

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِيْمِ



دانشکده : فیزیک

گروه : فیزیک حالت جامد

مقایسه خواص ترابرد الکترونی در دو ماده نیمرسانای InN و AlN در حضور میدان های الکتریکی ضعیف

دانشجو : اکرم کریمی

اساتید راهنما :

دکتر مرتضی ایزدی‌فرد - دکتر هادی عربشاهی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

بهمن ماه ۱۳۹۱

تقدیم به

پدر و مادر مهربانم

تقدیم به

خواهر و برادر عزیزم

تشکرو قدردانی

سپاس خدای را که برمن منت نهاد تا خوشه چین دانش بی منتهای او شوم.
خداآوند متعال را سپاسگذارم به خاطر نعمت های بی پایانش ، بخصوص وجود پدر و
مادر دلسوزم که اگر یاری هایشان نبود، انجام این کار برایم میسر نبود .

از اساتید گرانمایه ام آقایان دکتر مرتضی ایزدی فرد و دکتر هادی عربشاهی به
دلیل راهنمایی ها و حمایت های ارزشمندانه کمال تشکر و قدردانی را دارم . امید
که این کار راهگشایی هرچند کوچک در روند تحقیقات محققین باشد .

اکرم کریمی

بهمن ماه ۱۳۹۱

تعهد نامه

اینجانب اکرم کریمی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه مقایسه خواص تراپرد الکترونی در دو ماده نیمرسانی InN و AlN در حضور میدان‌های الکتریکی ضعیف تحت راهنمایی دکتر مرتضی ایزدی فرد متعهد می‌شوم.

- تحقيقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطلوب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام «دانشگاه صنعتی شاهرود» و یا «Shahrood University of Technology» به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می‌گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که از موجود زنده) یا بافت‌های آنها (استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد .

چکیده

در این پایان نامه مسئله تراپرد الکترون ها در دو نیمرسانای InN و AlN در حضور میدان های الکتریکی ضعیف با استفاده از حل معادله بولتزمن به روش برگشت پذیر مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج این مطالعه نشان می دهد که در میدان های الکتریکی ضعیف (10^4 V/cm) ، تنها الکترون های واقع در دره مرکزی Γ در تراپرد الکترون ها سهمیم می باشند و گذارهای بین دره ای و بین نواری وجود ندارد ، در حالیکه در میدان های الکتریکی قوی ، الکترون های واقع در دره های مجاور نیز در تراپرد الکترون ها شرکت می کنند و گذارهای بین دره ای و بین نواری نیز صورت می پذیرد . در واقع در میدان های الکتریکی قوی ، الکترون های واقع در دره مرکزی Γ می توانند انرژی لازم برای رفتن به دره های دیگر را کسب نمایند. در بررسی ساختارنواری و تأثیر آن بر خواص تراپرد الکترون ها از نظریه کین ، استفاده شده است. همچنین در این کار پراکندگی های ناشی از فونون های آکوستیکی و اپتیکی قطبی ، پتانسیل تغییر شکل شبکه ، اثرپیزو الکتریک ، ناخالصیهای یونیزه نیز بررسی شده است . بستگی تحرک پذیری به دما و همچنین تراکم الکترون ها نیز در دو نیمرسانای InN و AlN مورد بررسی قرار گرفته است .

کلمات کلیدی : تراپرد الکترون ها ، معادله بولتزمن ، روش برگشت پذیر ، نظریه کین ، پراکندگی ناشی از فونون های آکوستیکی و اپتیکی قطبی ، پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه ، پراکندگی ناشی از اثرپیزوالکتریک ، پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه ، تحرک پذیری الکترون ها ، گذار بین دره ای ، گذار بین نواری .

مقالات مستخرج از این پایان نامه :

۱.” Comparison of Scattering Effect in Zincblende and Wurtzite AlN Structures”, H. Arabshahi , M. Izadifard and A. Karimi. International Journal of Science and Advanced Technology . (ISSN ۲۲۲۱-۸۳۸۶) Volume ۱ No ۱ December ۲۰۱۱.

۲.”Comparison of Electron Mobility in AlN and InN at Low Electric Field Application.”, H. Arabshahi , M. Izadifard and A. Karimi. International Journal of Science and Advanced Technology. (ISSN ۲۲۲۱-۸۳۸۶) Volume ۲ No ۱ January ۲۰۱۲.

فهرست مطالب

عنوان	صفحة
ت تقدیم	ت
تشکر نامه ث	ث
چکیده ح	ح
لیست مقالات مستخرج خ	خ
فهرست مطالب د	د
فهرست نمودارها و شکلها ز	ز
فهرست جدول ها ظ	ظ

فصل اول - مفاهیم مقدماتی

۱-۱ مقدمه ۱	۲
۱-۲ تابع موج الکترون در ساختار نواری ۳	۳
۱-۳ ساختار بلوری ۶	۶
۱-۳-۱ ساختار بلوری مکعبی زینک بلند ۱	۶
۱-۳-۲ ساختار بلوری وورتسایت ۱	۷

۸	۴-۱ محاسبه ساختار نواری
۱۳	۵-۱ چگالی حالات انرژی
۱۳	۶-۱ محاسبه ساختار نواری انرژی به روش شبه پتانسیل

فصل دوم - عوامل پراکندگی الکترون ها

۱۸	۱-۲ مقدمه
۱۹	۲-۲ بررسی ترابرد الکترون ها در درون یک بلور کامل
۲۰	۳-۲ مکانیسم پراکندگی الکترون
۲۳	۴-۲ انواع فرآیند های پراکندگی
۲۴	۵-۲ ناکاملیهای بلور
۲۶	۶-۲ پراکندگی ناشی از نوسانات شبکه
۲۹	۱-۶-۲ پراکندگی ناشی از فونون های آکوستیکی
۳۰	۱-۱-۶-۲ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه
۳۳	۲-۱-۶-۲ پراکندگی پیزوالکتریک
۳۶	۲-۶-۲ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی
۳۷	۱-۲-۶-۲ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی غیر قطبی
۳۸	۲-۲-۶-۲ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی قطبی
۴۱	۷-۲ پراکندگی الکترون ناشی از ناخالصی های یونیزه

فصل سوم- معادله تراابردی بولتزمن

۴۶	۱-۳ مقدمه
۴۷	۲-۳ معادله تراابردی بولتزمن

فصل چهارم- نتایج و بحث

۵۵	۱-۴ مقدمه
۵۶	۲-۴ محاسبه آهنگ های پراکندگی در دو نیمرسانای InN و AlN
۵۶	۱-۲-۴ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه
۶۰	۲-۲-۴ پراکندگی پیزوالکتریک
۶۴	۳-۲-۴ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی قطبی
۷۱	۴-۲-۴ پراکندگی الکترون ناشی از ناخالصی های یونیزه
۷۷	۳-۴ مقایسه آهنگ های پراکندگی در دو نیمرسانای InN و AlN در ساختار وورتسایت و مقایسه آهنگ های پراکندگی نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند
۸۹	۴-۴ مقایسه حرکت پذیری در حد میدان های الکتریکی ضعیف در ترکیبات نیمرسانای InN و AlN
۱۰۲	۵-۴ نتیجه گیری کلی

مراجع

۱۰۶	مراجع
-----------	-------

فهرست شکل ها

عنوان صفحه

فصل اول

شكل(۱-۱)- الف) پتانسیل ناشی از زنجیره خطی از یون ها ، ب) تابع موج ، ج) مؤلفه های تناوبی تابع موج بلاخ ، د) مؤلفه های تخت تابع موج بلاخ ۵

شكل(۲-۱)- ا) ساختار بلوری زینک-بلند ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری زینک-بلند ۶

شكل (۳-۱) - ا) ساختار بلوری وورتسایت. ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری وورتسایت ۷

شكل(۴-۱) - ا) ساختار نوار انرژی نیمرساناهای AlN (ساختار وورتسایت و زینک بلند) ب) InN (ساختار وورتسایت) ۹

شكل(۵-۱)- ا) یک طرح شماتیک از نوارهای انرژی کروی ب) نوارهای انرژی بیضوی ۱۱

شكل (۶-۱) - غیرسهموی بودن نوار رسانش رابطه انرژی ($E(k)$) را هموار می کند و چگالی حالتها را در فضای انرژی افزایش می دهد ۱۲

شكل (۷-۱)- مفهوم شبه پتانسیل الف) پتانسیل واقعی و تابع موج مربوطه ، آن طور که توسط الکترون دیده می شود ب) شبه پتانسیل و شبه تابع متناظر آن ۱۵

فصل دوم

شكل(۱-۲)- نوسانات بلاخ الکترون تحت تأثیر میدان الکتریکی اعمالی در درون یک بلور ایده آل نیمرسانا ۲۰

شكل(۲-۱) الف - نوافص نقطه ای ۲۴

شكل(۲-۲) ب- نوافص خطی ۲۵

شكل (۲-۲) ج- نوافص سطحی ۲۵

شکل (۳-۲)- انواع پراکندگی ناشی از نوسانات شبکه..... ۲۸

شکل (۴-۲) - تأثیر ارتعاشات شبکه بر روی پتانسیل تناوبی شبکه..... ۲۹

شکل (۵-۲)- جابجایی یک زنجیره از اتم ها برای فونون های آکوستیکی طولی و عرضی..... ۳۰

فصل سوم

فصل چهارم

شکل (۱-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییرشکل شبکه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای InN در سه دره K و U و Γ ۵۷

شکل (۲-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییرشکل شبکه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای InN ۵۷

شکل (۳-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییر شکل شبکه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ ۵۸

شکل (۴-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییر شکل شبکه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ ۵۸

شکل (۵-۴) - واپستگی دمایی آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه واقع در دره Γ در نیمرسانای InN که دراین پایان نامه بررسی شده است ۵۹

شکل (۶-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پدیده پیزوالکتریک برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای InN در سه دره K و U و Γ ۶۱

شکل (۷-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها ناشی از پیزوالکتریک برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای $GaInNAs$ ۶۱

شکل (۴-۸)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پدیده پیزوالکتریک بر حسب تابعی از انرژی الکترون
۶۲.....
ها در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ .

شکل (۹-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پدیده پیزوالکتریک بر حسب تابعی از انرژی الکترون
۶۲.....
ها در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ .

شکل (۱۰-۴)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از پدیده پیزوالکتریک واقع در دره مرکزی و Γ در نیمرسانای
۶۳.....
 InN

شکل (۱۱-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت جذب بر حسب
۶۴.....
تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای InN در سه دره K و U و Γ .

شکل (۱۲-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت جذب بر حسب
۶۵.....
تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای InN در سه دره K و U و Γ .

شکل (۱۳-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت گسیل و جذب
۶۶.....
بر حسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای $GaInNAs$

شکل (۱۴-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت گسیل بر حسب
۶۶.....
تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ .

شکل (۱۵-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت جذب بر حسب
۶۷.....
تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ .

شکل (۱۶-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت گسیل بر حسب
تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ .
۶۷.....

شکل (۱۷-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت جذب بر حسب
۶۸.....
تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ .

شکل (۱۸-۴)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از فونونهای اپتیکی قطبی در حالت جذب واقع در دره مرکزی Γ
۶۹.....
در نیمرسانای InN

شکل (۴-۱۹)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از فونونهای اپتیکی در حالت گسیل واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN ۷۰

شکل (۴-۲۰)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از فونونهای اپتیکی قطبی در حالت گسیل واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN ۷۰

شکل (۴-۲۱)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای InN در سه دره K و U و Γ ۷۲

شکل (۴-۲۲)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای $GaInNAs$ ۷۲

شکل (۴-۲۳)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ ۷۳

شکل (۴-۲۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ ۷۳

شکل (۴-۲۵)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از اتم های ناخالصی یونیزه واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN ۷۴

شکل (۴-۲۶)- نمودار تغییرات آهنگ کل پراکندگی الکترون ها برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای InN ۷۵

شکل (۴-۲۷)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی کل الکترون ها برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت ۷۶

شکل (۴-۲۸)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی کل الکترون ها برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند ۷۶

شکل (۴-۲۹)- آهنگ پراکندگی الکترون از پتانسیل تغییر شکل شبکه برحسب انرژی در ترکیبات نیمرسانای InN و AlN ۷۸

شکل (۴-۳۰)- آهنگ پراکندگی الکترون از پتانسیل تغییر شکل شبکه بر حسب انرژی برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی ۷۹

شکل (۴-۳۱)- آهنگ پراکندگی الکترون از اثر پیزوالکتریک بر حسب انرژی در ترکیبات نیمرسانای AlN و InN ۸۰

شکل (۴-۳۲)- آهنگ پراکندگی الکترون از اثر پیزوالکتریک بر حسب انرژی برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی Γ ۸۱

شکل (۴-۳۳)- آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونونهای اپتیکی بر حسب انرژی در حالت جذب برای ترکیبات نیمرسانای AlN و InN ۸۲

شکل (۴-۳۴)- آهنگ پراکندگی الکترون از فونونهای اپتیکی بر حسب انرژی در حالت جذب برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی ۸۳

شکل (۴-۳۵)- آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونونهای اپتیکی بر حسب انرژی در حالت گسیل در دو نیمرسانای AlN و InN ۸۴

شکل (۴-۳۶)- آهنگ پراکندگی الکترون از فونونهای اپتیکی بر حسب انرژی در حالت گسیل برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی Γ ۸۵

شکل (۴-۳۷)- آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه بر حسب انرژی در حالت گسیل برای ترکیبات نیمرسانای AlN و InN ۸۶

شکل (۴-۳۸)- آهنگ پراکندگی الکترون از ناخالصی های یونیزه بر حسب انرژی برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی Γ ۸۷

شکل (۴-۳۹)- آهنگ پراکندگی کل الکترون ها بر حسب انرژی برای دو نیمرسانای InN و AlN ۸۸

شکل (۴-۴۰)- آهنگ پراکندگی کل الکترون ها بر حسب انرژی برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی ۸۹

شکل (۴-۴۱)- تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در غیاب برخی از پراکندگی ها ، در نیمرسانای InN ۹۲

شکل (۴-۴)- تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در غیاب برخی از پراکندگی ها ، در نیمرسانای InN ۹۲.....

شکل (۴-۵)- تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در غیاب برخی از پراکندگی ها ، در نیمرسانای AlN ۹۳.....

شکل (۴-۶)- تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در نیمرسانای InN ۹۴.....

شکل (۴-۷)- تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در نیمرسانای InN ۹۴.....

شکل (۴-۸)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب دما به ازای تراکم های الکترونی مختلف در نیمرسانای InN ۹۵.....

شکل (۴-۹)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب دما به ازای تراکم های الکترونی مختلف در نیمرسانای AlN ۹۶.....

شکل (۴-۱۰)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب دما در تراکم های الکترونی مختلف در ترکیبات نیمرسانای AlN و InN ۹۷.....

شکل (۴-۱۱)- مقایسه تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در دو نیمرسانای AlN و InN ۹۸.....

شکل (۴-۱۲)- مقایسه تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند ۹۹.....

شکل (۴-۱۳)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب چگالی الکترون ها در نیمرسانای InN ۱۰۰.....

شکل (۴-۱۴)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب چگالی ناخالصی های یونیزه در نیمرسانای InN ۱۰۰.....

شکل (۴-۱۵)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب چگالی الکترون در نیمرسانای AlN ۱۰۱.....

شکل (۴-۱۶)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب چگالی الکترون در نیمرسانای AlN ۱۰۲.....

فهرست جدول ها

عنوان	صفحة
جدول (۱-۲)- پارامترهای نواری ترکیب های نیمرسانای InN و AlN ۴۳	
جدول (۲-۲)- پارامترهای فیزیکی ترکیب های نیمرسانای InN و AlN مورد استفاده در این مطالعه ۴	

فصل اول

مفاهیم مقدماتی

۱-۱ مقدمه

به منظور محاسبه خواص تراپرد الکترونی مواد دانستن ساختار نوار انرژی ضروری است. ساختار نوار انرژی بلور از حل معادله مستقل از زمان شرویدینگر بدست می آید . روش های زیادی برای بررسی ساختار نوار انرژی نیمرسانانها وجود دارد . مشخصات نوارهای انرژی معمولاً بوسیله ترسیم انرژی های ممکن الکترون به ازای مقادیر متفاوت بردار موج الکترون در منطقه اول بریلوئن مشخص می شود . برای بررسی چگونگی تراپرد الکترون ها در درون قطعات نیمرسانا ، ساختار نوار انرژی ، پتانسیل شبکه و فرآیندهای پراکندگی الکترون ها درون بلور ، باقیستی از ساختار بلوری ماده اطلاعات کافی داشت .

در این فصل به بررسی ساختار نواری بلورهای نیمرسانای InN و AlN پرداخته شده است . نیمرساناهای InN و AlN در دو ساختار بلوری مکعبی زینک بلند^۱ و یا شش گوشی وورتسایت^۲ متبلور می شوند [۱] . گاف نواری InN و AlN از نوع مستقیم بوده و به ترتیب در دمای اتصاق دارای مقادیر $6/2$ eV و $7/0$ eV می باشند . از این ترکیبات به طور گستردۀ ای

^۱. Zincblende
^۲. Wurtzite

برای ساخت قطعات اپتوالکترونیکی نظیر دیودهای نور گسیل (LED)^۱ ، دیودهای لیزری و همچنین ترانزیستورهای با تحرک الکترون بالا (HEMTs)^۲ استفاده می شود [۱] .

۲-۱ تابع موج الکترون در ساختار نواری

الکترون یکی از ذرات بنیادی در طبیعت است . برای بررسی خواص ترابرد الکترونی در بلورهای نیمرسانا ، ضروری است تا درک کاملی از تمام عوامل تأثیرگذار بر حرکت الکترون ها بدست آورد. ساختارنواری و پراکندگی الکترون ها توسط عوامل پراکننده در بلور از مهمترین عواملی است که در ترابرد الکترون ها در درون بلور نقش دارند و بنا بر این باید به طور دقیق مشخص شوند.

برای مشخص کردن حالت الکترون ها در درون بلور کافیست معادله شرودینگر^۳ را حل نماییم:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + U_k(r) \right] \psi_k = E \psi_k \quad (1-1)$$

که در آن m^* جرم مؤثر الکترون ها درون بلور و E ویژه مقادیر انرژی می باشد. به خاطر طبیعت بلوری نیمرساناها (r) U_k پتانسیل دوره ای ناشی از هسته های اتم ها و سایر الکترون

^۱. Light emitting device

^۲. High electron mobility transistors

^۳. Schrodinger Equation

ها است و اگر بردار \vec{R} را بردار شبکه مستقیم و \vec{k} را بردار موج الکترون در اولین منطقه

بریلوئن در نظر بگیریم ، برای این پتانسیل تناوبی داریم [۲] :

$$u_k = u_k(r+R) \quad (2-1)$$

با توجه به قضیه بلاخ^۱ نشان داده می شود که مجموع بردارهای موج الکترون در فضای فاز که بتوان آنها را به صورت $\vec{k} + \vec{G}$ نوشت ، تعیین کننده بردارهای موج مستقل می باشد . در این رابطه \vec{G} بردار شبکه وارون ، \vec{k}' برداری از فضای فاز و \vec{k} بردار موج واقع در منطقه اول بریلوئن است. بدین ترتیب می توان از بردارهای موج الکترون واقع در منطقه اول بریلوئن جهت مشخص کردن تمام خصوصیات الکترونی بلور استفاده کرد .

با اعمال شرایط مرزی دوره ای بر رویتابع موج الکترون و به کمک قضیه بلاخ نشان داده می شود که تعداد حالت های مجاز در منطقه اول بریلوئن برابر تعداد یاخته های بنیادی بلور است .

در نتیجه تعداد حالت های مجاز بردار \vec{k} در منطقه اول بریلوئن بسیار زیاد است و با توجه به کوچک بودن حجم منطقه اول بریلوئن ، مجموعه بردارهای \vec{k} در این فضا فشرده می شوند . به همین علت بردار موج الکترون در محاسبات به صورت متغیر پیوسته در نظر گرفته می شود [۲] .

^۱. Bloch Theorem

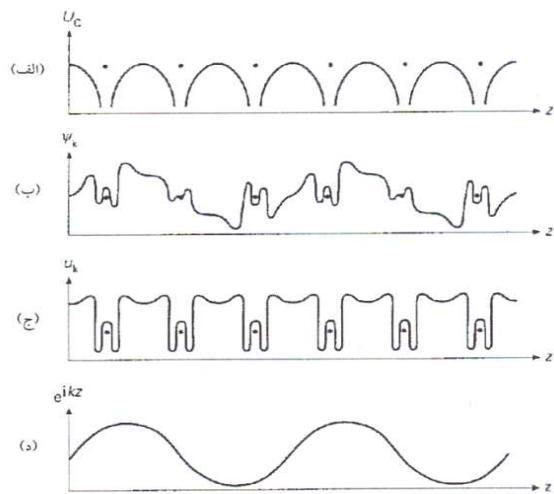
بنابر قضیه بلاخ پاسخ های معادله شرودینگر (۱-۱) برای یک پتانسیل دوره ای باید به شکل زیر باشد:

$$\psi_k(r) = e^{ik.r} U_k(r) \quad (3-1)$$

باتوجه به روابط (۳-۱) و (۳-۲)، تابع موج الکترون تحت انتقال به اندازه بردار \vec{R} دارای این خاصیت است [۱]:

$$\psi_k(r+R) = e^{ik.(r+R)} U_k(r+R) = e^{ik.R} e^{ik.r} U_k(r) = e^{ik.R} \psi_k(r) \quad (4-1)$$

در شکل (۱-۱ الف) طرحی نمادین از پتانسیل تناوبی در امتداد شبکه خطی از یون ها نشان داده شده است. دایره های توپر معرف جایگاه یون های شبکه هستند. در شکل (۱-۱ ب) تابع موج حاصل شده از حل معادله (۱-۱) برای پتانسیل تناوبی شبکه رسم شده است. با توجه به این شکل مشخص است که تابع موج خاصیت تناوبی دارد. همانگونه که عنوان شد تابع موج بلاخ شامل دو مؤلفه موج تخت و یک مؤلفه با تناوب شبکه می باشد که این مؤلفه ها به ترتیب در اشکال (۱-۱ج) و (۱-۱د) نشان داده شده است [۲].



شکل (۱-۱)-الف) پتانسیل ناشی از زنجیره خطی از یون ها ، ب) توابع موج ، ج) مؤلفه های تناوبی تابع موج بلاخ ، د) مؤلفه های تخت تابع موج بلاخ

۳-۱ ساختار بلوری

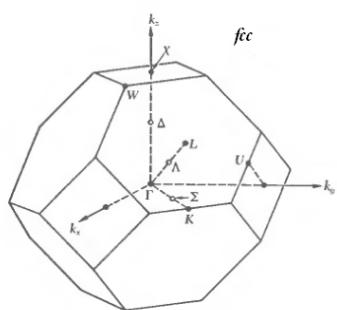
۱-۳-۱ ساختار بلوری مکعبی زینک بلند

همانگونه که در بخش‌های قبلی اشاره شد اکثر ترکیبات نیمرسانای گروه ۷-III می‌توانند دریکی از دو ساختار بلوری مکعبی زینک بلند و یا شش گوشی وورتسایت متبلور شوند . در آرایش بلوری زینک بلند اتم سه ظرفیتی (پنج ظرفیتی) در مرکز یک هرم قرار گرفته و توسط چهار اتم پنج ظرفیتی (سه ظرفیتی) که در رئوس هرم قرار گرفته اند ، احاطه شده است . این ساختار را می‌توان بصورت دو زیر شبکه fcc که دریکدیگر نفوذ کرده اند در نظر گرفت به گونه‌ای که یک زیر شبکه به اندازه یک چهارم فاصله در راستای قطر مکعب (یعنی تغییر مکانی به اندازه

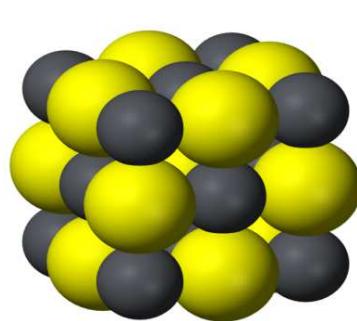
$\frac{\sqrt{3}}{4}a$) نسبت به زیرشبکه دیگر جا بجا شده است (شکل ۲-۱ الف) . همچنین منطقه اول

بریلوئن برای این ساختار در (شکل ۲-۱ ب) رسم شده است . تمام بردارهای موج الکترون ها

محدود به این ناحیه هستند [۴].



(ب)

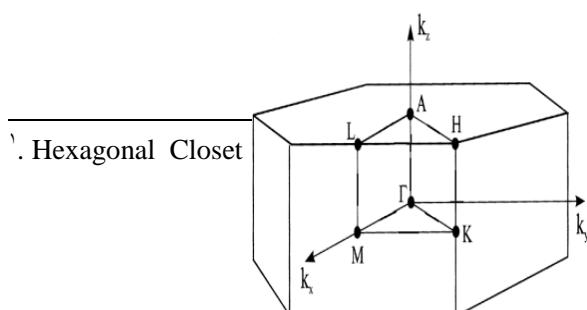


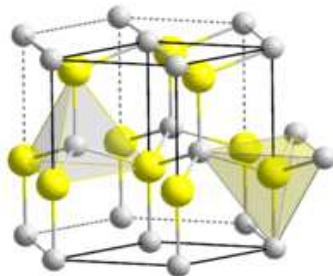
الف)

شکل (۲-۱) ا) لف(ساختار بلوری زینک-بلند مت Shank از دو ساختار fcc که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در پکدیگر فرو رفتند . ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری زینک-بلند [۴]

۲-۳-۱ ساختار بلوری وورتسایت

همان طور که در شکل (۲-۳ الف) نشان داده شده است شکل ، سلول واحد ساختار وورتسایت هگزاگونال است و در نتیجه دو ثابت شبکه a و c خواهد داشت و شامل شش اتم از هر نوع در سلول واحد است . ساختار وورتسایت از دو شبکه تنگ پکیده شش گوشی^۱ (hcp) که به اندازه c درهم فرورفته اند ساخته شده است . منطقه اول بریلوئن نیز در شکل (۲-۳ ب) نشان داده شده است [۴] .





(ب)

(الف)

شکل (۳-۱) - الف) ساختار بلوری وورتسایت. متشکل از دو ساختار **hcp** که به اندازه $\frac{3}{8}$ محور C دریکدیگر فرو رفته اند .
ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری وورتسایت [۴] .

۱-۴ محاسبه ساختار نواری

روش های زیادی برای بررسی ساختار نواری نیمرسانها وجود دارد . مشخصات نوارهای انرژی معمولاً به وسیله ترسیم انرژی های ممکن الکترون برای مقادیر متفاوت بردار موج الکترون در راستاهای متفاوت در منطقه اول بریلوئن نمایش داده می شوند . به دلیل اختلاف فواصل اتم ها در راستاهای مختلف بلور ، مقدار انرژی نه تنها به طول بردار موج الکترون بلکه به راستای آن هم بستگی دارد .

روش تحلیلی دقیقی برای محاسبه ساختار نواری نیمرسانا وجود ندارد و اغلب از روش های تقریبی نظیر تنگ بست^۱ ، موج تخت شده^۲ ، شبه پتانسیل^۳ ، اختلال $k.p$ ، مدل الکترون تقریباً آزاد استفاده می شود . ساختار نوار انرژی برای نیمرسانا InN که به روش مدل الکترون تقریباً آزاد محاسبه شده ، در شکل (۲-۱) رسم شده است [۲] . همانطور که در این شکل دیده می شود منطقه ای از انرژی وجود دارد که حالت های الکترونی در آن یافت نمی شوند که به آن منطقه گاف نوار انرژی^۴ می گویند . اندازه این اختلاف انرژی را که به گاف انرژی معروف است با E_g نمایش می دهند . حالت های الکترونی در بالا و پایین این گاف نواری قرار می گیرند .

نوارهای انرژی بالای گاف انرژی ، نوار رسانش و نوارهای پایین گاف انرژی نوارهای ظرفیت نامیده می شوند . در این نیمرسانا پایین ترین نقطه نواررسانش و بالاترین نقطه نوارظرفیت در $k=0$ قرار دارد که اصطلاحاً به اینگونه مواد نیمرسانای دارای گاف نواری مستقیم می گویند . در نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم برای گذار از نوارظرفیت به نوار رسانش احتیاجی به تغییر اندازه حرکت بلوری الکترونی نمی باشد . این مواد به نام نیمرساناهای اپتیکی نیز معروف اند . در نیمرساناهای نظیر AlN با ساختار زینک بلند پایین ترین نقطه نوار رسانش در نقطه X و بالاترین نقطه نوار ظرفیت در نقطه Γ دو موقعیت دریک بردار موج یکسان قرارندارند و به این مواد نیمرساناهای با گاف نواری غیر مستقیم گفته می شود [۲] .

