

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: فیزیک

گرایش: حالت جامد

عنوان:

مطالعه خواص ترابرد الکترونی در ترکیبات نیمرسانای گروه $III-V$ با ابعاد زیر میکرونی در حضور میدان های الکتریکی قوی به روش شبیه سازی مونت کارلو

دانشجو:

محمد رضا خلوتی

اساتید راهنما:

دکتر مرتضی ایزدی فرد

دکتر هادی عربشاهی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تیرماه ۱۳۸۹

پیوست شماره ۲

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: فیزیک


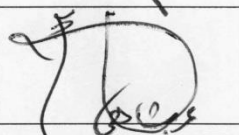
پایان نامه ارشد آقای محمدرضا خلوتی

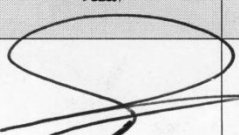
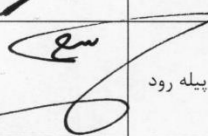

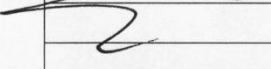
تحت عنوان:

مطالعه خواص تراپرد الکترونی در ترکیبات نیمرسانای گروه III-V با ابعاد زیر میکرونی در حضور میدانهای الکتریکی قوی به روش شبیه سازی مونت کارلو

در تاریخ ۸۹/۴/۳۹ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد مورد ارزیابی و با

درجه عالی مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور:	امضاء	اساتید راهنما:
	نام و نام خانوادگی:		نام و نام خانوادگی: دکتر مرتضی ایزدی فرد
	نام و نام خانوادگی:		نام و نام خانوادگی: هادی عربشاهی

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور:
			نام و نام خانوادگی: دکتر محمدابراهیم قاضی
	نام و نام خانوادگی: دکتر مهدی مؤمنی		نام و نام خانوادگی: دکتر سعید حسامی پیله رود
			نام و نام خانوادگی:
			نام و نام خانوادگی:

تقدیم به

پدر و مادر مهربانم

تقدیم به

خواهر و برادر عزیزم

تشکر و قدردانی

سپاس خدای را که بر من منت نهاد تا خوشه چین دانش بی منتهای او شوم. خداوند 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 ارزشمندشان کمال تشکر و قدر دانی را دارم. همچنین از سرکار خانم عادلہ مخلص گرامی که راهنمایی هایشان، راهگشای کار من بود، تقدیر و تشکر می کنم. امید که این کار راهگشایی هرچند کوچک در روند تحقیقات محققین باشد.

محمدرضا خلوتی

تیرماه ۱۳۸۹

تعهد نامه

اینجانب **محمدرضا خلوتی** دانشجوی دوره کارشناسی ارشد فیزیک - حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان‌نامه مطالعه خواص ترابرد الکترونی در ترکیبات نیم‌رسانای گروه III-V با ابعاد زیر میکرونی در حضور میدان های الکتریکی قوی به روش شبیه سازی مونت کارلو تحت راهنمایی دکتر مرتضی ایزدی فرد و دکتر هادی عربشاهی متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان‌نامه 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.
- مطالب درج شده در پایان‌نامه تا کنون 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 بدست آمدن نتایج اصلی پایان‌نامه تاثیرگذار بوده‌اند در مقالات مستخرج از پایان‌نامه رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان‌نامه، 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:

ماکلیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان‌نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی‌باشد.

لیست مقالات مستخرج از پایان‌نامه

۱. "بررسی خواص ترابرد الکترونها در نیمه رسانای InN برای طراحی و بهینه سازی قطعات اپتوالکترینیکی در حد طول موج بلند"، کنفرانس سالانه فیزیک ایران، ۲۴ تا ۲۸ مرداد ۱۳۸۸، دانشگاه صنعتی اصفهان- اصفهان.
۲. "شبیه سازی ترابرد الکترون در شبکه بلوری GaP با استفاده از روش مونت کارلو"، هفدهمین همایش انجمن بلورشناسی و کانی شناسی ایران، ۲۱ تا ۲۳ مرداد ۱۳۸۸، دانشگاه بو علی سینا – همدان.

بررسی ترابرد الکترون ها در بلور ها و قطعات نیمرسانا در حضور میدان های الکتریکی قوی همواره یکی از موضوعات مورد توجه محققان و صنعت بوده است. در این پایان نامه خواص ترابرد الکترون ها در ترکیبات نیمرسانای کپه ای $III-V$ در دو حالت پایدار و ناپایدار با استفاده از روش شبیه سازی مونت کارلو محاسبه و مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین ترابرد الکترون ها در دیودهای بالستیک محاسبه و بررسی شده است. این محاسبات با استفاده از مدلی سه دره ای انجام داده شده است. در این مدل حرکت الکترون ها به صورت نیمه کلاسیک در نظر گرفته می شوند. همچنین فرآیندهای پراکندگی الکترون ها از اتمهای ناخالصی و فونون های شبکه گنجانده شده است. همچنین تاثیر تغییر تغییرات دما و میدان الکتریکی اعمالی شدید بر ترابرد الکترون ها در این مواد مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

کلمات کلیدی: روش مونت کارلو، میدان های الکتریکی شدید، ترابرد الکترون، ترکیبات نیمرسانای $III-V$ ، حالت پایدار ترابرد الکترون ها، حالت نا پایدار ترابرد الکترون ها، دیود بالستیک

فهرست مطالب

عنوان صفحه

تقدیم د

تشکرنامه د

چکیده ح

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه ز

فهرست مطالب و

فهرست نمودارها و شکل ها م

فهرست جدول ها ر

مقدمه ا

فصل اول - مفاهیم مقدماتی

۱-۱ مقدمه ۴

۲-۱ حالت الکترون در ساختار نواری ۵

۳-۱ ساختار بلوری ۷

۱-۳-۱ ساختار بلوری مکعبی زینک بلند ۸

۱-۳-۲ ساختار بلوری وورتسایت ۸

۹ ۴-۱ ساختار نواری انرژی در بلور نیمرسانا
۱۴ ۵-۱ چگالی حالات انرژی
۱۵ ۶-۱ تقریب نیمه کلاسیک
۱۷ ۷-۱ قطعات نیمرسانا
۱۹ ۸-۱ تکنیک های رشد بلور و قطعات نیمرسانا
۱۹ ۱-۸-۱ معرفی روش های رشد بلور
۲۰ ۲-۸-۱ روش روآراستی پرتو ملوکولی

فصل دوم - عوامل پراکندگی الکترون ها

۲۳ ۱-۲ مقدمه
۲۴ ۲-۲ بررسی حرکت الکترون ها درون یک بلور ایده آل
۲۵ ۳-۲ انواع فرآیندهای پراکندگی
۲۶ ۴-۲ ناکاملی های بلور
۲۷ ۵-۲ پراکندگی از نوسانات شبکه
۳۰ ۶-۲ محاسبه نرخ پراکندگی
۳۲ ۷-۲ پراکندگی از فونون های آکوستیکی
۳۵ ۸-۲ فونون های اپتیکی غیر قطبی

۳۹ فونون های اپتیکی قطبی
۴۲ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه
۴۵ مقایسه نرخ پراکندگی در نیمرساناهای III-V

فصل سوم- معرفی روش شبیه سازی مونت کارلو

۵۱ ۱-۳ مقدمه
۵۱ ۲-۳ فرآیندهای آماری و روش مونت کارلو
۵۲ ۳-۳ تاریخچه روش مونت کارلو
۵۴ ۴-۳ شبیه سازی ترابرد الکترون ها در بلورهای نیمرسانا
۵۶ ۵-۳ پوشش آزاد الکترون ها
۶۱ ۶-۳ انتخاب فرآیند پراکندگی
۶۳ ۱-۶-۳ انتخاب حالت نهایی پس از پراکندگی
۶۴ ۷-۳ شبیه سازی نیمرساناهای کپه ای
۶۶ ۸-۳ شبیه سازی قطعات نیمرسانا
۶۹ ۱-۸-۳ روش تجزیه LU

فصل چهارم - نتایج شبیه سازی مونت کارلو برای قطعات نیمرسانای گروه III-V در حضور میدان های

الکتریکی شدید

۱-۴ مقدمه ۷۲

۲-۴ نتایج شبیه سازی خواص ترابرد نیمرساناهای کپه ای گروه III-V در دمای اتاق ۷۳

۱-۲-۴ شبیه سازی حالت پایدار ترابرد الکترون ها ۷۳

۱-۱-۲-۴ مقایسه وابستگی دمایی نیمرساناها در حالت پایدار ۸۱

۲-۲-۴ شبیه سازی حالت ناپایدار ترابرد الکترون ها ۸۳

۳-۴ شبیه سازی ترابرد الکترون ها در قطعات نیمرسانا ۸۷

۴-۴ بررسی اعتبار شبیه سازی قطعات نیمرسانا به روش مونت کارلو ۹۳

۵-۴ نتیجه گیری ۹۴

مراجع

مراجع ۹۷

مقالات مستخرج از پایان نامه

مقالات مستخرج از پایان نامه ۱۰۱

فهرست نمودارها و شکلها

عنوان صفحه

شکل ۱-۱: الف) پتانسیل ناشی از زنجیره خطی از یون ها، ب) توابع موج، ج) مولفه های تناوبی تابع موج

بلاخ، د) مولفه های تخت تابع موج بلاخ ۷

شکل ۱-۲: الف) ساختار بلوری زینک - بلند متشکل از دو ساختار fcc که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در

یکدیگر فرو رفته اند. ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری زینک - بلند ۸

شکل ۱-۳: الف) ساختار بلوری وورتسایت. متشکل از دو ساختار hcp که به اندازه سه هشتم محور C در

یکدیگر فرو رفته اند. ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری وورتسایت ۹

شکل ۱-۴: الف) ساختار نوار انرژی نیمرساناهای $GaAs, GaP, InP, InN, GaSb, InAs$ ۱۱

شکل ۱-۵: الف) نوارهای انرژی گروه ب) نوارهای انرژی سهموی ۱۳

شکل ۱-۶: 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، همان طور که در روی محور انرژی مشخص شده است، تعداد

حالت های مجاز k برای نوارهای انرژی غیرسهموی نسبت به نوارهای انرژی سهموی بیشتر است ۱۴

شکل ۱-۷: حرکت بسته موج الکترون در $k_z = k_0$ ۱۵

شکل ۱-۸: ساختار هندسی دیود بالستیک ۱۹

شکل ۱-۹: روش کار دستگاه بکار برده شده برای رشد بلور و قطعات نیمرسانا به روش روآراستی پرتو

ملوکولی ۲۱

- شکل ۲-۱: نوسانات بلاخ الکترون تحت تاثیر میدان الکتریکی اعمالی درون بلور ایده آل نیمرسانا ۲۵
- شکل ۲-۲: الف) نمایش از نواقص نقطه ای در شبکه بلور نیمرسانا ب) نمایش در رفتگی در شبکه بلوری نیمرسانا ۲۷
- شکل ۲-۳: الف) رابطه پراکندگی در نیمرسانای $GaAs$ ب) جایجایی اتم ها در دو شاخه آکوستیکی و اپتیکی ارتعاشات شبکه ۲۹
- شکل ۲-۴: تاثیر ارتعاشات شبکه بر روی پتانسیل تناوبی شبکه ۳۰
- شکل ۲-۵: تاثیر یک پتانسیل پراکندگی فرضی بر اندازه حرکت الکترون ها ۳۱
- شکل ۲-۶: نمودار تغییرات نرخ پراکندگی الکترون ها از فونون های آکوستیکی بر حسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای $GaAs$ در سه دره L, X, Γ ۳۴
- شکل ۲-۷: وابستگی دمایی نرخ پراکندگی از فونون های آکوستیکی واقع در دره Γ در نیمرسانای $GaAs$ ۳۵
- شکل ۲-۸: نمودار تغییرات نرخ پراکندگی بین دره ای از دره مرکزی به دره های فضایی L و X بر حسب انرژی الکترون ها در دو حالت جذب و گسیل فونون برای نیمرسانای $GaAs$ ۳۷
- شکل ۲-۹: نمودار وابستگی دمایی نرخ پراکندگی بین دره ای از دره مرکزی به دره L در حالت جذب فونون ۳۸
- شکل ۲-۱۰: نرخ پراکندگی الکترون از فونون های قطبی اپتیکی شبکه در دو حالت جذب و گسیل فونون در نیمرسانای $GaAs$ ۴۱
- شکل ۲-۱۱: وابستگی دمایی نرخ پراکندگی از فونون های قطبی اپتیکی در حالت جذب فونون، در نیمرسانای $GaAs$ ۴۱

شکل ۲-۱۲: وابستگی نرخ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه برای الکترون های واقع در دره ی مرکزی در نیمرسانای $GaAs$ و در حضور چگالی ناخالصی ها از مرتبه ی $10^{22} m^{-3}$ ۴۵

شکل ۲-۱۳: نمونه نمودار نرخ پراکندگی برای تمام فرآیندهای پراکندگی در دره مرکزی نیمرسانای $GaAs$ (نیمرسانای با گاف نواری مستقیم). فرآیند پراکندگی در نظر گرفته شده: (۱) ناشی از فونون آکوستیکی (۲) جذب فونون اپتیکی قطبی (۳) گسیل فونون اپتیکی قطبی (۴) پراکندگی بین دره به دره L با جذب فونون (۵) پراکندگی بین دره به دره L با گسیل فونون (۶) پراکندگی بین دره به دره X با جذب فونون (۷) پراکندگی بین دره به دره X با گسیل فونون (۸) پراکندگی از ناخالصی های یونیزه ۴۶

