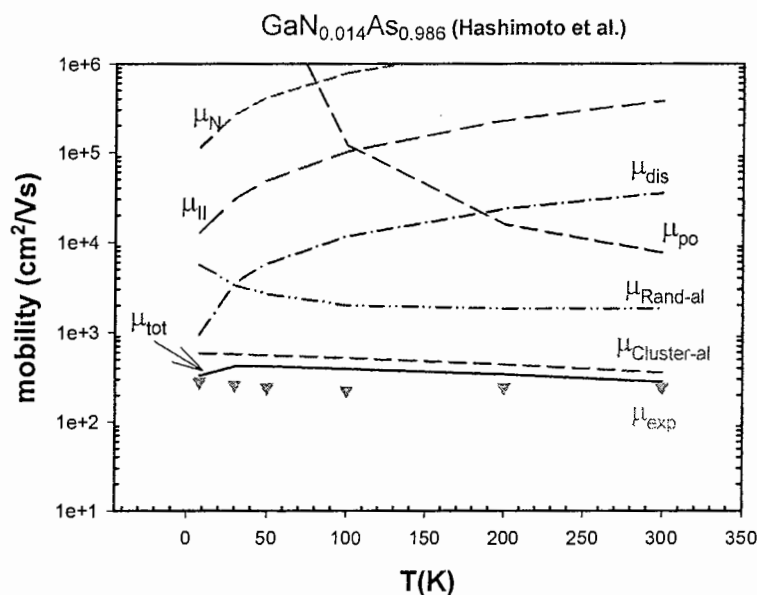
x=۱/۴٪ مربوط به Hashimoto. منحنی خط پر پیش بینی نظری مبتنی بر تحلیل ماست.

چنانچه پیداست و در ابتدای فصل نیز توضیح داده شد با توجه به شرایط خاص مورد نیاز جهت وارد کردن نیتروژن به مقدار ناچیز در شبکه بلورین GaAs، تا حد زیادی از تحرک الکترونی لایه کاسته شده است، بطوری که نمونه Wolfe در دمای اتاق از تحرک الکترونی حدود $8000 \text{ cm}^2/V_s$ و قله ای با مقداری در حدود $3 \times 10^5 \text{ cm}^2/V_s$ در دمای ۴۰ K برخوردار می باشد در حالی که این مقادیر به ترتیب در نمونه GaAs رشد یافته Hashimoto به $1300 \text{ cm}^2/V_s$ در دمای اتاق و $1600 \text{ cm}^2/V_s$ در دمای ۱۷۵ K تقلیل یافته است. این تقلیل تحرک در نمونه اخیر با توجه به اینکه هیچ گونه آرایش خواسته ای در آن به کار گرفته نشده است و بررسی های Wolfe و همکارانش نشان داده است که نمونه آنها، از تراکم ناخالصی پایین و کیفیت بلوری بالا برخوردارست، می تواند نشانگر حضور و تشکیل تراکم بالایی از نقایص بلوری شامل ترازهای اتم های ناخواسته به دام اندازنده الکترونی (تله ها) و همچنین دررفتگی های بلوری باشد. تحلیل نظری، منحنی منطبق شده در شکل (۱-۴)، نشان

می‌دهد نمونه Wolfe دارای تراکم ناخالصی بخشنده $10^{13} \times 4/3 \text{ cm}^{-3}$ با ضریب جبران

$$\Phi \left(= \frac{N_a}{N_d} \right) = 0.44 \text{ بوده است.}$$

اکنون با توجه به نکات ذکر شده فوق پایین بودن تحرک الکترونی و همچنین وابستگی دمایی ضعیف این نمونه را در گستره دمایی پهن ۱۰-۳۰۰ K مورد بررسی قرار می‌دهیم. چنانچه در فصل ۳ آمده است تحرک حامل‌ها در یک نیم‌رسانا متأثر از عوامل گوناگون پراکندگی (ذاتی و غیرذاتی) است. به‌منظور ملاحظه اثر هر کدام از این عوامل پراکننده الکترونی، داده‌های مربوط به این نمونه را همراه با پیش‌بینی نظریه‌های مربوطه شامل پراکندگی‌های ناخالصی‌های خنثی و یونیده، فونون‌های قطبی و آکوستیکی، آلیاژی و همچنین دررفتگی‌ها، در شکل (۲-۴) نشان داده‌ایم این پیش‌بینی‌ها به ترتیب حاصل از به‌کارگیری معادلات (۲۱-۳)، (۷-۳)، (۱۰-۳)، (۱۴-۳)، (۱۷-۳)، (۱۸-۳) و (۲۲-۳) برای سازوکارهای یاد شده است. در انجام این محاسبات نیازمند اطلاع از جرم مؤثر الکترونی به‌زای غلظت نیتروژن بخصوص در ماده (در این مورد ۱/۴٪ هستیم. ما برای یافتن این کمیت از نتایج پیش‌بینی شده توسط نظریه BAC (شکل ۲-۸) استفاده کرده‌ایم که مقدار $m^* = 0.99 m_0$ را به ازای x موردنظر به‌دست می‌دهد.



شکل (۲-۴) نتایج تحلیل نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی در سیستم $\text{GaN}_{0.014}\text{As}_{0.986}$ (نمونه Hashimoto [۱]).

چنانچه ملاحظه می شود در بازه‌های دمایی مختلف سازوکارهای غالب متفاوت است. نتایج محاسباتی ما حاکی از آنند که نقش اساسی در پراکندگی الکترونی در این نمونه، بر عهده پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای بوده که در کل گستره دمایی مورد بحث به عنوان سازوکار غالب پراکندگی عمل کرده‌است. لازم به ذکر است که این پراکندگی توسط O'Reilly و همکارانش [۳] فقط در دو دمای ۳۰ K و ۳۰۰ K محاسبه شده‌است (فصل ۲) و ما برای پیش‌بینی نظری تحرک الکترونی برحسب دما از تقریب خطی در بین این دو دما استفاده کردیم. از مقایسه داده‌های تجربی با μ_{tot} که حاصل کل پراکندگی‌هاست، دیده می‌شود که انطباق بسیار خوبی بین آنها وجود دارد. اختلاف اندک می‌تواند به برخی عوامل شامل تقریب خطی به کار رفته در پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای، وجود ناخالصی‌های ناخواسته و تشکیل ترازهای وابسته به تله‌ها و همچنین دررفتگی‌ها در نمونه نسبت داد. یکی دیگر از عواملی که می‌تواند به خطای محاسباتی ما منجر شده باشد مقادیر به کار گرفته شده مربوط به پارامترهای مادی نمونه شامل ثابت دی‌الکتریک، چگالی جرمی و... مربوط به $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ است. آنجا که در مقالات بررسی شده در مورد این کمیت‌ها در نمونه‌های نیتروژن دار رقیق مقداری گزارش نشده است ما از همان مقادیر وابسته به GaAs استفاده کرده‌ایم. این نیز می‌تواند به عدم انطباق نظری ما و داده‌های تجربی منجر شود.