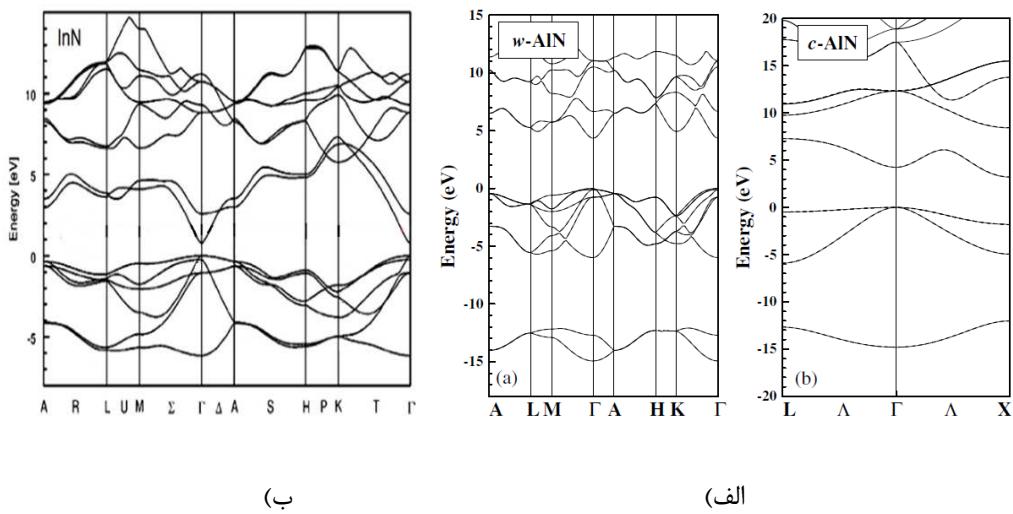
وقتی الکترونی در نیمرسانای با گاف نواری غیرمستقیم گذاری از نوارظرفیت به نواررسانش انجام می دهد ، نه فقط تغییر در انرژی بلکه تغییر در اندازه حرکت بلوری نیز لازم می باشد . نیمرساناهای با گاف نواری غیرمستقیم بیشتر کاربردهای الکترونیکی دارند .

^۱. Tight binding

^۲. Orthogonal plain wave method

^۳. Pseudo-Potential

^۴. Energy band gap



شکل(۴-۱) - الف) ساختار نوار انرژی نیمرساناهای AlN (ساختار وورتسایت و زینک بلند)

ب) InN (ساختار وورتسایت) [۱] .

مشخصات عمومی ساختار نوار انرژی برای نیمرسانای InN با آرایش شش گوشی وورتسایت به شرح زیر است:

الف) نوارسانش در مرکز منطقه بریلوئن (در نقطه Γ) دارای یک کمینه (دره) و در نقاط M نیز دارای کمینه های دیگر است[۵].

ب) نوارظرفیت شامل سه شاخه است که بیشینه آنها در مرکز منطقه اول بریلوئن واقع است.

دotta از این شاخه ها به هم دیگر نزدیک تر بوده که شاخه اولی مربوط به حفره های سنگین و دومی مربوط به حفره های سبک می باشد و شاخه سوم به دلیل برهم کنش اسپین - مدار نسبت به دو شاخه دیگر بیشتر دور شده است .

هنگامی که شدت میدان الکتریکی خیلی بزرگ نباشد، تنها کمینه های نواررسانش و بیشینه های نوارظرفیت توسط الکترون ها و حفره ها اشغال خواهند شد.

در فضای k ، رابطه انرژی بر حسب بردار موج الکترون به فرم زیر می باشد [۲] :

$$E(k) = \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m} \right)_{ij} k_i k_j \right] \quad (5-1)$$

که در آن m^* جرم مؤثر می باشد. تansور جرم مؤثر بارابطه زیر بیان می شود :

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_j \partial k_i} \right]_{k=0} \quad (6-1)$$

معادله یک نوار با سطح انرژی ثابت کروی در فضای k به شکل زیر است (شکل ۱-۵ الف) [۴] :

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} \quad (7-1)$$

در این حالت جرم مؤثر الکترون یک کمیت عددی است. این رابطه جهت توصیف کمینه نواررسانش واقع در نقطه Γ و بیشینه ای نوار ظرفیت که به دلیل برهم کنش اسپین - مدار از دو نوار دیگر جدا شده مناسب است. این رابطه ساده ترین مدل نواررسانش جهت بررسی تقریبی خواص تراپری در هر نیمرسانا می باشد.

معادله یک نوار با سطح انرژی ثابت بیضی گون^۱ در فضای k به شکل زیر می باشد (شکل ۱

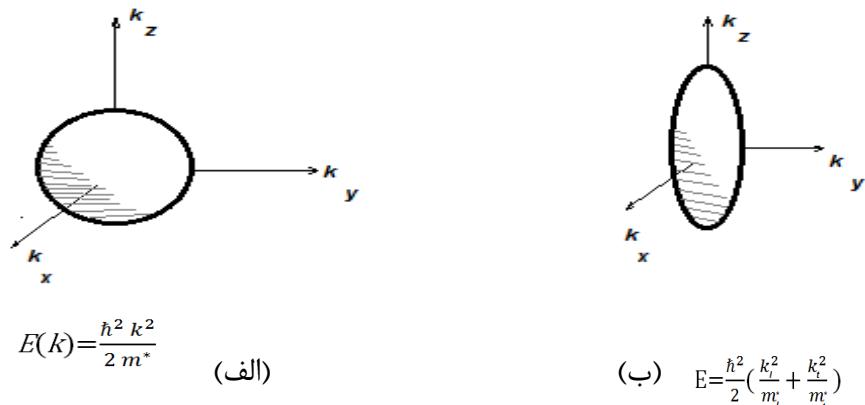
ب) :

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k'_i}{m'_i} + \frac{k'_t}{m'_t} \right) \quad (8-1)$$

^۱. Ellipsodial Constant Energy Surface

دراین حالت جرم مؤثر الکترون یک کمیت تانسوری است. این رابطه جهت توصیف کمینه نواررسانش واقع در راستای [۱۰۰] و [۱۱۱] مناسب است. دراین رابطه k و m_l^* مؤلفه های بردار موج الکترون در راستای موازی و عمود بر راستاهای [۱۰۰] و [۱۱۱] است.

m_t^* مؤلفه های طولی و عرضی جرم مؤثر هستند [۴].



شکل (۱۱-۵)-الف) یک طرح شماتیک از نوارهای انرژی کروی ب) نوارهای انرژی بیضوی

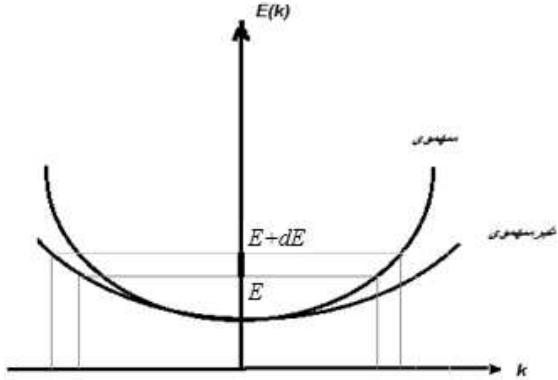
در رابطه (۷-۱) تغییرات انرژی برای حالتی که نوارهای سهموی باشند بیان شده است اما با توجه به شکلهای (۴-۱) و (۱۱-۵ ب) نوارهای انرژی در بلور واقعی سهموی کامل نیست. این انحراف از حالت سهموی را با وارد نمودن ضریب غیرسهموی به صورت زیر تصحیح می نمائیم

: [۷]

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left[1 - \frac{m^*}{m_0} \right] \quad (9-1)$$

$$E(k)[1 + \alpha E(k)] = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} = \gamma(E(k)) \quad (10-1)$$

که در آن E_g گاف نواری، m^* جرم مؤثر الکترون و m جرم الکترون آزاد است.



شکل (۶-۱) - غیرسهموی بودن نوار رسانش رابطه انرژی $E(k)$ را هموار می کند و چگالی حالتها را در فضای انرژی افزایش می دهد. در یک dE معین همانطور که در روی محور انرژی مشخص شده است ، تعداد حالتهای مجاز k برای نوارهای انرژی غیر سهموی نسبت به نوارهای انرژی سهموی بیشتر است [۴] .

۵-۱ چگالی حالات انرژی

چگالی حالات^۱ انرژی یکی از مهم ترین مفاهیمی است که در بررسی بسیاری از خواص اپتیکی والکترونیکی نیمرسانها باشد در نظر گرفته شود . چگالی حالات انرژی اشاره به تعداد حالات انرژی دسترس پذیر (با انرژی اطراف E) در واحد حجم در واحد انرژی دارد . در نوارهای انرژی سهموی چگالی حالات در فضای انرژی درسه بعد با رابطه زیر داده می شود [۶] :

$$N_c(E) = \frac{m^* \sqrt{2m^* E}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (11-1)$$

^۱. Density of states

يعنى چگالی حالات به صورت تابعی از \sqrt{E} تغيير می کند . در محاسبه چگالی حالتها برای نوارهای غيرسهموی باید از (10-1) به جای رابطه (7-1) استفاده کرد . چگالی حالتها در اين حالت به صورت حاصلضرب عامل $(1+2\alpha E)^{1+\sqrt{1+\alpha E}}$ در رابطه (11-1) خواهد بود. همان طور که از شکل (6-1) مشخص است غيرسهموی بودن نوارها، انرژی را هموار می کند بطوری که حالت های k مجذب است غيرسهموی بین انرژی $E+dE$ وجود دارد و چگالی حالتها افزایش می یابد . تعداد حالات مجذب انرژی با بیشتری بین انرژی E در بازه dE از حاصلضرب $N(E)dE$ بدست می آید .

٦-١ محاسبه ساختار نواری انرژی به روش شبه پتانسیل ^١

روش های متفاوتی برای محاسبه ساختار نواری در جامدات وجود دارد، که در مراجع مختلف به آن اشاره شده است . تعدادی از این روش ها عبارتند از : مدل الکترون تقریباً آزاد ، روش سلولی ، روش موج تخت انباشته شده ، روش بستگی قوی ، روش ویگنر-سایتز و روش شبه پتانسیل .

در این بخش به توصیف روش شبه پتانسیل که روش عمومی برای محاسبه ساختار نواری در جامدات است می پردازیم . این روش بوسیله حالتی که برای تابع موج انتخاب می شود ، از روش های دیگر متمایز می شود . ما به دنبال تابعی هستیم که داخل مغز یونی سریعاً نوسان کند و در باقیمانده فضای ویگنر-سایتز مانند یک موج تخت حرکت کند . بنابراین تابع موج

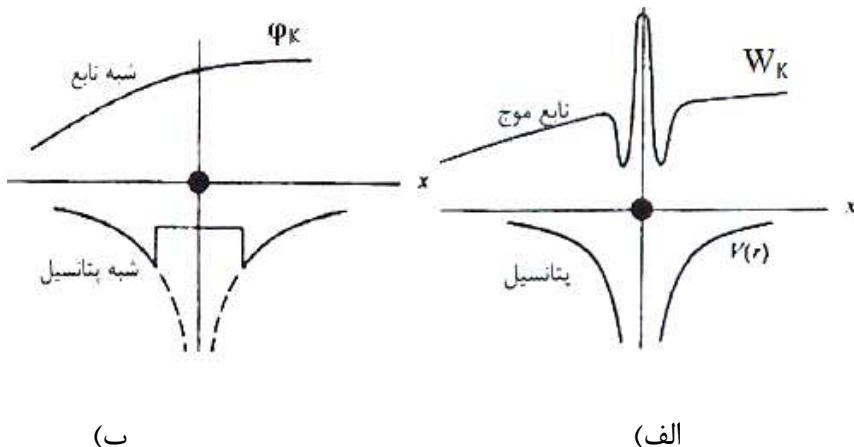
برای بردار موج \vec{k} به صورت زیر درنظر گرفته می شود [10] :

^١. Pseudo-Potential

$$W_k = \varphi_k - \sum_i a_i V_i \quad (12-1)$$

که در این رابطه φ_k یک موج تخت و V_i یک تابع موج اتمی است. جمع روی i ، برروی همه حالت‌های اتمی که اشغال شده‌اند گسترش می‌یابد.

تابع W_k همان ترکیبی را دارد که به دنبال آن بودیم، توابع اتمی V_i در خارج از مغز یونی قابل چشم پوشی است و بنابراین $\varphi_k = W_k$ یک موج تخت است. در مغز یونی، توابع اتمی قابل ملاحظه و به گونه‌ای عمل می‌کنند که مانند آنچه در شکل (1-۷الف) نشان داده شده نوسانات سریعی داشته باشند.



شکل (۱-۷)-مفهوم شبه پتانسیل (الف) پتانسیل واقعی و تابع موج مربوطه، آن طور که توسط الکترون دیده می‌شود
ب) شبه پتانسیل و شبه تابع متناظر آن [۱۰].

حال اگر W_k را در معادله شرودینگر جایگزین نماییم خواهیم داشت:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V]W_k = E(k)W_k \quad (13-1)$$

با مرتب کردن جملات در می یابیم که معادله (13-1) را می توان به شکل زیر نوشت:

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V']\varphi_{\vec{k}} = E(\vec{k})\varphi_{\vec{k}} \quad (14-1)$$

$$V' = V - \sum_i b_i < V | V | V_i > \quad (15-1)$$

معادله (14-1) نشان می دهد که پتانسیل مؤثر با V' بیان می شود در حالی که رابطه (15-1) نشان می دهد که V' ضعیف تر از V است زیرا جمله دوم طرف راست رابطه (15-1) تمایل به حذف جمله اول دارد . این حذف پتانسیل بلور توسط توابع اتمی معمولاً قابل ملاحظه بوده و اغلب منجر به پتانسیل ضعیف V' می شود . این پتانسیل ، شبیه پتانسیل نامیده می شود .

از آنجا که V' بسیار ضعیف است ، جوابهای معادله موج همانگونه که از رابطه (13-1) ملاحظه می شود تقریباً به شکل موج تخت خواهند بود که با φ_k بیان می شوند و شبیه تابع^۱ نامیده می شوند .

تابع موج W_k و پتانسیل واقعی $V(r)$ در شکل (1-7الف) و شبیه پتانسیل V' و شبیه تابع φ_k در شکل (1-7ب) رسم شده اند . همانطور که در شکل (1-7ب) ملاحظه می شود ، پتانسیل در نواحی مغرهای یونی ضعیف بوده و تکینگی پتانسیل در مغز یونی کاملاً برطرف شده است . همچنین نوسانات موجود در تابع موج برطرف شده به طوری که تابع موج در این ناحیه شبیه یک تابع موج تخت هموار رفتار می کند [۱۰].

^۱. Pseudo-Function

فصل دوم

انواع فرآیندهای پراکندگی

۱-۲ مقدمه

در تقریب نیمه کلاسیک ، رفتار یک الکترون دریک بلور کامل نظیر رفتار یک ذره آزاد لیکن با جرمی معادل جرم مؤثر می باشد . به عبارت دیگر اثر برهم کنش الکترون با پتانسیل دوره ای شبکه بلور به صورت تغییر در جرم الکترون آزاد منظور شده است. می دانیم که حالت الکترون توسط تابع موج وابسته به آن توصیف می شود . در این حالت عملگر هامیلتونی مستقل از زمان است، بنابراین در یک بلور کامل انتظار می رود با اعمال میدان الکتریکی سرعت الکترون ها با ثابت چگالی افزایش یابد. اما در عمل سرعت الکترون ها به مقدار ثابتی محدود می گردد و این محدودیت سرعت به علت برهم کنش آن با ناکاملیهای بلور است . الکترون ها در درون بلور همواره عوامل پراکندگی مختلفی را تجربه می کنند . این عوامل سبب ایجاد تغییراتی در بردار اندازه حرکت الکترون ها درون بلور می شوند . از این رو ضروریست تا این عامل مهم در بررسی تراپرد الکترون ها در درون بلور به حساب آورده شود . منشاء عوامل پراکندگی اغلب ارتعاشات شبکه و ناخالصی های یونیزه می باشند [۱۱]. برای محاسبه تراپرد الکترون ها در یک بلور نیمرسانا باید اطلاعات دقیق و کاملی در مورد برهم کنش ها و عوامل پراکندگی الکترون در بلور داشت . اثراخواه برهم کنش ها به صورت اختلال در پتانسیل دوره ای اتم های شبکه منظور می شود .

در این فصل اطلاعاتی درخصوص پراکندگی الکترون ها که براساس تئوری مرتبه اول اختلال وابسته به زمان در مکانیک کوانتموی بدست می آید ، ارائه شده است .

۲-۲ بررسی تراپردازی الکترون ها در درون یک بلور کامل

در یک بلور کامل که فاقد ناخالصی است ، الکترون ها به راحتی و دور از عوامل پراکنده‌گی ، درون بلور حرکت می‌کنند . در چنین حالتی الکترون در ساختار نواری بلور نوسان می‌کند . این نوسانات به نوسانات بلاخ^۱ معروف می‌باشند [۴] . در این حالت انرژی الکترون درون بلور با تغییرات بردار اندازه حرکت ، نوساناتی مطابق شکل (۱-۲) انجام می‌دهد . معادله حرکت الکترون در درون بلور تحت تأثیر یک نیروی الکتریکی ثابت \vec{F} عبارت است از [۶] :

$$\hbar \frac{dk}{dt} = -e |\vec{E}| = F_{ext} \quad (1-2)$$

از رابطه (۱-۲) بر حسب زمان انتگرال گیری می‌کنیم :

$$k(t) = k(0) + \frac{-e |E| t}{\hbar} \quad (2-2)$$

با استفاده از نتیجه بدست آمده ، رابطه پاشندگی برای $E-K$ را می‌توان به فرم زیر در نظر گرفت [۶] :

$$E(k) = A \cdot \cos(ak) \quad (3-2)$$

که در این رابطه a پارامتر شبکه و $E(k)$ رابطه انرژی الکترون ها در بلور است . بنابراین سرعت گروه برابر است با :

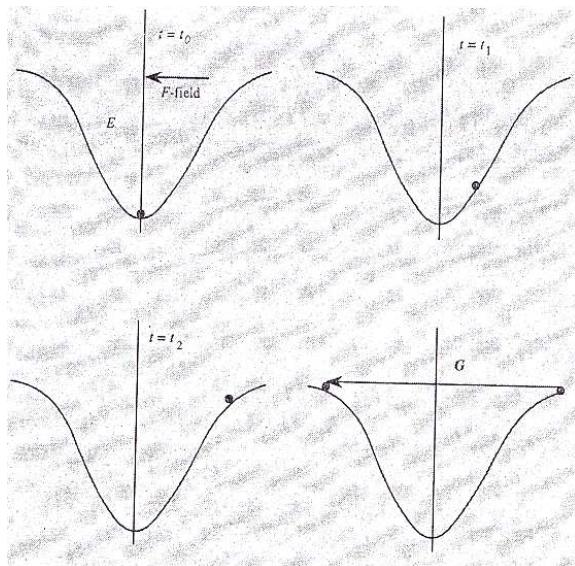
$$\nu_g(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k} \quad (4-2)$$

را صفر در نظر می‌گیریم . در نهایت معادله مکان الکترون برابر با $k(t)$ داده می‌شود :

$$x(t) = \int \nu_g(k(t)) dt = -\frac{Aa\hbar}{e|E|} \cos\left(\frac{-ae|E|t}{\hbar}\right) \quad (5-2)$$

^۱. Bloch Oscillation

معادله (۲-۵) نشان می دهد که الکترون در درون یک بلور کامل تحت تأثیر یک میدان الکتریکی اعمالی ثابت ، حرکت نوسانی بلاخ انجام می دهد [۱۷] [۴۴].



شکل(۱-۲)-نوسانات بلاخ الکترون تحت تأثیر میدان الکتریکی اعمالی در درون یک بلور ایده آل نیمرسانا [۱۱].

۳-۲ مکانیسم پراکندگی الکترون

دریک نیمرسانا فرآیندهای فیزیکی وجود دارند که می توانند باعث پراکندگی الکترون شوند .

این فرآیندها بستگی به قدرت میدان الکتریکی و خواص ماده موردنظر دارند . هنگامی که یک

الکترون پراکنده می شود بردار موج الکترون از حالت k به حالت نهایی['] k' تبدیل می شود .

زمان لازم برای این تبدیل را پارامتربرخورد^۱ τ می نامند . مدت زمان پراکندگی کوتاه است .

^۱. Collision Parameters

برای وارد کردن آهنگ پراکندگی در محاسبات تراپرد الکترون عموماً لازم است که فرمول سطح مقطع کل پراکندگی و وابستگی زاویه ای آن بین حالات k و k' را مشخص کنیم . سطح مقطع پراکندگی $S(k, k')$ عموماً براساس قاعده طلایی فرمی^۱ محاسبه می شود [۱۱] .

$$S(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} \int | \langle \psi_k | \Delta u | \psi_{k'} \rangle |^2 G(k, k') \delta[\epsilon(k') - \epsilon(k) \pm \Delta\epsilon] d^3 k \quad (6-2)$$

که در این رابطه جمله $| \langle \Psi_k | \Delta u | \Psi_{k'} \rangle |^2$ عنصر ماتریسی بین توابع موج قبل و بعد از پراکندگی است . ΔE افزایش (+) یا کاهش (-) انرژی در طی تراپرد الکترون بوده و انتگرال گیری روی تمام حالت های نهایی انجام می شود. در رابطه (6-2) تابع دلتای دیراک مبین اصل بقای انرژی است. $G(k, k')$ انتگرال همپوشانی بین توابع متناوب بلاخ حالت های ابتدایی و نهایی است . برای توابع موج حالت خاص ، یعنی نوارهای انرژی سهموی شکل با توجه به شرط بهنجارش توابع موج ، انتگرال همپوشانی دقیقاً برابر واحد است . هنگامی که غیر سهموی بودن نوارها درنظر گرفته شود ، انتگرال همپوشانی همیشه کمتر از واحد است و معمولاً به صورت تابعی از ضرایب غیرسهموی نوار انرژی ، a ، خواهد بود . در این حالت انتگرال همپوشانی به فرم کلی زیرتعریف می شود [۱۱] :

$$G(k, k') = \frac{1}{2} \sum_{\mu\mu'} | u_{\mu\mu'}^*(r) u_{\mu\mu'}(r) |^2 d^3 r \quad (7-2)$$

که در آن u تابع موج بین دو حالت نوارهای انرژی است . در این حالت طبق نظریه کین^۲ انتگرال همپوشانی به صورت زیرساده می شود [۱۳] :

^۱ . Fermi's golden rule

$$G(k, k') = (a_k a_{k'} + c_k c_{k'} \cos\varphi)^2 \quad (8-2)$$

که در آن φ زاویه بین بردارهای k و k' است.

کمیت های c_k و a_k توسط نظریه کین^۱ به صورت زیر محاسبه شده اند [۱۵] :

$$c_k = \left[\frac{\alpha\epsilon(k)}{1+2\alpha\epsilon(k)} \right]^{1/2} \quad a_k = \left[\frac{1+\alpha\epsilon(k)}{1+2\alpha\epsilon(k)} \right]^{1/2} \quad (9-2)$$

بنابراین انتگرال همپوشانی عبارت است از:

$$G(k, k') = \frac{[(1+\alpha\epsilon(k))^{1/2}(1+\alpha\epsilon(k'))^{1/2} + \alpha\epsilon(k)\epsilon(k')\cos\varphi]^2}{(1+\alpha\epsilon(k))(1+\alpha\epsilon(k'))} \quad (10-2)$$

وقتی انتگرال همپوشانی معلوم شد، می توان آهنگ کلی پراکندگی $R(k)$ را با انتگرال گیری از سطح مقطع پراکندگی $S(k, k')$ روی تمام حالت های نهایی مجاز بدست آورد ، به طوری که

داریم :

$$R(k) = \frac{V}{8\pi} \int_0^\infty \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \int_0^\pi S(k, k') K^2 \sin\theta d\theta d\varphi dk' \quad (11-2)$$

که در این رابطه V حجم بلور است .

^۱. Kane's theory

۴-۲ انواع فرآیندهای پراکنده‌گی

ساختار بلوری که در واقعیت با آنها سروکار داریم بلور کامل نمی‌باشد زیرا همواره عواملی در درون بلور وجود دارند که سعی در از بین بردن نظم بلوری دارند. این عوامل درون بلورهای نیمرسانی مختلف یکسان نبوده و تابعی از انرژی و سرعت الکترون‌ها هستند. هرچند که بعضی از این عوامل از قبیل نواقص بلوری را می‌توان به حداقل رساند ولی امکان حذف آن‌ها به طور کامل غیر ممکن است. به طور کلی فرآیندهای پراکنده‌گی در یک بلور را می‌توان ناشی از سه گروه عمدۀ زیر دانست [۲] :

۱- ناشی از ارتعاشات (فونون‌های) شبکه

۲- ناشی از حضور ناخالصی‌های یونیزه

۳- ناشی از ناکاملی‌های بلوری

در این کارپژوهشی فقط اثرات ناشی از ناخالصی‌های یونیزه و ارتعاشات شبکه درنظر گرفته شده است زیرا امروزه تکنولوژی رشد بلورهای نیمرسانا با خلوص و کیفیت قابل توجه فراهم شده است و به این ترتیب می‌توان اثر نواقص بلوری را تاحد زیادی کاهش داد. در ادامه به معرفی هریک از این عوامل خواهیم پرداخت و اثر هر یک را بر روی ترابرد الکترون‌ها در درون یک بلور نیمرسانا بررسی خواهیم کرد

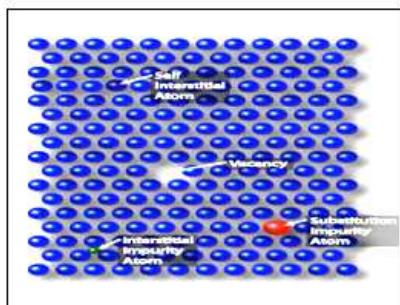
۵-۲ ناکاملیهای بلور

بلور ایده آل بلوری است که تمامی اتم‌های تشکیل دهنده آن از نظم شبکه براوه بلور تبعیت می‌کنند. همانگونه که می‌دانیم در طبیعت عوامل مختلفی موجب از بین رفتن نظم اتم‌های

شبکه و پتانسیل تساوی بلورهای واقعی می شوند. از جمله این عوامل می توان به انواع نواقص بلوری اشاره کرد . در این حالت بلور را ناکامل می گویند.

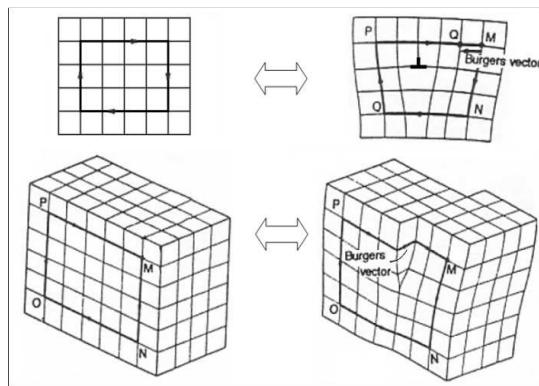
منظور از نواقص بلوری قرار نگرفتن گروهی از اتم های تشکیل دهنده بلور در نقاط شبکه است.
انواع مختلف نواقص بلوری را می توان به شکل زیر دسته بندی کرد :

الف) نواقص نقطه ای : به دسته ای از ناکاملیهای بلوری گفته می شود که بسته به ماهیتشان منجر به وجود آمدن نقص در تعداد متناهی و کوچک اتم در شبکه بلوری می شود . این تعداد مستقل از اندازه بلور و ریزساختار ماده است . برخی از این ناکاملی ها مانند نقص فرنکل (تهیجایی و خود بین نشینی) بطور ذاتی و تعادلی در دماهای بالاتر از صفر مطلق در تمامی مواد وجود دارند . شامل : تهیجایی ، جانشینی ، بین نشینی ، نقص شاتکی ، نقص فرنکل (شکل(۲-۲) الف) [۶].



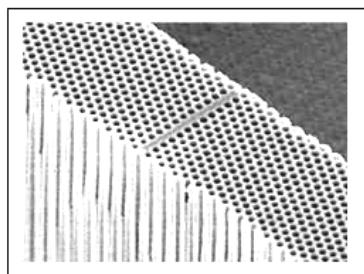
شکل(۲-۲) الف-نواقص نقطه ای شامل : تهیجایی ، جانشینی ، بین نشینی .

ب) نواقص خطی: نقص خطی زمانی رخ می دهد که یک ساختار کریستالی شامل دررفتگی صفحاتی از اتمها است که اتمها از موقعیت خود در شبکه جابجا شده اند و به عنوان جابجایی به آن اشاره شده است . شامل : دررفتگی لبه ای ، دررفتگی پیچشی (شکل(۲-۲) ب)[۶] .



شکل(۲-۲) ب-نواقص خطی شامل : دررفتگی لبه ای (بالا) ، دررفتگی پیچشی(پایین) .

ج) نواقص سطحی: این ناکاملی در مرز دانه ها روی می دهد که در آن جهت کریستالی بطور ناگهانی تغییر می کند ، این نقص زمانی اتفاق می افتد که دو بلور بطور جداگانه شروع به رشد می کنند و پس از آن اتصال پیدا می کنند . شامل : عیب انباشتگی ، مرزدانه ، دوقلویی ، حلقه پریزماتیک (شکل(۲-۲) ج)[۶] .



شکل (۲-۲) ج-نواقص سطحی در نواحی مرزی اتفاق می افتد .

۶-۲ پراکندگی ناشی از نوسانات شبکه

از بروز نوسانات بلاخ در بلورهای کامل انتظار می‌رود، اتم‌ها حول نقطه تعادل خود نوسان کنند. دامنه‌ی این نوسانات وابسته به دما هستند. این ارتعاشات باعث تغییرات زمانی پتانسیل تناوبی در نیمرسانا می‌شوند که نتیجه آن پراکندگی الکترون‌ها در درون بلور است. ارتعاشات اتم‌ها در شبکه بلوری کوانتیزه است که کوانتای این ارتعاشات را فونون می‌نامند. فرآیندهای پراکندگی شبکه را می‌توان به عنوان برهم کنش الکترون‌ها با فونون در نظر گرفت. پراکندگی الکترون‌ها توسط فونون‌ها بستگی به ماهیت فونون‌ها دارد. فونون‌ها ذراتی از نوع بوزون هستند، انرژی فونون‌ها N برابر با $\hbar\omega$ است که ω فرکانس ارتعاش است. به خاطر نیروهای پیوندی که ساختار بلوری را ایجاد می‌کنند، حرکت تصادفی اتم‌ها به شدت با یکدیگر جفت شده‌اند. وقتی الکترون‌ها در بلور حرکت می‌کنند، می‌توانند با اتم‌های شبکه انرژی و اندازه حرکت مبادله نمایند. برخلاف نوافض بلوری که می‌توان با خالص کردن بلور و بهینه کردن فرآیند رشد بلور آثار آنها را کم کرد، نوسانات شبکه همیشه وجود دارند. بنابراین ضروریست تا نقش این عامل مهم در ترا برد الکترون‌ها به دقت مورد توجه قرار گرفته و بررسی شود.