شکل ۲-۱۴: نمونه نمودار نرخ پراکندگی برای تمام فرآیندهای پراکندگی در دره مرکزی نیمرسانای $InAs, GaN$ (نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم). فرآیند پراکندگی در نظر گرفته شده: (۱) ناشی از فونون آکوستیکی (۲) جذب فونون اپتیکی قطبی (۳) گسیل فونون اپتیکی قطبی (۴) پراکندگی بین دره به دره L با جذب فونون (۵) پراکندگی بین دره به دره L با گسیل فونون (۶) پراکندگی بین دره به دره X با جذب فونون (۷) پراکندگی بین دره به دره X با گسیل فونون (۸) پراکندگی از ناخالصی های یونیزه ۴۷

شکل ۲-۱۵: نمونه نمودار نرخ پراکندگی برای تمام فرآیندهای پراکندگی در دره مرکزی نیمرساناهای $InP, GaSb$ (نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم). فرآیند پراکندگی در نظر گرفته شده: (۱) ناشی از فونون آکوستیکی (۲) جذب فونون اپتیکی قطبی (۳) گسیل فونون اپتیکی قطبی (۴) پراکندگی بین دره به دره L با جذب فونون (۵) پراکندگی بین دره به دره L با گسیل فونون (۶) پراکندگی بین دره به دره X با جذب فونون (۷) پراکندگی بین دره به دره X با گسیل فونون (۸) پراکندگی از ناخالصی های یونیزه ۴۸

شکل ۲-۱۶: نمودار نرخ پراکندگی برای تمام فرآیندهای پراکندگی در دره X نیمرسانا GaP با گاف نواری غیر مستقیم. فرآیند پراکندگی در نظر گرفته شده: (۱) ناشی از فونون آکوستیکی (۲) جذب فونون اپتیکی قطبی (۳) گسیل فونون اپتیکی قطبی (۴) پراکندگی بین دره به دره مرکزی با جذب فونون (۵) پراکندگی بین دره به دره مرکزی با گسیل فونون (۶) پراکندگی بین دره به دره X با جذب فونون (۷) پراکندگی بین

- دره به دره X با گسیل فونون (۸) پراکندگی بین دره به دره های فضایی هم نام L با جذب فونون (۹) پراکندگی بین دره به دره های فضایی هم نام L با گسیل فونون (۱۰) پراکندگی از ناخالصی های یونیزه..... ۴۹
- شکل ۱-۳: طرحواره مقایسه زمان مورد نیاز بر حسب پیچیدگی مسائل در دو روش مونت کارلو و حل تحلیلی دقیق ۵۳
- شکل ۲-۳: الف) طرحواره مسیر حرکت الکترون در یک بلور نیمرسانا که تحت تاثیر یک میدان الکتریکی اعمالی در جهت Z قرار دارد ب) تغییرات اندازه حرکت الکترون ها بر حسب زمان ج) تغییرات مکانی الکترون ها بر حسب زمان ۵۵
- شکل ۳-۳: الگوریتم شبیه سازی حرکت یک تک ذره تحت تاثیر میدان الکتریکی ۵۶
- شکل ۴-۳: تفاوت وقایع پراکندگی واقعی (مشخص شده با ضربدر) با وقایع خود پراکندگی (مشخص شده با دایره تو خالی) ۶۰
- شکل ۵-۳: طرحواره نحوه محاسبه نرخ خود - پراکندگی بر حسب انرژی الکترون ها و با در نظر گرفتن پارامتر Γ_0 ۶۱
- شکل ۶-۳: نحوه تعیین یک فرآیند پراکندگی را در نیمرسانای $GaAs$ در دمای اتاق ۶۲
- شکل ۷-۳: تعیین جهت بردار اندازه حرکت پس از پراکندگی ۶۴
- شکل ۸-۳: الگوریتم حلقه اصلی کد مونت کارلو برای شبیه سازی نیمرساناهای کپه ای ۶۵
- شکل ۹-۳: الگوریتم برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی خواص ترابرد الکترون ها در قطعات نیمرسانا ۶۷
- شکل ۱۰-۳: تقسیم دیود بالستیک به سلول های کوچک با طول dx ۶۸

شکل ۴-۱: نمودار حالت پایدار سرعت سوق الکترونی در ترکیبات نیمرساناهای InP , $InAs$ با $GaAs$ و $GaSb$ در دمای اتاق از 30 kVcm^{-1} کمتر ۷۶

شکل ۴-۲: نمودار حالت پایدار سرعت سوق الکترونی در نیمرساناهای InN , GaN و GaP با میدان آستانه بیشتر از 30 kVcm^{-1} در دمای اتاق ۷۶

شکل ۴-۳: وابستگی تغییرات سرعت سوق الکترون ها (منحنی ستاره دار) و درصد اشغال الکترونی دره های انرژی (خط) به میدان الکتریکی اعمالی در بلور نیمرسانای GaN ۷۸

شکل ۴-۴: وابستگی تغییرات انرژی متوسط الکترون ها (منحنی ستاره دار) و درصد اشغال الکترونی دره های انرژی به میدان الکتریکی اعمالی در بلور نیمرسانای GaN ۷۹

شکل ۴-۵: نمودار انرژی جنبشی الکترون ها بر حسب میدان الکتریکی اعمالی در تعدادی از ترکیبات نیمرساناهای $III-V$ در دمای اتاق ۸۰

شکل ۴-۶: نمودار درصد اشغال الکترونی دره های انرژی توسط الکترون ها در تعدادی از ترکیبات نیمرساناهای گروه $III-V$ در دمای اتاق ۸۱

شکل ۴-۷: نمودار سرعت سوق الکترون ها بر حسب میدان الکتریکی اعمالی در حضور میدان های الکتریکی اعمالی شدید در گروهی از ترکیبات نیمرساناهای $III-V$ ۸۲

شکل ۴-۸: نمودار تغییرات حالت ناپایدار سرعت سوق الکترونی بر حسب تابعی از زمان در نیمرسانای $GaAs$ در دمای اتاق و برای میدان های اعمالی در بازه 2 kVcm^{-1} تا 16 kVcm^{-1} ۸۴

شکل ۴-۹: نمودار تغییرات حالت ناپایدار سرعت سوق الکترونی بر حسب تابعی از زمان در نیمرسانای GaN در دمای اتاق و برای میدان های اعمالی در بازه 20 kVcm^{-1} تا 250 kVcm^{-1} ۸۵

شکل ۴-۱۰: نمودار تغییرات حالت ناپایدار درصد اشغال الکترونی دره های انرژی بر حسب تابعی از زمان برای نیمرسانای GaN در دمای اتاق و در میدان های اعمالی 150 kVcm^{-1} و 250 kVcm^{-1} ۸۶

شکل ۴-۱۱: نمودار تغییرات حالت ناپایدار انرژی متوسط الکترون ها بر حسب تابعی از زمان در دمای اتاق و برای میدان های اعمالی 150 kVcm^{-1} و 250 kVcm^{-1} برای نیمرسانای *GaN* ۸۷

شکل ۴-۱۲: نمودار تغییرات سرعت سوق الکترون ها بر حسب تابعی از مکان الکترون ها در دیودهای بالستیک *InP* و در حضور سه ولتاژ اعمالی 0.25 و 0.5 و 0.75 ولت در دمای اتاق ۸۸

شکل ۴-۱۳: نمودار تغییرات چگالی الکترون ها بر حسب تابعی از مکان در دیود بالستیک *InP* و در حضور سه ولتاژ اعمالی 0.25 و 0.5 و 0.75 ولت و در دمای اتاق ۸۹

شکل ۴-۱۴: نمودار تغییرات پتانسیل الکتریکی ایجاد شده بر حسب تابعی از مکان در دیود بالستیک *InP* و در حضور سه ولتاژ اعمالی 0.25 و 0.5 و 0.75 ولت و در دمای اتاق ۹۰

شکل ۴-۱۵: نمودار تغییرات میدان الکتریکی ایجاد بر حسب تابعی از مکان در دیود بالستیک *InP* و در حضور سه ولتاژ اعمالی 0.25 و 0.5 و 0.75 ولت و در دمای اتاق ۹۰

شکل ۴-۱۶: نمودار درصد اشغال الکترونی دره ها در سه دره انرژی بر حسب تابعی از مکان الکترون ها در دیود بالستیک *InP* و در حضور دو ولتاژ متفاوت 0.75 و 1.25 ولت ۹۱

شکل ۴-۱۷: نمودار تغییرات سرعت سوق الکترون ها بر حسب تابعی از مکان در تعدادی از نیمرسانای گروه *III-V* و در دو دمای 300 و 400 کلوین و در حضور ولتاژ اعمالی 0.75 ولت ۹۲

شکل ۴-۱۸: مقایسه نتیجه بدست آمده توسط روش شبیه سازی مونت کارلو با نتیجه تجربی گزارش شده توسط *Adachi* ۹۴

فهرست جدول ها

عنوان..... صفحه

جدول ۴-۱: مقادیر انرژی کمینه دره های انرژی و جرم موثر الکترونی در دره های انرژی ۷۳

با اختراع ترانزیستور ها در اوایل سال ۱۹۵۰، بررسی خصوصیات ترابرد الکترون ها در بلور و قطعات نیمرسانا یکی از موضوعات مورد علاقه فیزیک دان ها و مهندسين گردید. این مطالعات از دو جنبه نظری و کاربردی اهمیت دارد. برای شبیه سازی قطعات نیمرسانا باید وضعیت الکترون ها در بلور و برهم کنش هایی که بر حرکت الکترون ها موثر است را در نظر بگیریم. آشنایی با این برهم کنش ها از یک سو می تواند در شناخت چگونگی ترابرد الکترون ها و پدیده های دیگر مفید باشد و از طرف دیگر نتایج این مطالعات در بررسی و بهینه سازی قطعات میکروالکترونیک بکار می رود. در مورد مدارهای مجتمع با مقیاس بسیار کوچک به دلیل کوچکی ابعاد قطعات، اعمال یک اختلاف پتانسیل کوچک چند ولتی موجب ایجاد یک میدان الکتریکی قوی می شود. در این حالت به دلیل افزایش انرژی الکترون ها نمی توان از قانون اهم استفاده کرد.

بنابراین سعی می شود با کمک نظریه ترابرد الکترون در بلورهای نیمرسانا تعیین پارامترهای ترابرد میکروسکوپی به کمک کمیت های فیزیکی قابل اندازه گیری بلور نیمرسانا، خصوصیات ترابرد الکترون ها در قطعات نیمرسانا با ابعاد زیر میکرون مورد بررسی قرار گیرند. از جمله این کمیت ها می توان به ثابت شبکه بلور، چگالی بلور، ضریب دی الکتریک فرکانس بالا، ضریب دی الکتریک فرکانس پایین و جرم مؤثر الکترون اشاره کرد. به کمک این نظریه همچنین می توان نحوه تغییرات خواص ترابرد به علت تغییرات میدان الکتریکی، مغناطیسی، دما و میزان ناخالصی موجود در ماده نیمرسانا را بررسی کرد. هدف این پایان نامه مطالعه ترابرد الکترون ها در بلورهای و قطعات نیمرسانا ساخته شده از ترکیبات دوتایی نیمرسانا $III-V$ تحت میدان های الکتریکی قوی است. امروزه ترکیبات نیمرسانای $III-V$ به طور گسترده ای در صنایع الکترونیک به کار می روند. در میان این ترکیبات، تحقیقات تجربی و تئوری بسیاری بر روی خواص ترابرد در نیمرسانای $GaAs$ صورت گرفته شده است. با این وجود بسیاری از ترکیبات این گروه هنوز به طور کامل مورد بررسی قرار نگرفته اند.

این پایان نامه در چهار فصل تنظیم شده است. در فصل اول به بررسی اجمالی خواص عمومی ترکیبات نیمرسانا از دیدگاه ساختار بلوری و ساختار نواری می پردازیم. همچنین در این فصل در مورد مفاهیم مورد نیاز برای شبیه سازی قطعات نیمرسانا توضیحاتی ارائه می دهیم.

در فصل دوم، به مطالعه عوامل مختلف پراکندگی الکترون ها تحت تأثیر میدان الکتریکی اعمالی می پردازیم. چنانکه می دانیم تحت تأثیر میدان الکتریکی اعمالی الکترون ها در ساختار نواری به حرکت در می آیند ولی حرکت آنها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی است. در این فصل آهنگ پراکندگی الکترون ها در حضور عوامل مختلفی چون فونون های آکوستیکی، اپتیکی و اتم های ناخالصی یونیزه را بررسی می کنیم و روابط مربوط به هر آهنگ پراکندگی را در ترکیبات نیمرسانای $III-V$ محاسبه کرده و تغییرات این آهنگ های پراکندگی بر حسب انرژی را رسم می نماییم.

در فصل سوم، ساز و کار روش شبیه سازی مونت کارلو را به طور کلی توضیح داده و کاربرد این روش در تراورد حامل ها در مواد نیمرسانا را شرح می دهیم. نهایتاً در فصل چهارم، خواص تراورد الکترون ها برای ترکیبات نیمرسانای $III-V$ در دو حالت پایدار و ناپایدار و در حد میدان های الکتریکی قوی به روش مونت کارلو شبیه سازی و وابستگی آن به دما و چگالی اتم های ناخالصی بررسی شده است و با خواص نیمرساناهای $InAs$ و $AlAs$ مقایسه شده است. همچنین خواص تراورد الکترونی و اثر دما را بر آن در دیود های بالستیک ساخته شده از ترکیبات نیمرسانای $III-V$ را مورد بررسی قرار خواهیم داد.