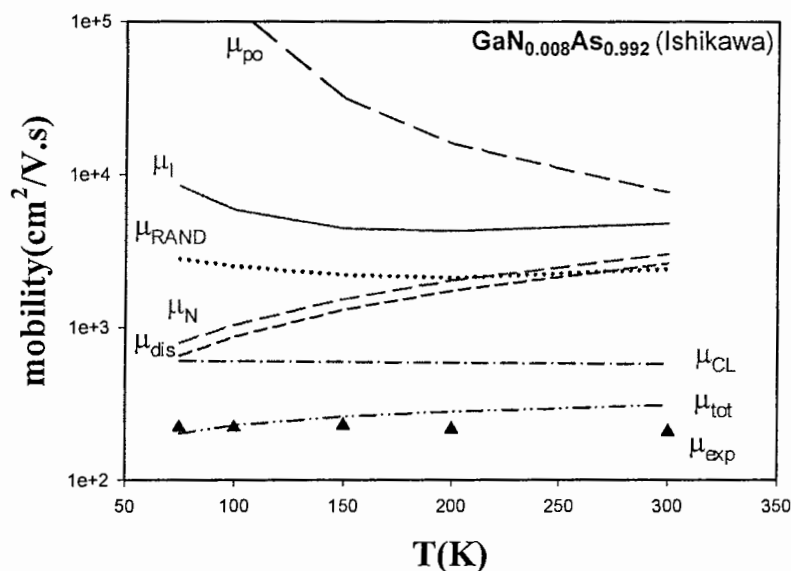
پارامترهای انطباق شامل چگالی ترازهای ناخالصی (N_d)، تراکم دررفتگی‌های سطحی (N_{dis})، تراز انرژی ناخالصی‌ها (E_d) و ضریب جبران (Φ) حاصل از تحلیل نظری داده‌های این نمونه Hashimoto به صورت زیر به دست آمده‌اند:

جدول ۴-۱: پارامترهای انطباق محاسبه شده در نمونه Hashimoto

| $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ | $N_{dis} (cm^{-2})$ | $N_d (cm^{-3})$ | $E_d (meV)$ | Φ |
|-------------------------------|----------------------|--------------------|-------------|--------|
| x=0 | $1/6 \times 10^{12}$ | 4×10^{17} | ۰/۴ | ۰/۳۴ |
| x=0.014 | 3×10^{12} | 4×10^{17} | ۰/۲ | ۰/۲۵ |

بدین ترتیب ملاحظه می‌شود تحرک الکترونی در گسترهٔ پهن دمایی $10-300\text{ K}$ تقریباً ثابت می‌ماند و حتی در دماهای بالا که معمولاً نقش پراکندگی‌های فونونی در مقایسه با دیگر سازوکارها غالب است، در اینجا چنین نبوده و این پراکندگی‌ها در مقایسه با پراکندگی آلیاژی بویژه خوشه‌ای نقش ناچیزی دارند. در دماهای پایین علاوه بر پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای، می‌توان پراکندگی دررفتگی را نیز مهم دانست که هر دوی اینها بر کیفیت پایین بلور رشد یافته دلالت می‌کنند.

دومین نمونه مورد بررسی ما توسط Ishikawa و همکارانش [۴] می‌باشد که نمونه‌هایی از $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ را با کسر مولی نیتروژن بین $0/8$ تا $2/2$ درصد به روش MBE برروی زیرلایهٔ GaAs و در دمای 450°C رشد داده‌اند. داده‌های مربوط به تحرک نمونه با $x=0/8$ که با ناخالصی خواسته Si با تراکم 10^{18} cm^{-3} به عنوان آلاینده بخشنده رشد یافته در شکل (۳-۴) نشان داده شده است. در این شکل پیش‌بینی‌های تحلیلی هرکدام از سازوکارهای پراکندگی الکترونی را به‌تنهایی و نیز اثر کلی آنها (μ_{tot}) را نشان داده‌ایم.



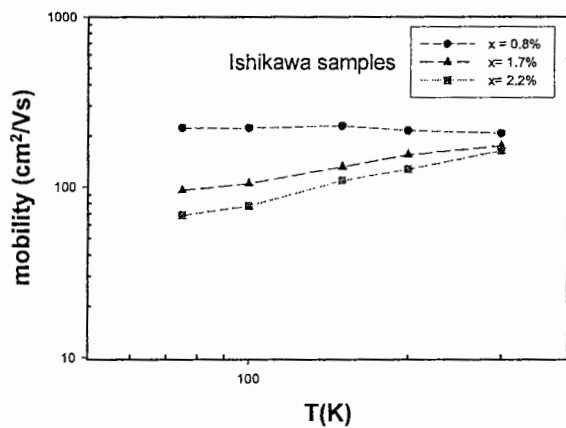
شکل (۳-۴) نتایج تحلیل نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی در سیستم $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با $x=0/8$

(نمونه Ishikawa [۴]).

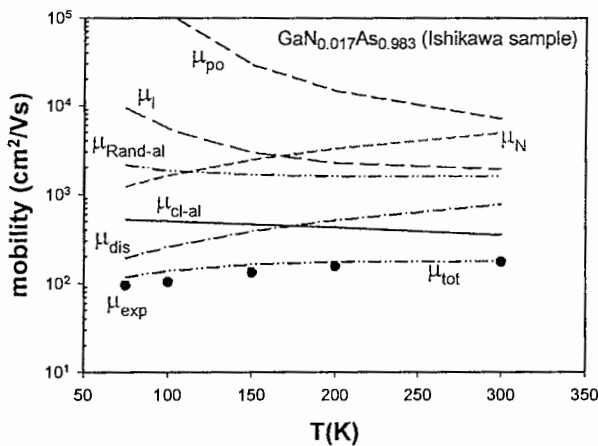
همانگونه که پیداست در این نمونه در دماهای زیر 100K بیشترین تأثیر در تحرک الکترونی ناشی از پراکندگی‌های وابسته به دررفتگی‌ها و همچنین ناخالصی‌های خنثی است. در دماهای بالاتر از 100K پراکندگی الکترون‌ها عمدتاً تحت تأثیر پراکندگی آلیاژی خوشه‌های اتم‌های نیتروژن است و به دنبال آن مجموعه پراکندگی‌های ناخالصی خنثی، ناخالصی یونیده و آلیاژی کتره‌ای روی هم رفته رفتار حرکت الکترون‌ها را توصیف می‌کنند. نتایج تحلیل ما نشان دهنده آن است که چگالی دررفتگی‌ها در این نمونه $3/8 \times 10^{14}\text{ cm}^{-2}$ ، تراکم ناخالصی‌ها 10^{18} cm^{-3} ، تراز ناخالصی‌های بخشنده $0/3\text{ meV}$ و ضریب جبران $0/2$ است.

۴-۱-۲ تغییرات تحرک الکترونی بر حسب تابعی از دما در نمونه‌هایی با x های متفاوت

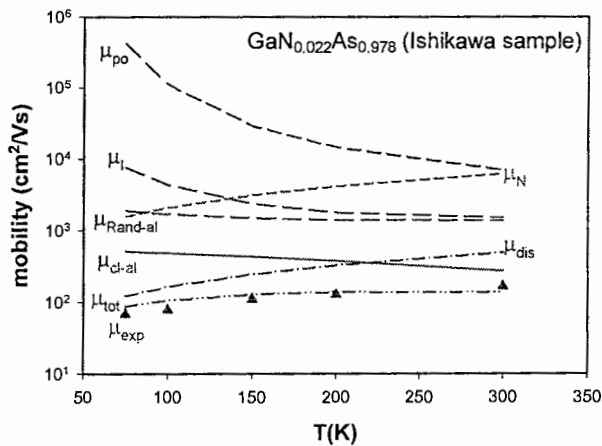
حال برای ملاحظه تأثیر غلظت نیتروژن در تحرک الکترونی دو نمونه دیگر $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با $x=1/7\%$ و $x=2/2\%$ که مشابه نمونه قبلی توسط Ishikawa با شرایط رشد یکسان داده شده‌اند را مورد توجه قرار می‌دهیم. داده‌های مربوط به این نمونه در شکل (۴-۴) نشان داده شده است. همانگونه که دیده می‌شود افزایش x به کاهش تحرک الکترونی منجر شده است. یکی از عوامل کاهش در این نمونه‌ها می‌تواند مربوط به افزایش جرم مؤثر الکترونی از $0/94 m_0$ (مربوط به نمونه با $x=0/8\%$) به $0/103 m_0$ و $0/106 m_0$ در نمونه‌های با $x=1/7\%$ و $2/2\%$ درصد بر اثر افزایش نیتروژن باشد. عوامل دیگر می‌تواند مربوط به افزایش قدرت سازوکارهای پراکندگی باشد که نتایج این محاسبات در شکل‌های ۴-۵ (الف و ب) نشان داده شده‌اند.