نوسانهای یون‌های شبکه از معادله حرکت دو جسم که توسط یک فنر به یکدیگر متصل شده‌اند پیروی می‌کند. اگر u_i را دامنه، ω را فرکانس زاویه‌ای و \vec{k} را بردار موج نوسانات شبکه درنظر بگیریم، معادله نوسان هر اتم را می‌توان با رابطه زیر مشخص کرد:

$$u(q) = u_i \exp [i(\vec{k}_s \cdot \vec{r} - \omega_s t)] \quad (12-2)$$

بطور کلی فونون ها به دو گروه آکوستیکی^۱ و اپتیکی^۲ تقسیم می شوند . رابطه ω بر حسب k برای نیمرسانا InN در شکل (۳-۲) آمده است [۱۲].

همانطور که در این شکل دیده می شود برای هریک از مدهای نوسانی فوق دو نوع مد نوسانی طولی^۳ و عرضی^۴ وجود دارد . شاخه آکوستیکی به حالتی اطلاق می شود که دو اتم هر سلول واحد همزمان در یک جهت حرکت نمایند . در مد اپتیکی دو اتم در جهت های مخالف نوسان می نمایند . با استفاده از قوانین مکانیک کوانتومی تعداد اتمهایی که با فرکانس ω در دمای T برانگیخته می شوند با معادله زیر داده می شود [۱۲] :

$$n_w = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar w}{KT}\right) - 1} \quad (13-2)$$

از آنجایی که نوسان فونون ها شبیه به مسئله یک نوسانگر ساده است ، بنابراین انرژی هر مد نوسانی با فرکانس زاویه ای ω با روشی مشابه آنچه برای نوسانگر هماهنگ ساده به کار می رود به دست می آید که برابر است با :

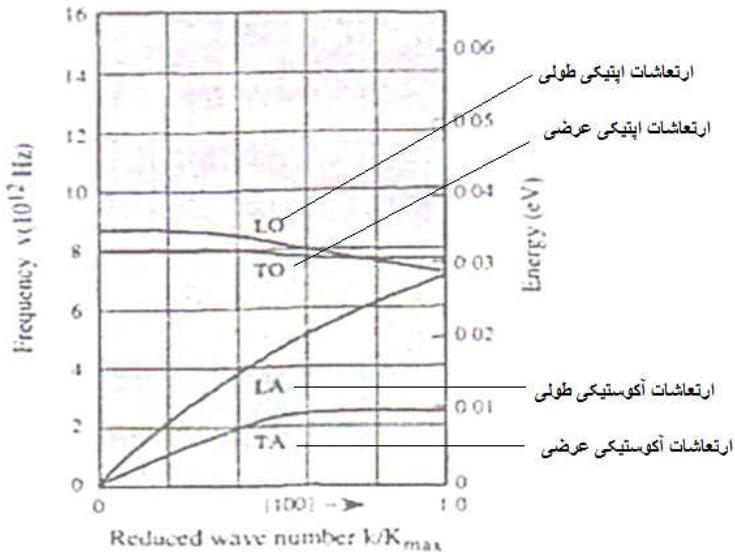
$$E_w = (n_w + 1) \hbar \omega \quad (14-2)$$

^۱.Acoustical Phonon

^۲.Optical Phonon

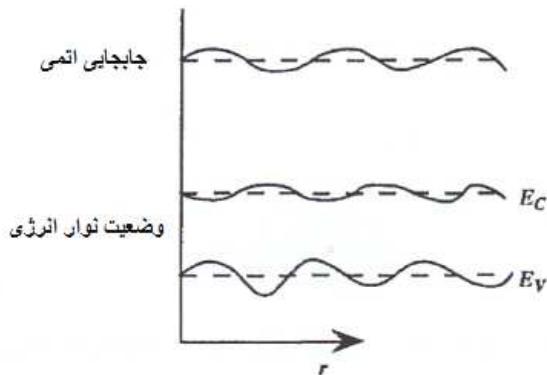
^۳.longitudinal variation

^۴.Transversal variation



شکل (۳-۲)- انواع پراکندگی ناشی از نوسانات شبکه [۶].

در شکل (۴-۲) اثر نوسانات شبکه بر روی پتانسیل تناوبی به طور نمادین رسم شده است . این اختلال در پتانسیل (که با گذشت زمان به سرعت تغییر می کند) عامل اصلی پراکندگی الکترون ها در بلور است و سبب ایجاد محدودیت هایی در خواص الکترونیکی و اپتوالکترونیکی قطعات نیمرسانا می شود .



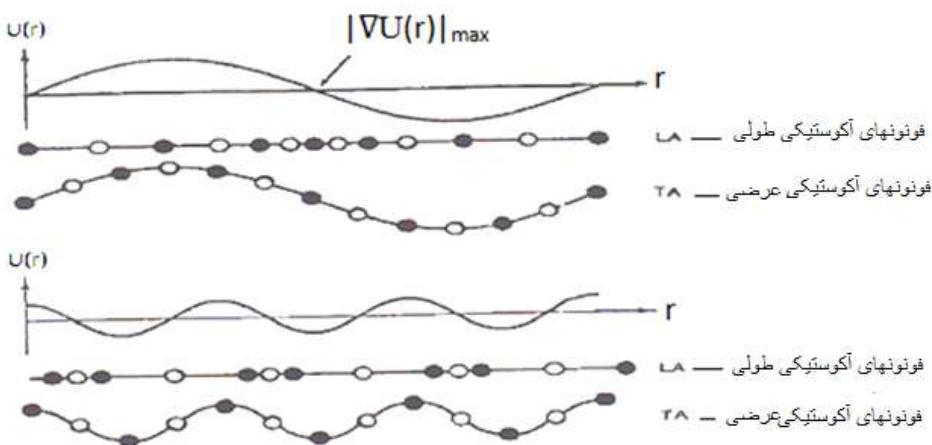
شکل (۴-۲) - تأثیر ارتعاشات شبکه بر روی پتانسیل تناوبی شبکه

۱-۶-۲ پراکندگی ناشی از فونون های آکوستیکی

ارتعاشات آکوستیکی شبکه سبب ارتعاش اتم های همسایه بصورت همفاز می شود . فونون های آکوستیکی در یک بلور می توانند حامل ها را به وسیله دو فرآیند کاملاً مستقل ، پراکندگی پتانسیل از تغییر شکل شبکه و پراکندگی پیزوالکتریک پراکنده نمایند . محدوده انرژی فونون های آکوستیکی $0 \text{ و } 2\hbar kV$ می باشد [۲] که در آن v سرعت صوت در ماده نیمرسانا و k بردار موج فونون است . مقدار متوسط k در حدود $7 cm^{-1}$ و سرعت صوت در نیمرسانا از مرتبه $10^5 cms^{-1}$ می باشد . لذا مقدار $2\hbar kV$ تقریباً برابر $1 meV$ است ، که در مقایسه با انرژی گرمایی الکترون ها در دمای اتاق اندک است . بنابراین پراکندگی از فونون های آکوستیکی یک پراکندگی کشسان است [۲] .

۱-۶-۱ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه^۱

در شکل (۲-۵) جابجایی یک زنجیره از اتم ها از مکان های شبکه براوه برای مؤلفه های طولی و عرضی فونون های آکوستیکی نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود فاصله بین اتم های مجاور در سلول واحد به شدت تحت تأثیر فونون های آکوستیکی طولی قرار می گیرد ، اگرچه تأثیر فونون های آکوستیکی عرضی کمتر است . چون تغییر ثابت شبکه می تواند باعث تغییر گاف نواری شود ، بنابراین فونون های آکوستیکی طولی لبه های نوار رسانش و لبه نوار ظرفیت را اصلاح کرده ، پتانسیل تناوبی بلور را مختل می کنند. این پتانسیل که پتانسیل تغییر شکل شبکه نام دارد باعث پراکندگی حامل ها می شود . بیشترین انبساط و انقباض سلول واحد وقتی توسط فونون های آکوستیکی طولی رخ می دهد که دیورژانس بردار جابجایی یا کرنش بیشترین مقدار را داشته باشد. لذا پتانسیل پراکندگی برای پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه با کرنش شبکه متناسب است .



شکل(۲-۵)- جابجایی یک زنجیره از اتم ها برای فونون های آکوستیکی طولی و عرضی [۴].

^۱. Deformation Potential Lattice

جابجایی حاصل از یک فونون آکوستیکی با فرکانس ω و بردار موج k را در نظر می‌گیریم:

$$\vec{u}(r,t) = \vec{a} \cdot u(r,t) \quad (15-2)$$

که در آن داریم:

$$u(r,t) = u \exp [i(\vec{k}_s \cdot \vec{r} - \omega_s t)] \quad (16-2)$$

در این معادله \vec{a} جهت جابجایی و u دامنه جابجایی از حالت تعادل است. کرنش ایجاد شده به

دلیل این جابجایی بصورت زیر است:

$$\nabla \cdot \vec{u}(r,t) = \vec{a} \cdot \nabla u(r,t) \quad (17-2)$$

$$\nabla \cdot \vec{u}(r,t) = i \vec{k}_s \cdot \vec{a} \cdot u(r,t) \quad (18-2)$$

معادله (18-2) نشان می‌دهد که برای مؤلفه عرضی فونون‌ها، که برای آن جابجایی و بردار موج متعامد می‌باشند (یعنی: $\vec{k}_s \cdot \vec{a} = 0$) هیچ کرنشی ایجاد نمی‌شود.

پتانسیل پراکندگی برای مؤلفه طولی بصورت زیر است:

$$\Delta U = \varepsilon_A \cdot \nabla \cdot \vec{u}(r,t) \quad (19-2)$$

که در آن پتانسیل تغییر شکل ε_A ، بر حسب انرژی به عنوان ثابت تناسب بین پتانسیل پراکندگی و کرنش تعریف می‌شود.

آهنگ پراکندگی دیفرانسیلی برای این پتانسیل اختلالی بصورت زیر است [۲۰]:

$$S_{ac} = \frac{2\pi}{\hbar} B_a(k, k') N_a \delta[\varepsilon(k') - \varepsilon(k)] \quad (20-2)$$

که در آن ضرائب N_a و B_a با روابط زیر داده می‌شوند:

$$B_a(k, k') = 2 \frac{\hbar \varepsilon_A^2}{2Vv\rho} |k - k'| G(k, k') \quad (21-2)$$

$$N_a = \left[\exp \left(\frac{\hbar v(k-k')}{K_B T} \right) - 1 \right]^{-1} \approx \frac{K_B T}{\hbar v |k - k'|} \quad (22-2)$$

در روابط بالا ، ε_A پتانسیل تغییر شکل آکوستیکی شبکه ، ρ چگالی ماده نیمرسانا ، V سرعت صوت در نیمرسانا و V حجم بلور است .

برای محاسبه آهنگ پراکندگی کل در فرآیندهای پراکندگی کشسان ، باید از رابطه (20-2) روی تمام حالت های مجاز انتگرال گرفت ، بطوری که خواهیم داشت :

$$\nu_{el} = \frac{1}{\tau} = \int (1-\chi) S_{el} d^3 k \quad (23-2)$$

آنچه آهنگ پراکندگی کل مربوط به یک فرآیند پراکندگی خاص و χ کسینوس زاویه بین k و k' است.

باجایگذاری (20-2) در (23-2) و محاسبه انتگرال ، آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه در اثر فونون های آکوستیکی برابر خواهد شد با :

$$R_{ac} = \frac{(2m^*)^{3/2} K_B T \varepsilon_A^2}{2\pi v^2 \hbar^4} \gamma^{1/2}(\varepsilon) (1+2\alpha\varepsilon) F_{ac}(\varepsilon) \quad (24-2)$$

$$\gamma(\varepsilon) = \varepsilon (1+\alpha \varepsilon)$$

این رابطه به وضوح نشان می دهد که ، پراکندگی از فونون های آکوستیکی تغییر شکل شبکه با افزایش دما افزایش می یابد . در این رابطه F_{ac} تابع انرژی الکترون بوده و بصورت زیر تعریف می شود :

$$F_{ac}(\varepsilon) = \frac{(1+\alpha\varepsilon)^2 + \frac{1}{3}(\alpha\varepsilon)^2}{(1+2\alpha\varepsilon)^2} \quad (25-2)$$

که در آن پارامتر α ضریب غیرسهمی بودن نوار انژی است.

۲-۱-۶-۲ پراکندگی پیزوالکتریک

اثرپیزوالکتریسیته در تمام رده های تقارن که دارای محور قطبی در یک امتداد است، دیده می شود. در واقع پیزوالکتریسیته همان ایجاد قطب الکتریکی در بلورها به وسیله عاملی مانند تغییر حرارت می باشد. پدیده ای که مبین تفاوت پیدایش بارالکتریکی در دو قطب یک محور قطبی است. بلورهای پیزوالکتریک به هنگام قرارگرفتن در معرض فشار مکانیکی یک ولتاژ الکتریکی تولید می کنند و همین امر باعث ایجاد میدان الکتریکی در آنها می شود. این میدان الکتریکی باعث بوجود آمدن اختلال در پتانسیل دوره ای بلور می شود. پراکندگی حاملها از این میدان های الکتریکی را پراکندگی پیزوالکتریک می نامند. ساختار وورتسایت در تمام رده های تقارنی دارای محور تک قطبی می باشد که خاصیت پیزوالکتریسیته را دارا می باشد.

پتانسیل اختلالی ایجاد شده برای الکترون ها به خاطر اثرپیزوالکتریک بصورت زیر است :

[۱۶]

$$\Delta U(r,t) = -e \Psi(r,t) \quad (26-2)$$

که در رابطه (۲۶-۲)، $\Psi(r,t)$ از رابطه زیر بدست می آید :

$$\Psi(r,t) = - \int \vec{E}(r,t) \cdot d\vec{r} \quad (27-2)$$

برای حل انتگرال (۲۷-۲) لازم است میدان ایجاد شده ناشی از اثر پیزوالکتریک را محاسبه کنیم . دریک فرکانس مشخص (۱) رابطه بین چگالی شارالکتریکی D ، میدان الکتریکی E و قطبش P بصورت زیر است [۱۶] :

$$\vec{D}(\omega) = \varepsilon(\omega)\vec{E} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}(\omega) \quad (28-2)$$

که در آن ε_0 گذردهی الکتریکی خلاء است . در حد فرکانس های پایین رابطه (۲۸-۲) بصورت زیر در می آید :

$$\vec{D}(0) = \varepsilon(0)\vec{E} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}(0) \quad (29-2)$$

که در آن ε_0 گذردهی استاتیکی محیط است. منشاء (۰) بارهای واقعی است ، در حالی که منشاء (۰) بارهای قطبشی می باشد ، که معمولاً هسته های اتمی و دو قطبی های یونی هستند . از آن جایی که در اندازه گیری ثابت دی الکتریک استاتیک ، قطبش پیزوالکتریکی وارد نشده است ، لازم است یک جمله به رابطه (۲۹-۲) اضافه گردد تا اثر آن نیز در محاسبات در نظر گرفته شود . این قطبش باید متناسب با کرنش ایجاد شده به وسیله فونون ها باشد .

بنابراین می توان نوشت :

$$\vec{D}(0) = \varepsilon(0)\vec{E}(r,t) + e_{pz}\nabla u(r,t) \quad (30-2)$$

که در آن e_{pz} ثابت پیزوالکتریک است ، واحد آن کولن بر مترمربع می باشد . بدون وجود بارهای حقیقی ، میدان الکتریکی داخلی ایجاد شده از اثر پیزوالکتریک ، نشأت گرفته از قطبش یونی و اتمی است ، بطوری که داریم :

$$\vec{E}(r,t) = -\frac{e_{pz}}{\varepsilon(0)} \nabla u(r,t) \quad (31-2)$$

با استفاده از معادلات (۲۶-۲) و (۲۷-۲) و (۳۱-۲) پتانسیل پراکندگی بر حسب جابجایی بصورت زیر است :

$$\Delta U(r,t) = -\frac{e_{pz} e}{\varepsilon(0)} \nabla u(r,t) \quad (32-2)$$

که در این رابطه e بار الکترون است . با توجه به روابط (۱۶-۲) و (۱۷-۲) و (۳۲-۲) پتانسیل پراکندگی پیزوالکتریک بر حسب کرنش بصورت زیر است :

$$\Delta U(r,t) = -\frac{i e_{pz} e}{\varepsilon(0) q_s} \nabla \cdot \vec{u}(r,t) \quad (33-2)$$

با مقایسه روابط (۱۹-۲) و (۳۳-۲) دیده می شود که پتانسیل های پراکندگی برای برهمن کنش پیزو الکتریک و پتانسیل تغییر شکل شبکه ، با یکدیگر 90° درجه اختلاف فاز دارند. بنابراین فرآیند پراکندگی فونون های آکوستیکی بصورت مستقل عمل می کند. آهنگ پراکندگی دیفرانسیلی برای این پتانسیل بصورت زیر است [۱۶] :

$$S_{pz} = \frac{e^2 K_B T P^2 G(k, k')}{4\pi^2 \hbar \varepsilon(0) |k - k'|^2} \delta(\varepsilon(k) - \varepsilon(k')) \quad (34-2)$$

که در آن P ضریب پیزوالکتریک بدون بعد است ، k و k' بترتیب بردار موج الکترون قبل و بعد از پراکندگی است ، که بستگی به ساختار بلوری دارد . با توجه به روابط (۲۳-۲) و (۳۴-۲) آهنگ پراکندگی کل برای پراکندگی پیزوالکتریک با رابطه زیر داده می شود :

$$R_{pz} = \frac{e^2 K_B T P^2 m^{1/2}}{2\sqrt{2\pi}\hbar^2 \epsilon(0)} \gamma^{1/2} (1+2\alpha\varepsilon) \left[(1+\alpha\varepsilon)^2 + \frac{1}{3}(\alpha\varepsilon)^2 \right] \quad (35-2)$$

۲-۶-۲ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی

پراکندگی الکترون به دلیل پتانسیل تغییر شکل بوجود آمده در اثر فونون های اپتیکی را پراکندگی غیرقطبی می گویند و پراکندگی الکترون به دلیل فرآیند پیزو الکتریک در اثر فونونهای اپتیکی را پراکندگی مدقطبی می گویند. فونون های اپتیکی نسبت به فونون های آکوستیکی انرژی بیشتری دارند، انرژی آنها در حدود ۵۰-۳۰ میلی الکترون ولت است. لذا حامل های بار تحت تأثیر این فونون ها می توانند پراکندگی ناکشسان داشته باشند.

ارتعاشات اپتیکی شبکه باعث ارتعاش اتم های مجاور شبکه در فاز مخالف هم میشود. بنابراین جابجایی اتم های شبکه در فاز مخالف باعث می شود که مرکز یون های مثبت و منفی شبکه از یکدیگر جدا شوند. در نتیجه این جابجایی ها اثرات دو قطبی در ساختار بلوری به وجود می آید. برای فونون های اپتیکی، همانند فونون های آکوستیکی، بیشترین انقباض و انبساط یاخته واحد توسط فونون های اپتیکی طولی ایجاد می شود، البته با این تفاوت که اتم ها در یاخته واحد برخلاف جهت یکدیگر ارتعاش می کنند.

پراکندگی الکترون ها توسط فونون های اپتیکی از دوطریق ممکن است صورت پذیرد: ممکن است پتانسیل تغییر شکل ناشی از فونون های اپتیکی باعث پراکندگی الکترون ها شود که در

این صورت به این نوع پراکندگی ، پراکندگی اپتیکی غیرقطبی^۱ می گویند . همچنین ممکن است که اثرپیزوالکتریک باعث پراکندگی الکترون ها شود که در این صورت پراکندگی اپتیکی قطبی نتیجه می شود .

۱-۲-۶-۲ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی غیرقطبی

در پراکندگی اپتیکی غیرقطبی لازم است جابجایی نسبی بین اتم ها در سلول واحد در نظر گرفته شود .

$$\delta \vec{u}(r,t) = \vec{u}_1(r,t) - \vec{u}_2(r,t) \quad (35-2)$$

که در این رابطه \vec{u}_2 و \vec{u}_1 با معادلات (۱۵-۲) و (۱۶-۲) مشخص می شوند . پتانسیل پراکندگی ناشی از تغییر در لبه نوارهای رسانش و ظرفیت بایستی متناسب با این جابجایی نسبی باشد [۲]، بطوری که داریم :

$$\Delta U(r,t) = D \delta \vec{u}(r,t) \quad (36-2)$$

که در آن $\delta \vec{u}(r,t)$ برابر است با :

$$\delta \vec{u}(r,t) = \vec{a} \delta u(r,t) \quad (37-2)$$

^۱.Inpolar Scattering

در رابطه (۳۶-۲) پارامتر D ثابت پتانسیل تغییر شکل اپتیکی شبکه است و یکای آن انرژی بر واحد طول می باشد .

از آن جایی که پراکندگی الکترون از فونون های اپتیکی غیرقطبی بسیار ضعیف است ، لذا در این پایان نامه از بررسی اثر این پراکندگی صرفنظر کرده و تنها اثر پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی را در نظر گرفته ایم .

۲-۲-۶-۲ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی قطبی^۱

پراکندگی حامل های بار از فونون های اپتیکی قطبی از میدان الکتریکی حاصل از قطبش یون ها در سلول واحد بلور ناشی می شود . این قطبش اساساً توسط مؤلفه طولی فونون های اپتیکی ایجاد می گردد . پتانسیل پراکندگی از روابط (۲۶-۲) و (۲۷-۲) بدست می آید و میدان الکتریکی داخلی در حد فرکانس های پایین از رابطه (۲۹-۲) و در حد فرکانس های بالا از رابطه زیر بدست می آید [۱۶] :

$$\varepsilon(\infty)\vec{E} = \varepsilon_0\vec{E} + \vec{P}(\infty) \quad (38-2)$$

با توجه به این که قطبش فرکانس پایین کل ، ناشی از قطبش یونی و اتمی است لذا داریم :

$$P(0) = P(\infty) + P_i \quad (39-2)$$

با جایگذاری رابطه (۳۹-۲) در معادله (۲۹-۲) خواهیم داشت :

^۱.Polar scattering

$$\varepsilon(0)E = \varepsilon(\infty)E + P_i \quad (40-2)$$

و یا این که :

$$D = \varepsilon(\infty)E + P_i \quad (41-2)$$

قطبش در یک سلول واحد به کمک جابجایی نسبی یون ها δu و باریونی مؤثر e^* تخمین زده می شود.

بطوری که می توان نوشت :

$$P_i(\vec{r}, t) = \frac{e^*}{\Omega} \delta u(\vec{r}, t) \quad (42-2)$$

در این معادله $\Omega = V/N$ حجم سلول واحد و e^* بار مؤثر است که توسط رابطه زیر داده می شود:

$$e^* = \Omega \omega_{L0} \varepsilon(\infty) \rho^{1/2} \left[\frac{1}{\varepsilon(\infty)} - \frac{1}{\varepsilon(0)} \right]^{1/2} \quad (43-2)$$

که در آن ρ چگالی بلور نیمرسانا است. با جایگذاری رابطه (42-2) در (41-2) با فرض این که هیچ بار فضایی و یا سطحی وجود ندارد، میدان الکتریکی داخلی بدست می آید:

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = - \frac{e^*}{\Omega \varepsilon(\infty)} \delta u(\vec{r}, t) \quad (44-2)$$

با توجه به روابط (26-2) و (27-2) و (45-2) پتانسیل پراکندگی برای مدادپتیکی قطبی به صورت زیر خواهد بود:

$$\Delta U(\vec{r}, t) = - \frac{i \dot{e} e}{\Omega \varepsilon(\infty) q_s} \delta u(\vec{r}, t) \quad (45-2)$$

در نتیجه آهنگ پراکندگی دیفرانسیلی برای این پتانسیل اختلالی به صورت زیر خواهد بود:

$$S_{po} = \frac{e^2 \omega_{po}}{8\pi^2} \left[\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right] \frac{G(k, k')}{|k-k'|} \delta[\varepsilon(k) - \varepsilon(k') + \hbar\omega_{po}] (N_{po} + 1) \quad (46-2)$$

$$S_{po} = \frac{e^2 \omega_{po}}{8\pi^2} \left[\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right] \frac{G(k, k')}{|k-k'|} \delta[\varepsilon(k) - \varepsilon(k') - \hbar\omega_{po}] N_{po}$$

که در آن $\varepsilon(\infty)$ و ε_0 به ترتیب گذردهی فرکانس بالا و گذردهی فرکانس پایین شبکه بلور هستند. $\hbar\omega_{po}$ انرژی فونون های اپتیکی طولی می باشد که فرض کرده ایم ثابت باشد و نیز عدد اشغال فونونی است و نشان دهنده تعداد متوسط فونون های هر مد نوسانی می باشد N_{PO} که فرض می شود از تابع بوز-انیشتین^۱ تبعیت کند :

$$N_{po} = \frac{1}{\exp[\frac{\hbar\omega_{po}}{K_B T}] - 1} \quad (47-2)$$

متناظر با پراکندگی با جذب فونون و N_{PO+} متناظر با پراکندگی با گسیل فونون است.

بنابراین با محاسبه می توان نشان داد که آهنگ پراکندگی کل الکترون ها در اثر فونون های اپتیکی قطبی شبکه در حالت جذب و گسیل فونون از رابطه زیر بدست می آید [۱۶] :

$$R_{po} = \frac{e\omega_{po} m^{1/2} (1+2\alpha\varepsilon)}{\sqrt{2}\hbar} \frac{1}{\gamma'^2(\varepsilon)} \left[\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right] F_{po}(\varepsilon, \varepsilon') N_{po} + I \quad \text{گسیل}$$

$$R_{po} = \frac{e\omega_{po} m^{1/2} (1+2\alpha\varepsilon)}{\sqrt{2}\hbar} \frac{1}{\gamma'^2(\varepsilon)} \left[\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right] F_{po}(\varepsilon, \varepsilon') N_{po} \quad \text{جب}$$

که در این رابطه ε' و $('\varepsilon, \varepsilon')$ با روابط زیر داده می شوند :

$$\varepsilon' = \begin{cases} \varepsilon - \hbar\omega_{po} \\ \varepsilon + \hbar\omega_{po} \end{cases}$$

$$F_{po}(\varepsilon, \varepsilon') = C^1 \left\{ A \ln \left| \frac{\gamma'^2(\varepsilon) + \gamma'^2(\varepsilon')}{\gamma'^2(\varepsilon) - \gamma'^2(\varepsilon')} \right| + B \right\} \quad (49-2)$$

ضرائب A و B و C در رابطه (۵۰-۲) با معادلات زیر تعریف می شوند :

$$A = [2(1+\alpha\varepsilon)(1+\alpha\varepsilon') + \alpha\{\gamma(\varepsilon) + \gamma(\varepsilon')\}]^2$$

$$B = -2\alpha\gamma''(\varepsilon)\gamma''(\varepsilon')[4(1+\alpha\varepsilon)(1+\alpha\varepsilon') + \alpha\{\gamma(\varepsilon) + \gamma(\varepsilon')\}] \quad (50-2)$$

$$C = 4(1+\alpha\varepsilon)(1+\alpha\varepsilon')(1+2\alpha\varepsilon)(1+2\alpha\varepsilon')$$

۷-۲ پراکندگی الکترون ناشی از ناخالصی های یونیزه

این نوع پراکندگی در اثر وجود اتم های ناخالصی در نیمرسانا به وجود می آید. جایگزینی یک اتم ناخالصی در یک محل شبکه باعث به هم خوردن نظم پتانسیل تناوبی بلوری می گردد. بی نظمی در پتانسیل تناوبی شبکه مطابق تئوری اختلال^۱ درمکانیک کوانتومی باعث ایجاد یک پتانسیل اختلالی در سیستم شده که با محاسبه توابع موج الکترونی در حضور چنین پتانسیلی می توان ویژه حالات انرژی را در این حالت محاسبه کرد. در هر حال برهم کنش الکترون با این پتانسیل اختلالی باعث پراکندگی الکترون خواهد شد. در هر صورت چون عموماً جرم اتمی ناخالصی بسیار بیشتر از جرم الکترون است، لذا پراکندگی در حضور اتم های ناخالصی در بلور ، از نوع کشسان است.

^۱. Perturbation Theory

آهنگ پراکندگی الکترون ها از اتم های ناخالصی یونیزه در دماهای پایین بیشتر از دماهای بالاست . زیرا در دماهای پایین ، انرژی جنبشی الکtron کوچک است ($\frac{3}{2}K_B T$) و لذا الکترون زمان بیشتری را تحت اثر پتانسیل کولنی سپری می کند .

با محاسبات مشابهی مطابق آنچه در قسمت های قبلی انجام شد می توان نشان داد که آهنگ پراکندگی الکترون ها ناشی از اتم های ناخالصی از رابطه زیر بدست می آید [۲۱] :

$$R_{in} = \frac{N_i e^4 (1+2\alpha\varepsilon)}{32\sqrt{2m} \pi \varepsilon_0^2 \sqrt{\gamma(\varepsilon)}} \left[\ln(1+b) - \frac{b}{1+b} \right] \quad (51-2)$$

که در این رابطه پارامتر b با رابطه زیر تعریف می شود :

$$b = \frac{8m \gamma(\varepsilon)}{\hbar^2 q_0^2} \quad (52-2)$$

در روابط (۵۱-۲) و (۵۲-۲) ضریب N_i معرف چگالی اتم های ناخالصی و ضریب q معرف طول استتار^۱ است که از رابطه زیر محاسبه می شود :

$$q^2 = \frac{n e^2}{\varepsilon_s \varepsilon_0 K_B T} \quad (53-2)$$

کلیه پارامترهای ساختاری و الکتریکی استفاده شده در این پایان نامه برای محاسبه تحرک پذیری الکترون ها در جدول (۱-۲) و (۲-۲) گزارش شده است .