فصل اول

مفاهیم مقدماتی

امروزه با گسترش تکنولوژی، امکان ساخت قطعات نیمرسانا در ابعاد زیر میکرون فراهم شده است [۱،۲]. به دلیل ابعاد بسیار کوچک قطعات امروزی، استفاده از روش های تجربی برای بهینه سازی و طراحی اینگونه قطعات بسیار پر هزینه و زمان بر می باشد. از این رو شبیه سازی قطعات نیمرسانا همواره یکی از موضوعات مورد علاقه محققان و صنایع بوده است. روش های زیادی برای شبیه سازی قطعات نیمرسانا ابداع شده است. در میان روش های موجود، روش شبیه سازی مونت کارلو^۱ به عنوان یکی از روش های شبیه سازی فرآیند های آماری و شبه آماری به شمار می آید [۳]. این روش که بر مبنای احتمالات و اعداد تصادفی بنا شده است، کاربرد فراوانی در کلیه حیطه های علمی پیدا کرده است. از جمله این موارد، می توان به کاربرد فراوان این روش در بررسی وضعیت الکترونها در مواد نیمرسانا^۲ و قطعات ساخته شده از مواد اشاره نمود [۴]. از آنجایی که نخستین گام در شبیه سازی قطعات نیمرسانا، آشنایی با ساختار بلوری^۳ این قطعات، ساختار نواری^۴، دره های انرژی^۵، جرم موثر^۶ و ضرایب غیر سهموی^۷ نیمرسانا ها می باشد، لذا در این فصل به طور مختصری به معرفی این مفاهیم که در حرکت الکترون ها درون بلور نقش دارند، می پردازیم. در نهایت به معرفی قطعات نیمرسانا و از جمله ساختار دیود های بالستیک^۸ خواهیم پرداخت.

¹ Monte Carlo simulation

² Semiconductor

³ Crystal structure

⁴ Band structure

⁵ Energy valleys

⁶ Effective mass

⁷ Non-parabolic coefficients

⁸ Ballistic Diode

۲-۱ حالت الکترون در ساختار نواری

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

برای مشخص کردن حالت الکترون ها در درون بلور کافیتست معادله شرودینگر^۱ را حل نماییم

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

که در آن m^* جرم موثر الکترون ها درون بلور و ε ویژه مقادیر انرژی می باشد. به خاطر طبیعت بلوری نیمرساناها $u_k(r)$ پتانسیل دوره ای ناشی از هسته های اتم ها و سایر الکترون ها است و اگر بردار R را بردار شبکه مستقیم و k را بردار موج الکترون در اولین منطقه بریلوئن^۲ در نظر بگیریم، این پتانسیل تناوبی به صورت زیر است [۵]:

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

با توجه به قضیه بلاخ^۳ نشان داده می شود که مجموع بردارهای موج الکترون در فضای فاز که بتوان آنها را به صورت $k' = k + G$ نوشت، تعیین کننده توابع موج مستقل می باشند که در این رابطه G بردار شبکه وارون، برداری از فضای فاز و 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 روی تابع موج الکترون و به کمک قضیه بلاخ نشان داده می شود که تعداد حالت های

¹ Schrödinger equation

² Brillouin zone

³ Bloch theorem

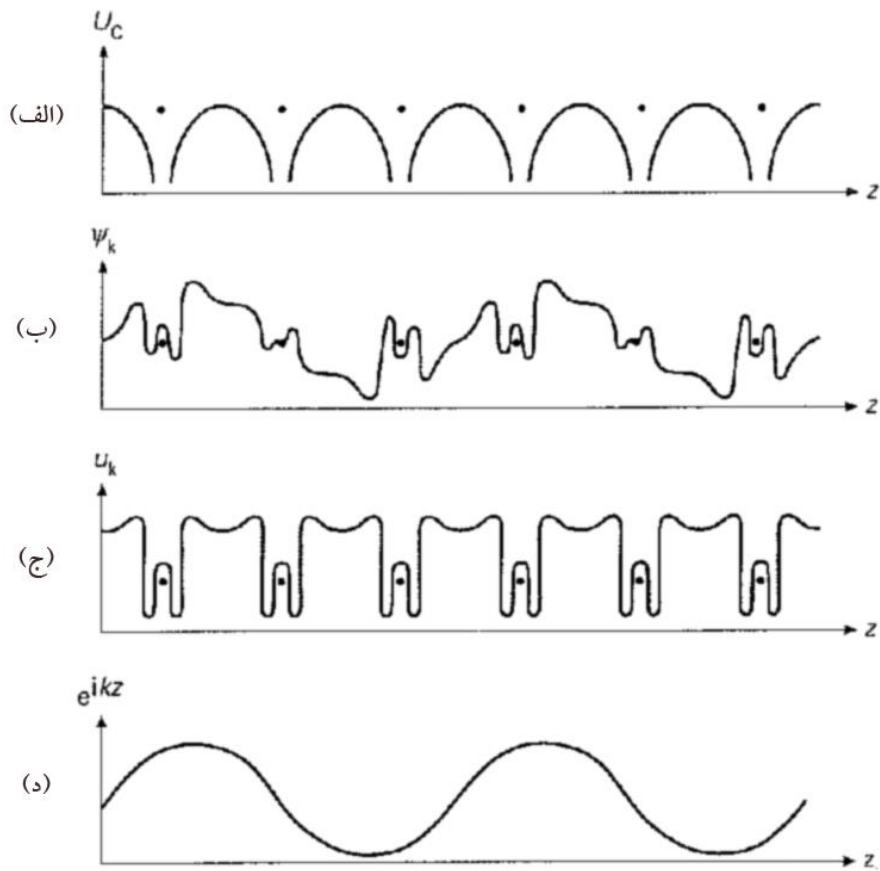
مجاز در منطقه اول بریلون برابر تعداد یاخته‌های بنیادی بلور است. در نتیجه تعداد حالت‌های مجاز بردار \mathbf{k} در منطقه اول بریلون بسیار زیاد است و با توجه به کوچک بودن حجم منطقه اول بریلون، مجموعه بردارهای بردارهای \mathbf{K} در این فضا فشرده می‌شوند. به همین علت بردار موج الکترون در محاسبات به صورت متغیر پیوسته در نظر گرفته می‌شود. ψ_k ها معرف توابع حالت الکترون ها می باشند که بنابر قضیه بلاخ پاسخ‌های معادله شرودینگر (۱-۱) برای یک پتانسیل دوره‌ای باید به شکل خاص زیر باشند:

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

با توجه به روابط (۲-۱) و (۳-۱)، تابع موج الکترون تحت انتقال به اندازه بردار \mathbf{R} دارای این خاصیت است [۵]:

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

در شکل (۱-۱ الف) طرحی نمادین از پتانسیل تناوبی در امتداد شبکه خطی از یون ها نشان داده شده است. دایره های تو پر 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 شکل مشخص است که تابع موج خاصیت تناوبی دارد. همانگونه که عنوان شد تابع موج بلاخ شامل دو مولفه موج تخت و یک مولفه با تناوب شبکه می باشد که به این مولفه ها به ترتیب در اشکال (۱-۱ ج) و (۱-۱ د) نشان داده شده است [۶].



شکل ۱-۱: الف) پتانسیل ناشی از زنجیره خطی از یون ها، ب) توابع موج، ج) مولفه های تناوبی تابع موج بلاخ، د) مولفه های تخت تابع موج بلاخ [۶].

۳-۱ ساختار بلوری

برای بررسی چگونگی حرکت الکترون ها درون قطعات نیمرسانا و بدست آوردن اطلاعاتی از قبیل ساختار نوار انرژی، پتانسیل شبکه و فرآیندهای پراکندگی^۱ الکترون ها درون بلور، باید از ساختار بلوری ماده اطلاعات کافی داشت. به طور کل می توان گفت که اکثر ترکیبات نیمرسانای III-V در یکی از دو ساختار بلوری مکعبی زینک بلند^۲ و یا شش گوشه ورتسایت^۳ رشد می یابند.

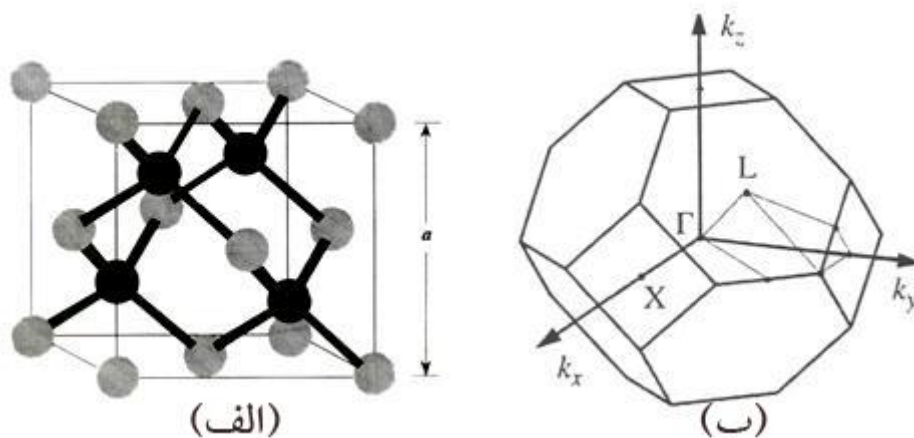
¹ Scattering process

² Zinc belende

³ Wurtzite

۱-۳-۱ ساختار بلوری مکعبی زینک بلند

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، احاطه شده است. این آرایش همانند یک شبکه بلوری fcc دارای شبکه براوه با دو اتم در هر پایه است (شکل ۱-۲ الف). این اتم ها در امتداد قطر اصلی و به فاصله یک چهارم قطر اصلی از یکدیگر قرار دارند. همچنین منطقه اول بریلوئن برای این ساختار در (شکل ۱-۲ ب) رسم شده است. تمام بردار های موج الکترون ها محدود به این ناحیه هستند [۵].



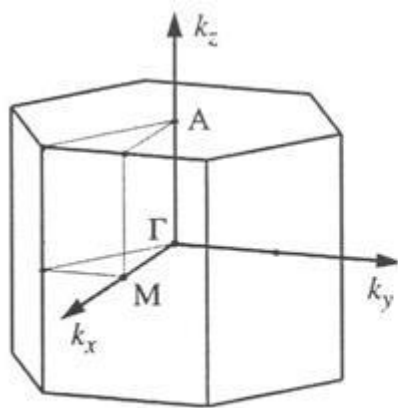
شکل ۱-۲: الف) ساختار بلوری زینک - بلند متشکل از دو ساختار fcc که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در یکدیگر فرو رفته‌اند. ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری زینک - بلند [۵].

۱-۳-۲ ساختار بلوری وورتسایت

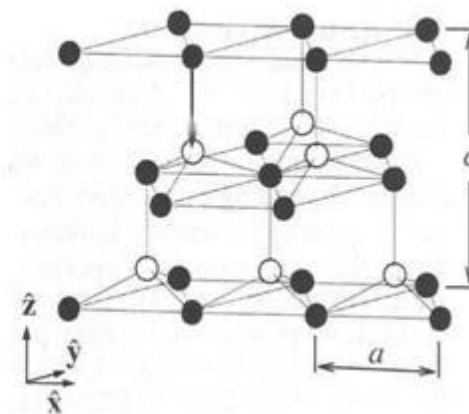
همان‌طور که در شکل (۱-۳ الف) نشان داده شده است ساختار وورتسایت سلول واحد هگزاگونال دارد و در نتیجه دو ثابت شبکه a و c خواهد داشت و شامل شش اتم از هر نوع در سلول واحد است. ساختار

¹ Face centered cubic

وورتسایت از دو شبکه hcp^1 که به اندازه سه هشتم بردار c در هم فرو رفته‌اند ساخته شده‌است. منطقه اول بریلوئن نیز در شکل (۱-۳ ب) نشان داده شده است [۵].



(ب)



(الف)

شکل ۱-۳: الف) ساختار بلوری وورتسایت. متشکل از دو ساختار hcp که به اندازه سه هشتم محور c در یکدیگر فرو رفته‌اند. ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری وورتسایت [۵].

۴-۱ ساختار نواری انرژی در بلور نیمرسانا

منظور از ساختار نواری تعیین رابطه‌ای میان انرژی الکترون و بردار موج آن می‌باشد. بنابراین ساختار نواری یک جامد نقطه شروع برای مطالعه خواص ترابرد الکترونی در بلورهای نیمرسانا بوده و مهمترین عاملی است که در ترابرد الکترون‌ها در بلور نیمرسانا نقش دارد و بنابراین باید این عامل را در محاسبات خواص ترابرد الکترونی در نظر گرفت. روش‌های زیادی برای بررسی ساختار نواری نیمرساناها وجود دارد. مشخصات نوارهای انرژی معمولاً به وسیله ترسیم انرژی‌های ممکن الکترون برای مقادیر متفاوت بردار موج الکترون در راستاهای متفاوت در منطقه اول بریلوئن نمایش داده می‌شود. به دلیل اختلاف فواصل اتم‌ها در راستاهای مختلف بلور، مقدار انرژی نه تنها به طول بردار موج الکترون بلکه به راستای آن نیز بستگی دارد. روش تحلیلی دقیقی برای

¹ Hexagonal closest packing

محاسبه ساختار نواری نیمرساناها وجود ندارد و اغلب از روش های تقریبی نظیر تنگ بست^۱، موج تخت عمود شده^۲، شبه پتانسیل^۳ و اختلال K.P استفاده می شود [۵]. ساختار نواری انرژی برای برخی از مطرح ترین ترکیبات دو تایی در خانواده ی نیمرساناهای ترکیبی III-V در شکل (۴-۱) رسم شده است [۷]. همانطور که در این اشکال دیده می شود، منطقه ای از انرژی وجود دارد که حالت های الکترونیکی در آن یافت نمی شوند که به آن منطقه گاف نواری انرژی^۴ می گویند. اندازه این اختلاف انرژی را که به گاف نواری معروف است را با E_g نمایش می دهند. حالت های الکترونیکی در بالا و پایین این گاف نواری قرار دارد. نوار های انرژی بالای گاف انرژی، به نوار رسانش^۵ و نوار های پایین گاف انرژی به نوار ظرفیت^۶ معروف اند. همانگونه که در شکل (۴-۱) دیده می شود، در میان نیمرساناهای خانواده III-V در نیمرساناهای $GaAs, InP, InAs, GaSb, InN$ پایین ترین نقطه نوار رسانش و بالاترین نقطه نوار ظرفیت در $K=0$ قرار دارد که اصطلاحاً به اینگونه مواد نیمرساناهای دارای گاف نواری مستقیم می گویند. در نیمرساناهایی نظیر $GaP, AlAs$ این دو موقعیت در یک بردار موج یکسان قرار ندارند و به این مواد نیمرساناهای با گاف غیر مستقیم گفته می شوند. در نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم، گذار از نوار ظرفیت به نوار رسانش احتیاجی به تغییر اندازه حرکت بلوری الکترون ندارد. از این رو این مواد به نیمرسانا های اپتیکی نیز معروف هستند. وقتی الکترونی در نیمرساناهای با گاف غیر مستقیم گذاری از نوار ظرفیت به نوار رسانش انجام می دهد، نه فقط تغییر در انرژی خواهیم داشت، بلکه تغییر در اندازه حرکت بلور نیز لازم می باشد. نیمرسانا های با گاف غیرمستقیم بیشتر کاربرد های الکترونیکی دارند [۸].