شکل (۴-۴) وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه های GaN_xAs_{1-x} مربوط به Ishikawa [۴] با کسر مولی نیتروژن متفاوت.



(الف)



(ب)

شکل (۵-۴) تحلیل نظری وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه های GaN_xAs_{1-x} مربوط به Ishikawa.

الف - $x = ۱/۷\%$ - ب - $x = ۲/۳\%$

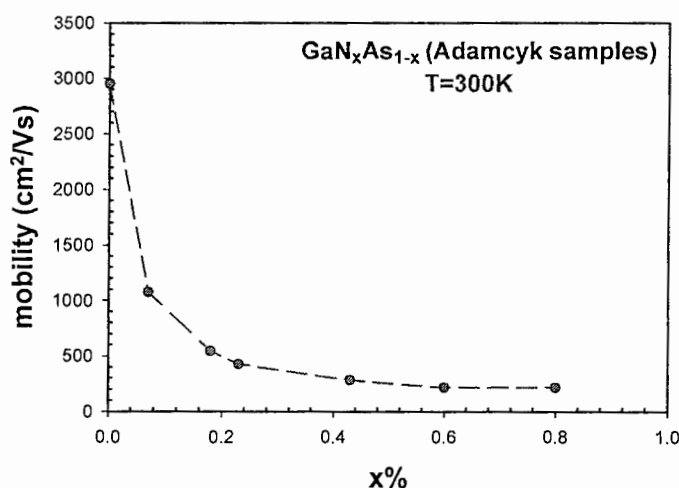
چنانچه پیداست با افزایش غلظت نیتروژن نقش پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای در این نمونه‌ها در دماهای بالاتر از 200 K غالب شده و در دماهای پایین‌تر، سازوکارهای پراکندگی‌های ناخالصی خنثی و دررفتگی‌ها تأثیر عمده را در کاهش تحرک الکترونی برعهده دارند. در نتیجه این محاسبات دریافتیم پارامترهای انطباق بصورت زیر خواهند بود.

جدول ۲-۴: پارامترهای انطباق محاسبه شده در نمونه‌های Ishikawa.

| $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ | $N_{\text{dis}} (\text{cm}^{-2})$ | $N_{\text{d}} (\text{cm}^{-3})$ | $E_{\text{d}} (\text{meV})$ | Φ |
|-------------------------------|-----------------------------------|---------------------------------|-----------------------------|--------|
| $x=1/7\%$ | 6×10^{14} | 4×10^{18} | $0/2$ | $0/2$ |
| $x=2/2\%$ | $7/5 \times 10^{14}$ | $4/8 \times 10^{18}$ | $0/15$ | $0/3$ |

۲-۴ تأثیر غلظت نیتروژن بر تحرک الکترونی $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ در دمای اتاق

هدف ما در این بخش مطالعه میزان تأثیر تغییر کسر مولی نیتروژن بر ویژگیهای تراپیری الکتریکی در نیمرسانای مورد نظر ماست. یکی از این ویژگیها تحرک الکترونی است. برای بررسی این کمیت نمونه‌های محققین مختلف را مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌دهیم. نخست به نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ که توسط Adamcyk [۵] گزارش شده‌اند می‌پردازیم که به روش MBE رشد یافته‌اند و تغییرات x در نمونه‌ها در بازه $0/07$ تا $0/6$ درصد می‌باشد. این نمونه‌ها با Si آرایش شده و تراکمی در حدود $6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ دارند. این نمونه‌ها در دمای 460°C و بر روی زیرلایه GaAs رشد یافته‌اند. مقادیر تحرک الکترونی این نمونه‌ها در دمای اتاق در شکل (۴-۶) نشان داده شده است.



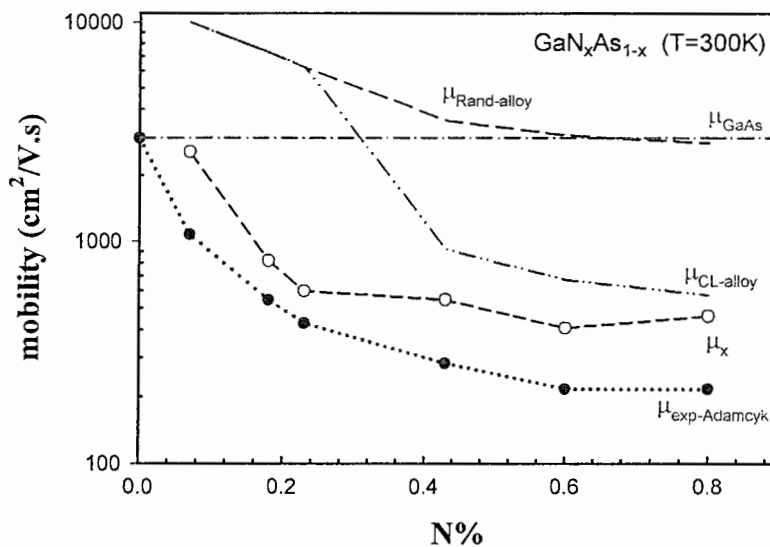
شکل (۴-۶) تحرک الکترونی نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ که با Si آلاینش شده‌اند در دمای اتاق.

با توجه به این شکل کاهشی شدید در تحرک الکترونی با افزایش مقدار نیتروژن بویژه در بازه صفر تا ۰/۲ درصد مشاهده می‌شود. می‌دانیم که سازوکارهای پراکندگی مختلف در کاهش تحرک الکترونی تأثیرگذارند. با توجه به مطالب گذشته در این فصل از جمله پراکندگی‌های غالب در این نمونه‌ها در دمای اتاق پراکندگی‌های آلیاژی کترهای ($\mu_{\text{Rand-al}}$)، آلیاژی خوشه‌ای ($\mu_{\text{cl-al}}$)، سازوکارهای متناظر با پراکندگی‌های مربوط به GaAs پایه (μ_{GaAs}) و نیز سایر پراکندگی‌های دیگر است که کلاً آنها را با μ_x نشان می‌دهیم می‌تواند به تراکم دررفتگی‌ها، ناراستی‌ها و ترازهای به دام اندازنده ایجاد شده توسط اتم‌های منفرد نیتروژن نسبت داده شود). در این صورت با به‌کارگیری قاعده ماتیسسن به‌ازای دمای ثابت اتاق (۳۰۰K) خواهیم داشت:

$$\frac{1}{\mu_{\text{tot}}} = \frac{1}{\mu_{\text{GaAs}}} + \frac{1}{\mu_{\text{cl-al}}} + \frac{1}{\mu_{\text{Rand-al}}} + \frac{1}{\mu_x} \quad (1-4)$$

در نمونه Adamcyk، تحرک الکترونی مربوط به GaAs مقداری حدود $2950 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ اندازه‌گیری شده است. مقادیر تحرک الکترونی ناشی از پراکندگی آلیاژی کترهای و خوشه‌ای را نیز به‌ازای x های مختلف می‌توانیم با استفاده از پیش‌بینی‌های تئوری O'Reilly و همکارانش که در شکل (۲-۳) آمده، در دمای اتاق به‌دست آوریم. بدین ترتیب μ_x به‌ازای هر x قابل محاسبه است. شکل (۴-۷)