^۱. Debye Length

جدول (۱-۲)- پارامترهای نواری ترکیب های نیمرسانی InN و AlN ، [۳۱-۳۷].

ترکیب	درجه	ضریب غیر سهموی (eV) ⁻¹	ضریب جرم مؤثر الکترون (m [*] /m.) (eV)
InN(Wurtzite)	Γ	•/۱۱	•/۴۱۹
	U	•/۴	•/۰۶۵
	K	•/۳	•/۷
AlN(Wurtzite)	Γ	•/۳۱	•/۳۲
	U	•/۳۹	•/۵
	K	•/۵۶	•/۰۳

جدول (۲-۲)-پارامترهای فیزیکی ترکیب های نیمرسانای InN و AlN مورد استفاده در این مطالعه [۳۱-۳۷]

پارامترهای فیزیکی	InN	AlN (wurtzite)	AlN (zinc blende)
ثابت دی الکتریک فرکانس پایین ϵ_s	۱۵/۳	۸/۵	۸/۰۷
ثابت دی الکتریک فرکانس بالا ϵ_∞	۸/۴	۴/۷۷	۴/۴۶
انرژی فونون های اپتیکی (eV)	۰/۰۸۹	۰/۰۹۹	۰/۰۹۹۲
پتانسیل تغییر شکل (eV)	۷/۱	۹/۵	۹
چگالی (kg m ^{-۳})	۶۸۱۰	۳۲۳۰	۳۲۵۷
سرعت صوت (ms ^{-۱})	۶۲۴۰	۹۰۶۰	۵۷۴۰

فصل سوم

معادله تراپردى بولتزمن

۱-۳ مقدمه

برای بررسی خواص ترابرد حامل ها در بلور نیمرسانا چندین روش وجود دارد که در این پژوهش به روش برگشت پذیر به آن می پردازیم . به روش برگشت پذیری مبتنی بر حل معادله بولتزمن لازم به یادآوری است که در این تحقیق میدان الکتریکی استفاده شده در حدود (7 cm^{-4}) که نسبت به میدان الکتریکی طبیعت شدید محسوب می شود . منتهی این اندازه میدان برای حل معادله بولتزمن به روش برگشت پذیر در محدوده میدان الکتریکی ضعیف محسوب می شود .

از جمله خواص ترابرد حامل ها محاسبه جریان الکتریکی ، تحرک پذیری حامل های نیمرسانا می توان اشاره کرد . در این فصل با حل معادله بولتزمن تحرک پذیری را بر حسب جرم مؤثر الکترون و اندازه میدان الکتریکی اعمالی در گستره انرژی الکترونی متفاوت بدست می آوریم .

۲-۳ معادله تراپردا بولتزمن

خواص تراپردا الکترون ها در نیمرساناهای با گاف انرژی مستقیم را می توان به راحتی با حل مستقیم معادله بولتزمن بدست آورد [۲۴]. از حل معادله بولتزمن می توان خواص تراپردا حامل های بار را در هر جامد بلورین که تحت تأثیر میدان الکتریکی خارجی قرار دارد مشخص نمود. از جمله این خواص می توان به محاسبه جریان الکتریکی، تحرک پذیری حامل های نیمرسانا، ضریب هال و مقاومت الکتریکی اشاره نمود.

معادله تراپردا بولتزمن در حالت کلی بصورت زیر است [۱۵] :

$$\frac{\delta f}{\delta t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r f + \frac{eE}{\hbar} \cdot \nabla_k f = \left(\frac{\delta f}{\delta t} \right)_{coll} \quad (1-3)$$

که در این رابطهتابع $f=f(r,k,t)$ ، تابع توزیع حامل های بار در درون نیمرسانا است. با توجه به آن که الکترون ها فرمیون اند (یعنی ذراتی با عدد اسپینی غیر صحیح اند) لذا تابع توزیع الکترون ها در درون ماده نیمرسانا از آمار فرمی-دیراک پیروی می کند [۲۴] :

$$f = f(r, k, t) = \frac{1}{1 + e^{(\epsilon - \epsilon_f)/KT}} \quad (2-3)$$

در معادله تراپردا حامل بولتزمن (۱-۳)، E شدت میدان الکتریکی اعمال شده بر بلور، \mathbf{v} سرعت حامل های بار در بلور و \vec{k}_r و $\vec{\nabla}_k$ به ترتیب مشتقات تابع توزیع الکترون ها نسبت به مختصات فضای حقیقی (\vec{r}) و فضای وارونه بلور (\vec{k}) می باشند. همچنین در این معادله $\left(\frac{\delta f}{\delta t} \right)_{coll}$ (معرف تغییر در تابع توزیع الکترون ها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی است). در این مطالعه ما شرایط فیزیکی مسئله را طوری در نظر گرفته ایم که میدان الکتریکی

خارجی اعمال شده بر بلور نیمرسانا یکنواخت و مستقل از زمان باشد ، همچنین ترا بر د الکترون ها را در ماده نیمرسانا در حالت پایا بررسی کرده ایم . این بدان معناست که تابع توزیع الکترون ها در بلور به مختصه مکانی بلور وابسته نیست . تحت چنین شرایطی می توان معادله بولتزمن (۳-۱) را به ساده ترین شکل ممکن در نظر گرفت :

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f = \left(\frac{\delta f}{\delta t} \right)_{coll} \quad (3-3)$$

در محاسبه تغییرات تابع توزیع الکترون ها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی ، باید هر دو حالت گسیل و جذب الکترون ها را بین حالت های انرژی بالا و انرژی پایین در نظر گرفت ، زیرا چنانکه می دانیم الکترون ممکن است تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی ، انرژی جذب نموده و از حالت اولیه k به حالت نهایی k' برانگیخته شود . تحت چنین شرایطی تابع توزیع الکترون ها پس از جذب انرژی تغییر خواهد کرد . البته باید در نظر داشت که در گذار الکترون از یک حالت انرژی به حالت انرژی دیگر ، اصل طرد پائولی برقرار بماند . این بدان معنی است که در برانگیختگی الکترون از حالت اولیه k با تابع توزیع $f_0(k)$ به حالت برانگیخته k' با تابع توزیع $f(k')$ ، وجود یک تراز انرژی خالی ، برای راه یافتن الکترون به آن تراز ضروری است . بنابراین در این حالت احتمال پراکندگی الکترون ها از تراز k به k' با ضریب $(1-f_0(k'))/f_0(k)$ داده می شود در آن $(f(k')-1)$ احتمال خالی بودن یک تراز انرژی در سطحی بالاتر از تراز انرژی k می باشد . چنین ضریبی را نیز در پراکندگی الکترون ها ، از سطح تراز انرژی بالاتر k' به تراز انرژی k پایین تر باید در نظر گرفت . مهمترین عوامل پراکندگی در محاسبه خواص ترا بر دی الکترون ها در مواد نیمرسانا ، عموماً شامل پراکندگی غیر الاستیکی از فونون های اپتیکی ، که پراکندگی از آنها را با رابطه $S_{inel}(k, k')$ نمایش می دهیم و پراکندگی الاستیکی از فونون های

آکوستیکی ، نظیر پراکندگی پیزوالکتریک و پراکندگی ناشی از حضور اتم های ناخالصی است ، که آن را با نماد $S_{el}(k, k')$ نمایش می دهیم ، می باشند . لذا در حالت کلی آهنگ پراکندگی کل الکترون ها در ماده نیمرسانا مجموع این دو پراکندگی می باشد :

$$S(k, k') = S_{el}(k, k') + S_{inel}(k, k') \quad (4-3)$$

به منظور حل معادله بولتزمن در حالت پایا ، فرض می کنیم الکترون ها در غیاب هرگونه میدان الکتریکی خارجی در پایین ترین درجه نوار رسانش (درجه Γ) با تابع توزیع $f(k)$ باشند . با اعمال میدان الکتریکی خارجی تابع توزیع الکترون ها از حالت تعادل خارج شده و می توان این سیستم را طبق نظریه اختلال در مکانیک کوانتومی بررسی نمود . بدین منظور اگر میدان الکتریکی خارجی اعمالی به بلور نیمرسانا در حدود $E \approx 10^4 \text{ V/cm}$ باشد ، تغییر در تابع توزیع الکترون ها تا تقریب مرتبه اول را می توان بصورت زیر در نظر گرفت [۱۵] :

$$f(k) = f_0(k) + g(k) \cos(\theta) \quad (5-3)$$

که در این رابطه θ زاویه بین بردار میدان الکتریکی اعمالی E و k بردار موج الکترون است . $g(k)$ در این رابطه نشانگر تغییر جزئی در تابع توزیع الکترون ها است که خود وابسته به اندازه شدت میدان الکتریکی اعمالی می باشد . با جایگذاری تابع توزیع الکترون ها در رابطه بولتزمن و با در نظر گرفتن آهنگ پراکندگی کل پس از ساده سازی خواهیم داشت [۱۶] :

$$\frac{eE\cos(\theta)}{\hbar} \frac{\delta f_\theta}{\delta k} = \int g'[S'_i(1-f_\theta) + S_i f_\theta] \cos \phi d^3k - g \cos \phi \int [S_i(1-f'_\theta) + S'_i f'_\theta] d^3k' \quad (6-3)$$

همچنین در رابطه فوق کمیت های S_i و S'_i به ترتیب ، آهنگ پراکندگی در حالت گسیل وجذب می باشند . لازم به ذکر است که برای نوارهای انرژی متقارن ، آهنگ پراکندگی به بردارهای موج حالت اولیه و نهایی و زاویه بین این دو و در نتیجه سطح تراز انرژی حالت های اولیه و نهایی بستگی دارد . با استفاده از رابطه (7-3) :

$$\int \cos \phi A(\cos \phi) d^3k' = \cos \theta \int \cos \phi A(\cos \phi) d^3k' \quad (7-3)$$

که در آن $A(\cos \phi)$ تابعی از $\cos \phi$ بوده و بستگی به زوایای θ و ϕ ندارد .

می توانیم رابطه (6-3) را بصورت زیر بنویسیم :

$$\frac{eE\cos(\theta)}{\hbar} \frac{\delta f_\theta}{\delta k} = \int g'[S'_i(1-f_\theta) + S_i f_\theta] \cos \phi d^3k - g \int [S_i(1-f'_\theta) + S'_i f'_\theta] d^3k' \quad (8-3)$$

حال همان طورکه اشاره کردیم ، چون آهنگ پراکندگی کل الکترون ها هنگام گسیل و جذب الکترون (S_i و S'_i) شامل هر دو نوع پراکندگی الاستیکی و غیر الاستیکی است ، چنانچه در رابطه فوق اثر هر نوع پراکندگی را از رابطه (4-3) درنظر بگیریم ، تغییر جزئی در تابع توزیع الکترون ها در اثر برخوردهای متواالی(k) g را می توان از رابطه زیر بدست آورد .

$$g(k) = \frac{-eE\delta f_0 \int \cos \phi g'(k) [S'_{inel}(1-f_0) + S_{inel} f_0] d^3 k'}{\int (1-\cos \phi) S_{el} d^3 k' + \int [S'_{inel}(1+f'_0) + S'_{inel} f'_0] d^3 k'} \quad (9-3)$$

در رابطه فوق اولین جمله در مخرج ، مجموع آهنگ های پراکندگی الکترون در اثر کلیه پراکندگی های الاستیکی است . معادله پیچیده (9-3) را می توان به روش های عددی مختلفی حل نمود . بطور مثال چنانچه آن را به روش عددی برگشت پذیر حل کنیم . اندازه تغییر جزئی تابع توزیع الکترون ها در مرتبه n ام معادله بازگشتی ، از رابطه زیر بدست می آید :

$$g(k)[n] = \frac{-eE\delta f_0 \int \cos \phi g'(k)[n-1] [S'_{inel}(1-f_0) + S_{inel} f_0] d^3 k'}{\int (1-\cos \phi) S_{el} d^3 k' + \int [S'_{inel}(1+f'_0) + S'_{inel} f'_0] d^3 k'} \quad (10-3)$$

برای محاسبه معادله بازگشتی فوق کافی است یک برنامه کامپیوترا بنویسیم که مشتمل بر محاسبه کلیه آهنگ های پراکندگی موجود در نمونه بلورین تحت تأثیر میدان الکتریکی اعمالی باشد . پس از محاسبه رابطه (10-3) اندازه $g(k)$ یعنی تغییر جزئی در تابع توزیع الکترون ها تحت تأثیر میدان الکتریکی خارجی بدست می آید . اگر بتوان $g(k)$ را با دقت بالایی از حل معادله بازگشتی (10-3) محاسبه نمود ، با کمک آن خواهیم توانست پارامترهای الکتریکی ماده نیمرسانا نظیر تحرک پذیری را با کمک رابطه زیر محاسبه کنیم . بطوریکه خواهیم داشت :

$$\mu_e = \frac{\int v \cdot E f(k) d^3 k}{E^2 \int f(k) d^3 k} \quad (11-3)$$

باجایگذاری مقدار تابع توزیع الکترون ها $f(k)$ از رابطه (3-5) در رابطه فوق و انتگرال گیری از آن در سیستم مختصات کروی خواهیم داشت :

$$\mu_e = \frac{\int v \cdot E \cos \theta (f+g \cos \theta) k^2 dk \sin \theta d\theta d\varphi}{E^2 \int f (f+g \cos \theta) k^2 dk \sin \theta d\varphi} \quad (12-3)$$

$$\mu_e = \frac{\int v \cdot E k dk \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta + \int v \cdot E g k^2 dk \int_0^\pi \cos \theta^2 \sin \theta d\theta}{E^2 \int f k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta d\theta + E^2 \int f k^2 dk \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta d\theta} \quad (13-3)$$

در محاسبه انتگرال های ظاهر شده در معادله (13-3) از نتایج زیر استفاده می کنیم :

$$\int_0^\pi \sin \theta \cos \theta d\theta = 0$$

$$\int_0^\pi \sin \theta d\theta = 2 \quad (14-3)$$

$$\int v E f k^2 dk = 0$$

$$\int_0^\pi \cos \theta^2 \sin \theta d\theta = \frac{2}{3}$$

اگر در صورت و مخرج رابطه (13-3) مقادیر مشابه را حذف کنیم ، خواهیم داشت :

$$\mu_e = \frac{\int v \cdot k^2 g dk}{3 \int k^2 f_o dk} \quad (15-3)$$

برای نوارهای غیرسهمی سرعت گروه از رابطه زیر بدست می آید :

$$v(k) = \frac{\hbar k}{m} \left(\frac{1}{1+2\alpha\varepsilon} \right) \quad (16-3)$$

در این رابطه α ضریب غیرسهمی بودن نوار است و ε انرژی الکترون می باشد .

با جایگذاری این نتیجه در رابطه (15-3) خواهیم داشت :

$$\mu_e = \frac{\hbar}{3mE} \frac{\int_0^\infty \left(\frac{k^3}{1+2\alpha\varepsilon} \right) g(k) dk}{\int_0^\infty k^2 f_o dk} \quad (17-3)$$

با استفاده از رابطه فوق می توان تحرک پذیری را بر حسب جرم مؤثر الکترون و اندازه میدان الکتریکی اعمالی در گستره انرژی الکترونی متفاوت بدست آورد . چنانچه ملاحظه می شود، اگر بتوان ، تغییرجزئی در تابع توزیع الکترون ها را در اثر پراکندگی ، $(k)g$ ، با دقت بالایی از معادله (۳-۱۰) محاسبه نمود ، آنگاه تحرک پذیری الکترونی قابل محاسبه خواهد بود .

فصل چهارم

نتائج و بحث

۱-۴ مقدمه

همانطور که در فصلهای قبل اشاره شد خواص ترابری الکترون‌ها در نیمرساناهایی که تحت تأثیر میدان الکتریکی خارجی قرار گرفته‌اند به عواملی همچون ساختار بلوری مانند: نوع شبکه بلور، ثابت‌های شبکه و نیز ساختار نواری مانند: گاف نواری، جرم مؤثر الکtron در دره‌های مختلف انرژی و فرآیندهای پراکندگی الکtron بستگی دارد.

هدف ما در این پایان نامه بررسی خواص ترابری الکترون در دو ترکیب نیمرسانای AlN و InN در میدان‌های الکتریکی ضعیف می‌باشد.

در این فصل نتایج حاصل از بررسی آهنگ‌های پراکندگی را برای ترکیبات نیمرسانای AlN و InN گزارش و با یکدیگر مقایسه شده‌اند، همچنین با استفاده از روش برگشت پذیری، تحرک پذیری الکترون‌ها و نیز عوامل مؤثر بر آن بصورت تابعی از دما و چگالی اتم‌های ناخالصی در حد میدان‌های ضعیف بررسی شده است.

۲-۴ محاسبه آهنگ های پراکندگی در دو نیمرسانای InN و AlN

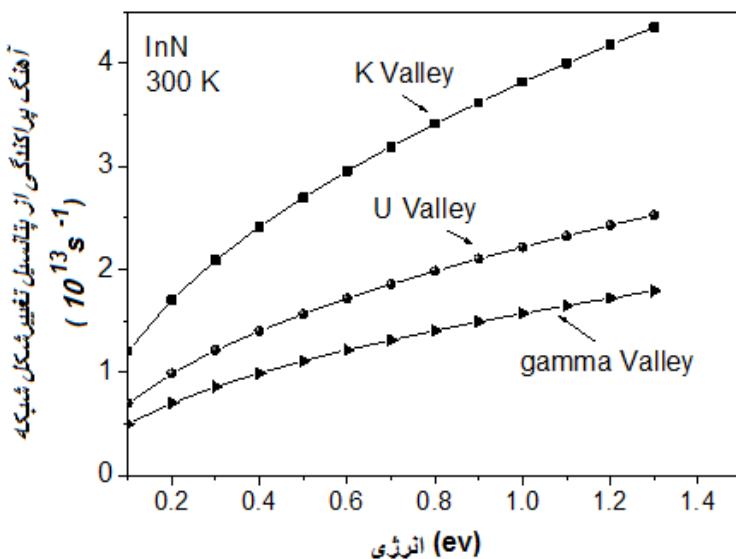
۱-۲-۴ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه

در این قسمت پراکندگی الکترون ها ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه بررسی شده است. با استفاده از روابط (۲۴-۲) و (۲۵-۲) منحنی آهنگ پراکندگی بر حسب انرژی الکترونها رسم شده و نتایج این بررسی برای نیمرسانای InN در شکل (۱-۴) نشان داده شده است.

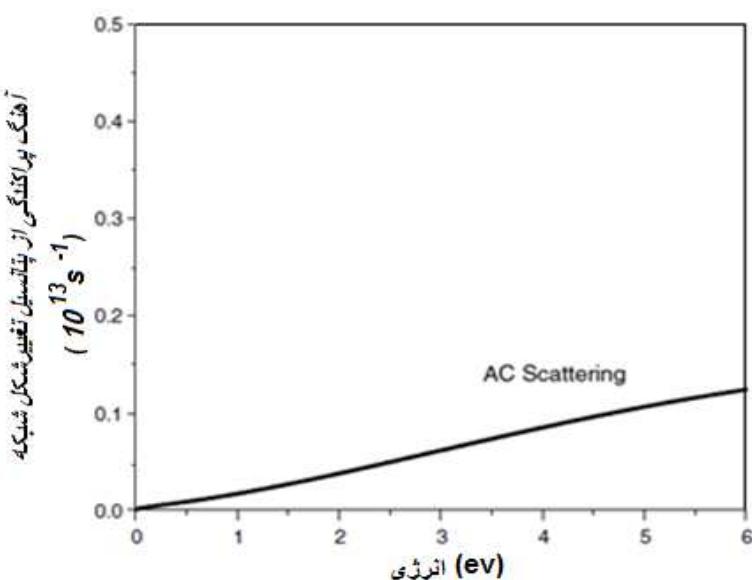
در این شکل می بینیم که با افزایش انرژی الکترونها پراکندگی محاسبه شده برای تمام دره ها افزایش می یابد. همچنین پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه برای این نیمرسانا در دره های فضایی K و U زیادتر از پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه در دره مرکزی Γ است. با توجه به جدول (۱-۲) جرم مؤثر الکترونی در نیمرسانای InN در دره های فضایی Γ نسبت به دره مرکزی بزرگتر است و در نتیجه آهنگ پراکندگی الکtron در این دره ها بیشتر از دره مرکزی خواهد بود.

در سال ۲۰۱۲ گروه آبوال-الا^۱ و همکارانش پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه را برای دره Γ نیمرسانای InN ب--- روشن ش---بیه س---ازی مون---ت کارلو بررسی کردند [۱۶] که در شکل (۲-۴) آمده است. همانطور که در این شکل دیده می شود با افزایش انرژی الکترونها آهنگ پراکندگی به طور یکنواخت افزایش می یابد. این رفتار با نتایج بدست آمده در این پایان نامه در توافق می باشد.

^۱. ABOU EL-ELA

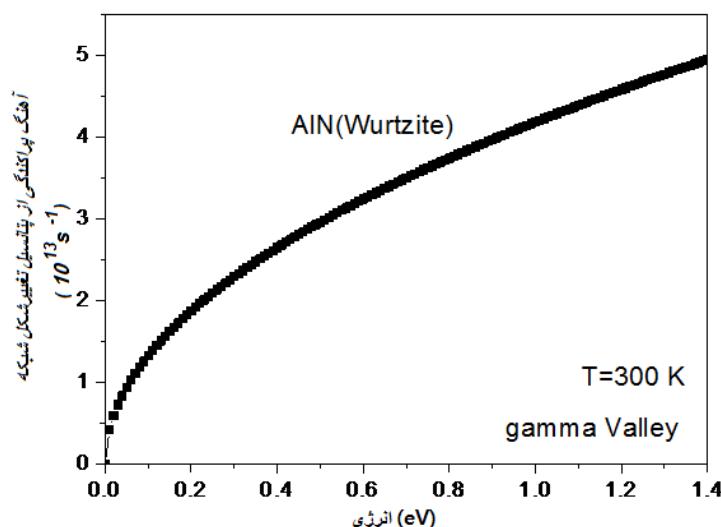


شکل(۱-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییرشکل شبکه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای InN در سه دره K و U و Γ .

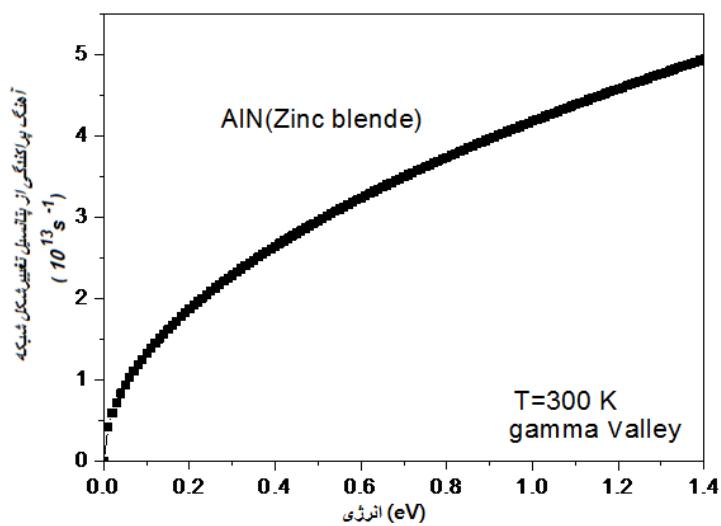


شکل(۲-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییرشکل شبکه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای InN [۱۶].

آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه برای نیمرسانی AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در شکل‌های (۳-۴) و (۴-۴) در درجه مرکزی Γ در دمای 300 رسم شده است.



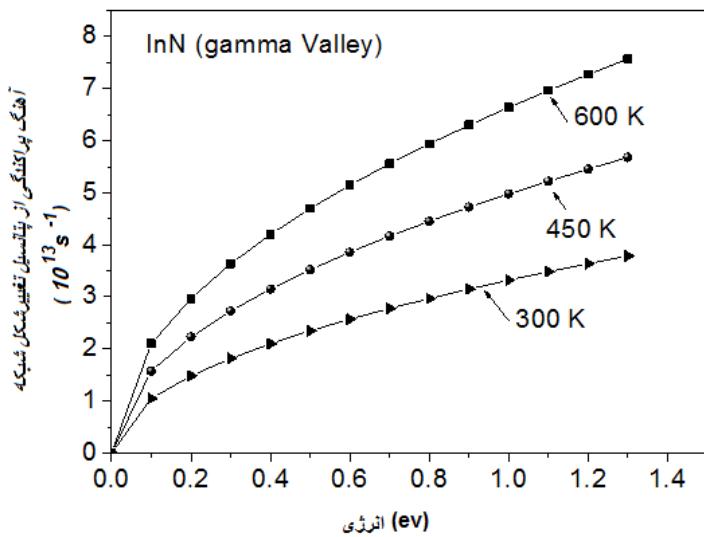
شکل (۳-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییر شکل شبکه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانی AlN با ساختار وورتسایت در درجه مرکزی Γ [۷۰].



شکل (۴-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییر شکل شبکه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانی AlN با ساختار زینک بلند در درجه مرکزی Γ [۷۰].

در ادامه وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه در دماهای مختلف برای ترکیب نیمرسانای InN بررسی شده است. نتایج این بررسی در شکل (۵-۴) نشان داده شده است.

این شکل نشان می‌دهد که با افزایش دمای محیط، آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه افزایش می‌یابد. بنابراین در دماهای بالاتر اثر این پراکندگی از اهمیت بیشتری برخوردار است. با افزایش دما، دامنه نوسانات اتم‌ها افزایش می‌یابد و در نتیجه آهنگ پراکندگی الکترون‌ها از پتانسیل تغییر شکل شبکه نیز افزایش می‌یابد.



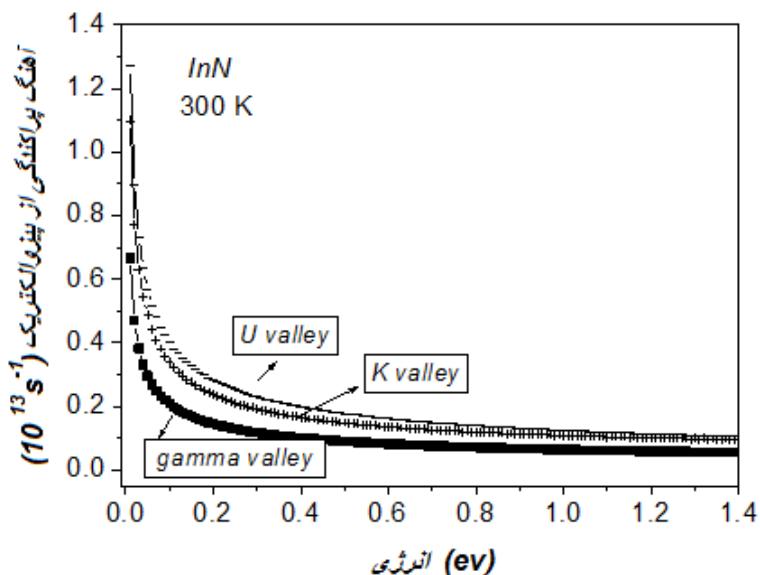
شکل (۵-۴)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه واقع در دره Γ در نیمرسانای InN که در این پایان نامه بررسی شده است.

۴-۲-۲ پراکندگی پیزوالکتریک

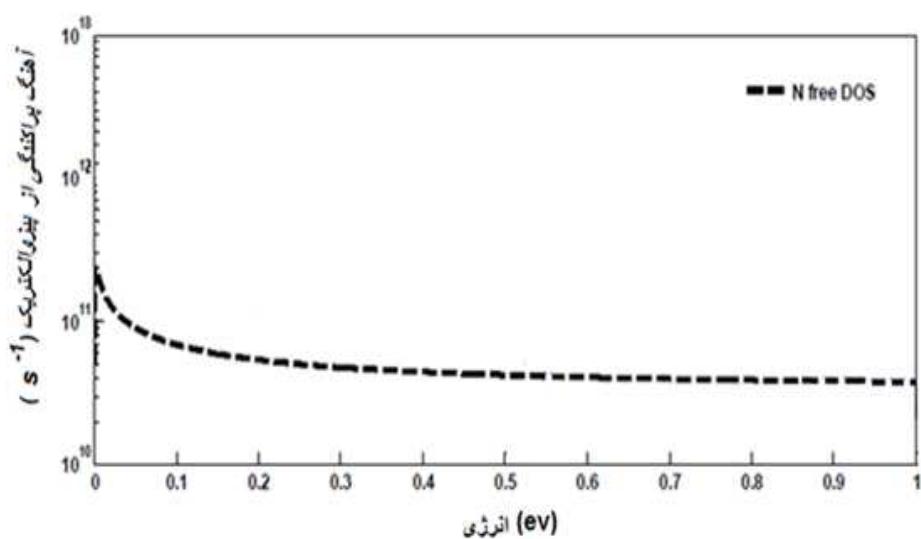
در این قسمت آهنگ پراکندگی ناشی از اثر پیزوالکتریک برای نیمرسانای InN با استفاده از رابطه (۳۵-۲) بررسی شده است. در شکل (۶-۴) منحنی تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها در اثر پدیده پیزوالکتریک بر حسب تابعی از انرژی الکترون ها نشان داده شده است. همانگونه که در این شکل دیده می شود پراکندگی ناشی از اثر پیزوالکتریک در دره های فضایی K و U بیشتر از پراکندگی در دره مرکزی Γ است.