¹ Tight binding

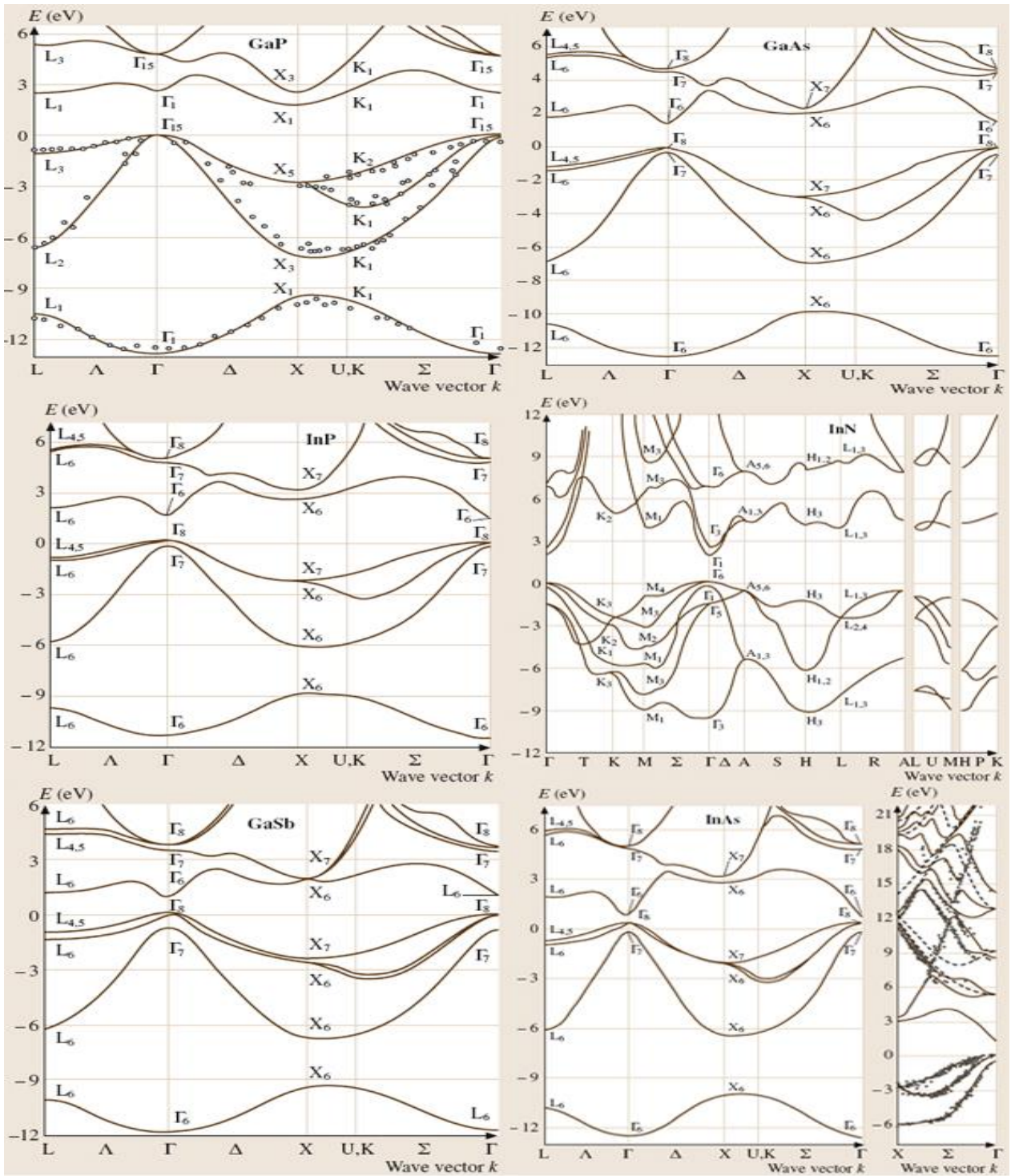
² Orthogonal plain wave method

³ Pseudo-potential

⁴ Energy band gap

⁵ Conduction band

⁶ Vallance band



شکل ۴-۱: الف) ساختار نوار انرژی نیمرساناهای [V]GaAs, GaP, InP, InN, GaSb, InAs

در فضای k رابطه انرژی برحسب بردار موج الکترون به فرم زیر می باشد:

$$E(k) = \sum_{i,j} \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m^*} \right)_{i,j} k_i k_j \right] \quad (۵-۱)$$

که در آن m^* جرم مؤثر می باشد. تانسور جرم مؤثر با رابطه ی زیر بیان می شود:

$$\frac{1}{m_{i,j}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{k=0} \quad (۶-۱)$$

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

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (۷-۱)$$

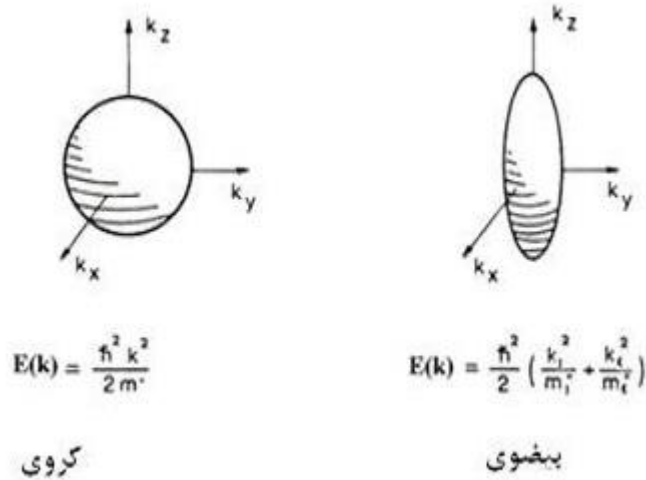
در این حالت جرم مؤثر الکترون یک کمیت عددی است. این رابطه جهت توصیف کمینه نوار رسانش واقع در نقطه Γ و برای بیشینه‌ای از نوار ظرفیت که به دلیل برهمکنش اسپین - مدار از دو نوار دیگر جدا شده مناسب است. این رابطه ساده‌ترین مدل نوار رسانش جهت بررسی تقریبی خواص تراپردی در هر نیمرسانا می باشد.

معادله یک نوار با سطح انرژی ثابت بیضی گون^۱ در فضای k به شکل زیر می باشد [۳] (شکل ۵-۱ ب):

$$E = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_l^2}{m_l^*} + \frac{k_t^2}{m_t^*} \right) \quad (۸-۱)$$

در این حالت جرم مؤثر الکترون یک کمیت تانسوری است. این رابطه جهت توصیف کمینه نوار هدایت واقع در راستای [۱۰۰] و [۱۱۱] مناسب است. در این رابطه k_l و k_t مؤلفه‌های بردار موج الکترون در راستای موازی و عمود بر راستاهای [۱۰۰] و [۱۱۱] است. m_l^* و m_t^* مؤلفه‌های طولی و عرضی جرم مؤثر هستند [۳].

¹ - Ellipsoidal constant energy surface



(الف)

(ب)

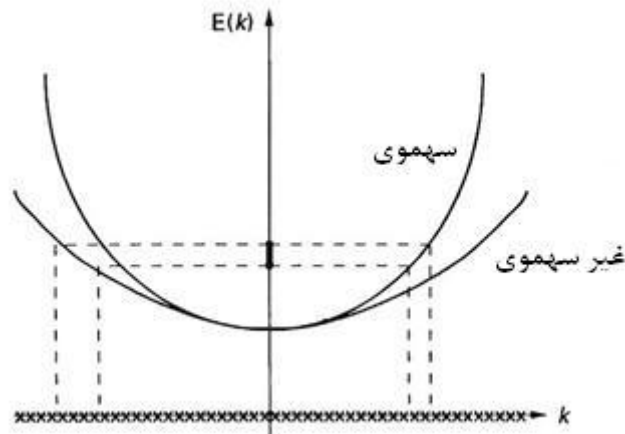
شکل ۵-۱: نوارهای انرژی کروی (ب) نوارهای انرژی بیضوی [۳]

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

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m_0} \right)^2 \quad 9-1$$

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

که در آن E_g گاف نواری، m^* جرم مؤثر الکترون و m_0 جرم الکترون آزاد است [۹].



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

۵-۱ چگالی حالات^۱ انرژی

چگالی حالات انرژی یکی از مهم‌ترین مفاهیمی است که در بررسی بسیاری از خواص اپتیکی و الکترونیکی نیم‌رساناها باید در نظر گرفته شود. چگالی حالات انرژی اشاره به تعداد حالات انرژی دسترس پذیر با انرژی اطراف E در واحد حجم و واحد انرژی یک نیم‌رسانا، دارد. در نوارهای انرژی سه‌موی چگالی حالت‌ها در فضای انرژی در سه بعد به صورت زیر است:

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

یعنی به صورت تابعی از \sqrt{E} تغییر می‌کند [۱۰]. در محاسبه چگالی حالت‌ها برای نوارهای غیرسه‌موی باید از رابطه (۷-۱) به جای رابطه (۱۰-۱) استفاده کرد. چگالی حالت‌ها در این حالت به صورت حاصلضرب عامل $\sqrt{1 + \alpha E} (1 + 2\alpha E)$ در رابطه (۱۱-۱) خواهد بود. همان‌طور که از شکل (۱۰-۱) مشخص است غیرسه‌موی بودن نوارها، انرژی را هموار می‌کند، به طوری که حالت‌های k ی مجاز بیشتری بین انرژی E و $E+dE$ وجود

¹ Density of state

دارد و چگالی حالت‌ها افزایش می‌یابد. بنابراین تعداد حالات مجاز انرژی با انرژی E در بازه dE برابر است با: $[۱۳] N(E)dE$

۶-۱ تقریب نیمه کلاسیک^۱

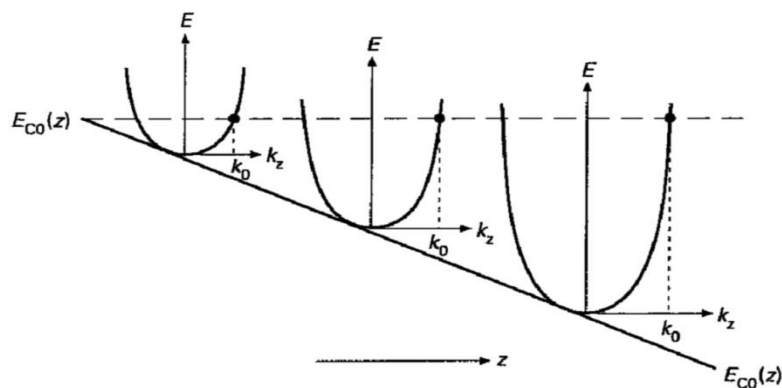
برای قطعات نیم‌رسانایی که پتانسیل داخلی درون ساز^۲ آنها در برابر تغییرات پتانسیل تناوبی شبکه بسیار بزرگ باشد، از اثرات موجی از قبیل انعکاس از سطوح مشترک و تونل زنی می‌توانیم صرف نظر نماییم. حرکت الکترون‌ها در این گونه قطعات به صورت کلاسیکی توصیف می‌شود. در این حالت داریم^[۶]:

$$E(k, z) = E_{c0}(z) + E(k) \quad (۱۲-۱)$$

که در آن $E_{c0}(z)$ نمایشگر انرژی انتهای نوار رسانش و $E(k)$ اشاره به انرژی جنبشی الکترون‌ها دارد. اگر $V(z)$ پتانسیل الکتروستاتیک ناشی از میدان اعمالی و یا پتانسیل درون ساز قطعه باشد داریم:

$$E_{c0}(z) = Const. - eV(z) \quad (۱۳-۱)$$

معادله ۱۲-۱ به طور نمادین در شکل ۷-۱ رسم شده است. بسته موج^۳ (در موقعیت $k = 0$) در عدم حضور فرآیندهای پراکندگی به گونه‌ای حرکت می‌کند که انرژی اش ثابت بماند.



¹ Semiclassical approximation

² Built in potential

³ Wave packet

شکل ۱-۷: حرکت بسته موج الکترون در $k_z = k_0$ [۶]

با مشتق گیری از رابطه (۱۲-۱) خواهیم داشت

$$\frac{dE(k_0, z)}{dt} = \frac{\partial E}{\partial k_0} \cdot \frac{dk_0}{dt} + \frac{\partial E}{\partial z} \cdot \frac{dz}{dt} = v_g \cdot \hbar \frac{dk_0}{dt} + \frac{\partial E_{C0}(z)}{\partial z} \cdot v_g \quad (14-1)$$

که در این رابطه v_g سرعت گروه است. به دلیل پایستگی انرژی می شود $\frac{dE}{dt} = 0$ می شود و در نتیجه معادله بالا را می

توان به شکل زیر نوشت [۶]:

$$\frac{d(\hbar k_0)}{dt} = \nabla E_{C0}(z) = F_e \quad (15-1)$$

در معادله فوق k_0 بردار موج در مرکز بسته موج می باشد. معادله (۱۵-۱) شبیه معادله حرکت ذرات کلاسیکی تحت اثر نیروی F_e است. همچنین در این حالت $\hbar k_0$ نقش بردار اندازه حرکت را بازی می نماید و به همین دلیل آن را اندازه حرکت بلوری می نامند.