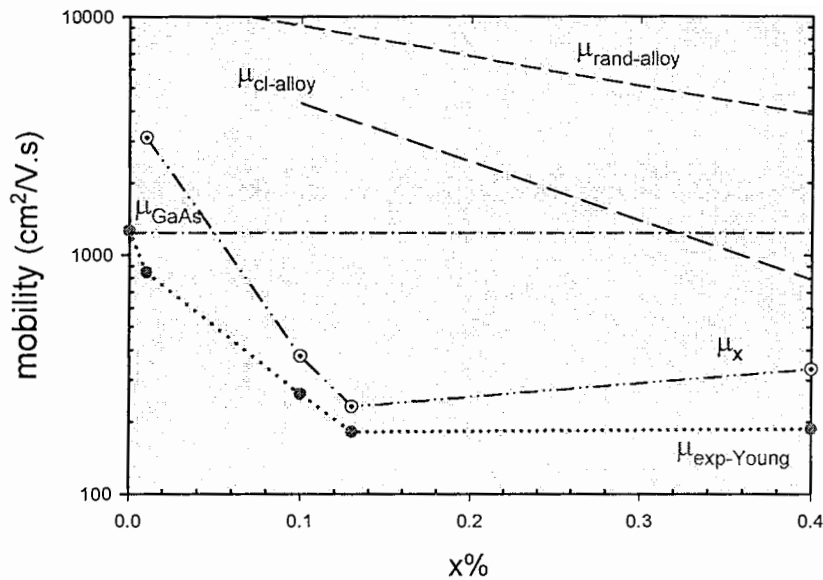
سازوکارهای پراکندگی غالب را که به صورت نظری محاسبه شده اند، نشان می‌دهد. تأثیر مجموع عوامل نشان داده شده، همان مقادیر تجربی تحرک را به دست می‌دهند. نکته قابل توجه آنکه اثر عوامل پراکننده μ_x در x های کوچکتر از ۰/۲ درصد بیشتر بوده و با زیادتر شدن نیتروژن، تأثیر این عوامل کاهش می‌یابد و این پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای است که نقش اصلی کنترل تحرک الکترون‌ها را برعهده می‌گیرد. این می‌تواند به معنی شکل‌گیری خوشه‌های اتم‌های نیتروژن در این محدوده باشد.



شکل (۷-۴) تحلیل نظری وابستگی تحرک الکترونی به مقدار نیتروژن در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ رقیق در دمای اتاق. دایره‌های توپر داده‌های تجربی اندازه‌گیری شده توسط Adamcyk با $N_d = 6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ می‌باشد.

بررسی مشابهی در نمونه‌های گزارش شده توسط Young و همکارانش [۶] که به روش MOCVD روی زیرلایه‌ای از GaAs در دمای بین 650°C - 550°C رشد داده شده‌اند قابل انجام است. در این نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ، محدوده تغییرات x بین صفر تا ۰/۴ می‌باشد. شکل (۸-۴) داده‌های مربوط به این نمونه‌ها را نشان می‌دهد. نکته قابل ذکر اینکه مقدار تحرک الکترونی GaAs پایه در این نمونه

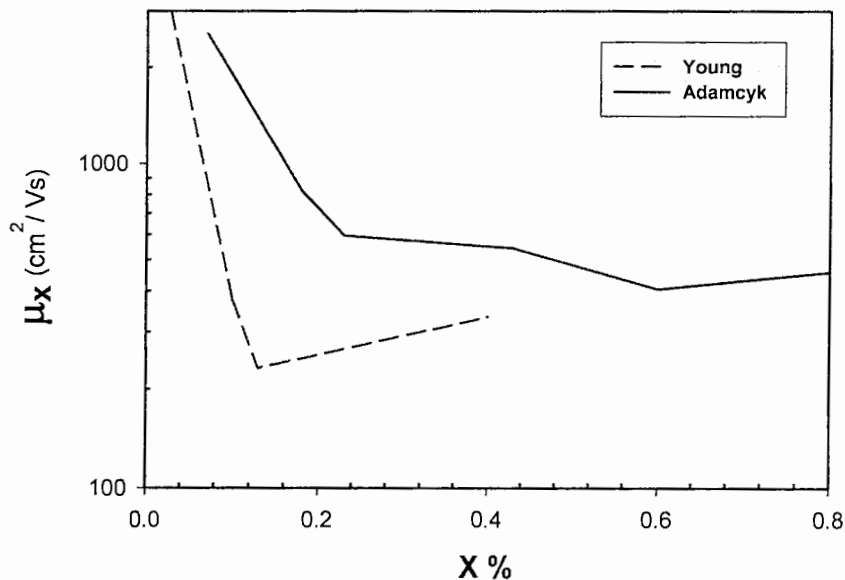
مقدار $1236 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ گزارش شده است.



شکل (۴-۸) تحلیل نظری وابستگی تحرک الکترونی به غلظت نیتروژن در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ رقیق در دمای اتاق. دایره‌های توپر داده‌های تجربی نمونه Young و همکارانش [۶] می‌باشند.

با توجه به این شکل، در نمونه Young، در محدوده $x < 0.15$ ، عامل اصلی پراکندگی، مربوط به پراکندگی‌های وابسته به GaAs پایه می‌شود و قرارگیری اتم‌های نیتروژن به صورت کتره‌ای و یا خوشه‌ای نقش چندانی در کاهش تحرک الکترونی ایفا نمی‌کنند، در حالی که در بازه $(0.15 < x < 0.3)$ نقش اساسی در کاهش تحرک ناشی از μ_x است و از آن پس $(x > 0.3)$ و پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای با هم در کاهش تحرک الکترونی مشارکت دارند. بنابراین در این محدوده احتمال تشکیل خوشه‌های نیتروژنی افزایش می‌یابد و انتظار می‌رود با افزایش x بیش از 0.4 ، پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای سازوکار غالب پراکندگی باشد.

اکنون با توجه به دو نمونه قبل که مورد بررسی قرار دادیم می‌توان μ_x به دست آمده در هر دو نمونه را در یک شکل رسم نموده و مقایسه‌ای انجام دهیم (شکل ۴-۹).

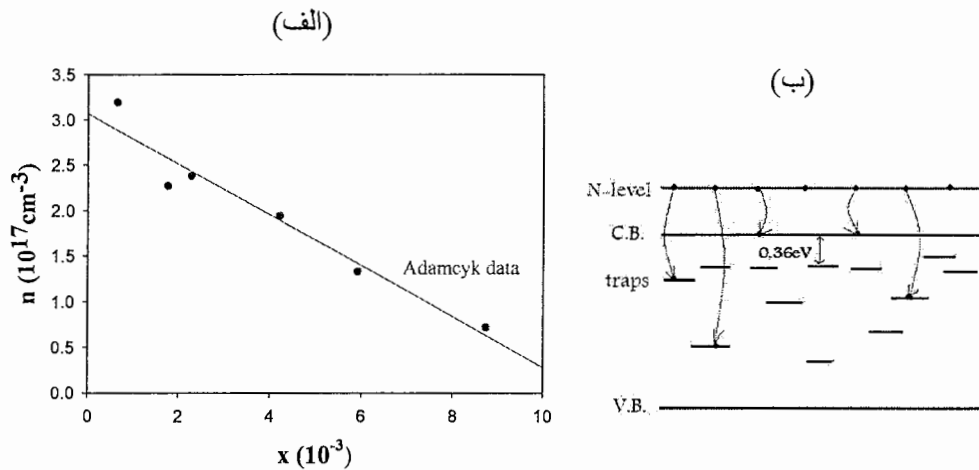


شکل (۹-۴) تحرک الکترونی ناشی از عوامل پراکندگی شامل ناراستی‌ها و ترازهای به دام اندازنده (μ_x). منحنی خط پر حاصل از تحلیل داده‌های Adamcyk و منحنی خط‌چین حاصل از تحلیل داده‌های Young می‌باشند.