در سال ۲۰۰۸ گروه نیکلاس و گیاتس^۱ و همکارانش به روش مونت کارلو پراکندگی از اثر پیزوالکتریک را برای نیمرسانای مستقیم $GaInAs$ که شامل ترکیب پایه InN می باشد را بررسی کرده اند. نتایج این بررسی در شکل (۷-۴) آمده است. همانطور که این شکل نشان می دهد با افزایش انرژی الکترون ها اثر پراکندگی ناشی از پیزوالکتریک به طور نمایی کاهش می یابد و سپس با افزایش بیشتر انرژی تقریباً ثابت می شود. رفتار گزارش شده در این ترکیب چهارتایی شبیه نتایج بدست آمده در این پایان نامه (البته برای ترکیب پایه دوتایی InN) است. اگرچه نمونه هایی که توسط گروه نیکلاس و گیاتس و همکارانش مطالعه شده دقیقاً همان نمونه هایی که در این پایان نامه بررسی می شود، نمی باشند لیکن در تمام نمونه های مطالعه شده، اثر پراکندگی پیزوالکتریک در انرژی های کم قابل توجه و با افزایش انرژی الکترون ها کاهش می یابند که نشانگر این واقعیت است که انرژی الکترونها در ایجاد پراکندگی ناشی از اثر پیزوالکتریک حائز اهمیت است [۳۲].

^۱. Nikolaos Vogiatzis

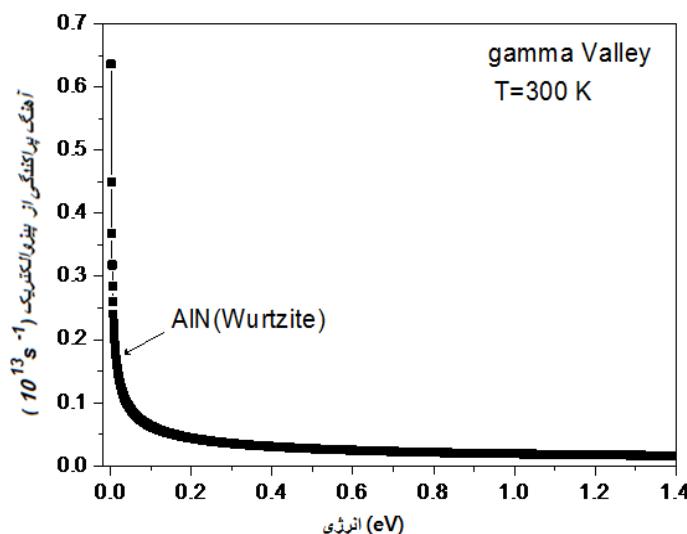


شکل (۶-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از پیزوالکتریک برحسب تابعی از انرژی الکترون ها برای نیمرسانی InN در سه دره Γ و U و K .

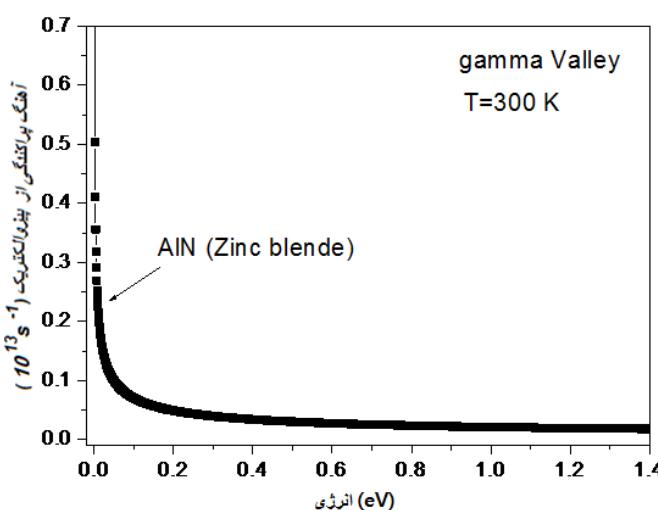


شکل (۷-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها ناشی از پیزوالکتریک برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در [۳۲] $GaInNAS$.

آهنگ پراکندگی پیزوالکتریک برای ترکیب نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت و ساختار زینک بلند بترتیب در شکل‌های (۸-۴) و (۹-۴) رسم شده است.

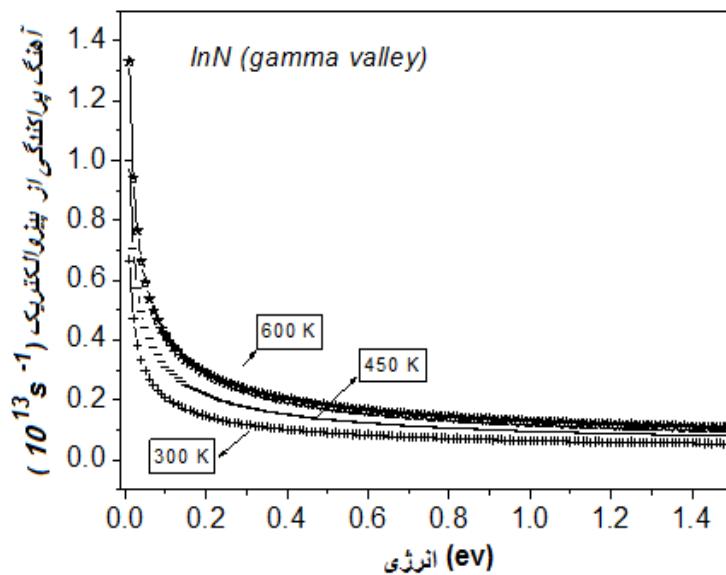


شکل (۸-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون‌ها از پدیده پیزوالکتریک بر حسب تابعی از انرژی الکترون‌ها در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ .



شکل (۹-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون‌ها از پدیده پیزوالکتریک بر حسب تابعی از انرژی الکترون‌ها در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ .

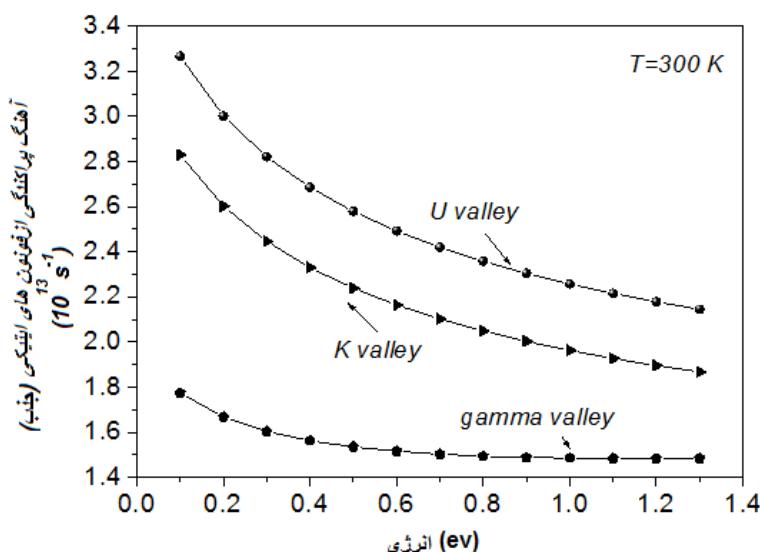
در ادامه وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از پدیده پیزوالکتریک در نیمرسانای InN نیز بررسی شده است. نتیجه این بررسی در شکل (۱۰-۴) آمده است. این شکل نشان می‌دهد با افزایش انرژی آهنگ پراکندگی کاهش می‌یابد، یعنی اثر این فرآیند فقط در انرژی‌های کم دارای اهمیت بوده و با افزایش انرژی آهنگ پراکندگی کاهش می‌یابد. همچنین این بررسی نشان می‌دهد، همانطور که انتظار می‌رود با افزایش دما در یک انرژی الکترونی معین نشان می‌دهد، پراکندگی افزایش یافته است. این ممکن است به این دلیل باشد که افزایش دما باعث افزایش میدان پیزوالکتریک شده و در نتیجه پراکندگی ناشی از این اثر افزایش می‌یابد.



شکل (۱۰-۴)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از پدیده پیزوالکتریک واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN

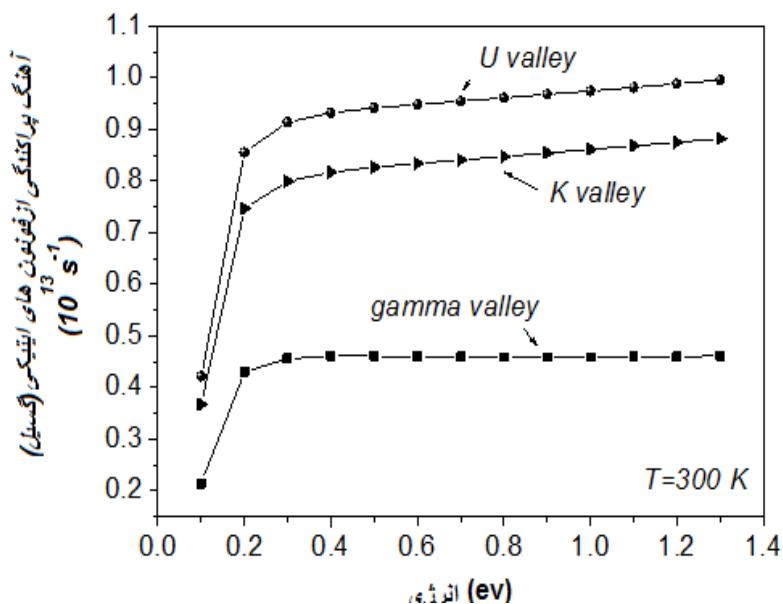
۳-۲-۴ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی قطبی

آهنگ پراکندگی الکترونها از فونون های اپتیکی قطبی شبکه در دو حالت جذب و گسیل فونون برای نیمرسانای InN با استفاده از روابط (۴۸-۲) و (۴۹-۲) و (۵۰-۲) محاسبه و در شکل‌های (۱۱-۴) و (۱۲-۴) رسم شده است. در حالت جذب فونون پراکندگی الکtron ها در هر انرژی امکان پذیر است ولی برای گسیل فونون، انرژی الکtron ها باید حداقل به اندازه انرژی فونون های قطبی-اپتیکی شبکه (حدود ۵۰-۳۰ میلی الکtron ولت) باشند. این نمودار ها نشان می‌دهند که در نیمرسانای InN آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی در دره های فضایی U و K بسیار بیشتر از دره مرکزی Γ می‌باشد. این مسئله می‌تواند ناشی از بزرگتر بودن جرم مؤثر الکترونی در دره های فضایی باشد.

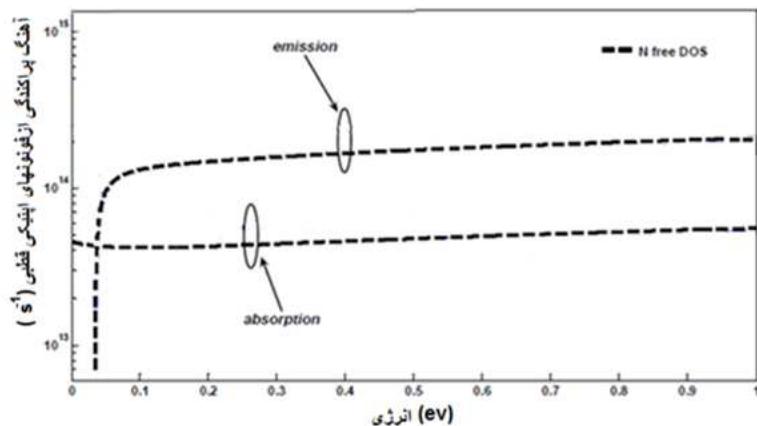


شکل (۱۱-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکtron ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت جذب بر حسب تابعی از انرژی الکtron ها در نیمرسانای InN در سه دره K و U و Γ

پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی قطبی به روش مونت کارلو برای نیمرسانای $GaInNAs$ برای حالت گسیل و جذب توسط گروه نیکلاس و گیاتس و همکارانش نیز مورد مطالعه قرار گرفته است که در شکل (۱۳-۴) نتایج این مطالعه نشان داده شده است. رفتار InN گزارش شده در حالت جذب و گسیل فونون ها برای این ترکیب کاملاً مشابه رفتار نمونه InN مطالعه شده در این پایان نامه می باشد (شکل (۱۱-۴) و (۱۲-۴)). در حالت جذب با افزایش انرژی پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی کاهش می یابد در حالیکه در حالت گسیل با افزایش انرژی الکترونها پراکندگی ناشی از این اثر ابتدا بطور قابل توجهی افزایش یافته و سپس تقریباً ثابت می شود .

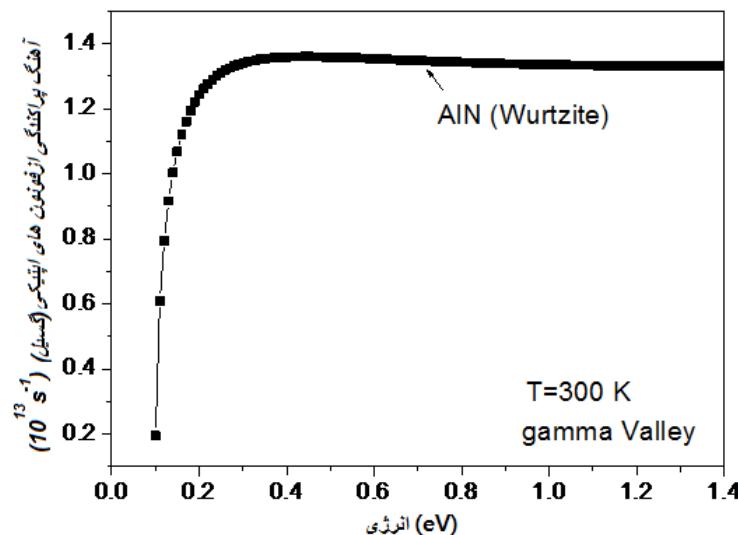


شکل (۱۲-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت گسیل بر حسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای InN در سه دره U و K و Γ

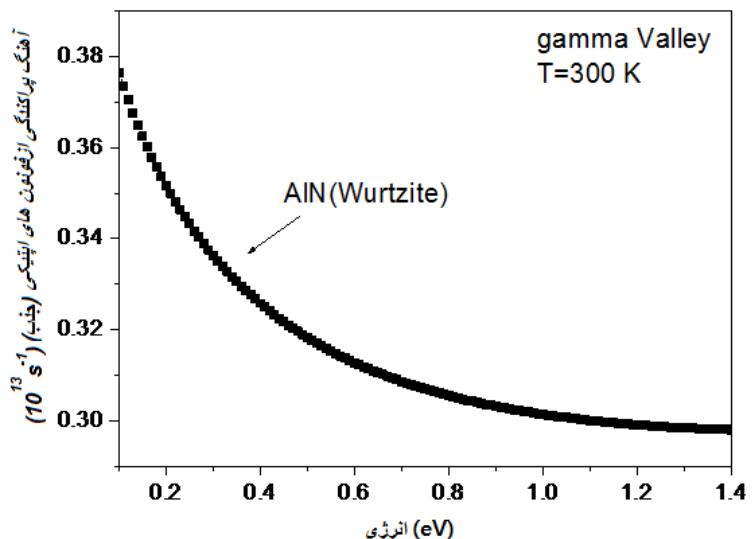


شکل (۱۳-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون‌ها از فونون‌های اپتیکی قطبی در حالت گسیل و جذب برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای $GaInNAs$ [۳۲].

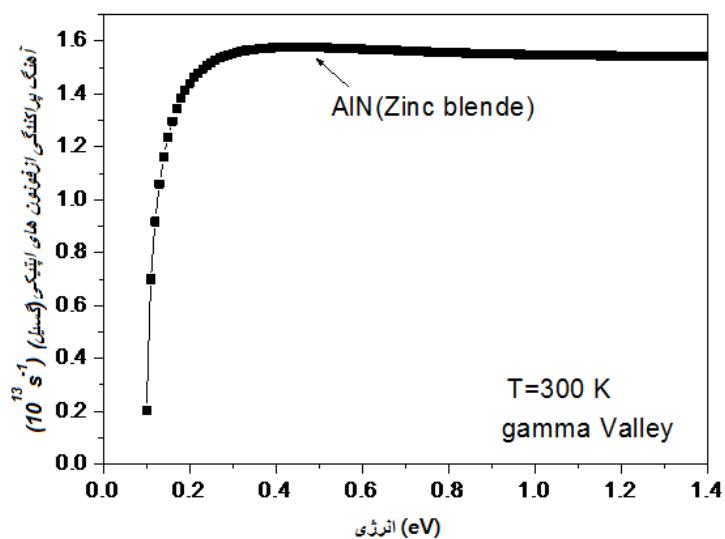
آهنگ پراکندگی الکترون‌ها از فونون‌های اپتیکی قطبی در دو حالت جذب و گسیل فونون برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در شکلهای (۱۴-۴) و (۱۵-۴) و (۱۶-۴) و (۱۷-۴) رسم شده است.



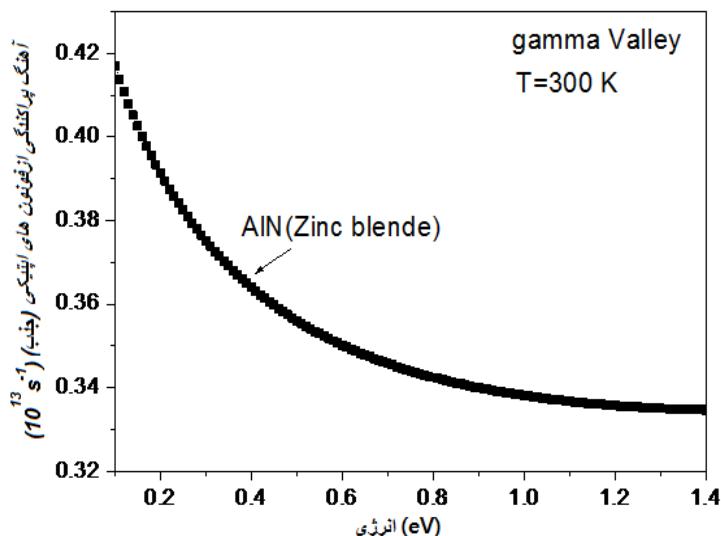
شکل (۱۴-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون‌ها از فونون‌های اپتیکی قطبی در حالت گسیل برحسب تابعی از انرژی الکترون‌ها در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ [۷۰].



شکل (۱۵-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت جذب بر حسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانی AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ [۷۰].

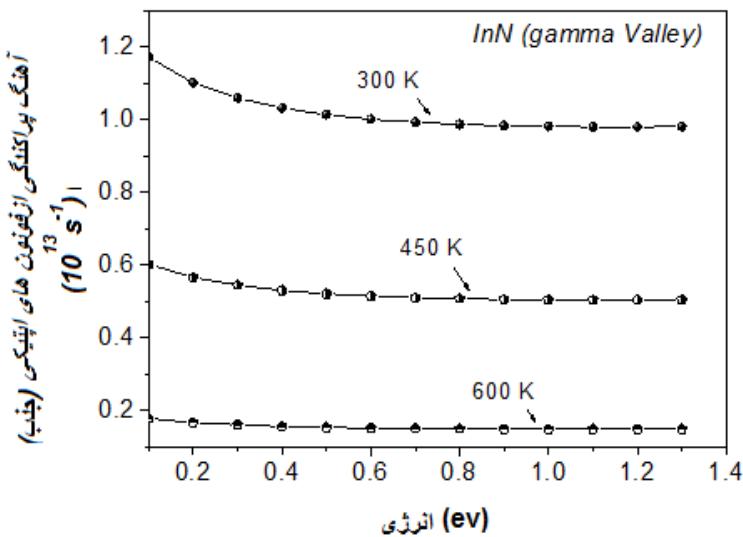


شکل (۱۶-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت گسیل بر حسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانی AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ [۷۰].



شکل (۱۷-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی در حالت جذب برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ [۷۰].

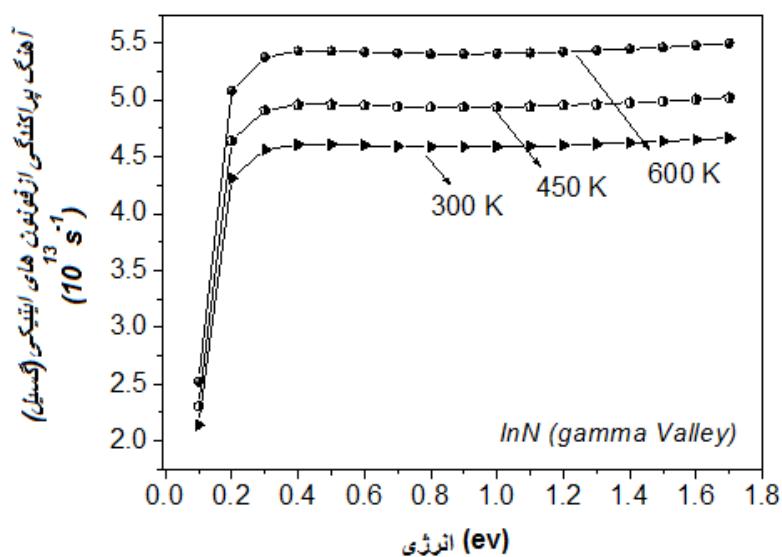
وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی در شکل های (۱۸-۴) و (۱۹-۴) رسم شده است. می دانیم که افزایش دما ، منجر به افزایش انرژی الکترونها می شود ، همانطور که قبل ذکر شد با زیاد شدن دما پراکندگی در حالت جذب کاهش می یابد و در حالت گسیل افزایش می یابد . افزایش دما می تواند حضور فونونهای اپتیکی قطبی را افزایش داده و در نتیجه در حالت گسیل فونونی احتمال افزایش پراکندگی بیشتر خواهد بود .



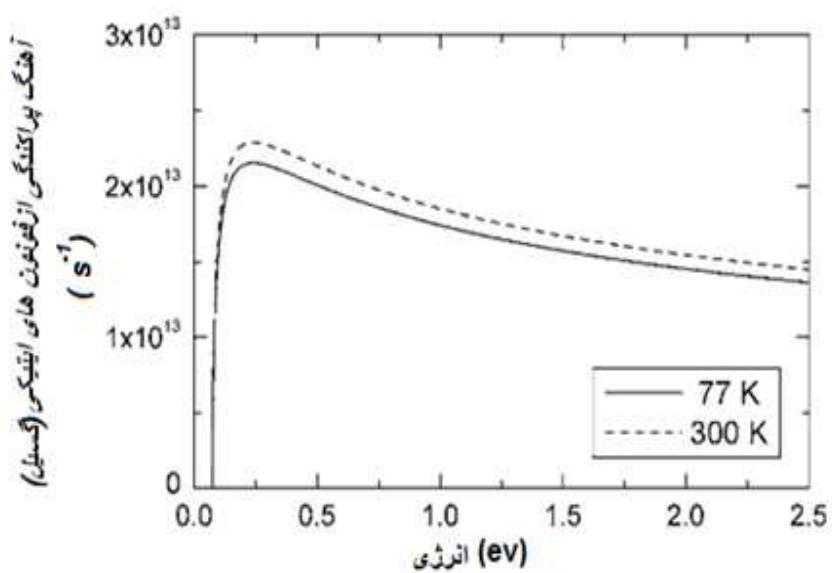
شکل (۱۸-۴)-وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از فونونهای اپتیکی قطبی در حالت جذب واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN .

در سال ۲۰۰۶، وی ام پلی کف^۱ و همکارانش به روش تجربی اثر دما بر پراکندگی از فونون های اپتیکی را در حالت گسیل در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN به روش MBE رشد داده بودند، مورد بررسی قرار دادند. نتایج بدست آمده توسط این گروه در شکل (۲۰-۴) نشان داده شده است، همانطور که در این شکل دیده می شود، با افزایش دما پراکندگی از فونون های اپتیکی هم افزایش می یابد. همچنین با زیاد شدن انرژی الکترونها پراکندگی از فونون های اپتیکی به طور سریع ابتدا افزایش یافته و سپس به طور نسبتاً آرام کاهش می یابد. این رفتار تقریباً در توافق با پراکندگی از فونون های اپتیکی در حالت گسیل در نمونه InN مطالعه شده در این کار می باشد. نتیجه می گیریم این رفتار با نتایج بدست آمده در این پایان نامه در توافق است [۳۰].

^۱. V.M.Polyakov



شکل (۱۹-۴)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از فونونهای اپتیکی در حالت گسیل واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN .

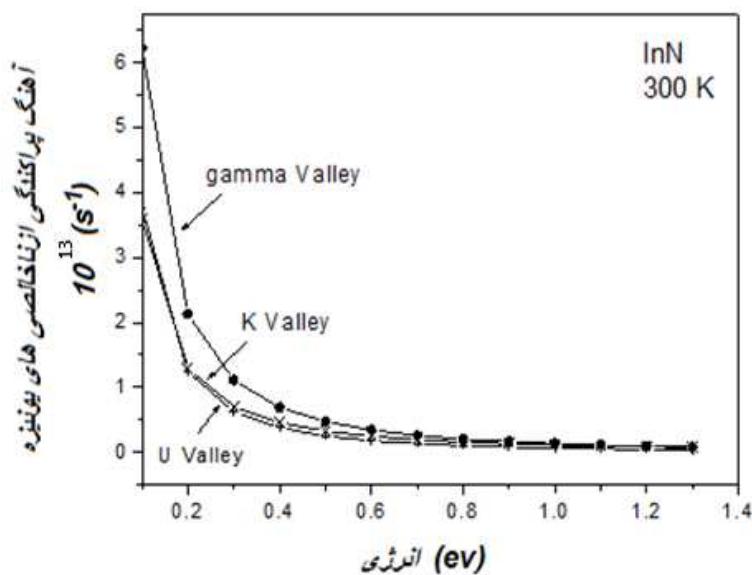


شکل (۲۰-۴)- وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از فونونهای اپتیکی قطبی در حالت گسیل واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای $[30] InN$.

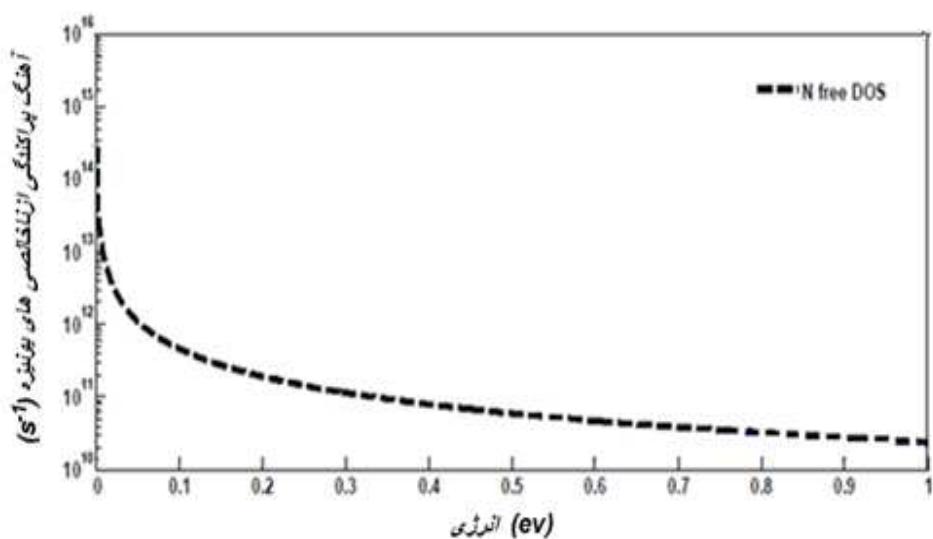
۴-۲-۴ پراکندگی الکترون ناشی از ناخالصی های یونیزه

در ابتدا پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه برای نمونه InN با استفاده از رابطه (۵۱-۲) محاسبه شده است . شکل (۲۱-۴) نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از اتم های ناخالصی را برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در دمای $300K$ برای این ترکیب نشان می دهد . نتیجه این بررسی نشان می دهد که پراکندگی ناشی از اتم های ناخالصی در درجه های فضایی K و U کمتر از پراکندگی در درجه مرکزی Γ است . همانطور که در رابطه (۵۳-۲) دیده می شود ، آهنگ پراکندگی ناشی از اتم های ناخالصی نسبت عکس با جرم مؤثر دارد . بنابراین با توجه به اینکه جرم مؤثر الکترونی در درجه های فضایی K و U نسبت به درجه مرکزی Γ در نیمرسانای InN بزرگتر است (جدول(۱-۲)) ، لذا انتظار داریم که آهنگ پراکندگی الکترون در این درجه ها کمتر از درجه مرکزی باشد .

پراکندگی الکترون ناشی از ناخالصیهای یونیزه به روش مونت کارلو توسط گروه نیکلاس و گیاتس برای ترکیب نیمرسانای $GaInNAs$ مطالعه شده است که نتایج آن در شکل (۲۲-۴) دیده می شود . مطالعه این گروه نشان می دهد که با افزایش انرژی الکترونها پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه بطور نمایی کاهش می یابد . رفتاری که در نمونه مطالعه شده در این کار نیز دیده می شود [۳۲].

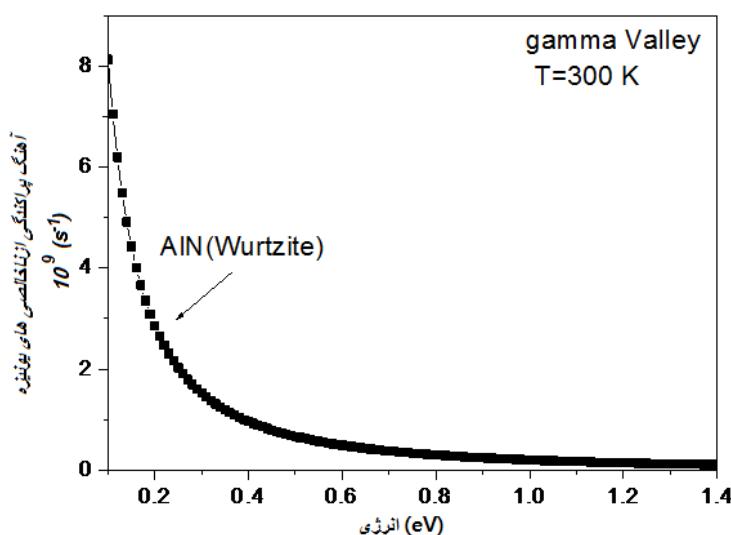


شکل (۲۱-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای InN در سه دره Γ و U و K .