به طور مشابه با حالت کلاسیکی، سرعت الکترون های بلاخ برای تراز های انرژی سهموی عبارت است از [۶]:

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m^*} \quad (16-1)$$

و اگر تراز های انرژی را غیر سهموی در نظر بگیریم سرعت گروه^۱ عبارت است از

$$v_g = \frac{\hbar k_0}{m^* (1 + 2\alpha E)} \quad (17-1)$$

در دیدگاه نیمه کلاسیک برای تراپرد الکترون ها، بسته موج الکترونی به عنوان یک ذره رفتار می کند. عدم قطعیت در اندازه حرکت الکترون بسیار کوچک فرض می شود، اگر انرژی آن بسیار دقیق تعیین شده باشد [۶].

¹ Group velocity

۷-۱ قطعات نیمرسانا^۱

شبیه سازی مونت کارلو برای تحلیل خصوصیات ترابرد الکترون ها در بسیاری از قطعات نیمرسانا استفاده می شود. شبیه سازی قطعات نیمرسانا بسیار شبیه به روش استفاده شده برای شبیه سازی نیمرساناهای کپه ای می باشد. در قطعات نیمرسانا بر خلاف حالت کپه ای، حرکت فضایی الکترون ها محدود به ابعاد قطعه است، از این رو باید از شرایط مرزی مناسب استفاده نماییم [۱۲]. تفاوت دیگر قطعات نیمرسانا با مواد کپه ای در این است که لزوما چگالی ناخالصی های آلاینده و یا نوع مواد بکار برده شده در همه جا یکسان نیست و می تواند تابعی از مکان باشد [۱۳، ۱۴، ۱۵]. بنابراین در قطعات نیمرسانا پراکندگی الکترون ها تابعی از مکان است و باید این موضوع را در محاسبات در نظر گرفت. تغییرات میدان الکتریکی در اثر حرکت حامل ها، عامل مهمی است که باید در شبیه سازی قطعات نیمرسانا در نظر گرفته شود. از این رو در تحلیل مسائل مرتبط با قطعات نیمرسانا میدان الکتریکی را به صورت خود-سازگار در بازه های زمانی بسیار کوچک بدست می آورند؛ به عبارت دیگر به طور متناوب با حل معادله پواسون و در نظر گرفتن شرایط مرزی مناسب حرکت الکترون ها درون قطعه را بررسی می کنیم [۳، ۱۲، ۱۶، ۱۷].

ساختار n^+nn^+ - که به دیود بالستیک نیز مشهور می باشد - یکی از قطعات پر کاربرد و مطرح در صنایع اپتوالکترونیک می باشد. به دلیل ساده بودن ساختار این قطعه، همواره به عنوان نخستین گام در شبیه سازی قطعات نیمرسانا، از این قطعه استفاده می شود [۱۸]. در این قطعه چگالی ناخالصی ها فقط در یک بعد تابعی از طول قطعه است و در دو بعد دیگر کاملا تقارن داریم. حرکت ذرات را در سه بعد و معادله پواسون برای این قطعه را فقط در یک بعد بررسی می کنیم. در این کار پژوهشی به بررسی و شبیه سازی این قطعه در ابعاد زیر میکرون پرداخته شده است. کلیات روش شبیه سازی برای سایر قطعات الکترونیک دیگری، کاملا مشابه با آن

¹ Semiconductor device

چیزی است که در اینجا بحث می کنیم و می توان مدل بکار برده شد را برای شبیه سازی هر قطعه دیگری تعمیم داد [۳].

با توجه به شکل (۱-۸)، دیود های بالستیک شامل یک نیمرسانای خالص و یا با غلظت ناخالصی بسیار رقیق می باشد که در میان دو لایه بسیار آلییده از همان نیمرسانا ساندویچ شده است. نواحی بسیار آلییده شده را آند^۱ و کاتد^۲ و ناحیه مرکزی را کانال^۳ می نامیم. به دو سر این قطعه اختلاف پتانسیل V را اعمال می کنیم و اثر آن را بررسی خواهیم کرد. با توجه به اینکه چگالی ناخالصی ها در دو سوی هر سطح مشترک برابر نیست، جریان پخشی و تزریق حامل ها را از ناحیه های بسیار آلیید شده به ناحیه کانال انتظار داریم. دو شرط مرزی برای این مسئله خواهیم داشت. تماس هایی که ولتاژ به آن ها اعمال می شوند، تماس اهمی در نظر گرفته می شوند. به عبارت دیگر این تماس ها در بعضی مواقع به عنوان یک چشمه و در موارد دیگر به عنوان چاه الکترون در نظر گرفته می شوند، یعنی الکترون های می توانند در این تماس ها جذب شوند و یا الکترون ها از تماس ها به داخل قطعه تزریق می شوند. این ورود و خروج به گونه صورت می گیرد که ولتاژ دو سر قطعه همواره ثابت و برابر مقدار اعمال شده به دو سر قطعه باشد.

همانگونه که عنوان شد، محاسبات میدان الکتریکی و پتانسیل باید به طور خود - سازگار^۴ انجام شوند. به عبارت دیگر با استفاده از معادله پواسون^۵ و با توجه به توزیع الکترون ها و شرایط مرزی مناسب [۳، ۶]، پتانسل و میدان الکتریکی را بر حسب زمان و مکان در تمام نقاط قطعه تعیین نماییم.

شکل کلی معادله پواسون به صورت زیر می باشد:

$$\nabla^2 \phi(r,t) = -\frac{\rho(r,t)}{\epsilon} \quad (1-18)$$

¹ Anode

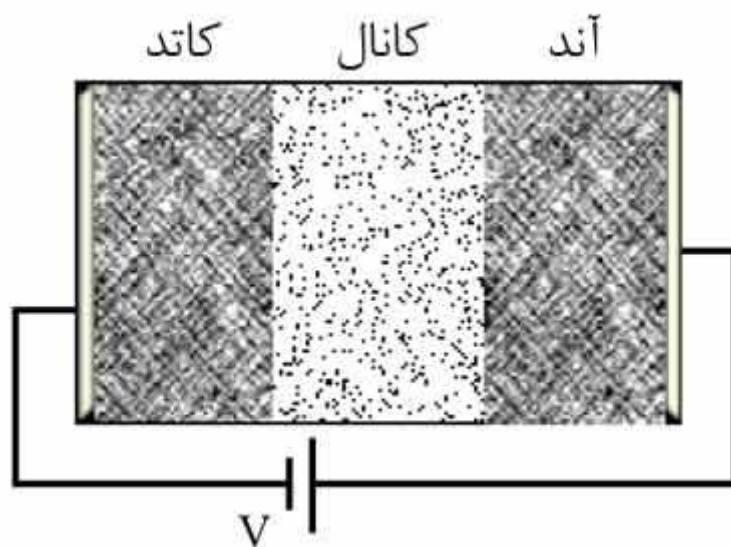
² Cathode

³ Channel

⁴ Self-consistent

⁵ Poisson equation

که در آن تابع چگالی الکترون ها و همچنین پتانسیل الکتریکی بر حسب مکان و زمان است.



شکل ۱-۸: ساختار هندسی دیود بالستیک

۸-۱ تکنیک های رشد بلور و قطعات نیم رسانا

رشد بلور های نیم رسانا با خلوص و کیفیت بالا همواره از مهمترین مواردی است که در ساخت قطعات نیم رسانا در نظر گرفته می شود. در اوایل قرن بیستم، در روش های رشد پیشرفت چشمگیری ایجاد شد و به عنوان شاخه مجزا از علوم شناخته می شود [۱۹]. این روش ها همواره بهبود یافته و امروزه توانایی رشد قطعات نیم رسانا با خلوص بالا فراهم شده است.

۱-۸-۱ معرفی روش های رشد بلور

در میان روش های رشد بلور می توان به روش های زیر اشاره نمود:

- (الف) فرآیند چوکراسکی^۱ [۲۰] (ب) روش رشد ناحیه شناور^۲ [۲۰] (ج) روش بریجمن^۳ [۲۰]
- (د) روش روآراستی فاز مایع^۱ [۸] (ه) رو آراستی فاز بخار^۲ [۸] (و) روآراستی پرتو ملوکولی^۳ [۸]

^۱ Czochralski process

^۲ Floating zone

^۳ Bridgman technique

(ز) انباشت بخار شیمیایی فلز آلی^۴

۱-۸-۲ روش روآراستی پرتو ملوکولی

این روش یکی از قدرتمندترین روش‌های موجود است. این تکنیک (*MBE*) در خلاء فوق‌العاده بالا برای تولید ساختارهای با کیفیت بالا و کنترل لایه به لایه اتمی به کار می‌رود. از زمان معرفی این دستگاه در سال ۱۹۷۰ از آن دستگاه به طور وسیعی در ساخت لایه‌های نیم‌رسانا، فلزی، غیرفلزی و ابررساناها استفاده شده است. مکانیزم عملکرد دستگاه‌های *MBE* بسیار ساده می‌باشد. در این تکنیک اتمها و یا خوشه‌های اتمی با حرارت دادن یک ماده در یک منبع تولید می‌شوند. سپس در خلاء فوق‌العاده بالا حرکت کرده و به یک سطح کریستالی که از پیش گرم شده است، برخورد می‌نمایند. این اتمها و یا خوشه‌های اتمی بر روی سطح کریستالی رشد می‌کنند. بر خلاف اصول کار ساده این سیستم، مسائل تکنولوژیک این دستگاه بسیار مشکل می‌باشد [۲۱].

تکنیک *MBE* قابلیت‌های بسیاری در کنترل فصل مشترک‌ها، عناصر آلیایده شده و زبری سطح دارد. خلاء بسیار بالا نیز امکان رشد مواد با خلوص بالا را فراهم می‌آورد.

اجزاء اصلی این دستگاه عبارتند از:

محفظه خلاء:

محفظه خلاء که متصل به سیستم خلاء می‌باشد از جنس فولاد زنگ نزن بوده و حاوی زیرسازه‌ای برای رشد، سیستمی برای انتقال نمونه و همچنین توانایی تحمل دماهای بالا تا حدود $C 200$ را به مدت زمان طولانی دارد.

¹ Liquid phase epitaxy

² Vapor phase epitaxy

³ Molecular beam epitaxy

⁴ Metal Organic Chemical Vapor Deposition

سیستم پمپ:

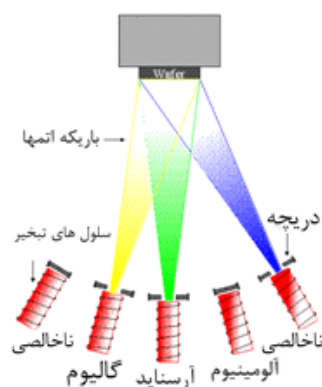
سیستم پمپ خلاء در دستگاه *MBE* باید قادر باشد آلودگی‌های محفظه رشد را با بهترین کارایی به حداقل برساند. در عمل خلاء محفظه *MBE* تا حدود 10^{-11} Torr کاهش داده می‌شود. گاز باقیمانده عمدتاً هیدروژن می‌باشد [۲۱].

کانال‌های نیتروژن مایع:

کانال‌های نیتروژن مایع محفظه اصلی رشد و فلانچ سلول‌های تبخیر را در بر می‌گیرد. در تکنیک *MBE* دیواره محفظه رشد سرد می‌باشد زیرا کانال‌های سرد اجازه تبخیر مجدد مواد را از اجزاء محفظه نمی‌دهند و تبخیر ماده فقط از سلول‌های تبخیر صورت می‌گیرد. این کانال‌های سرد کننده همچنین سلول‌های رشد را از یکدیگر ایزوله می‌کند [۲۱].

سلول‌های تبخیر:

سلول‌های تبخیر از مهمترین اجزاء *MBE* می‌باشند. زیرا نرخ جریان یافتن ماده و پایداری و خلوص آن بسیار مهم می‌باشد. این سلول‌ها همچنین باید توانایی تحمل دماهای بسیار بالا (C ۱۴۰۰) را به مدت زمان طولانی داشته باشند؛ بنابراین سلول‌های رشد باید از مواد خاصی ساخته شده و هندسه خاصی داشته باشند [۲۱].



شکل ۹-۱: روش کار دستگاه بکار برده شده برای رشد بلور و قطعات نیم‌رسانا به روش روآراستی پرتو ملوکولی

فصل دوم

عوامل پراکندگی الکترون ها

الکترون ها در طی حرکت آزادشان در درون بلور همواره عوامل پراکندگی مختلفی را تجربه می کنند. این عوامل پراکندگی سبب ایجاد تغییراتی در بردار اندازه حرکت الکترون ها درون بلور می شوند. از این رو ضروریست تا این عامل مهم را در بررسی ترابرد الکترون ها درون بلور به حساب آورده شود. منشاء این عوامل پراکندگی اغلب ارتعاشات شبکه و ناخالصی های یونیزه می باشند. برای محاسبه ترابرد الکترون ها در بلور نیمرسانا باید اطلاعات دقیق و کاملی در مورد برهمکنش و عوامل پراکندگی الکترون ها در بلور داشت. اثر این برهمکنش ها به صورت اختلال در پتانسیل دوره ای اتم های شبکه منظور می شود. در این فصل اطلاعاتی از رفتار کوانتوم مکانیکی پراکندگی های الکترون ها داده شده است که بر اساس تئوری مرتبه اول اختلال وابسته به زمان در مکانیک کوانتومی بدست می آید. به منظور محاسبه نرخ پراکندگی لازم است که حالت الکترون در فضای اندازه حرکت و مکان توصیف شود. با انتگرال گیری از این رابطه روی تمام حالت های نهایی مجاز بردار موج، می توان نرخ پراکندگی کل را محاسبه کرد. برای برقراری اصل عدم قطعیت^۱ باید اندازه حرکت الکترون کوچکتر از اندازه حرکت میانگین الکترون و مکان آن نیز باید کوچکتر از مسیر آزاد حامل باشد.