با توجه به اینکه در نمونه Young و همکارانش مقدار μ_{GaAs} ، تقریباً سه برابر کمتر از نمونه Adamcyk بوده است و در شکل (۹-۴) نیز دیده می‌شود که در نمونه Young مقادیر μ_x کاهش قابل ملاحظه‌ای یافته است (به ویژه در x های کمتر از ۰/۲ درصد)، می‌توان نتیجه گرفت که یکی از عوامل کنترل μ_x همان کیفیت پایه GaAs می‌باشد. بطوری‌که هر چه تحرک الکترونی GaAs پایه بیشتر باشد، تأثیر μ_x کاهش می‌یابد.

۳-۴ بستگی تراکم الکترونی در GaN_xAs_{1-x} به x دردمای اتاق

شکل (۱۰-۴ الف) تغییرات تراکم حامل‌ها در نمونه‌های Adamcyk [۵] را بر حسب تابعی از غلظت نیتروژن (x) نشان می‌دهد. داده‌ها نشانگر آن است که با افزودن کمتر از ۰/۱ درصد نیتروژن به شبکه GaAs تراکم الکترون‌های آزاد در دمای اتاق از $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ تا ۶ برابر کاهش پیدا کرده است. این کاهش به حضور تعداد تله‌ها (traps) در گاف نواری نمونه‌ها نسبت داده می‌شود [۵].



شکل (۴-۱۰) الف- تغییرات تراکم الکترونی بر حسب مقدار نیتروژن در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$

ب- نمای شماتیک گاف انرژی و ترازهای به دام اندازنده الکترون در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$

با انجام یک بررسی نظری می‌توان از طریق حل معادلات مربوط به تراکم حامل‌ها و احتمال اشغال ترازهای ناخالصی، تراکم ترازهای به دام اندازنده در گاف نواری $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ را به دست آورد. بطور کلی می‌دانیم برای یک تراز انرژی E_x از تابع توزیع فرمی - دیراک خواهیم داشت:

$$f(E_x) = \frac{1}{1 + g e^{(E_x - E_F)/kT}} \quad (۲-۴)$$

که در آن E_F تراز فرمی و g عامل واگنی است. برای حالت‌های بخشنده، g برابر 0.5 است [۵]. از آنجا که طبیعت ناراستی‌های مربوط به نیتروژن کاملاً مشخص نیست، مقدار g برای این ترازهای به دام اندازنده، 1 فرض می‌شود [۵]. به طور کلی بار خالص جایگزیده (N_x^0)، در تراز انرژی مشخص E_x با رابطه زیر داده می‌شود:

$$N_x^0 = N_x f(E_x)$$

که N_x چگالی حالت‌های انرژی در انرژی E_x می‌باشد.

برای GaNAs که به صورت نوع n آرایش شده باشد، تعداد کل الکترون‌های اضافی در ماده، برابر است با تعداد اتم‌های بخشنده. شرایط تعادل گرمایی، چگونگی توزیع این حامل‌های بار را در نوار

رسانش، ترازهای ناخالصی، و ترازهای به دام اندازنده که بوسیله نیتروژن ایجاد شده‌اند، مشخص می‌کند. بنابراین از معادله موازنه بار خواهیم داشت:

$$N_d = N_d f_d + N_t f_t + n \quad (3-4)$$

که N_d و N_t به ترتیب تراکم اتم‌های بخشنده و ترازهای به دام اندازنده و همچنین f_d و f_t به ترتیب احتمال اشغال ترازهای بخشنده و ترازهای به دام اندازنده می‌باشد. در این رابطه n تراکم الکترون‌ها در نوار رسانش است که از طریق اندازه‌گیری اثر هال به دست می‌آید. حال با استفاده رابطه (۳-۲۷) و در نظرگیری ته نوار رسانش به عنوان تراز مرجع، می‌توان موقعیت تراز فرمی (E_F) را پیدا کرد. با به کارگیری این روش در داده‌های Adamcyk، در نمونه‌ای با $x=0.18\%$ به ازای $N_C=4.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ و با توجه به $n=7.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (شکل ۴-۱۰)، $E_C-E_F=-49/4 \text{ meV}$ حاصل می‌شود. با توجه به موقعیت تراز فرمی در این نمونه و استفاده از آن در رابطه (۴-۲)، احتمال اشغال تراز ناخالصی $f(E_d)$ به دست می‌آید. در رابطه مذکور به جای E_d ، به تقریب مقدار $5/8 \text{ meV}$ را قرار دادیم که موقعیت تراز ناخالصی Si در شبکه GaAs می‌باشد [۸]. بدین ترتیب برای f_d مقدار 0.27 حاصل می‌گردد. Kaplan و همکارانش [۷] با استفاده از روش DLTS¹ چندین تراز به دام اندازنده در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ پیدا کرده‌اند. اندازه‌گیری‌های آنها حاکی از آن است که تراز به دام اندازنده غالب الکترون در 0.36 eV زیرنوار رسانش واقع است شکل (۴-۱۰ ب). ما برای یافتن چگالی ترازهای به دام اندازنده با استفاده مجدد از رابطه (۴-۲) و موقعیت تراز فرمی که قبلاً پیدا شد، احتمال اشغال این ترازها یعنی f_t را محاسبه کردیم که مقدار 0.99 حاصل آمد، که بسیار نزدیک به واحد است. بنابراین با گذاشتن تمام این مقادیر در رابطه (۴-۳)، تراکم ترازهای به دام اندازنده (N_t) برای این نمونه (با $x=0.18\%$) مقداری برابر $3/6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ حاصل آمد. مشابه این محاسبات را می‌توان برای سایر مقادیر x تکرار نمود. نتیجه محاسبات ما در جدول ذیل آمده است:

1 - Deep Level Transient Spectroscopy

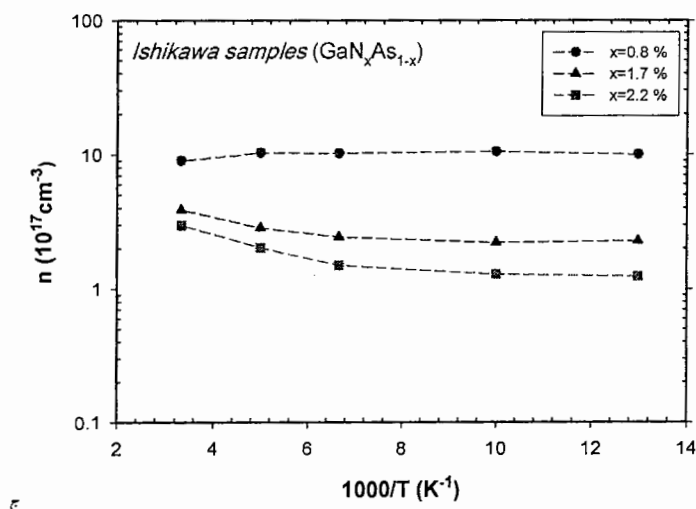
جدول ۳-۴: محاسبات مربوط به تراکم تله ها در نمونه Adamcyk.

| X (درصد) | $n(\text{cm}^{-3})$ | $E_f(\text{meV})$ | $N_t(\text{cm}^{-3})$ |
|----------|-----------------------|-------------------|-----------------------|
| ۰/۱۷ | $۲/۲ \times ۱۰^{۱۷}$ | -۱۹/۵ | $۵/۶ \times ۱۰^{۱۶}$ |
| ۰/۴ | $۱/۸۹ \times ۱۰^{۱۷}$ | -۲۳/۵ | $۱/۱ \times ۱۰^{۱۷}$ |
| ۰/۸ | $۷/۰ \times ۱۰^{۱۶}$ | -۴۹/۴ | $۳/۶ \times ۱۰^{۱۷}$ |

با توجه به نتایج محاسبات فوق می توان نتیجه گرفت به ازای افزایش یک درصد نیتروژن به مقدار $۴/۵ \times ۱۰^{۱۷} \text{ cm}^{-۳}$ بر تراکم تله های تولید شده در ماده افزوده می گردد. نتیجه محاسبات ما توافق بسیار نزدیکی با محاسبات انجام شده توسط Adamcyk ($۵/۳ \times ۱۰^{۱۷} \text{ cm}^{-۳}$) به ازای هر درصد افزایش نیتروژن دارد.