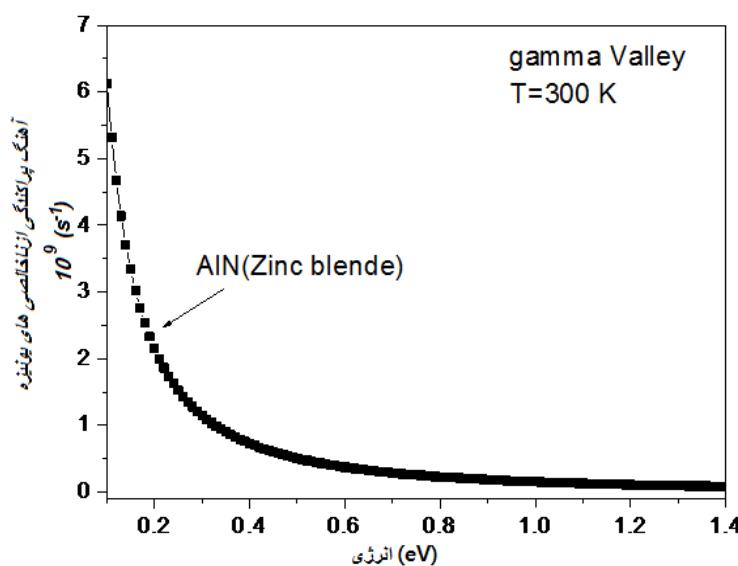


شکل (۲۲-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای [۳۲] $GaInNAS$.

آهنگ پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه برای نیمرسانی AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی Γ در دمای 300 K در شکل های (۲۳-۴) و (۲۴-۴) رسم شده است.



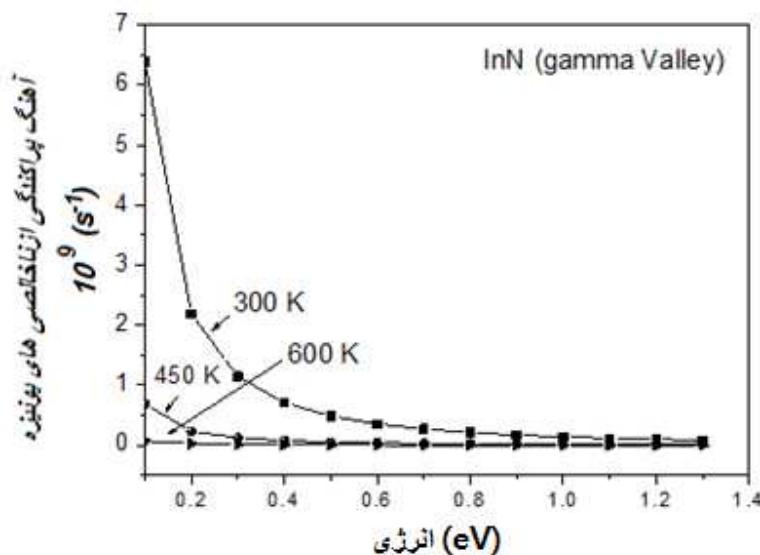
شکل (۲۳-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانی AlN با ساختار وورتسایت در دره مرکزی Γ [۷۰].



شکل (۲۴-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانی AlN با ساختار زینک بلند در دره مرکزی Γ [۷۰].

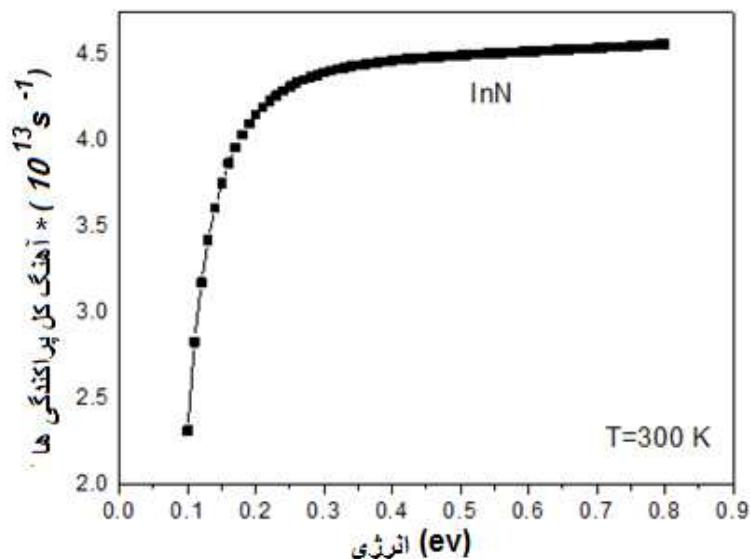
در شکل (۲۵-۴) نمودار تغییرات پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه برای الکترون های واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN و در حضور ناخالصی ها از مرتبه $10^{22} cm^{-3}$ بحسب دما به صورت تابعی از انرژی الکترونها رسم شده است.

این بررسی نشان می دهد که با زیاد شدن انرژی الکترونها، میزان پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه کاهش می یابد. این کاهش را می توان ناشی از زیاد شدن سرعت الکترون ها با افزایش انرژی و در نتیجه کاهش میزان برهم کنش الکترون ها با پتانسیل کولنی استثمار شده ناخالصی ها دانست. همچنین این بررسی نشان می دهد با افزایش دما در یک انرژی معین، پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه افزایش می یابد. افزایش دما می تواند ارتعاشات اتمهای شبکه و همچنین اتمهای ناخالصی را افزایش داده و در نتیجه باعث افزایش پراکندگی الکترون گردد.

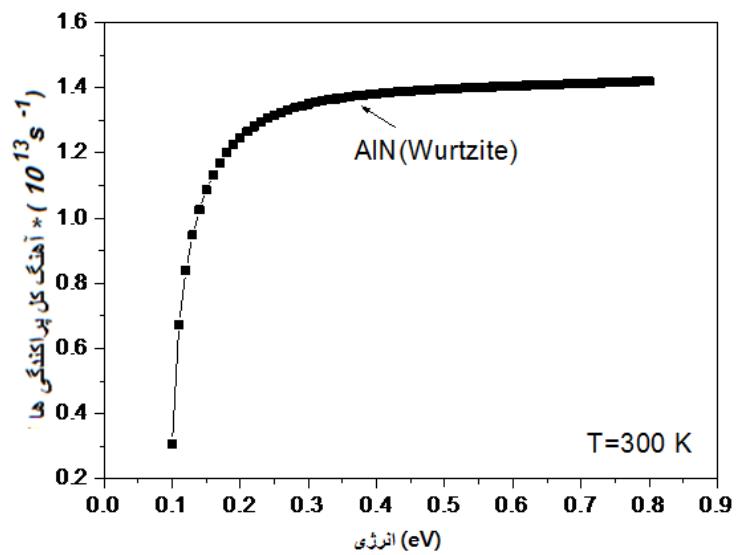


شکل (۲۵-۴)-وابستگی دمایی آهنگ پراکندگی از اتم های ناخالصی یونیزه واقع در دره مرکزی Γ در نیمرسانای InN .

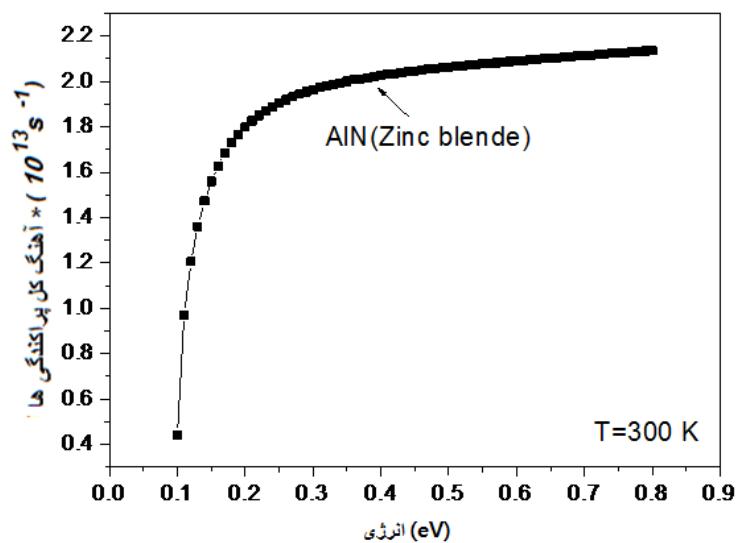
در شکل (۲۶-۴) و (۲۷-۴) و (۲۸-۴) نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی کل برای الکترونهای واقع در دره مرکزی Γ برای نیمرسانای InN با ساختار وورتسایت و AlN با ساختار وورتسایت و زینک بلند به صورت تابعی از انرژی الکترونها رسم شده است. همانطور که می بینیم با افزایش انرژی الکترونها ، این آهنگ افزایش می یابد تا به یک مقدار معینی می رسد . افزایش دما باعث افزایش انرژی الکترونها و سبب زیاد شدن آهنگ پراکندگی کل می شود .



شکل (۲۶-۴)-نمودار تغییرات آهنگ کل پراکندگی الکترون ها برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای InN



شکل (۲۷-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی کل الکترون ها برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای AlN با ساختار وورتسایت [۷۰].



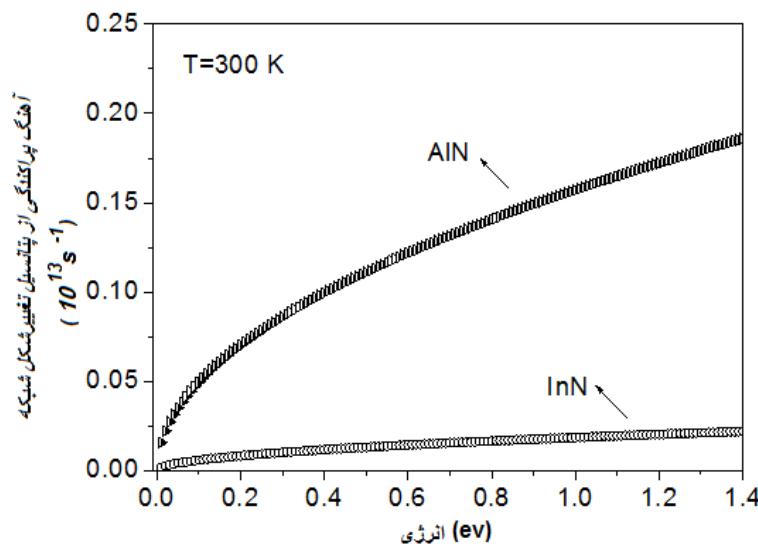
شکل (۲۸-۴)- نمودار تغییرات آهنگ پراکندگی کل الکترون ها برحسب تابعی از انرژی الکترون در نیمرسانای AlN با ساختار زینک بلند [۷۰].

۳-۴ مقایسه آهنگ های پراکندگی در دو نیمرسانی InN و AlN در ساختار وورتسایت و مقایسه آهنگ های پراکندگی نیمرسانی AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند

از آن جایی که پراکندگی ها عامل محدود کننده رسانندگی الکتریکی در ترکیبات نیمرسانی باشند، محاسبه آهنگ پراکندگی الکترون ها از عوامل مختلف از اهمیت خاصی برخوردار است. از جمله مهمترین عوامل پراکندگی الکترون ها می‌توان به پراکندگی ناشی از ارتعاشات شبکه (فونون های اپتیکی و آکوستیکی) و همچنین پراکندگی ناشی از حضور اتم های ناخالصی اشاره کرد. لذا در این بخش آهنگ های پراکندگی را برای ترکیبات نیمرسانی InN و AlN محاسبه و با یکدیگر مقایسه می‌کیم. پارامترهای ساختاری و الکتریکی این ترکیبات که در این بررسی مورد استفاده قرار گرفته اند، در جدول (۱-۲) اشاره شده اند. فرآیندهای پراکندگی که در این تحقیق در نظر گرفته شده اند عبارتنند از: پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه، پراکندگی پیزوالکتریک، پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی و پراکندگی از ناخالصی های یونیزه.

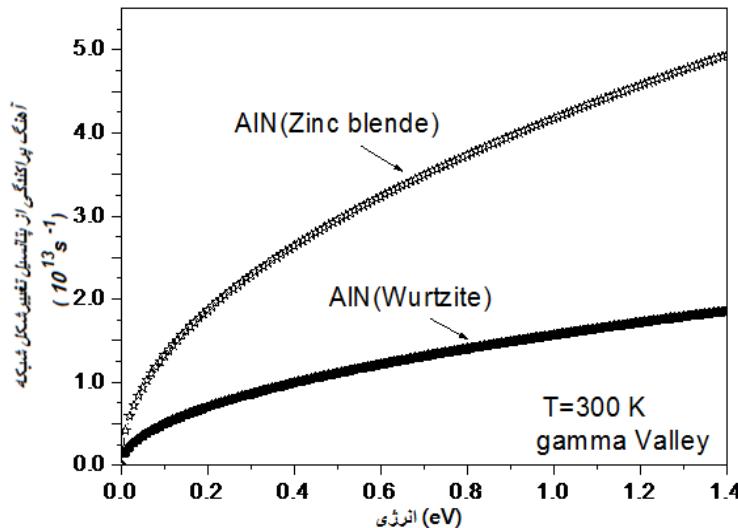
در شکل (۲۹-۴) نتایج حاصل از بررسی آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های آکوستیکی پتانسیل تغییرشکل شبکه را بر حسب تابعی از انرژی الکترون ها برای دو ماده InN و AlN ، در دمای اتاق (300 K) نشان داده شده است، همانطور که در معادلات (۲۴-۲) مشاهده می‌شود، ثابت پتانسیل شبکه و جرم مؤثر رابطه مستقیمی با آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه دارند و مقدار پارامتر

ثابت پتانسیل تغییر شکل شبکه و جرم مؤثر الکترون در AlN نسبت به InN بزرگر است، همانگونه که در این شکل دیده می شود، در هر دو ترکیب آهنگ پراکندگی همراه با افزایش انرژی، افزایش می یابد لیکن آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه در نیمرسانای AlN نسبت به InN بطور قابل توجهی بیشتر است.



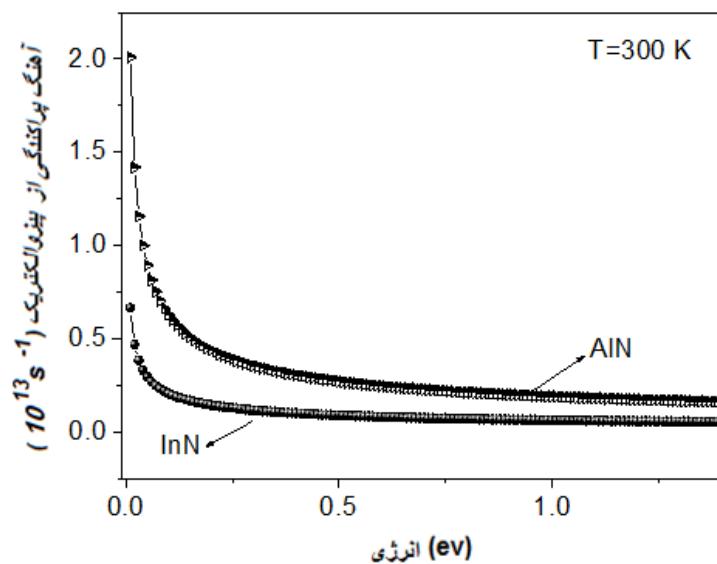
شکل (۲۹-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون از پتانسیل تغییر شکل شبکه برحسب انرژی در ترکیبات نیمرسانای InN و AlN .

مقایسه آهنگ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه بر حسب تابعی از انرژی الکترونها برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند انجام شده و در شکل (۳۰-۴) رسم شده است. این شکل نشان می دهد که آهنگ پراکندگی در ساختار زینک بلند بیشتر از ساختار وورتسایت است.



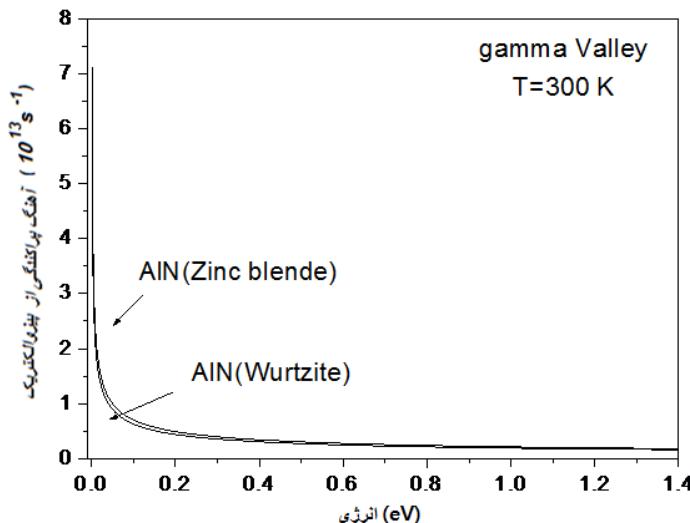
شکل (۳۰-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون ازپتانسیل تغییر شکل شبکه از پتانسیل تغییر شکل شبکه وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی Γ [۷۰].

در ادامه آهنگ پراکندگی از فونون های آکوستیکی پیزوالکتریکی بر حسب تابعی از انرژی الکترون برای ترکیبات نیمرسانای InN و AlN در دمای اتاق محاسبه شده است. نتایج این بررسی در شکل (۳۱-۴) نشان داده شده است. همانگونه که در این شکل دیده می شود آهنگ پراکندگی ناشی از اثربیزو الکتریک در نیمرسانای AlN قوی تر از InN است. دلیل این رفتار جرم مؤثر الکترونی و ثابت پیزوالکتریکی بزرگتر این نیمرسانا نسبت به نیمرسانای دیگر می باشد. زیرا همانگونه که معادله (۳۵-۲) نشان می دهد آهنگ پراکندگی پیزوالکتریکی با جرم مؤثر و ثابت پیزوالکتریک رابطه مستقیم دارد. با افزایش انرژی الکترون، آهنگ پراکندگی کاهش یافته و تقریباً ثابت می شود. با توجه به این مسئله می توان گفت که پراکندگی پیزوالکتریک فقط در حد انرژی های ضعیف (کمتر از حدود ۲۰۰ meV)، دارای اهمیت می باشد و در حد انرژی های الکتریکی زیاد اثر قابل توجهی در تراکم الکترون ها ندارد.



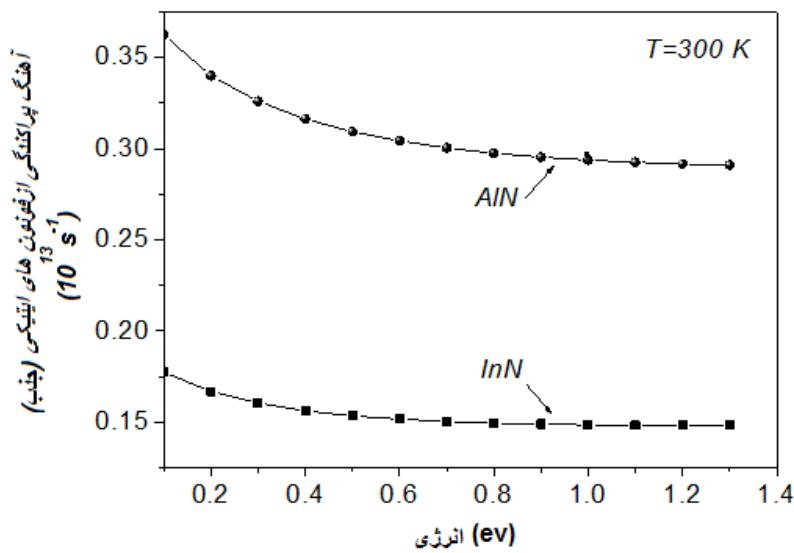
شکل (۳۱-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون از اثر پیزوالکتریک برحسب انرژی در ترکیبات نیمرسانای AlN و InN .

مقایسه آهنگ پراکندگی پیزوالکتریک برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند انجام شده و نتایج آن در شکل (۳۲-۴) نشان داده شده است . مقایسه این دو آهنگ پراکندگی نشان می دهد که آهنگ پراکندگی در ساختار زینک بلند اندکی بیشتر از آهنگ پراکندگی در ساختار وورتسایت است .



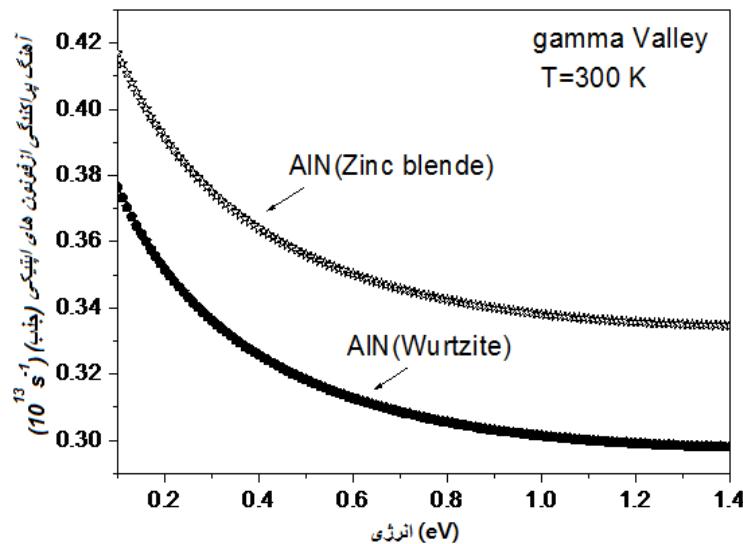
شکل (۳۲-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون از اثر پیزوالکتریک بر حسب انرژی برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلنڈ در دره مرکزی Γ [۷۰].

در شکل (۳۳-۴) نتایج حاصل از بررسی آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی را در حالت جذب فونون بر حسب تابعی از انرژی الکترون برای ترکیبات نیمرسانای InN و AlN در دمای اتاق داده شده است. همان طور که مشاهده می شود جذب فونون در هر سطح انرژی رخ می دهد. با افزایش انرژی آهنگ پراکندگی الکترونی تقریباً ثابت می شود که این مقدار ثابت برای هر ماده متفاوت است. این آهنگ پراکندگی به عوامل مختلفی همچون، ضریب گذردهی در فرکانس پایین، ضریب گذردهی در فرکانس بالا و نیز انرژی فونون اپتیکی بستگی دارد، که تأثیر این عوامل برای مقدار پارامترهای ترکیب AlN نسبت به InN بیشتر است.



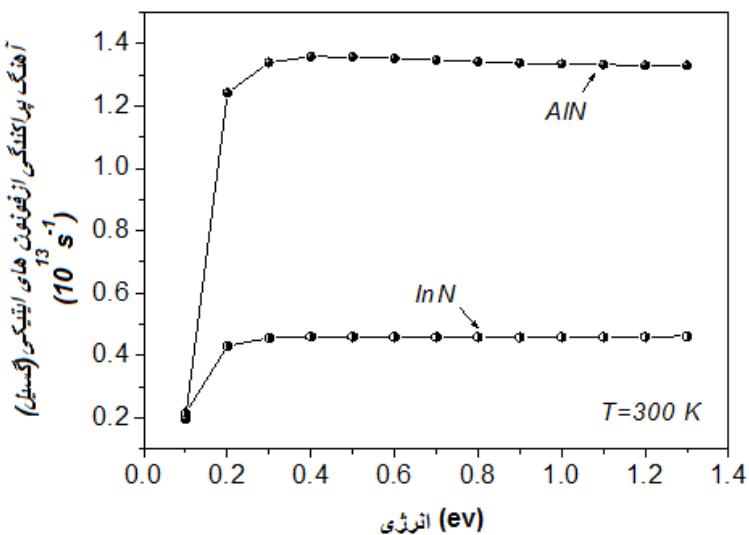
شکل (۳۳-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونونهای اپتیکی برحسب انرژی در حالت جذب برای ترکیبات نیمرسانای AlN و InN

در شکل (۳۴-۴) نیز آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی در حالت جذب برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند مقایسه شده اند، مقایسه آهنگ پراکندگی ها نشان می دهد که آهنگ پراکندگی برای این ترکیب با ساختار زینک بلند بیشتر از ساختار وورتسایت است.



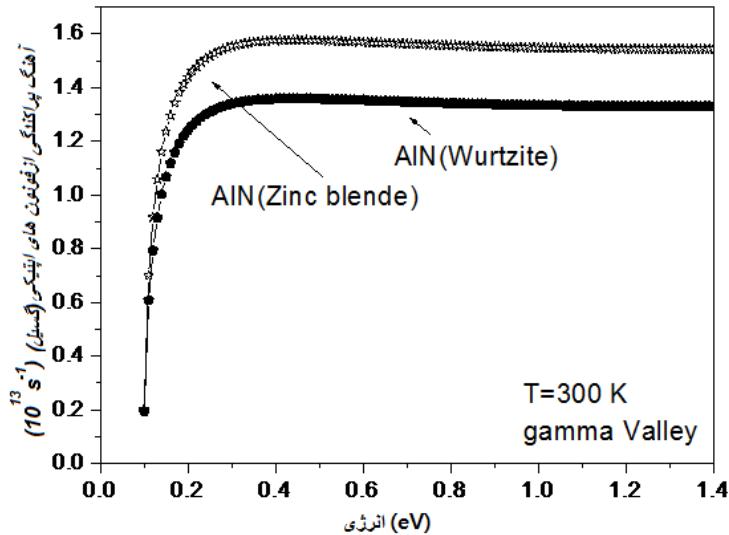
شکل (۳۴-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون از فونونهای اپتیکی برحسب انرژی در حالت جذب برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در درجه مرکزی Γ [۷۰].

شکل (۳۵-۴) نیز آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی برحسب تابعی از انرژی الکترون را این بار برای حالت گسیل فونون در ترکیبات نیمرسانای InN و AlN در دمای اتاق نشان می دهد . در این وضعیت برخلاف حالت قبل پراکندگی زمانی اتفاق می افتد ، که انرژی الکترون ها از انرژی فونون های اپتیکی بیشتر باشد . این آهنگ پراکندگی همانگونه که در معادله (۴۸-۲) در حالت گسیل مشاهده می شود ، به پارامترهای مختلفی از جمله ، ضریب گذردهی در فرکانس پایین ، ضریب گذردهی در فرکانس بالا و نیز انرژی فونون اپتیکی بستگی دارد که این مقدار پارامترها در AlN نسبت به InN بیشتر است . در نتیجه آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی در حالت گسیل فونون بطور قابل توجهی در AlN بیشتر از InN است .



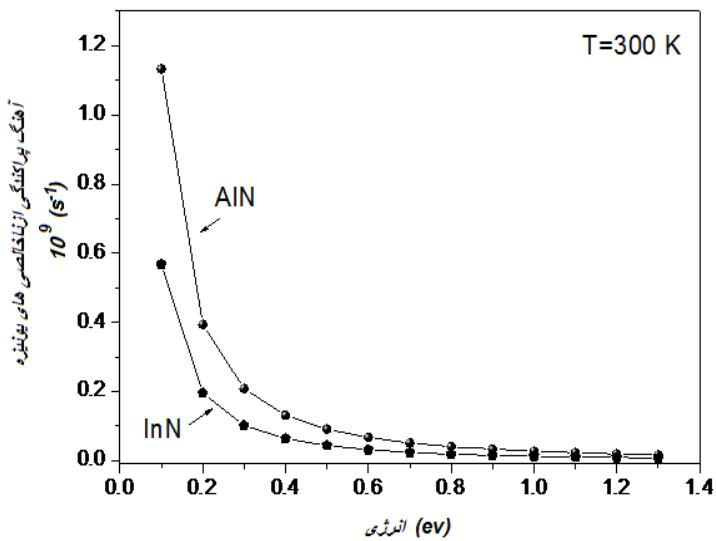
شکل (۳۵-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونونهای اپتیکی برحسب انرژی در حالت گسیل در دو نیمرسانای InN و AlN

در شکل (۳۶-۴) آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی در حالت گسیل برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند مقایسه شده اند، همانگونه که در این شکل مشاهده می شود آهنگ پراکندگی در ساختار زینک بلند بیشتر از ساختار وورتسایت این ترکیب می باشد.



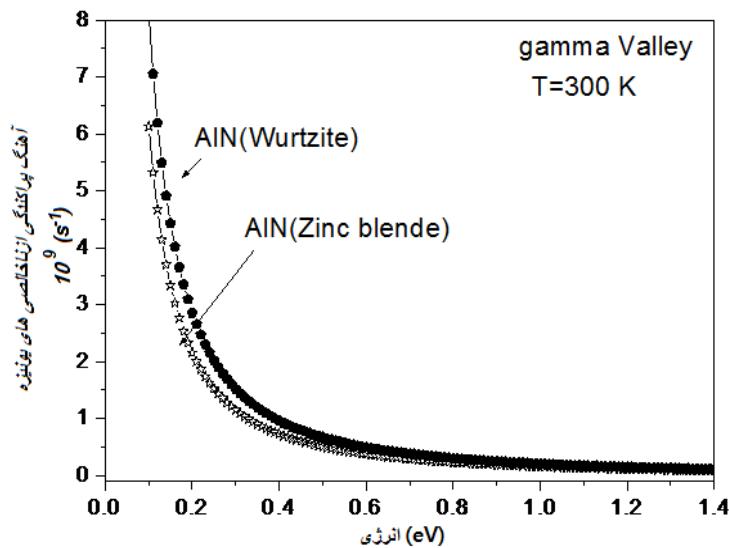
شکل (۳۶-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون از فونونهای اپتیکی برحسب انرژی در حالت گسیل برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی Γ [۷۰].