¹ Uncertainty principle

۲-۲ بررسی حرکت الکترون ها درون یک بلور ایده آل

در یک بلور ایده آل (که فاقد ناخالصی و دارای یک پتانسیل دوره ای و مستقل از زمان می باشد) الکترون ها به راحتی و دور از عوامل پراکندگی، درون بلور حرکت می کنند. در چنین حالتی الکترون در ساختار نواری بلور نوسان می کند. این نوسانات به نوسانات بلاخ^۱ معروف می باشد. در این حالت انرژی الکترون درون بلور با تغییرات بردار اندازه حرکت نوساناتی مطابق شکل (۱-۲) می کند. معادله حرکت الکترون درون بلور تحت تاثیر یک نیروی الکتریکی ثابت F عبارت است از [۶]:

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

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

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

با استفاده از نتیجه بدست آمده در تقریب تنگ، رابطه پاشندگی برای $E-K$ را می توان به فرم زیر در نظر

گرفت [۶]:

$$\varepsilon(k) = A \cdot \text{Cos}(ak) \quad (3-2)$$

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

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

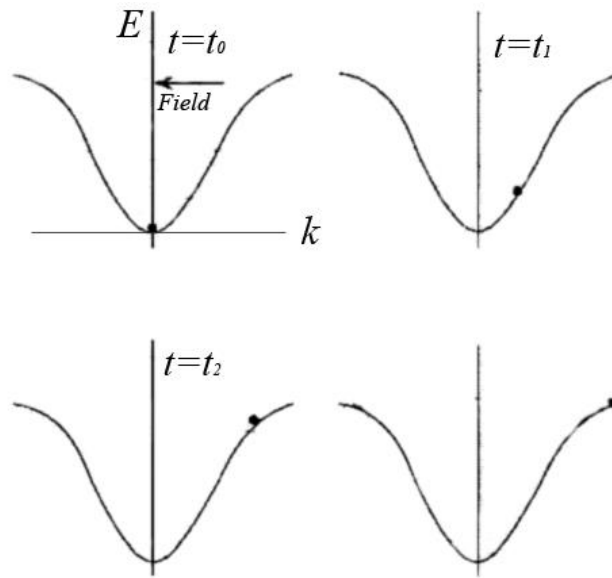
$K(0)$ را صفر در نظر می گیریم. در نهایت معادله مکان الکترون به صورت زیر خواهد بود:

$$x(t) = \int v_g(k(t)) dt = -\frac{Aa\hbar}{e|F|} \text{Cos}\left(-\frac{ae|F|t}{\hbar}\right) \quad (5-2)$$

با توجه به معادله (۵-۲) الکترون درون یک بلور کامل تحت تاثیر یک میدان الکتریکی اعمالی ثابت،

حرکت نوسانی بلاخ انجام می دهد [۶].

¹ Bloch oscillation



شکل ۲-۱: نوسانات الکترون تحت تاثیر میدان الکتریکی اعمالی درون بلور ایده آل نیمرسانا

۲-۳ انواع فرآیندهای پراکندگی الکترون ها

بلورهایی که در واقعیت با آنها سر و کار داریم بلور کامل و ایده آل نیستند. همواره عواملی درون بلور وجود دارند که سعی در از بین بردن نظم بلور دارند. این عوامل پراکندگی درون بلور های نیمرسانای مختلف یکسان نبوده و تابعی از انرژی و سرعت الکترون ها هستند [۲۵]. هر چند که بعضی از این عوامل از قبیل نواقص بلوری را می توان به حداقل رساند ولی امکان حذف آن ها به طور کامل، غیر ممکن است. به طور کلی می توان فرآیندهای پراکندگی را در بلور در سه گروه عمده زیر طبقه بندی کرد:

۱- ناشی از ارتعاشات یا فونون^۱ های شبکه

۲- فرآیندهای ناشی از حضور ناخالصی های یونیزه^۲

۳- فرآیندهای ناشی از ناکاملی های بلوری^۱

¹ Phonon oscillation

² Ionized impurities

در ادامه به معرفی این عوامل خواهیم پرداخت و اثر هر یک را بر روی تراورد الکترون ها درون بلور نیمرسانا بررسی خواهیم کرد.

۲-۴ ناکاملی‌های بلور^۲

بلور ایده آل بلوری است که تمامی اتم‌های تشکیل‌دهنده آن از نظم شبکه برآوه بلور تبعیت می‌کنند. همانگونه که می‌دانیم در طبیعت عوامل مختلفی موجب از بین رفتن نظم اتم‌های شبکه و پتانسیل تناوبی بلورهای واقعی می‌شوند. از جمله این عوامل می‌توان به انواع نواقص بلوری، اشاره کرد. در این حالت بلور را ناکامل می‌گویند.

منظور از نواقص بلوری قرار نگرفتن گروهی از اتم‌های تشکیل‌دهنده بلور در نقاط شبکه است. انواع مختلف نواقص بلوری به شرح زیر است:

نواقص نقطه‌ای^۳: در این نقص بلوری اتم‌ها بصورت منفرد در نقاط اصلی شبکه قرار ندارند. مانند تهی جاها^۴، قرار گرفتن ناخواسته اتم‌های ناخالصی محیط در شبکه^۵ و یا قرار نگرفتن اتم‌های میزبان در نقاط اصلی شبکه^۶ (شکل (۲-۲ الف)) [۸].

نواقص خطی^۷: در این نقص بلوری اتم‌ها در یک بعد در نقاط شبکه قرار ندارند مانند دررفتگی‌ها^۸ (شکل (۲-۲ ب)) [۸].

نواقص سطحی^۱: در این نقص بلوری اتم‌ها در دو بعد در نقاط اصلی شبکه قرار دارند (به علت پایان یافتن بلور) [۸].

¹ Crystal defect

² Crystal imperfections

³ Point defects

⁴ Vacancies

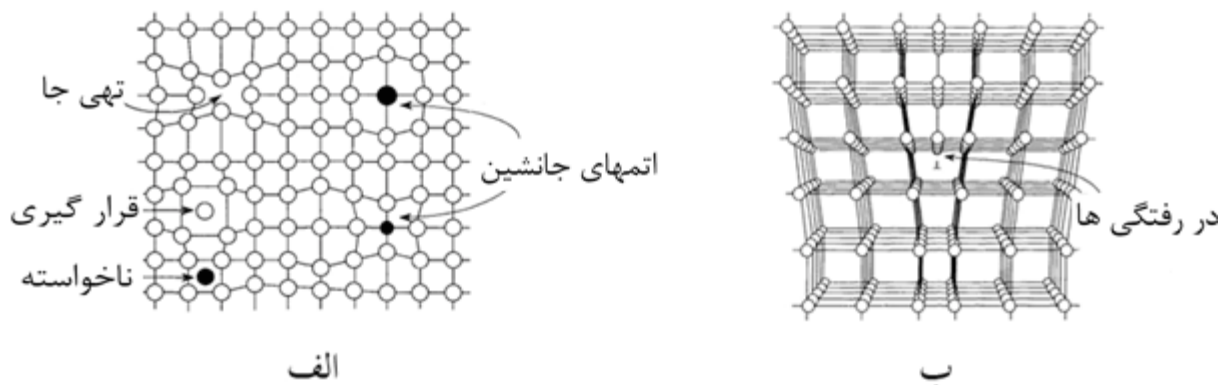
⁵ Substitutional

⁶ Self interstitial

⁷ Line defects

⁸ Dislocations

در این کار پژوهشی برای شبیه سازی نیمرسانا های کپه ای و قطعات نیمرسانا فقط اثرات ناشی از ناخالصی های یونیزه و ارتعاشات شبکه در نظر گرفته شده است. به دلیل اینکه امروزه تکنولوژی رشد بلور های نیمرسانا با خلوص و کیفیت کاملا بالا فراهم شده است و می توان اثر نواقص بلوری را تا حد زیادی کاهش داد.



شک

ل ۲-۲: الف) نمایش از نواقص نقطه ای در شبکه بلور نیمرسانا ب) نمایش در رفتگی در شبکه بلوری نیمرسانا

۲-۵ پراکندگی از نوسانات شبکه

همانگونه که عنوان شد بروز نوسانات بلاخ در بلور های ایده آل انتظار می رود. در بلورهای واقعی، اتمها حول نقطه تعادل خود نوسان می کنند. به همین دلیل نوسانات بلاخ درون بلور نیمرسانای واقعی مشاهده نشده است [۶]. دامنه ی این نوسانات وابسته به دما هستند. این ارتعاشات باعث تغییرات زمانی پتانسیل تناوبی در نیمرسانا می شوند که نتیجه آن پراکندگی الکترون ها در درون بلور است. ارتعاشات اتم ها در شبکه کوانتیزه است و کوانتای این ارتعاشات را فونون می نامند [۵]. فرآیندهای پراکندگی شبکه را می توان به عنوان برهم کنش الکترون ها با فونون در نظر گرفت. پراکندگی الکترون ها توسط فونون ها بستگی به ماهیت فونون ها دارد [۸]. به خاطر نیروهای پیوندی که ساختار بلوری را ایجاد می کنند، حرکت تصادفی اتم ها به شدت با یکدیگر جفت

¹ Surface defects

شده‌اند. وقتی الکترون‌ها در بلور حرکت می‌کنند، می‌توانند با اتم‌های شبکه انرژی و اندازه حرکت مبادله کنند. برخلاف اتم‌های ناخالصی و نواقص بلوری که می‌توان با خالص کردن بلور و بهبود بخشیدن فرآیند رشد بلور اثرات آن را کم کرد، نوسانات شبکه همیشه وجود دارند. بنابراین ضروریست تا نقش این عامل مهم را که نقش عمده‌ای در تراپرد الکترون‌ها دارد، بررسی نماییم.

نوسانات 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 q را بردار موج نوسانات شبکه در نظر بگیریم، معادله نوسان هر اتم را می‌توان با رابطه زیر نشان داد [۲۲]:

$$U_i(q) = U_i \exp[i(q \cdot r - \omega t)] \quad (۶-۲)$$

در ترکیبات نیمرسانای گروه III-V به هر سلول واحد شبکه دو نوع اتم متفاوت متصل است. برای اینگونه ترکیبات مدهای نوسانی آکوستیکی^۱ و اپتیکی^۲ در بلور نیمرسانا وجود خواهند داشت. رابطه ω بر حسب k برای نیمرسانای GaAs مطابق شکل (۲-۳ الف) می‌باشد. با توجه به این شکل برای هر یک از مدهای نوسانی فوق دو نوع مد نوسانی طولی و عرضی وجود دارد. شاخه آکوستیکی به حالتی اطلاق می‌شود که دو اتم هر سلول واحد همزمان در یک جهت حرکت نمایند. برای مثال در نیمرسانای GaAs هر دو اتم Ga و As هم جهت با یکدیگر نوسان نمایند [۸]. در مد اپتیکی دو اتم در جهت‌های مخالف نوسان می‌نمایند (شکل ۲-۳ ب). با استفاده از مکانیک کوانتوم تعداد مد‌هایی که با فرکانس ω در دمای T برانگیخته می‌شوند به صورت زیر بدست می‌آید [۱۰]:

$$n_w = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} \quad (۷-۲)$$

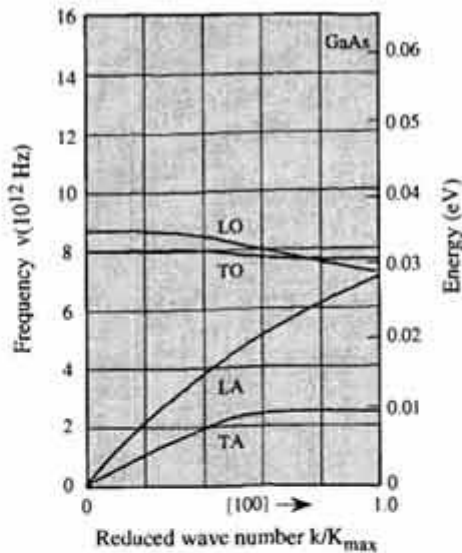
از آنجایی که نوسانات فونون‌ها شبیه به نوسانگر هماهنگ ساده است، بنابراین انرژی هر مد نوسانی با فرکانس زاویه‌ای ω با روشی مشابه آنچه برای نوسانگر هماهنگ ساده به کار می‌رود بدست می‌آید که برابر است با:

1- Acoustic mode

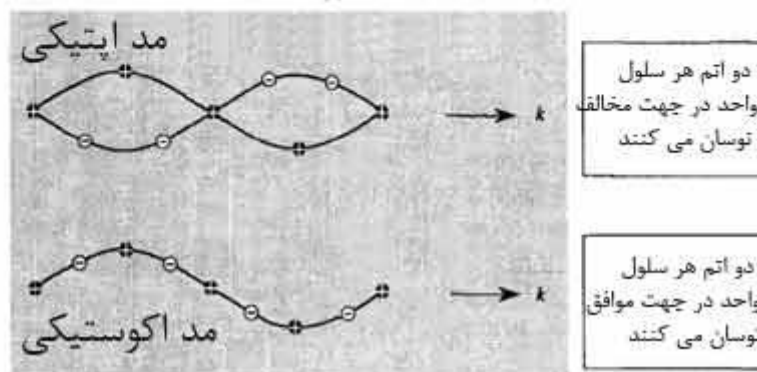
2- Optical mode

$$E_{\omega} = (n_w + \frac{1}{2})\hbar\omega$$

(۸-۲)