۴-۴ بستگی دمایی تراکم الکترونی در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$

در نمونه های Ishikawa و همکارانش [۴] با توجه به داده های مربوط به مقاومت ویژه و همچنین تحرک الکترونی در بازه دمایی ۷۷-۳۰۰K تراکم الکترونی را در سه نمونه محاسبه نمودیم. نتایج آنها در شکل (۴-۱۱) دیده می شود.



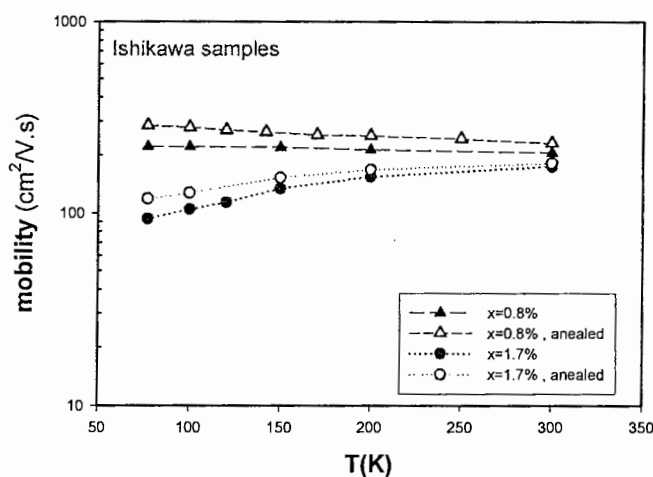
شکل (۴-۱۱) وابستگی تراکم الکترونی در نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ به ازای x های متفاوت [۴].

همانطور که مشاهده می‌گردد با افزایش غلظت نیتروژن در این نمونه‌ها که همگی در شرایط یکسانی رشد یافته‌اند، تراکم حامل‌های بار به ازای هر درصد نیتروژن حدود ۱ مرتبه بزرگی کاهش پیدا کرده که می‌تواند به معنی آن باشد که با اضافه شدن غلظت نیتروژن احتمال تشکیل ترازهای به‌دام‌اندازنده افزایش یافته است. از طرف دیگر مشاهده می‌شود تراکم حامل‌ها وابستگی ضعیفی نسبت به دما نشان می‌دهند. این موضوع به‌ویژه در غلظت‌های پائین‌تر نیتروژن مشهودتر است. مثلاً در $x=0/8\%$ تغییرات تراکم حامل‌ها نسبت به دما بسیار ناچیز است. این امر می‌تواند نشانگر نزدیکی تجمع ترازهای ناخالصی به لبه نوار رسانش باشد با افزایش غلظت نیتروژن وابستگی دمایی تراکم حامل‌ها بیشتر می‌شود، بطوری‌که در دمای 300 K تراکم الکترونی در نمونه‌های با $x=1/7\%$ و $x=2/2\%$ به ترتیب $2/5$ و $1/7$ برابر مقدار آن در دمای 77 K شده است. این امر می‌تواند به معنی برانگیخته شدن ناخالصی‌ها و یا ترازهای وابسته به تله‌ها در انرژی قدری پایین‌تر از لبه نوار رسانش باشد.

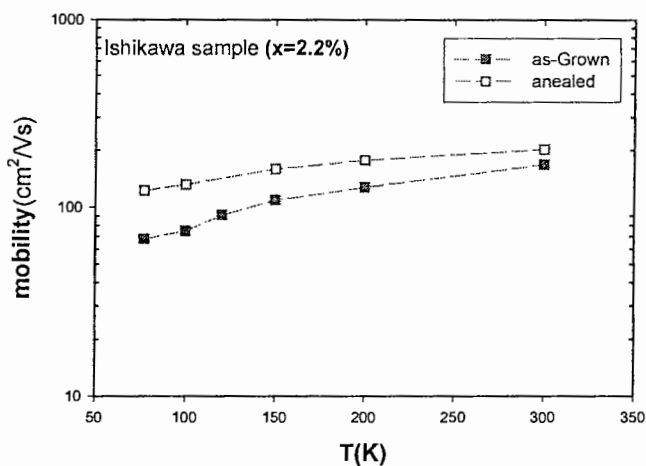
۴-۵ تأثیر بازپخت سریع در تحرک و تراکم الکترونی

بازپخت سریع (Rapid Thermal Annealing) به عملیات حرارتی اطلاق می‌شود که معمولاً پس از رشد نمونه، به منظور بهبود خواص رسانندگی آن انجام می‌گیرد. در طی بازپخت، نمونه رشد داده شده برای مدت مشخصی تحت دمای معین در کوره قرار می‌گیرد. همانگونه که در بخش‌های قبل این فصل دیدیم ترکیب نیتروژن در GaNAs باعث تنزل کمیت‌های وابسته به خواص ترابری نمونه می‌شود. علت این امر می‌تواند ناشی از تشکیل تجمعات خوشه‌ای نیتروژن باشد که به ناهمگونی و ایجاد انحرافات پتانسیل تناوبی در شبکه بلورین منجر شود و در نتیجه بر روی ترابری حامل‌ها و بازدهی قطعات تأثیر نامطلوب گذارد. بدین ترتیب انتظار می‌رود بر اثر بازپخت، آلیاژ نیتروژن خوشه‌ای به حالت کتره‌ای نزدیک شده و به تحرک الکترونی بالاتری دست یافت. عمل بازپخت همچنین می‌تواند موجب شکسته شدن پیوندهایی از قبیل N-H که در حین رشد احتمال شکل‌گیری دارد گردیده و در نتیجه اتم‌های نیتروژن را فعال نماید.

با توجه به شکل‌های ۴-۱۲ (الف و ب) به وضوح دیده می‌شود که در نمونه‌های Ishikawa بعد از بازپخت به مدت ۶۰s در دمای $800^{\circ}C$ ، مقدار تحرک الکترونی افزایش یافته است. در تراکم حامل‌های این نمونه‌ها نیز بعد از بازپخت افزایش مشاهده شده است. در این شکل‌ها علائم توخالی، نمونه‌های بازپخت شده را نشان می‌دهد.