آهنگ پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون برای دو نیمرسانای AlN و InN در دمای اتاق در شکل (۳۷-۴) نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود در هر نیمرسانا با افزایش انرژی الکترون آهنگ پراکندگی کاهش می‌یابد. افزایش جرم مؤثر باعث کاهش انرژی جنبشی الکترون در بلور می‌شود و لذا الکترون مدت زمان بیشتری تحت تأثیر پتانسیل کولنی حاصل از اتم‌های ناخالصی قرار می‌گیرد. این مسئله باعث می‌شود که آهنگ پراکندگی از ناخالصی یونیزه افزایش یابد. در نتیجه آهنگ این پراکندگی در نیمرسانای AlN به علت بالاتر بودن مقدار جرم مؤثر آن بیشتر از InN می‌شود. با توجه به این بررسی می‌توان نتیجه گرفت که پراکندگی الکترون‌ها از ناخالصی‌های یونیزه تنها در انرژی‌های پایین فرآیند مهم و تأثیرگذاری در ترابری الکترونی است و با افزایش انرژی الکترون اثر آن به سرعت کاهش می‌یابد.



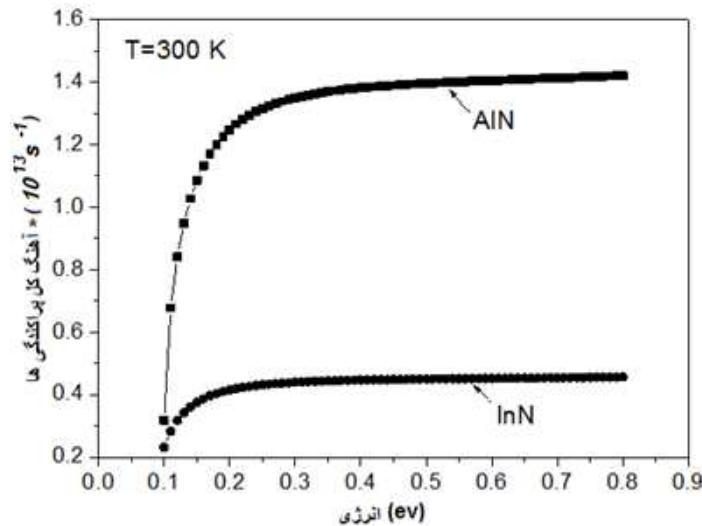
شکل (۳۷-۴)- آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه برحسب انرژی در حالت گسیل برای ترکیبات نیمرسانای AlN و InN .

شکل (۳۸-۴) آهنگ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند مقایسه شده اند ، می بینیم که آهنگ پراکندگی در ساختار وورتسایت بیشتر از ساختار زینک بلند این ماده است .



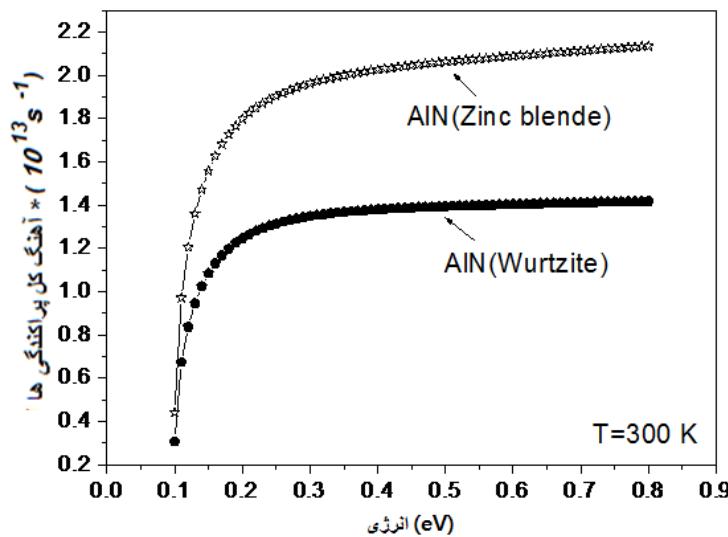
شکل (۳۸-۴)-آهنگ پراکندگی الکترون از ناخالصی های یونیزه برحسب انرژی برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در درجه مرکزی Γ [۷۰].

در ادامه آهنگ کل پراکندگی الکترون برای دو نیمرسانای InN و AlN در دمای اتاق در شکل (۳۹-۴) نشان داده شده است. مشاهده می شود در هردو نیمرسانا با افزایش انرژی الکترون آهنگ پراکندگی افزایش می یابد تا به مقدار معینی می رسد. به علت اینکه تا این مرحله تمام آهنگ های پراکندگی بررسی شده پراکندگی نیمرسانای AlN بیشتر از InN بود، در نتیجه آهنگ کل پراکندگی نیمرسانای AlN بیشتر از InN است.



شکل (۳۹-۴)- آهنگ پراکندگی کل الکترون ها برحسب انرژی برای دو نیمرسانای AlN و InN .

شکل (۴۰-۴) آهنگ پراکندگی کل برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند مقایسه شده اند ، همانطور که مشاهده می کنیم آهنگ پراکندگی کل در ساختار زینک بلند بیشتر از ساختار وورتسایت این ماده است .



شکل (۴-۴)- آهنگ پراکندگی کل الکترون‌ها بر حسب انرژی برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند در دره مرکزی Γ [۷۰].

۴-۴ مقایسه تحرک پذیری در حد میدان‌های الکتریکی ضعیف در ترکیبات نیمرسانای AlN و InN

مطالعه ضرایب تراپرد الکترونها در یک نیمرسانا به منظور تعیین خواص تراپردی به دلیل وجود نیروهای خارجی مانند: میدان‌های الکترومغناطیسی، گرادیان دما و چگالی الکtron انجام می‌شود. با مطالعه ضرایب تراپردی متفاوت یک نیمرسانا می‌توان در خصوص استفاده از آن در ساخت یک قطعه الکترونیکی تصمیم گیری بعمل آورد. یکی از ضرایب تراپردی نیمرسانا، ضریب تحرک است. ضریب تحرک الکترون در میدان الکتریکی را ضریب تحرک رانشی

(تحرک پذیری^۱) گویند . به منظور مطالعه رسانندگی الکتریکی مواد مختلف ، دانستن ضریب تحرک رانشی آنها ضروری است .

با در اختیار داشتن اطلاعات کافی درخصوص بدست آوردن تحرک پذیری دانستن ساختار بلوری ، ساختار نواری و آهنگ های پراکندگی مختلف در دو نیمرسانای InN و AlN ، که در فصلهای یک و دو به بررسی آن ها پرداخته شد لازم می باشد . حال می توانیم تحرک پذیری الکترونها را در این ترکیبات با استفاده از حل معادله بولتزمن به روش برگشت پذیر بررسی کنیم .

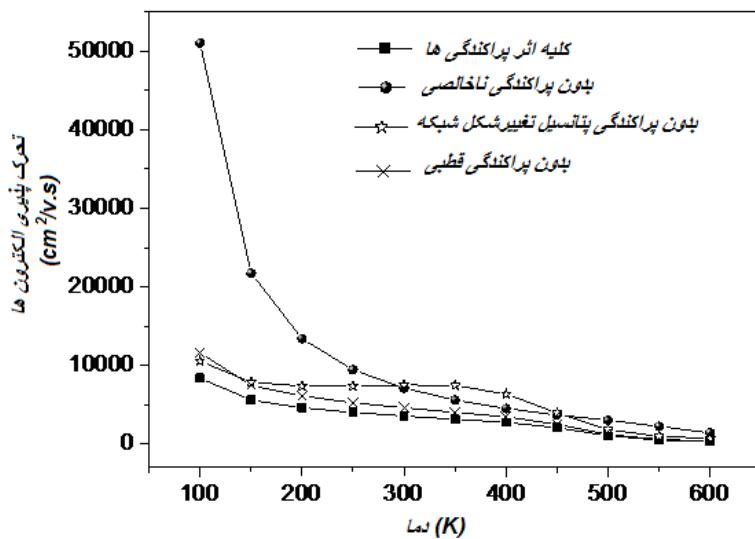
در این بخش نتایج حاصل از محاسبه که تحرک پذیری الکترون ها برای ترکیبات نیمرسانای AlN و InN با ساختار بلوری و ورتسایت و اثر تغییر پارامترهای مؤثر در تحرک پذیری حامل های بار نظری دما و چگالی حاملها ، مورد بحث و بررسی قرار گرفته است .

^۱.Mobility

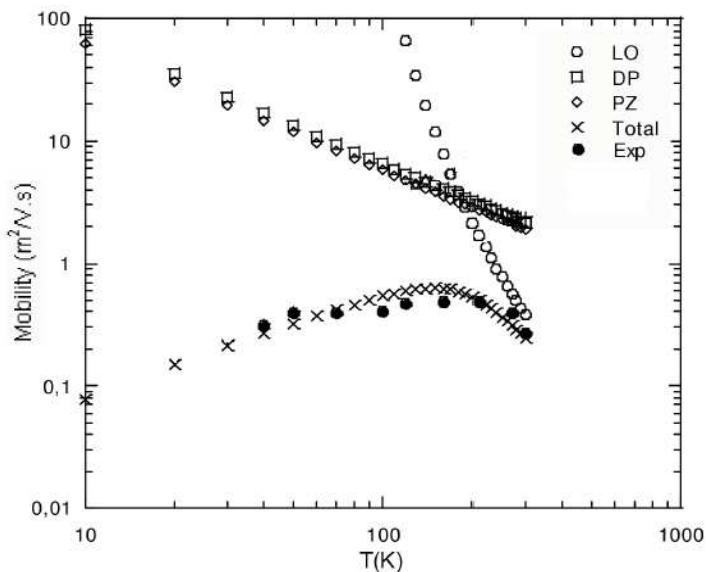
به منظور بررسی اثر پراکندگی الکترون‌ها بر رسانش الکتریکی مواد مورد مطالعه تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی حرکت پذیری الکترون‌ها بر حسب تابعی از دما بررسی و نتایج حاصل از آن در شکل‌های (۴۱-۴) و (۴۳-۴) گزارش شده است. همانطور که در این شکل‌ها دیده می‌شود برای هر دو ترکیب InN و AlN حرکت پذیری الکترون‌ها در غیاب پراکندگی از اتم‌های ناخالصی در دماهای پایین به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد. این بررسی بوضوح نشان می‌دهد که اثر پراکندگی از اتم‌های ناخالصی بر حرکت پذیری الکترون‌ها در دماهای پایین بسیار شدیدتر از عوامل دیگر است. علت این امر ممکن است به دلیل کوچک بودن انرژی جنبشی الکترون‌ها در دماهای پایین باشد که باعث افزایش اثر پتانسیل کولنی بین یون‌ناخالصی و الکترون می‌گردد و بنابراین آهنگ پراکندگی از اتم‌های ناخالصی افزایش می‌یابد. همچنین پراکندگی ناشی از اثر پیزوالکتریک که در دماهای پایین و پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی در دماهای بالا نیز اثر کمی بر حرکت پذیری الکترون در مقایسه با دیگر عوامل دارد.

در سال ۲۰۰۸، سیبل گوکدن^۱ اثر پراکندگی روی حرکت حاملهای بار در نیمرسانی InN به روش MBE رشد داده شده است و حرکت پذیری را با استفاده از اثر هال مورد بررسی قرار دادند. نتایج این بررسی در شکل (۴۲-۴) آمده است. همانطور که در این شکل می‌بینیم با افزایش دما برای پراکندگی‌های مختلف و همچنین پراکندگی کل حرکت حاملهای بار کاهش می‌یابند. همانطور که قبل اشاره شد با افزایش دما پراکندگی افزایش و در نتیجه حرکت کاهش می‌یابد. این رفتار با نتایج بدست آمده در این پایان نامه (شکل (۴۱-۴)) در توافق قابل قبولی می‌باشد [۳۶].

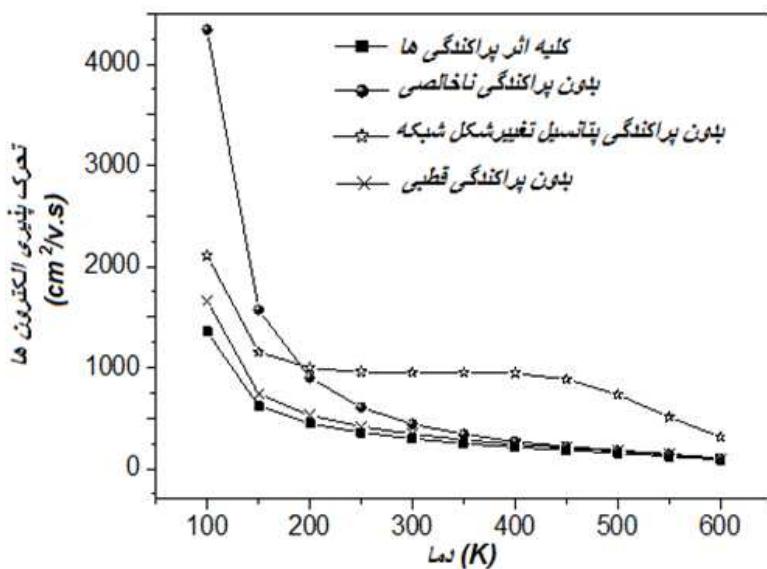
^۱. Sibel Gökden



شکل (۴۱-۴)- تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در غیاب برخی از پراکنده‌گی‌ها ، در نیمرسانای InN



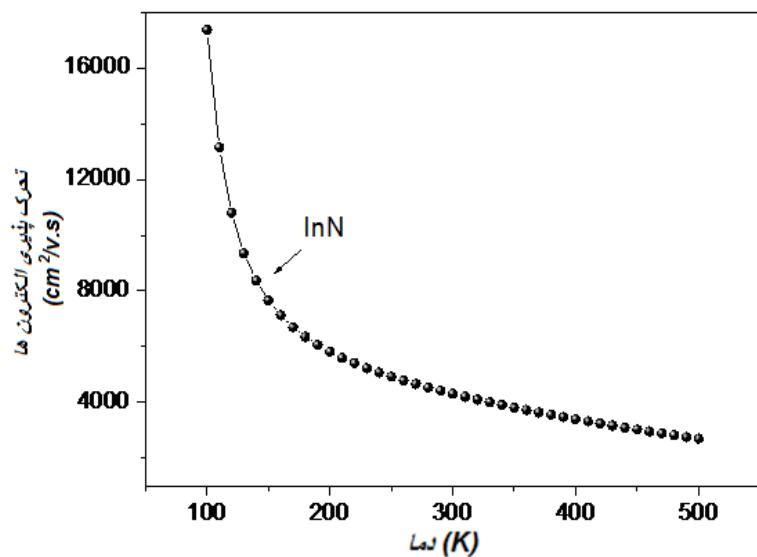
شکل (۴۲-۴)- تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در غیاب برخی از پراکنده‌گی‌ها ، در نیمرسانای InN [۳۶]



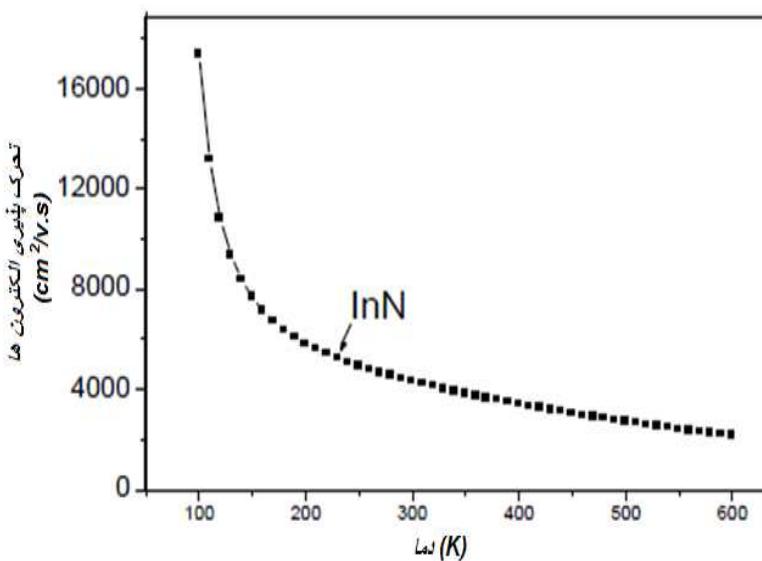
شکل (۴۳-۴)- تحرک پذیری الکترون برحسب دما در غیاب برخی از پراکنندگی ها ، در نیمرسانای AlN .

در سال ۲۰۱۱، ع. وطن خواهان^۱ و همکارانش با محاسبه تحرک پذیری الکترون به روش برگشت پذیر در دره مرکزی Γ برای نیمرسانای InN رفتار کاهشی که در شکل (۴۵-۴) می بینیم را نتیجه گرفتند . همانطور که در این شکل مشاهده می شود با افزایش دما تحرک پذیری کاهش می یابد . با افزایش دما پراکنندگی الکترونها افزایش می یابد ، در نتیجه تحرک پذیری کاهش خواهد یافت . این رفتار با نتایج بدست آمده در این پایان نامه (شکل(۴۴-۴)) در توافق است [۲۴].

^۱. A . Vatankhahan

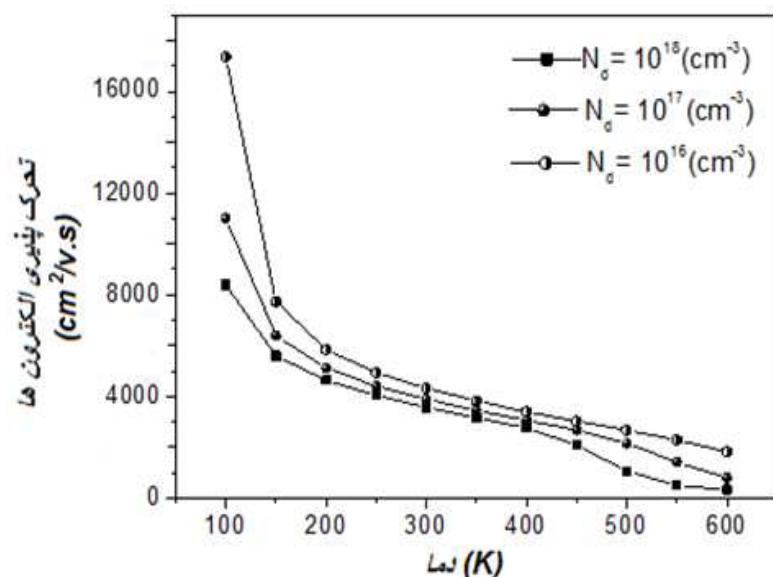


شکل (۴۴-۴) - تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در نیمرسانای InN

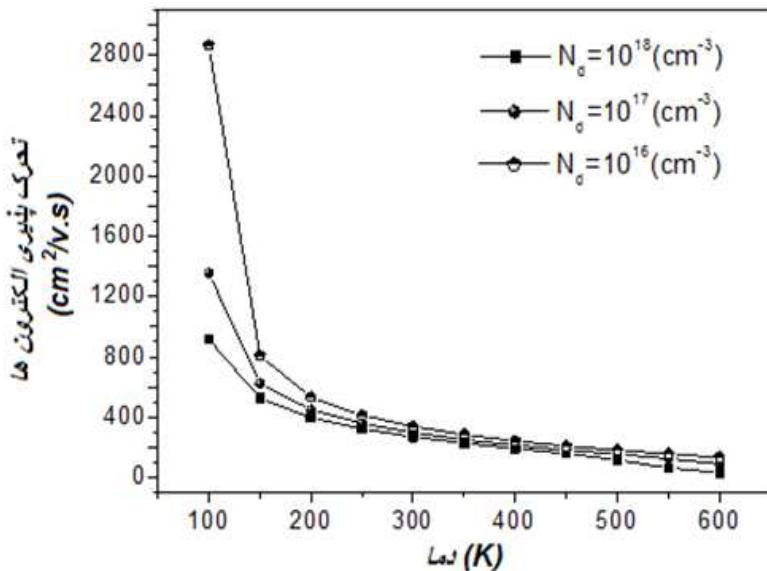


شکل (۴۵-۴) - تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در نیمرسانای InN [۲۴]

در ادامه اثر تراکم حامل های بار بر تحرک پذیری در دماهای مختلف برای ترکیبات InN و AlN به روش برگشت پذیر بررسی و با یکدیگر مقایسه شده اند . نمودار تغییرات تحرک پذیری الکترونها بر حسب دما به ازای تراکم های الکترونی مختلف در شکل های (۴۶-۴) و (۴۷-۴) نشان داده شده است . نتایج این بررسی نشان می دهند که در هر دو نمونه InN و AlN با کاهش تراکم الکترونی تحرک پذیری در تمام بازه دمایی اندازه گیری شده بیشتر می شود و با افزایش دما ($T > 150$ K) تحرک پذیری به طور قابل ملاحظه ای کاهش می یابد . علت کاهش تحرک پذیری با افزایش دما ممکن است به دلیل شروع فرآیند پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی باشد .



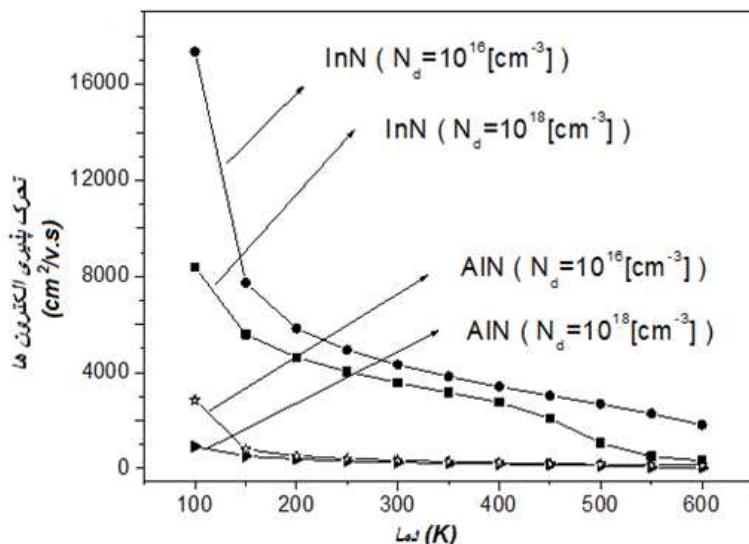
شکل (۴۶-۴)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب دما به ازای تراکم های الکترونی مختلف در نیمرسانای InN .



شکل (۴۷-۴)- نمودار حرکت پذیری الکترون ها بر حسب دما به ازای تراکم های الکترونی مختلف در نیمرسانای AlN .

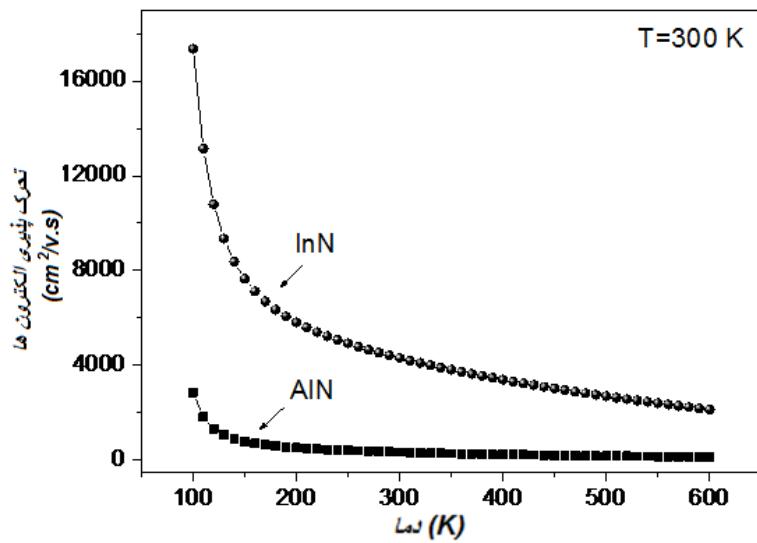
با افزایش دما از $K = 150$ تا 600 حرکت پذیری الکترون ها به سرعت به ازای تمام تراکم های الکترونی در نظر گرفته شده کاهش می یابد . زیرا با افزایش دما ، باعث حضور و افزایش انرژی فونون ها شده و در نتیجه باعث برهم کنش قوی بین الکترونها و فونون ها می گردد که نتیجه آن افزایش آهنگ پراکندگی و نهایتاً کاهش حرکت پذیری الکترون ها است . به منظور مقایسه حرکت پذیری دو نیمرسانای InN و AlN در تراکم های الکترونی یکسان 10^{16} cm^{-3} و 10^{18} cm^{-3} نمودار حرکت پذیری بر حسب دما برای این دو ماده در شکل (۴۸-۴) آمده است . همانطور که در این شکل دیده می شود در یک تراکم الکترونی یکسان حرکت پذیری نیمرسانای InN بیشتر از AlN می باشد . این مسئله می تواند به دلیل عوامل مختلفی باشد که یکی از آنها جرم مؤثر الکترونی بیشتر AlN نسبت به InN است . همانطور که قبلان نیز اشاره شده است افزایش جرم مؤثر الکترون موجب افزایش لختی حامل بار و در نتیجه کاهش شتاب

الکترون در یک میدان الکتریکی یکواخت می گردد . این مسئله در نهایت می تواند منجر به کاهش تحرک پذیری حامل بار در حضور میدان الکتریکی گردد .



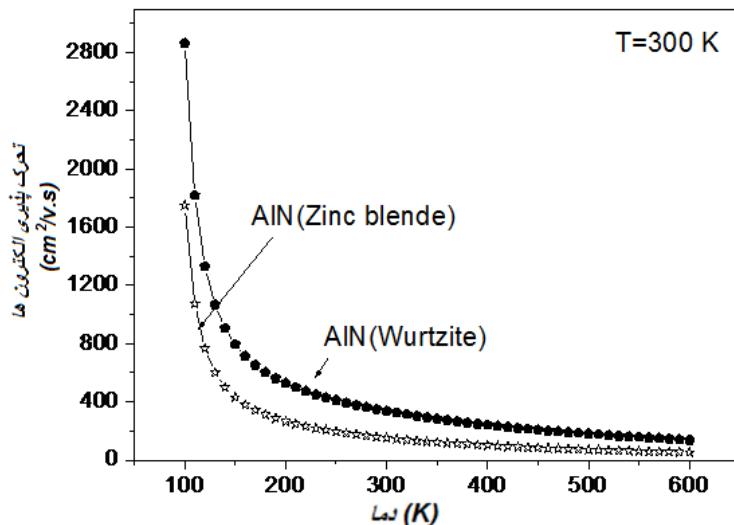
شکل (۴۸-۴)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب دما در تراکم های الکترونی مختلف در ترکیبات نیمرسانای AlN و InN

در این کار تحرک پذیری الکترون در دو نیمرسانای InN و AlN بررسی شده است . در شکل (۴۹-۴) منحنی تحرک پذیری الکترون بر حسب دما برای این دو ترکیب نشان داده شده است. همانگونه که در این شکل دیده می شود تحرک پذیری نیمرسانای InN بیشتر از AlN است. در قسمت های قبل نتیجه گرفتیم که پراکندگی InN بیشتر از AlN است . چون هر چه پراکندگی الکترون ها بیشتر باشد تحرک پذیری آن ترکیب کمتر می شود و در تراکم الکترونی نقش کمتری دارد .



شکل (۴-۴۹)- مقایسه تحرك پذيرى الكترون بحسب دما در دو نیمرسانای InN و AlN .

شکل (۴-۵۰) تحرك پذيرى الكترون بحسب دما برای نیمرسانای AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند رسم شده است . همانطور که در این شکل مشاهده می شود تحرك پذيرى الكترون ها در ساختار وورتسایت بيشتر از ساختار زینک بلند اين ماده است .



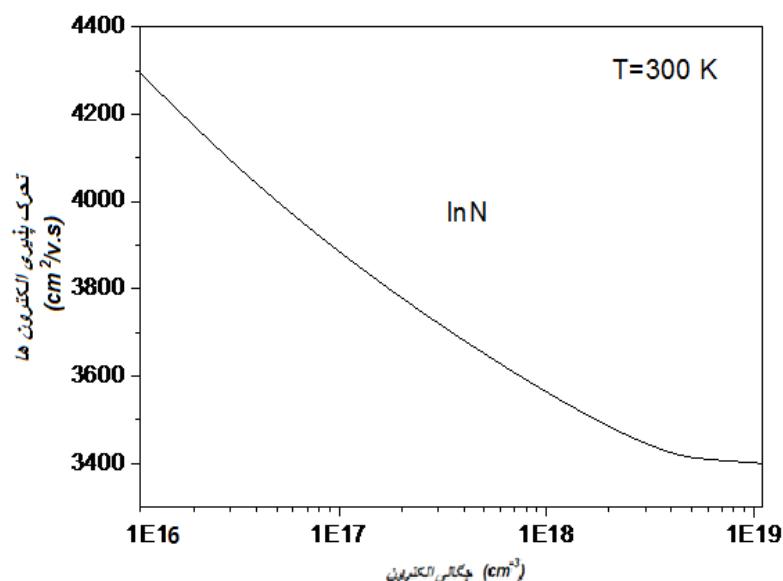
شکل (۵۰-۴)- مقایسه تحرک پذیری الکترون بر حسب دما در نیمرسانی AlN در دو ساختار وورتسایت و زینک بلند [۷۰]

در این مطالعه همچنین تحرک پذیری حامل های بار بر حسب تراکم الکترونی در دو ماده InN و AlN محاسبه شده است . نتایج این بررسی در شکل (۵۱-۴) و شکل (۵۳-۴) نشان داده شده است . همانگونه که در این شکل دیده می شود و ما انتظار داریم با افزایش تراکم الکترونها به دلیل افزایش فرآیندهای پراکندگی تحرک پذیری در هر دو ماده کاهش می یابد .