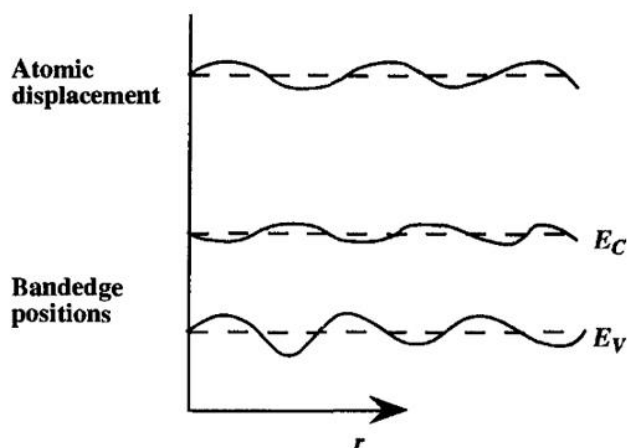
(a)



شکل ۲-۳: الف) رابطه پراکندگی در نیمرسانای *GaAs* (ب) جابجایی اتم ها در دو شاخه آکوستیکی و اپتیکی ارتعاشات

شبهه [۶]

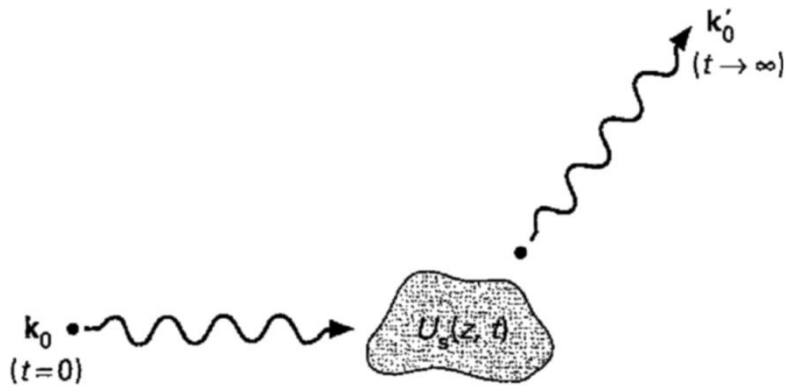
در شکل (۲-۴) اثر نوسانات شبکه بر روی پتانسیل تناوبی به طور نمادین رسم شده است. این اختلال به وجود آمده در پتانسیل (که با گذشت زمان به سرعت تغییر می کند) عامل اصلی پراکندگی الکترون ها در بلور است و سبب ایجاد محدودیت هایی در خواص الکترونیکی و اپتوالکترونیکی قطعات نیمرسانا می شود [۸].



شکل ۲-۴: تاثیر ارتعاشات شبکه بر روی پتانسیل تناوبی شبکه

۶-۲ محاسبه نرخ پراکندگی

فرآیندهای پراکندگی گوناگونی وجود دارند که می توانند بر حرکت الکترون ها درون یک بلور نیمرسانا تاثیر گذار باشند. این فرآیندها برای تمام قطعات نیمرسانا یکسان نمی باشند. هر یک از این فرآیندها بستگی به قدرت میدان الکتریکی، دمای محیط و خواص ماده مورد نظر دارند. بردار موج الکترون ها در اثر فرآیندهای پراکندگی تغییر می کند. شکل (۲-۵) اثر یک پتانسیل پراکندگی فرضی را بر اندازه حرکت الکترون ها نشان می دهد. هامیلتونی اختلالی که الکترون ها در طی مسیر حرکت آزادشان و در اثر فرآیندهای پراکندگی متفاوت احساس می کنند به زمان وابسته می باشد؛ بنابراین ضروری است که از نظریه اختلال وابسته به زمان استفاده شود [۳].



شکل ۲-۵: تاثیر یک پتانسیل پراکندگی فرضی بر اندازه حرکت الکترون ها

مجموعه جواب های معادله شرودینگر کامل است یعنی در حالتی که هامیلتونی اختلالی H' وجود ندارد،

خواهیم داشت [۲۳]:

$$H_0 \phi_n = E_n^0 \phi_n \quad (9-2)$$

آنگاه باید ویژه توابع $\psi(t)$ در معادله شرودینگر به صورت زیر صدق نماید:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = [H_0 + \lambda H'(t)] \psi(t) \quad (10-2)$$

می توانیم $\psi(t)$ را به صورت مجموعه کاملی از جواب ها به صورت زیر بسط دهیم :

$$\psi(t) = \sum_n C_n(t) e^{-iE_n^0 t/\hbar} \phi_n \quad (11-2)$$

مجموعه جواب های معادله ۲-۸ باید در معادله شرودینگر وابسته به زمان (معادله ۲-۷) صدق نماید.

بنابراین باید داشته باشیم [۲۳]:

$$\sum_n i\hbar \left[\frac{dC_n(t)}{dt} + E_n^0 C_n(t) \right] e^{-iE_n^0 t/\hbar} \phi_n = \sum_n [E_n^0 + \lambda H'(t)] C_n(t) e^{-iE_n^0 t/\hbar} \phi_n \quad (12-2)$$

یعنی خواهیم داشت:

$$i\hbar \sum_n \frac{dC_n(t)}{dt} e^{-iE_n^0 t/\hbar} \phi_n = \lambda \sum_n H'(t) C_n(t) e^{-iE_n^0 t/\hbar} \phi_n \quad (13-2)$$

با ضرب کردن طرفین در ویژه توابع ϕ_m^* ها و با استفاده از رابطه بهنجارش بین آنها ها خواهیم داشت:

$$i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} = \lambda \sum_n C_n(t) e^{-i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar} \langle \phi_m | H'(t) | \phi_n \rangle \quad (14-2)$$

اگر در زمان $t=0$ دستگاه در حالت خاص ϕ_k باشد به طوری که $\psi(0) = \phi_k$ ، یعنی

$$C_n(0) = \delta_{nk} \quad (15-2)$$

بنابراین برای هر $m \neq k$ داریم:

$$i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} = \lambda e^{-i(E_m^0 - E_k^0)t/\hbar} \langle \phi_m | H'(t) | \phi_k \rangle \quad (16-2)$$

پس با یک بار انتگرال گیری احتمال گذار از حالت اولیه ϕ_m به حالت نهایی ϕ_k بدست می آید [۲۳]:

$$C_n(t) = \int_0^t \frac{\lambda}{i\hbar} e^{-i(E_m^0 - E_k^0)t'/\hbar} \langle \phi_m | H'(t') | \phi_k \rangle dt' \quad (17-2)$$

$$P_n(t) = |\langle \phi_n | \psi(t) \rangle|^2 = |C_n(t)|^2 \quad (18-2)$$

۷-۲ پراکندگی از فونون های آکوستیکی

نوسانات مد آکوستیکی عامل ایجاد یک نیروی کششی در بلور می شوند و الکترون ها یک پتانسیل

اختلالی به فرم زیر را احساس خواهند کرد [۲۴]:

$$V_{ac} = D \nabla \cdot u \quad (19-2)$$

که در آن D پتانسیل تغییر شکل آکوستیکی می باشد و u جابجایی نوسانات می باشد.

جابجایی اتم ها از حالت تعادلشان تحت اثر نوسانات آکوستیکی هر اتم در بلور را می توان به صورت زیر

در نظر گرفت:

$$S_{1b} = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} \exp[i(q.r - \omega t)] \quad (20-2)$$

که در رابطه فوق ρ چگالی ماده و Ω حجم بلور نیمرسانا است. با توجه به تقریب مرتبه اول بورن^۱، مقادیر کوچک q را در نظر می گیریم. بنابراین هامیلتونی اختلالی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$H' = \sum_q iqD \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q} \right)^{1/2} \exp[i(q.r - \omega t)] \quad (21-2)$$

با قرار دادن معادله (۲۱-۲) در معادله (۱۸-۲) و با انجام محاسبات مربوطه، در نهایت نرخ پراکندگی الکترون از فونون های آکوستیکی به شکل زیر خواهد بود^[۸]:

$$W(k) = \frac{2\pi D^2 K_B T}{\hbar C_l} N(E_k) \quad (22-2)$$

که در آن T دمای محیط و $N(E_k)$ چگالی حالت بر حسب انرژی الکترون ها است (معادله ی ۱۱-۱). در این معادله C_l برابر است با:

$$\sqrt{\frac{C_l}{\rho}} = v_s \longrightarrow \rho v_s^2 = C_l \quad (23-2)$$

که v_s سرعت سوق^۲ صوت در بلور نیمرسانا است.

برای بدست آوردن نرخ پراکندگی از فونون های آکوستیکی فرض مهمی را در نظر گرفته ایم. در دمای اتاق انرژی فونون های آکوستیکی بسیار کمتر از $K_B T$ است. بنابراین مقدار انرژی که الکترون ها از فونون های آکوستیکی کسب می نمایند، بسیار ناچیز است و می توان آن را صفر در نظر گرفت. به عبارت دیگر می توان گفت که این فرآیند پراکندگی ماهیت کشسان دارد^[۳].

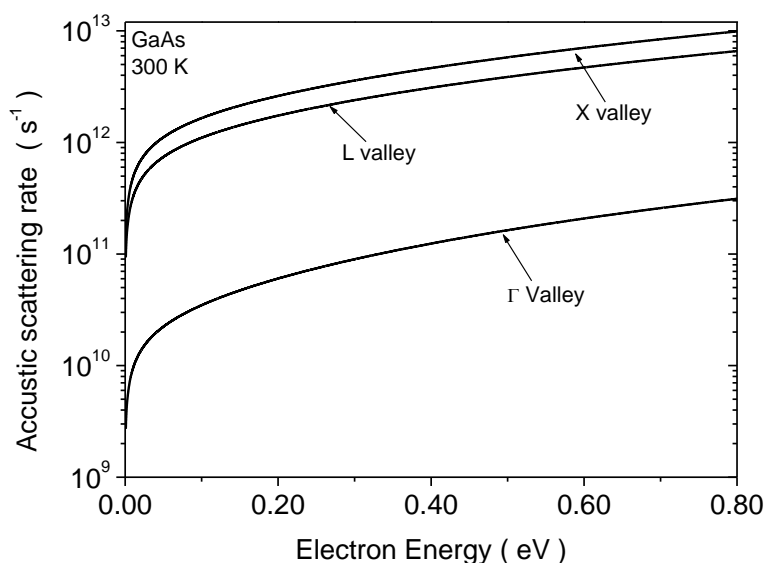
شکل (۶-۲) نمودار تغییرات نرخ پراکندگی الکترون ها از فونون های آکوستیکی را بر حسب تابعی از انرژی الکترون ها در نیمرسانای $GaAs$ نشان می دهد. با توجه به این شکل با افزایش انرژی الکترون ها تا حدود 0.8 eV ، نرخ پراکندگی از فونون های آکوستیکی تقریباً ۱۰۰۰ برابر می شود. این افزایش پراکندگی ناشی از زیاد تر شدن چگالی حالات با افزایش انرژی است. همچنین پراکندگی ناشی از فونون های آکوستیکی در دره

¹ Born approximation

² Sound velocity

های فضایی L و X زیاد تر از پراکندگی ناشی از این فونون ها در دره مرکزی Γ است. همانگونه که در معادله (۲-۲۲) مشاهده می شود، چگالی حالات با جرم موثر الکترون رابطه مستقیم دارد. با توجه به جدول (۴-۱) جرم موثر الکترونی در دره های فضایی^۱ نسبت به دره مرکزی در نیمرسانای $GaAs$ خیلی بیشتر است و در نتیجه نرخ پراکندگی الکترونی در این دره ها خیلی بیشتر از دره ی مرکزی خواهد بود.

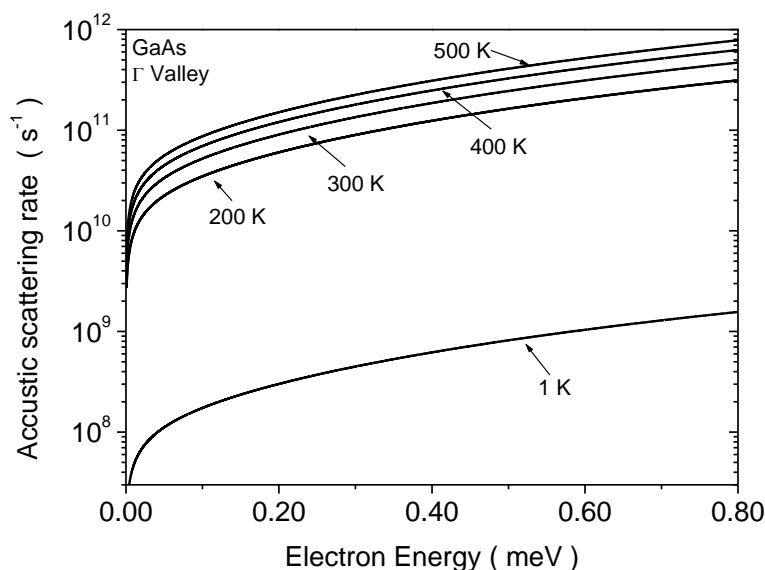
در شکل (۲-۷) وابستگی دمایی نرخ پراکندگی از فونون های آکوستیکی در نیمرسانای $GaAs$ رسم شده است. این نمودار و سایر نمودار های این فصل را با استفاده از یک زیر برنامه کامپیوتری که در برنامه اصلی بکار می رود، محاسبه شده است. با توجه به این شکل با افزایش دمای محیط نرخ پراکندگی از فونون های آکوستیکی افزایش می یابد. همچنین ملاحظه می شود که در دماهای بسیار پایین (۱ کلوین) احتمال وقوع این فرآیند پراکندگی به شدت کاهش می یابد هر چند که باز هم مقداری در حدود $10^{-8} s^{-1}$ را دارد.