(الف)

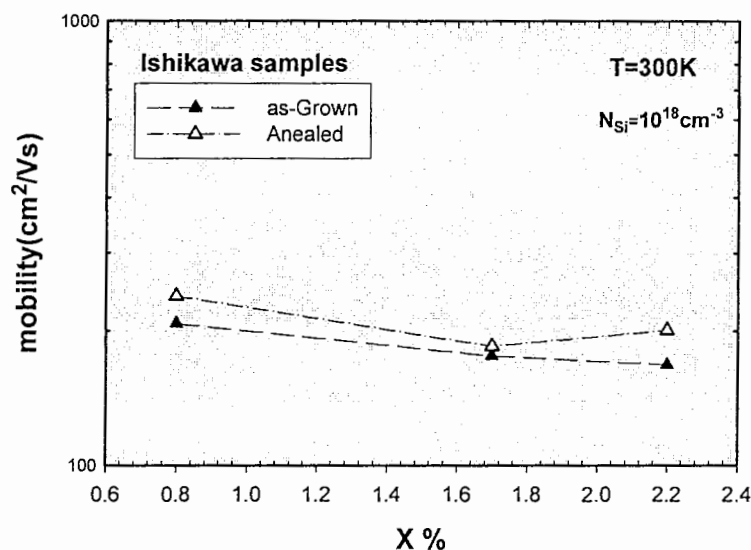


(ب)

شکل (۴-۱۲) وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه‌های Ishikawa. علائم توخالی نمونه‌های بازپخت شده را

نشان می‌دهد (الف) $x=0.8\%$ و $x=1.7\%$ (ب) $x=2.2\%$

برای مقایسه افزایش تحرک بر حسب X در نمونه‌های بازپخت شده و بازپخت نشده، داده‌های مربوط به این نمونه‌ها در دمای اتاق در شکل (۴-۱۳) رسم شده است.



شکل (۴-۱۳) تغییرات تحرک الکترونی در نمونه‌های با کسر مولی نیتروژن متغیر نسبت به بازپخت نمونه در دمای اتاق.

به گزارش Adamczyk [۵]، در نمونه‌ها پس از بازپخت تأثیر قابل ملاحظه‌ای در تحرک الکترونی و تراکم الکترونی مشاهده نشده است. شاید بتوان علت بی‌تأثیر بودن بازپخت در این نمونه‌ها را به پایین بودن غلظت نیتروژن در آنها نسبت داد. یعنی با توجه به مطالب گفته شده در قبل می‌توان انتظار داشت که با پایین آمدن کسر مولی نیتروژن احتمال تشکیل خوشه‌های نیتروژنی کاهش یابد بنابراین چنین نمونه‌ای بیشتر به صورت آلیاژ کتره‌ای شکل می‌گیرد. پس احتمالاً بازپخت نمی‌تواند تأثیر چندانی در بالا بردن کیفیت آلیاژ داشته باشد.

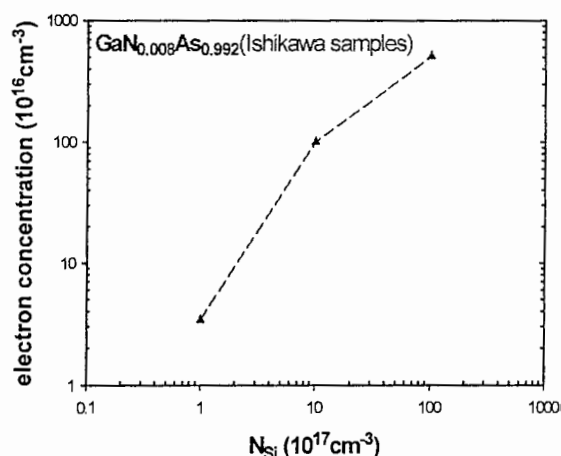
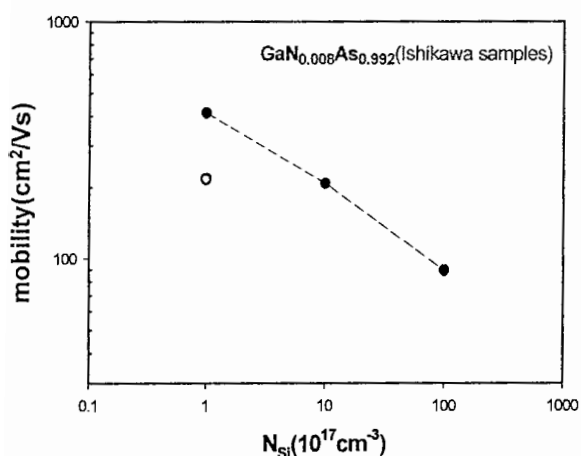
۶-۴ نقش آلیش در تحرک و تراکم الکترونی

آلیش (doping) در یک نیمرسانا معمولاً به منظور کنترل تراکم و نوع حامل‌ها در ماده انجام می‌شود. همانگونه که در فصل اول گفته شد در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ برای دستیابی به رسانندگی نوع n غالباً از Si به عنوان آلاینده استفاده می‌شود.

همانگونه که در شکل (۴-۱۴) دیده می‌شود آلیش سنگین در نمونه Ishikawa به کاهش تحرک و افزایش تراکم الکترونی منجر شده است. بر اساس این داده‌ها ملاحظه می‌شود که با افزایش در حدود $100 \text{ cm}^2/Vs$ برابر در تراکم اتم‌های Si تحرک الکترونی تنها از $400 \text{ cm}^2/Vs$ به حدود $100 \text{ cm}^2/Vs$ تنزل پیدا کرده است. در شکل (۴-۱۴ الف) موقعیت نمونه Adamcyk که با همین غلظت نیتروژنی و روش رشد مشابه حاصل آمده است نیز به صورت دایره توخالی نشان داده شده است. علت اختلاف احتمالاً می‌تواند ناشی از تفاوت در دمای رشد زیرلایه و یا سایر پارامترهای گزارش نشده باشد.

(الف)

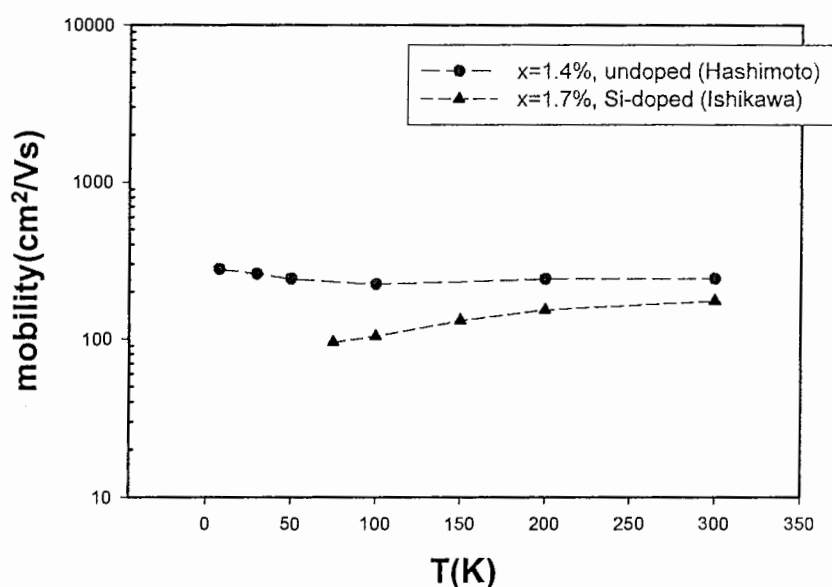
(ب)



شکل (۴-۱۴) الف- تغییرات تحرک الکترونی نسبت به تراکم ناخالصی‌ها در نمونه‌های Ishikawa.

ب- تغییرات تراکم حامل‌ها نسبت به تراکم ناخالصی‌ها در نمونه‌های Ishikawa.