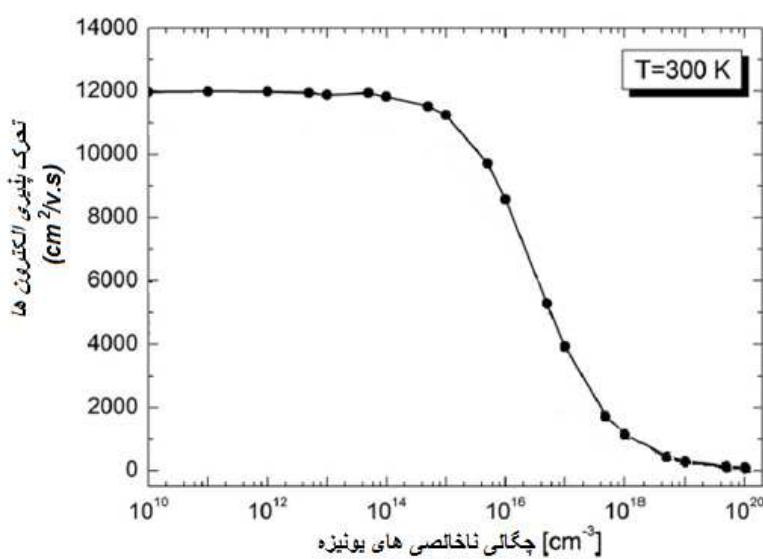
در سال ۲۰۰۹، وی . ام . پلی کف ' خواص تراپرد الکترونی را در نیمرسانی InN به روش شبیه سازی مونت کارلو در دره مرکزی Γ ، در دمای اتاق را مورد بررسی قرار دادند . در این کار رفتار تحرک حاملهای بار بر حسب چگالی ناخالصی یونیزه مطالعه شده است . نتایج این بررسی در شکل (۵۲-۴) نشان داده شده است . همانگونه که در این شکل مشاهده می کنیم با افزایش چگالی ناخالصی های یونیزه تحرک پذیری کاهش می یابد . گستره ناخالصی های

' . V. M. Polyakov

یونیزه که در آن سیری نزولی مشاهده می شود در بازه 10^3 cm^{-3} تا 10^{16} cm^{-3} می باشد که این رفتار با نتایج بدست آمده در این پایان نامه (شکل (۵۱-۴)) در توافق است [۲۹].

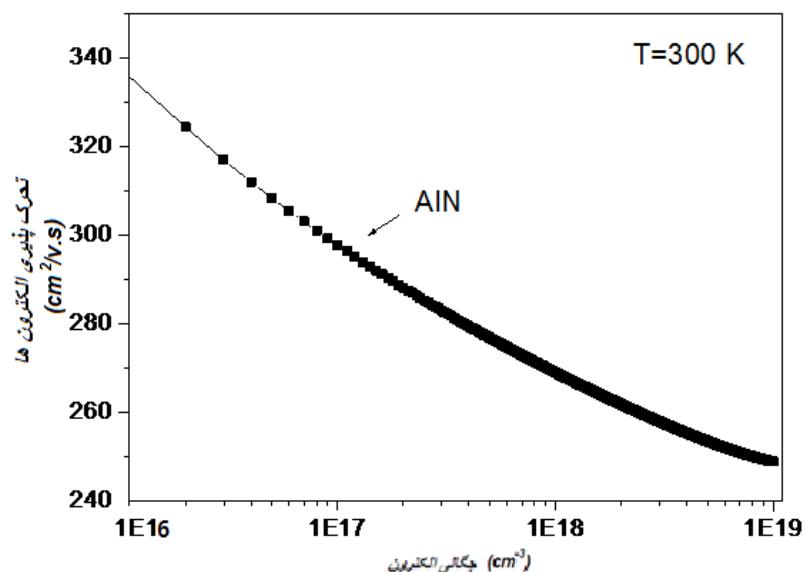


شکل (۵۱-۴)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها برحسب چگالی الکترون ها در نیمرسانای InN



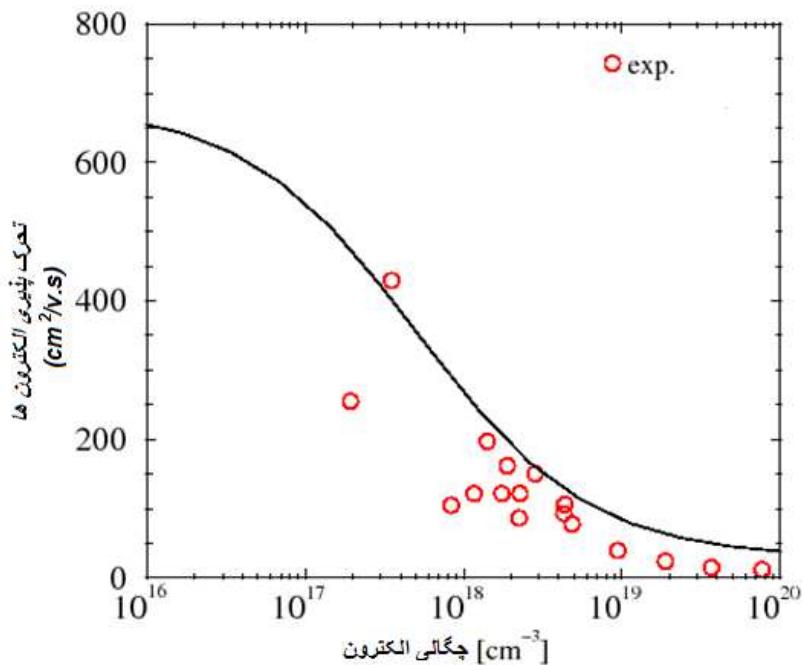
شکل (۵۲-۴)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها برحسب چگالی ناخالصی های یونیزه در نیمرسانای InN [۲۹]

در سال ۲۰۱۱، تانیاسو^۱ و همکارانش تحرک حاملهای بار در نیمرسانای AlN به روش شبیه سازی مونت کارلو در دره مرکزی Γ ، در دمای اتاق بر حسب چگالی الکترونها مورد مطالعه قرار دادند. نتایج این بررسی در شکل(۵۴-۴) نشان داده شده است. همانطور که در این شکل مشاهده می شود با افزایش چگالی الکترونها تحرک پذیری کاهش می یابد. نتایج بدست آمده در این پایان نامه در توافق با گزارش کار می باشد [۶۹].



شکل (۵۳-۴)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب چگالی الکtron در نیمرسانای AlN .

^۱.Taniyasu



شکل (۵۴-۴)- نمودار تحرک پذیری الکترون ها بر حسب چگالی الکترون در نیمرسانای AlN [۶۹].

۵-۴ نتیجه گیری کلی :

با استفاده از حل معادله بولتزمن ، بسیاری از خواص تراپردنی الکترون در نیمرساناهای ، به دست می آید . این خواص از طریق محاسبه پراکندگیها و تحرک پذیری الکترون در نیمرسانان قابل اندازه گیری است .

از آنجایی که حل معادله بولتزمن پیچیده بوده و حل آن بسیار مشکل است ، با تهیه نرم افزاری که قادر به انجام این کار باشد ، می توان به راحتی معادله مذکور را حل و از بسیاری از خواص تراپردنی نیمرسانا ، آگاهی یافت . همچنین می توان اثر عوامل دیگری چون دما ، چگالی ، جرم مؤثر الکترون و ... را در تحرک پذیری الکترون محاسبه و نتایج جالب توجه دیگری را بدست آورد . همچنین با استفاده از این برنامه می توان ترکیبات دیگری از سایر گروههای جدول

تناوی را از نظر خواص ترا برد الکترون مورد بررسی قرارداد و از خواص منحصر بفرد آنها در صنعت الکترونیک بهره گرفت . برای محاسبه ساختار نواری از روش شبیه پتانسیل استفاده شده است . در این محاسبات فرآیندهای پراکندگی در نظر گرفته شده شامل پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی و فونون های آکوستیکی و نیز پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه می باشد .

با توجه به محاسبات و تحقیقات انجام شده بر روی دو نیمرسانای InN و AlN می توان مطالب زیر را در مورد خواص ترا بری این ترکیبات بیان نمود .

۱-در میدان های الکتریکی ضعیف تنها الکترون های واقع در دره مرکزی Γ در ترا بری الکتریکی نقش دارند. زیرا تقریباً تمامی الکترون ها تنها دره مرکزی را اشغال می کنند .

۲-در میدان های الکتریکی پایین ، پراکندگی پیزو الکتریک و پراکندگی از ناخالصی های یونیزه نقش بسزایی دارند و نمی توان از آنها چشم پوشی کرد .

همچنین نتایج محاسبات برای تحرک پذیری الکترون ها و بستگی آن به دما و تراکم اتم های ناخالصی برای ساختار وورتسایت InN و AlN در حد میدان های الکتریکی ضعیف نشان داده شد . با توجه به شکل های بدست آمده و محاسبات انجام گرفته ، می توان نتیجه گرفت :

۱- نیمرسانای InN دارای تحرک پذیری بالا در مقایسه با نیمرسانای AlN است ، که دلیل آن کوچک تر بودن جرم مؤثر الکترونی این نیمرسانا می باشد.

۲- با افزایش دما تحرک پذیری کاهش می یابد . زیرا با افزایش دما ، آهنگ پراکندگی از فونون ها افزایش یافته و از طرفی افزایش دما باعث افزایش انرژی فونون ها هم می شود . چنین

افرایشی در انرژی فونون ها باعث ایجاد یک برهم کنش قوی بین الکترون ها و فونون ها می شود که نتیجه آن افزایش آهنگ پراکندگی و نهایتاً کاهش تحرک پذیری الکترون ها می باشد.

۳- با افزایش تراکم الکترون ها تحرک پذیری کاهش می یابد ، زیرا با افزایش تعداد الکترون ها تعداد مراکز ناخالصی یونیزه نیز افزایش می یابد . در نتیجه تعداد دفعاتی که الکترون پتانسیل کولنی را احساس می کند بیشتر می شود و لذا آهنگ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه افزایش می یابد و تحرک پذیری الکترون ها کاهش می یابد .

۴-در دماهای پایین فرآیند پراکندگی غالب پراکندگی از ناخالصیهای یونیزه است . در نتیجه در ترکیبات نیمرسانی مورد بررسی ، این فرآیند پراکندگی عامل تأثیرگذار در کاهش تحرک پذیری می باشد .

۵-با افزایش دما ارتعاشات گرمایی شبکه بلور هم افزایش می یابد . مهمترین عامل محدود کننده تحرک پذیری الکترون ها در دماهای بالا ، پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی است ، که باعث کاهش تحرک پذیری در ازای افزایش دما می شود . ولی با کاهش دما از اثر آن کاسته می شود بطوری که در دماهای پایین تقریباً دماهای زیر K_{100} ، می توان از اثر آن صرفنظر کرد .

۶-در دماهای بالا پراکندگی پیروالکتریک اثربار ملاحظه ای در تحرک پذیری الکترون ها ندارد و تنها در دماهای پایین بر تحرک پذیری تأثیر می گذارد .

مراجع

¹-F. Litimein, B . Bouhafs ,Z. Dridi and P. Ruterana (१९९२).” The electronic structure of wurtzite and zincblende AlN : an ab initio comparative study “ . **New Journal of Physics** ४- ६४.१-६४.१२ .

²-Ashcroft N.W.,mermain , N.D.(१९७१) ,”**solid state physics** ” ,Harcourt college .

³-Lundstrom M. .(१९८०) . “fundamentals of carrier transport” ,Cambridge university press .

४-Charles Kittel ,Introduction to solid state physics , Wiley Eastern Limited ,(१९८३) .

५-Martienssen W . , Warlimant H . , (१९९०) ,” Springer Hand book of condensed matter and materials Data “ , Springer .

६-Singh J.(१९९०) ,”**Semiconductor Optoelectronics** “ , McGRAW –HILL .

७-Jacoboni .C .Lugli P.(१९८१) ,”The Monte Carlo Method for Semiconductor Devices Simulation “ Springer –Verlog .

८- Jacoboni C.,Reggiani L.,(१९९३) , “ The Monte Carlo Method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to Coavalant materials”. **Reviews of Modern physics** , vol ५५ , No ३, ६४४

९- Kejia _Albert_ Wang,^a Yu Cao, John Simon, Jing Zhang, Alexander Mintairov, James Merz, Douglas Hall, Thomas Kosel, and Debdeep Jena .(१९८१) , “Fundamentals of semiconductor theory and device physics” - **APPLIED PHYSICS LETTERS** ५१, P1६२११-३.

१०-Kalsall R.W , (१९९०) , “The Monte Carlo method for semiconductor device simulation” , IEEE . VOL .०४ , NOS . १-१० ,P . १०२४ – १०३७.

११-S.Dhare , s .Ghosh ; (१९९१) . “Low field electron transport in GaN “ ; **J .Appl . phys .** ८७,०.

१२- C. M. wolf , N. Holonak , G. E .Stillman ; “physical properties of semiconductors” ;**Prentice-Hall** ,New Jersey (१९८१).

१३-W.Fawcett ,A . D .Boardam , S . Swain ; “Monte Carlo determination of electron transport properties in SiC “ ; **J.Phys. Chem .Solids** ३१(१९७०).

۱۴-Sibel Goken .” Scattering Mechanisms in InN “ (۲۰۰۸) . **Chiness Journal of Physics** . VOL . ۴۶ , NO . ۲ ,P ۱۴۵.

۱۵-F M ABOU EL-ELA and BMEL-ASSY .”Electron transport in Wurtzie InN “ . **Indian Academy of Sciences** . VOL. ۷۹,NO . ۱ (۲۰۱۲) . P ۱۲۵ – ۱۳۶.

۱۶-Ashcroft , Neil W.,Solid state physics , ۱۹۷۶ saunders college publishing .

۱۷-اس. ام. زی، فیزیک و تکنولوژی قطعات نیمرسانا ، ترجمه غلامحسین سدیر عابدی، ۱۹۸۵،
چاپ مرکز نشر دانشگاهی ، چاپ اول ، تهران .

۱۸-H . Morkoc ; (۱۹۹۹). “Semiconductor Physics and Devices “ Springer – Verlag. ۱۷۴.P۵۶۶-۵۷.

۱۹-S.A YDOGU ، M . AKARSU . (۲۰۰۴) .“ Numerical calculation of the electron mobility of GaN semiconductor compound “ .**Paper Presented At The ۹ th International Balkan Workshop On Applied Physics** , Constanta , Romania , VOL .۵۰ , NOS . ۹-۱۰ ,P . ۱۰۴۷ – ۱۰۵۳.

۲۰-Matienssen W . , Warlimant H . ,(۲۰۰۵) , “ Springer Hand Book Of Condeenced Matter And Material Data” , **Springer** .P۶۴-۶۸.

۲۱-N .A.Masyukov and A.V.Dmitriew (۲۰۱۱) “Hot electron in wurtzite indium nitride” . **Journal of Applied Physics** ۱۰۹, ۰۲۳۷۶.

۲۲-H.Arabshahi, (۲۰۱۲).” Modeling low field electron mobility in group III Nitride material” , **computer science and application** ,VOL .۱ , NO .۱.

۲۳-J.Graul,O,Semchinova and Raman scattering in hexagonal GaN and AlN “. **Physical Review B**, Volume ۵۸,Number ۱۹(۱۹۹۸).

۲۴- H.Arabshahi, A.Vatan-khahan and M.H.Tayarani . (۲۰۱۱). “Comparison of low field electron transport properties in InN and GaN semiconductors by solving Boltzmann equation using iteration model “ .**International Journal of Science and Advance Technology**. (ISSN ۲۲۲۱-۸۳۸۶).

۱۰-S.Loughin and R.H.French , (۱۹۹۳) .“electronic structure of AlN :theory and experiment”. **American Institute of physics** . ۰۰۲۱-۸۹۷۹/۲۰۰۶/۹۹(۱۱) /۱۱۳۷۰.

۱۱-Hiroyuki FUKUYAMA .(۲۰۰۱) . “Innovative crystal growth processes of nitride semiconductors based on their physical chemistry”. **Funding program for next Generation world-leading Reserches** –Institution : Tohoku University.

۱۲- Fabio Bernardini and Vincenzo Fiorentini . “Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V Nitrides “ **arXiv : cond – mat /۹۷۰۵۱۰ v۲** .

۱۳- Cloves G.Rodrigues /Aurea R.Vasconcellos/Roberto Luzzi . “Non-linear electron mobility in N-Doped III-Nitrides” . **Brazilian Journal of Physics** ,junio , ano /VOL. ۳۶,numero ,۲A – PP. ۲۵۰-۲۵۷.

۱۴- V.M .Polyakov , F .Schwietz , F.Fuchs , J. Furthmuller and F.Bechstedt .” Low -field and high-field electron transport in Zincblende InN “ **Applied Physics Letters** ۹۴, ۰۲۲۱۰ (۲۰۰۹).

۱۵- V.M .Polyakov and F.Schwierz : (۲۰۰۷) “Nonparabolicity effect on bulk transport properties in wurtzite InN “ **American Institute of physics** . ۰۰۲۱-۸۹۷۹/۲۰۰۶/۹۹(۱۱) /۱۱۳۷۰.

۱۶- Yu . V. Zhilyaev , V.V Rossin ,T .V. Rossina and V.V Travnikov (۱۹۹۱)- **American institute of Physics** . *Zh . Eksp . Tear . Fiz .* ۹۴, ۱۲۴۱-۱۲۵۳.

۱۷- Nikolaos Vogiatzis , Ying Ning Qiu and Judy M.Rrison . (۲۰۰۸).”Carrier transport study in GaInNAs material using Monte-Carlo method” -**SPIE Digital Library** – VOL. ۶۹۹۷V-۱.

۱۸- S. AYDOĞU, M. AKARSU and Ö. ÖZBA^a. (۲۰۰۰). “NUMERICAL CALCULATION OF THE ELECTRON MOBILITY OF GaN SEMICONDUCTOR COMPOUND” . **Paper presented at the ۹th International Balkan Workshop on Applied Physics**, Constanța, Romania . Rom. Journ. Phys., Vol. ۴۵, Nos. ۹-۱۰, P. ۱۰۴۷-۱۰۵۳, Bucharest.

۳۴- H.Arbshahi , M.Rezaee Rokn-Abadi , F.Badieyan and Z.Eslami Moghadam .(۲۰۱۲) ,” steady -state and Transient electron transport with in Bulk III-V Nitride semiconductors using and updated semiclassical three-valley Monte -Carlo method” **Advances in applied science research** , ۱(۱),pp: ۱۹-۲۵.

۳۵- Janardan Kundu¹, C.K. Sarkar² and P.S. Mallick¹ , (۲۰۰۷) . “Calculation of electron mobility and effect of dislocation scattering in GaN ” . **Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics**. V. ۱۰, N ۱. P. ۱-۴.

۳۶- Sibel Gőkden. (۲۰۰۸) .“ Scattering mechanisms in InN ”. **The physics society Chinese Journal of Physics** . VOL. ۴۶,NO .۲.

۳۷-R.E.Jones ,H.C.M.van Genuchten , K.M .YU ,W . Walukiewicz, S.X.Li . (۲۰۰۸) .” Defect dopping of InN ”. **Lawrence Berkeley National Laboratory** . Fiz . ۱۰۰ , ۱۲۴۲-۱۲۵۴.

۳۸- V.M .Polyakov , F .Schwietz , F.Fuchs , J. Furthmuller and F.Bechstedt . (۲۰۰۷) .” Low -field transport in Wurtzite InN” . **Internationales Wissenschaftliches Kolloquium Technische Universität Ilmenau** . September ۱۱ – ۱۵ .VOL. ۴۶,NO .۱.P1۰۲۳-۱۰۲۸

۳۹-Arindam Biswas, Aniruddha Ghosal, Hasanujjaman, Sahnawaj Khan. (۲۰۱۱) .“Low Temperature Magnetotransport in ۴D GaN Quantum Wells”. **International Journal of Scientific & Engineering Research Volume ۲, Issue ۹,P1۰۸-۱۱۶**.

۴۰- ام.روزنبرگ ، فیزیک حالت جامد ، ترجمه دکترحسین عشقی و دکتر حسن عزیزی ، ۱۳۷۶ ،

مرکز نشر دانشگاهی ، چاپ اول ، تهران

۴۱-Tigran T. Mnatsakanov ^a, Michael E. Levenshtein ^{b,*}, Lubov I. Pomortseva ^{a,,}

Sergey N. Yurkov ^a, Grigory S. Simin ^c, M. Asif Khan . (۲۰۰۳) .“Carrier mobility model for GaN”. **Elsevier Science Ltd. Solid-State Electronics ۴۷** , P۱۱۱-۱۱۸.

۴۲- F. M. Abou El-Ela, A. Z. Mohamed ,(۲۰۱۱), “Temperature and Doping Dependencies of the Transport Properties within GaN and GaAs”. **Journal of Modern Physics**, ۲ , ۱۳۲۴-۱۳۳۰ .

ξ³- Tobias Zibold .(۲۰۰۷). “Semiconductor based quantum information devices: Theory and simulations” . **Die Dissertation wurde am ۲۰.۱۲.۲۰۰۷ bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Physik am ۲۱.۰۹. angenommen**

ξ⁴- Nate Miller and Eugene E. Haller .Gregor Koblmüller . William J. Schaff . Michael E. Hawkridge, Kin Man Yu, and Joel W. Ager III . (۲۰۱۱). “ Effect of charged dislocation scattering on electrical and electrothermal transport in *n*-type InN” . **PHYSICAL REVIEW B** ۸۴, ۷۰۳۱۰ .

ξ⁵- O Ambacher (۲۰۰۲).” Theory of transport in semiconductors ” . ECE ۲۱۱A, **Device Physics . Debdeep Jena, (djena@engineering.ucsb.edu)** .

ξ⁶- Kejia _Albert_ Wang, Yu Cao, John Simon, Jing Zhang, Alexander Mintairov, James Merz, Douglas Hall, Thomas Kosel, and Debdeep Jena “Effect of dislocation scattering on the transport properties of InN grown on GaN substrates by molecular beam epitaxy” **APPLIED PHYSICS LETTERS** ۸۹, ۱۶۲۱۱ . ۲۰۰۶.

ξ⁷- O Ambacher . (۱۹۹۸) . “Growth and applications of Group III-nitrides” . **IOP Publishing Ltd,Appl. Phys. ۳۱.۲۶۰۳–۲۷۱۰.** Printed in the UK .

ξ⁸-J.Albercht, R.P.Wang, P.P.Ruden .M.Farahmand.(۱۹۹۷).”Monte carlo calculation of electron transport properties of bulk AlN” .**UMSI ۹۷/۱۸۸** .

ξ⁹- Agostino Zoroddu, Fabio Bernardini, and Paolo Ruggerone,(۲۰۰۰), “First-principles prediction of structure”, energetics, formation enthalpy, elastic. **Cond-mat.mtrl-sci** P ۲۱۲۲–۲۱۳۰ .

ξ۱۰- P. Jonnard, N. Capron . F. Semond, J. Massies . E. Martinez-Guerrero, H. Mariette. (۲۰۰۳). “Electronic structure of wurtzite and zinc-blende AlN” . Cond-mat.mtrl-sci. Vol . ۱۰۰ (۲۰۰۳) .NO .۱.

ξ۱۱- Hue-Min Wu*and Jaw-Yeu Liang,(۲۰۱۰). “Optical Properties of Single-Crystalline Wurtzite Aluminum Nitride Nanowires” . IEEE. ۹۷۸-۱-۴۲۴۴-۳۰۴۴-۹/۱۰ .

- १- Fabio Bernardini and Vincenzo Fiorentini . (१९९७) .“Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides” . **Cond-mat.mtrl-sci.** P १०२८-१०३२.
- २- Hadis Morko ,“ General Properties of Nitrides” . “Handbook of Nitride Semiconductors and Devices”. Vol. १ _ ISBN: ९७८-३-०२८-४०८३८-०.
- ३- J .A . M aj ewsk i, G. Zan dl er and P. V ogl , (२००१) ,“ B ands, B on ds, an d P ola rization s in N itrid es | fro m Ele ctron ic Or bital s to Ele ctron ic De v ice s”. **ACT A PHYSICA POLONICA**, A . Vol . १००.NO . १.
- ४- J. Wu and W. Walukiewicza . S. X. Li, R. Armitage, J. C. Ho, E. R. Weber, and E. E. Haller . Hai Lu and William J. Schaff . A. Barcz and R. Jakielka, .(२००४). “ Effects of electron concentration on the optical absorption edge of InN” . **APPLIED PHYSICS LETTERS** . VOLUME ८५, NUMBER १०, P ९८/१२०.
- ५- J. Li, K. B. Nam, M. L. Nakarmi, J. Y. Lin, and H. X. Jiang.(२००३). “Band structure and fundamental optical transitions in wurtzite AlN “. **APPLIED PHYSICS LETTERS** . VOLUME ८३, NUMBER २० .
- ६- J. Wu . W. Walukiewicz,a) K. M. Yu, and J. W. Ager III . E. E. Haller.(२००२). “ Unusual properties of the fundamental band gap of InN “. **APPLIED PHYSICS LETTERS**. VOLUME ८१, NUMBER २१ .
- ७-J.-M. Wagner and F. Bechstedt -(२००२).“Properties of strained wurtzite GaN and AlN: *Ab initio* studies “. **PHYSICAL REVIEW B** ६६, ११०२०२.
- ८- M. Willatzena_ and B. Lassen . L. C. Lew Yan Voon . R. V. N. Melnik .(२००७).“Dynamic coupling of piezoelectric effects, spontaneous polarization , and strain in lattice-mismatched semiconductor quantum-well heterostructures “. **JOURNAL OF APPLIED PHYSICS** १००, ०२४३०२.
- ९- B. Abbar, B. Bouhafs, H. Aourag, G. Nouet¹ , (२००१) .“First-Principles Calculations of Optical Properties of AlN, GaN, and InN Compounds under Hydrostatic Pressure” . **phys. stat. sol. (b)** २२८, No. २, ४०८-४६०.
- १०- Manuel C ARDONA ..(१९८७) .“Acoustical deformation potentials and heterostructure band offers in semiconductors” . **Physical Review** .Volume ३०. NO १२.
- ११- “Theoretical study of the band-gap anomaly of InN”- Pierre Carrier and Su-Huai Wei . **JOURNAL OF APPLIED PHYSICS** ९७, ०३३८०७ s२०००d .

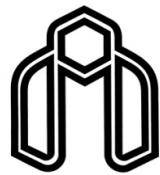
- ٦٣- I. Vurgaftman and J. R. Meyer . L. R. Ram-Mohan.(٢٠٠١). “ Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys”. **JOURNAL OF APPLIED PHYSICS** . VOLUME ٨٩, NUMBER ١١.
- ٦٤- Zhu Jun . Ban Shiliang . Ha Sihua .(٢٠١١). “ Property comparison of polarons in zinc-blende and wurtzite GaN/AlN quantum wells” . **Journal of Semiconductors**. Vol. ٣٢, No. ١١.
- ٦٥- M. Röppischer,^١,^a_٢ R. Goldhahn,^٢ G. Rossbach,^٢ P. Schley,^٢ C. Cobet,^١ N. Esser .(٢٠٠٩).“ Dielectric function of zinc-blende AlN from ١ to ٢٠ eV: Band gap and van Hove singularities” . **JOURNAL OF APPLIED PHYSICS** ١٠٦, ٠٧٦١٠٤.
- ٦٦- Junqiao Wu .(٢٠٠٩) .“ When group-III nitrides go infrared: New properties and perspectives” **JOURNAL OF APPLIED PHYSICS** ١٠٦, ٠١١١٠١.
- ٦٧- Abbes Bluofa.(٢٠٠٩). “First principles calculation of the structural and electronic properties of AlN,GaN,InN”. **Int .J. Nanoelectronics and materials** ٤.NO.١.
- ٦٨ -S.Loughin and R.H.French. (١٩٩٣).” Electronic structure of AlN : Theory and experiment “**Appl .Phys.Lett** . ٦٣(٩) , ٣٠ .
- ٦٩-Y. Taniyasu. (٢٠٠٦).”An AlN light -emitting diode with a wavelength of ٢١٠ nanometres “, **nature** . ٤٧٦ .**PMD,Nature** ٤٤١ (٧٠٩١): ٣٢٥-٨. dio : ١٠.١٠٣٨.
- ٧٠-. H. Arabshahi , M. Izadifard and A. Karimi ,(٢٠١١),” Comparison of Scattering Effect in Zincblende and Wurtzite AlN Structures”. International Journal of Science and Advanced Technology. (ISSN ٢٢٢١-٨٣٨٦) Volume ١ No.

Abstract

In this thesis, the electron transport properties in InN and AlN compound semiconductors under an applied weak electric field (V/cm) have been studied .Iterative technique was used to solve Boltzmann transport equation. Our results show that in the weak electrical field, the central valley electrons are contributed in the transport of electrons and the inter valley and interband transitions do not exist , while in the strong electric fields, the electrons in the adjacent valleys are contributed in transport and inter valley and interband transitions exist .

In fact, when the electric field is strong, the central valley electrons can gain enough energy to go to the other valleys. The Kane's theory has been used in order to investigate the band structure and its effect on electron transport properties. The scattering from the acoustic and polar optical phonons, deformation potential of the lattice, piezoelectric effect and also from ionized impurities have been studied. Moreover, dependence of the electron mobility in terms of temperature and electron concentration in InN and AlN semiconductor systems have been investigated.

Keywords: the electron transport , Boltzmann equation , iterative technique , Kane's theory , scattering from the acoustic and polar optical phonons , scattering from deformation potential of the lattice , scattering from piezoelectric effect, scattering from ionized impurities, the electron mobility , inter valley transitions , interband transitions .



**Shahrood University of Technology
Physics Faculty
Solid state group**

**Comparison of low field Electron transport properties in InN
and AlN semiconductors**

Akram Karimi

Supervisors:

Dr. M. Izadifard- Dr. H. Arabshahi

February ۱۴۰۲