اگر دو نمونه Hashimoto و Ishikawa را با هم مقایسه کنیم شکل (۴-۱۵)، می بینیم با توجه به اینکه نمونه Hashimoto بدون آرایش خواسته و دارای تراکم ناخالصی در حدود 10^{17}cm^{-3} است، مقدار تحرک الکترونی در تمامی گستره دمایی نشان داده شده از نمونه آرایش شده Ishikawa با تراکم سیلیکون 10^{18}cm^{-3} بیشتر است. علاوه بر این در دماهای پایین تحرک الکترونی در نمونه آرایش شده Ishikawa به وضوح رفتار کاهشی نشان می دهد. علت این کاهش را می توان به پراکندگی بیشتر الکترون ها از ناخالصی های موجود در این نمونه نسبت داد.



شکل (۴-۱۵) وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$. دایره ها مربوط به نمونه آرایش نشده Hashimoto با تراکم ناخالصی ناخواسته حدود 10^{17}cm^{-3} و مثلث ها مربوط به نمونه آرایش شده Ishikawa با تراکم Si به مقدار 10^{18}cm^{-3} است.

۷-۴ نتیجه گیری

در ماده نیمرسانای $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با کسر مولی پایین نیتروژن ($0 < x < 0.05$) رفتارهای غیرطبیعی مشاهده شده است. از آن جمله گاف نواری این ماده با افزایش نیتروژن کاهش شدیدی می‌یابد به طور نوعی از 1.42 eV در $x=0$ به 1.29 eV در $x=0.005$ و به 1.14 eV در $x=0.017$ تنزل می‌یابد. این کاهش به طور نسبتاً خوبی توسط نظریه BAC توجیه شده است.

کمیت دیگر جرم مؤثر الکترونی نیز در این نمونه‌ها بر خلاف نیمرساناهای معمولی، با افزایش نیتروژن - کاهش گاف نواری - افزایش می‌یابد. پیش‌بینی‌های نظریه BAC و $\mathbf{k.p}$ نیز این روند را توصیف می‌کند.

رشد نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ رقیق به علت دمای پایین مورد نیاز (حدود 500°C) برای ترکیب نیتروژن و نیز اختلاف قابل توجه بین ثابت شبکه لایه و زیرلایه، بسیار دشوار است. به خاطر کامل نشدن پیوندهای اتمی و یا پیوندهای ناخواسته در رفتگی‌ها و ناراستی‌هایی در بلور شکل می‌گیرند، که به کاهش کیفیت بلوری نمونه‌ها می‌انجامد.

تحرك الکترونی در نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ رقیق با افزایش نیتروژن به شدت کاهش می‌یابد. این در حالی است که وابستگی دمایی تحرك الکترونی در این نمونه‌ها بسیار ضعیف است. تحلیل‌های انجام شده بر روی این داده‌ها حاکی از تشکیل تراکم بالای ناراستی‌های ناخواسته و در رفتگی‌ها در این نمونه‌هاست که شاهدهی بر کیفیت بلوری پایین این لایه‌ها می‌باشد. علاوه بر این ملاحظه می‌شود که در دمای اتاق سازوکار غالب پراکندگی الکترونی پراکندگی آلیاژی خوشه‌ای و در دماهای پایین نقش پراکندگی در رفتگی‌ها و ناخالصی‌ها (در این شرایط ناخالصی‌های خنثی) محسوس است. می‌توان پنداشت که تشکیل ناراستی‌ها با تشکیل خوشه‌های نیتروژنی در ماده در ارتباط باشند.

تراکم الکترونی در این مواد اگرچه از وابستگی دمایی ناچیزی برخوردار است با افزایش x این تراکم به شدت کاهش می‌یابد. توجیه این پدیده با در نظر گرفتن حضور ترازهای به‌دام اندازنده در داخل

گاف نواری ماده امکان پذیر است. تراکم این ترازها در نمونه‌های مختلف، بسته به مقدار کسر مولی نیتروژن (x) آنها، از مرتبه بزرگی 10^{17} cm^{-3} بوده و با افزایش x به ازای هر یک درصد در حدود $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ افزوده می‌گردد.

با توجه به بررسی تأثیر بازپخت در تحرک و تراکم الکترونی نمونه‌های مورد نظر ملاحظه شد که معمولاً بازپخت می‌تواند باعث افزایش تحرک و تراکم الکترونی ماده به طور همزمان شود. این امر می‌تواند به خاطر کاهش بی‌نظمی‌ها و ناراستی‌ها و نیز شکسته شدن برخی از پیوندهای ناخواسته در حین بازپخت باشد. این پدیده به‌ویژه در نمونه‌هایی با $0.01 < x < 0.02$ از اهمیت بیشتری برخوردار است، که خبر از این می‌دهد که در این بازه احتمال تشکیل خوشه‌های نیتروژنی و نقص‌های بلوری بیشتر می‌شود. و سرانجام بررسی داده‌های تجربی بیانگر آن است که آرایش سنگین Si در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ (حدود 10^{18} cm^{-3}) گرچه سبب افزایش تراکم الکترون‌ها می‌گردد، لکن تحرک آنها را کاهش می‌دهد.

- 1- A. Hashimoto, T. Yamaguchi, T. Suzuki, A. Yamamoto, '*Hall electron mobility versus N spatial distribution in III-V-N systems*', J. Cryst. Growth. **278**, 532-537 (2005)
- 2- C. M. Wolfe, N. Holonyak, JR., G. E. Stillman, '*Physical properties of Semiconductors*', Prentice Hall (1989)
- 3- S. Fahy, A. Lindsay, E. P. O'Reilly, '*Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors*', NMRC and Department of Physics, University College Cork, Ireland (2004)
- 4- F. Ishikawa, G. Mussler, K.-J. Friedland, H. Kostial, K. Hagenstein, '*Impact of N-induced potential fluctuations on the electron transport in Ga(As,N)*', Appl. Phys. Lett. **87**, 262112 (2005)
- 5- M. Adamcyk, '*Epitaxial Growth Of Dilute Nitride-Arsenide Compound Semiconductors By Molecular Beam Epitaxy*', PhD Thesis, University Of British Columbia (2002)
- 6- D. L. Young, J. F. Geisz, T. J. Coutts, '*Nitrogen-induced decrease of the electron effective mass in GaN_xAs_{1-x} thin film measured by thermomagnetic transport phenomena*', Appl. Phys. Lett. **82**, 1236 (2003)
- 7- R. J. Kaplar, et al. J. Appl. Phys. **90**(7), 3405-3408 (2001)
- 8- J. Singh, '*Semiconductor Optoelectronics*', McGraw-Hill, Inc. (1995)
- 9- J. Toivonen, '*Growth and properties of GaNAs structures*', PhD Thesis, Helsinki University of Technology, Espoo, Finland (2003)
- 10- E. Strohm, '*Optical and Electrical Properties Of Dilute Nitride GaN_xAs_{1-x} Alloys*', master of science thesis, University Of British Columbia (2002)

11- S. Fahy, E. P. O'Reilly, '*Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors*', Physica E **21** 881-885 (2004)

Abstract

In the last decade, the study of the dilute nitride semiconductors such as GaN_xAs_{1-x} , GaN_xP_{1-x} , ... have been interested in the theoretical and experimental research areas. The main reason is that by incorporation of a little amount of nitrogen the band gap of the material dramatically decreases. This feature makes these materials very useful especially in long wavelength optoelectronics devices as well as high efficient solar cells.

In this thesis we are mainly interested in the data analysis of the transport properties of a number of intentionally and unintentionally doped GaN_xAs_{1-x} ($x < 3\%$) samples. From the mobility data analysis of a number of samples grown with different methods ($MBE, RF - MBE, MOCVD$) and with different amount of nitrogen mole fractions (x), we have found that at room temperature the nitrogen cluster scattering is the dominant scattering mechanism for the free electrons. In addition our data analysis at low temperatures show that the incorporation of nitrogen in the material leads to a high density of dislocations and trap levels in the band gap causing a noticeable reduction in mobility and free electron density.