شکل ۲-۶: نمودار تغییرات نرخ پراکندگی الکترون ها از فونون های آکوستیکی بر حسب تابعی از انرژی الکترون ها در

نیمرسانای $GaAs$ در سه دره L, X, Γ

¹ Satellite valley



شکل ۲-۷: وابستگی دمایی نرخ پراکندگی از فونون های آکوستیکی واقع در دره ی Γ در نیمرسانای $GaAs$

۲-۸ فونون های اپتیکی غیر قطبی

بر خلاف فونون های آکوستیکی که انرژی آنها بسیار کمتر از $k_B T$ است و پراکندگی ناشی از آنها را کشسان در نظر گرفتیم؛ انرژی فونون های اپتیکی غیر قطبی ($\hbar\omega_0$) قابل مقایسه با انرژی متوسط گرمایی حامل ها در دمای اتاق ($k_B T$) می باشد و از این رو، این فرآیند ماهیت غیر کشسان خواهد داشت. یعنی انرژی الکترون در طی برخورد به اندازه ی $\hbar\omega_0$ افزایش یا کاهش می یابد. انتقال بین دره ای حامل ها فقط در پراکندگی فونون های اپتیکی غیر قطبی رخ می دهد [۹]. این نوع پراکندگی ناشی از نوسانات مکانی مد اپتیکی اتمها می باشد. این نوسانات نیز مانند مد آکوستیکی فونون ها عمل می کنند و تغییراتی در پتانسیل شبکه ایجاد می کند. از آنجائیکه برای پراکندگی بین دره ای به اندازه حرکت بزرگی نیاز است، تنها فونون های با بردار موج نزدیک مرز منطقه بریلوئن در پراکندگی بین دره ای شرکت می کنند. انرژی فونون های اپتیکی نزدیک مرکز منطقه بریلوئن $\hbar\omega_0$ می باشد. بنابراین در محاسباتمان $\hbar\omega_{ij}$ که بیانگر انرژی فونون های اپتیکی نزدیک مرز منطقه است را در نظر می گیریم. [۹] در مجموع دو نوع فرآیند پراکندگی بین دره ای داریم [۶]:

الف) فرآیند پراکندگی بین دره ای بین دره های همسان

در این نوع پراکندگی الکترون ها از یک دره فضایی مثلا L به یکی دیگر از دره های فضایی L پراکنده می شوند(دره های همسان).

ب) فرآیند پراکندگی بین دره ای بین دره های غیر همسان

در این نوع پراکندگی الکترون ها از یک دره فضایی مثلا L به یکی دیگر از دره های فضایی غیر از دره L به عنوان مثال X پراکنده می شوند(دره های ناهمسان).

اختلال ناشی از فونون های اپتیکی با دامنه ی نوسانات شبکه متناسب است. پتانسیل اختلالی ناشی از نوسانات مد اپتیکی برای فرآیند پراکندگی بین دره ای عبارت است از:

$$V_{inter-valley} = A_{ij}u \quad (25-2)$$

که در رابطه فوق A_{ij} ها ضرایب پتانسیل تغییر شکل اپتیکی بین دره ی i ام و j ام هستند. جابجایی ناشی از فونون های اپتیکی را می توانیم به صورت زیر فرض نماییم

$$U_{OP} = \sum_q \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q}\right)^{1/2} \exp[i(q.r - \omega t)] \quad (26-2)$$

هامیلتونی اختلالی ناشی از پتانسیل اختلالی با معادله (۲۶-۲) برابر است با:

$$H'_{OP} = \sum_q A_{ij} \left(\frac{\hbar}{2\rho\Omega\omega_q}\right)^{1/2} \exp[i(q.r - \omega t)] \quad (27-2)$$

با محاسباتی مشابه آنچه تا به حال برای حالت درون دره ای داشتیم و با توجه به این نکته که در این

حالت باید انرژی فونون ها بیشتر از انرژی فاصله جدایی بین دو دره باشد ($\Delta E_{ij} = E_j - E_i$)، خواهیم داشت:

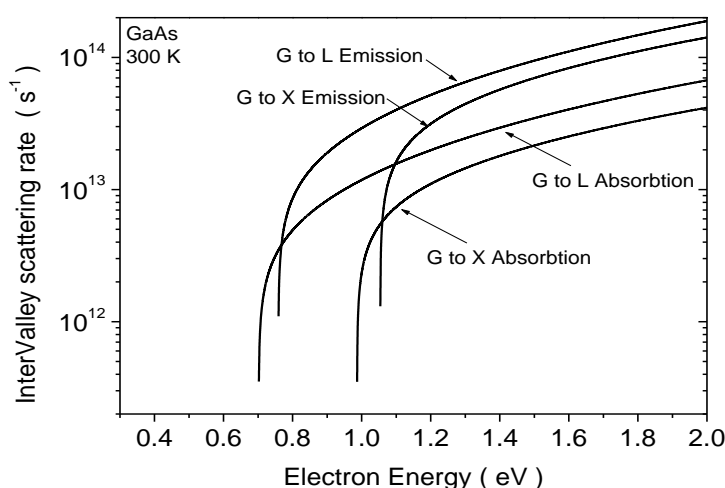
$$W(k) = \frac{Z_j \pi A_{ij}^2}{\rho \omega_{ij}} (n(\omega_{ij}) + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}) N(E_k \pm \hbar \omega_{ij} - \Delta E_{ij}) \quad (28-2)$$

که $n(\omega)$ تابع توزیع فرمی دیراک می باشد. در رابطه فوق Z_j عبارت است از تعداد دره های فضایی

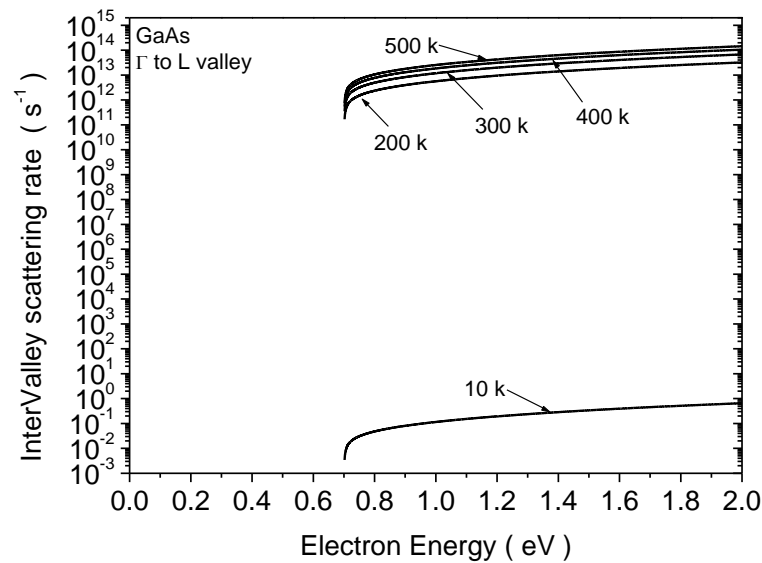
موجود که الکترون ها می توانند به آن پراکنده شوند. این ضریب به این دلیل اعمال شده است که الکترون ها می توانند به هر یک از این دره Z_j پراکنده شوند.

در شکل (۸-۲) نمودار تغییرات نرخ پراکندگی بین دره ای بر حسب انرژی الکترون ها برای نیمرسانای *GaAs* رسم شده است. نرخ پراکندگی برای گذار از دره مرکزی به دره های فضایی *L* و *X* برای دو حالت جذب و گسیل فونون در شکل مشخص شده است. برای شروع پراکندگی بین دره ای، انرژی الکترون ها باید حداقل برابر با اختلاف انرژی بین دره ای مبدا و دره ای که به آن پراکنده می شوند، باشد. بنابراین با توجه به این شکل برای پراکندگی از دره مرکزی به دره *L*، الکترون ها باید حداقل انرژی 0.7 eV را کسب نمایند. با توجه این به شکل فرآیند بین دره ای با جذب فونون همواره در انرژی های پایین تری نسبت به حالت گسیل فونون شروع می شود. دلیل این رویداد ناشی از اینست که در هر انرژی دلخواهی الکترون می تواند فونون های شبکه را جذب نماید (به شرط آنکه حداقل انرژی الکترون برابر با انرژی بین دو دره باشد) ولی برای گسیل فونون، انرژی الکترون باید بیشتر از انرژی فونون های شبکه باشد تا بتواند یک فونون گسیل نماید.

در شکل (۹-۲) نمودار نرخ پراکندگی بین دره ای از دره مرکزی به دره *L* برای دما های مختلف نشان داده شده است. با افزایش دمای محیط ارتعاشات شبکه افزایش می یابد و بنابراین احتمال پراکندگی الکترون ها توسط این عامل افزایش می یابد. با توجه به این شکل، در دمای 10 کلوین سهم این فرآیند پراکندگی بسیار کاهش می یابد که بسیار بیشتر از کاهش نرخ پراکندگی آکوستیکی است.



شکل ۸-۲: نمودار تغییرات نرخ پراکندگی بین دره ای از دره مرکزی به دره های فضایی *L* و *X* بر حسب انرژی الکترون ها در دو حالت جذب و گسیل فونون برای نیمرسانای *GaAs*



شکل ۹-۲: نمودار وابستگی دمایی نرخ پراکندگی بین دره ای از دره مرکزی به دره L در حالت جذب فونون.

۹-۲ فونون های اپتیکی قطبی

در نیمرساناهای ترکیبی مانند ترکیبات نیمرسانای گروه III-V، نوسان های مد اپتیکی دو اتم هر سلول واحد، سبب پیدایش پتانسیل اختلالی مهم دیگری علاوه بر فونون های اپتیکی غیر قطبی می شود. با توجه به تفاوت الکترون خواهی دو اتم، یک اتم مرکز بار مثبت می شود (دارای بار $+e^*$) و اتم دیگر مرکز بار منفی می شود (دارای بار $-e^*$). نوسانات دو اتم سبب ایجاد یک ممان دو قطبی می شود که به عنوان عامل موثری برای الکترون ها درون بلور بشمار می آید. میدان حاصل از این دو قطبی به شدت با الکترون ها بر همکنش می کند و سبب پراکندگی آنها می شود. این فرآیند پراکندگی الکترون ها، فرآیند پراکندگی فونون های اپتیکی-قطبی نام دارد. این فرآیند پراکندگی در دمای اتاق بسیار تاثیر قابل توجهی بر تراورد الکترون ها دارد [۲۶].

پراکندگی از فونون های قطبی می تواند توسط فونون های آکوستیکی هم ایجاد شود که فرآیند پراکندگی پیزو الکتریک نام دارد. این فرآیند پراکندگی در دماهای بسیار پایین در نیمرسانای ذاتی تاثیر قابل توجهی دارد ولی در دماهای در محدوده دمای اتاق سهمی زیادی در فرآیند پراکندگی الکترون ها نخواهد داشت و اثر آن ناچیز است [۲۷].

پتانسیل این بر هم کنش عبارت است از:

$$V_{po} \approx e^* u$$

(۲۹-۲)

بار موثر e^* متناسب است با :

$$e^* \propto \epsilon_\infty \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right)^{1/2} \quad (۳۰-۲)$$

که در آن ϵ_∞ و ϵ_s به ترتیب گذردهی فرکانس بالا^۱ و گذردهی فرکانس پایین^۲ شبکه بلور هستند [۲۷]. همچنین در این گونه ترکیبات فونون‌های اپتیکی تا قبل از رسیدن به انرژی فونون‌های قطبی اپتیکی $\hbar\omega_0$ ، هیچ‌گونه گسیلی از خود نشان نمی‌دهند و تمامی انرژی کسب شده را صرفاً به صورت ارتعاش فونون اپتیکی در شبکه بلور آزاد می‌کنند. آهنگ پراکندگی از فونون‌های اپتیکی برای الکترون‌هایی با انرژی E که در دره مرکزی Γ قرار دارند از رابطه زیر بدست می‌آید [۱۲]:

$$R_{po}(\mathbf{k}) = \frac{\sqrt{2} m^* e^* \omega_{op}}{4\pi \epsilon_0 \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{1 + 2\alpha E'}{\gamma^{1/2}(E)} F_o(E, E') \left\{ \begin{matrix} N_{op} \\ N_{op} + 1 \end{matrix} \right. \quad (۳۱-۲)$$

که در آن داریم [۱۲]:

$$F_o(E, E') = \left\{ 2(4a_g + 2\gamma b_g + \gamma^2 c_g) \operatorname{Im} \left[\frac{\gamma^{1/2}(E) + \gamma^{1/2}(E')}{\gamma^{1/2}(E) - \gamma^{1/2}(E')} \right] \right\} - (2b_g - c\gamma_0)$$

$$\left\{ \begin{matrix} a_g = \frac{(1 + \alpha E)(1 + \alpha' E')}{(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha' E')} \\ b_g = \frac{2\sqrt{\alpha\alpha' EE'(1 + \alpha E)(1 + \alpha' E')}}{(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha' E')} \\ c_g = \frac{\alpha\alpha' EE'}{(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha' E')} \end{matrix} \right. \quad (۳۲-۲)$$

¹ High frequency permittivity

² Low frequency permittivity

$\hbar\omega_{op}$ انرژی فونون‌های اپتیکی طولی می‌باشد که فرض کرده‌ایم ثابت است و N_{op} عدد اشغال فونونی^۱ است. تعداد متوسط فونون‌های هر مد نوسانی که از تابع توزیع بوز-اینشتین^۲ تبعیت کرده برابر است با:

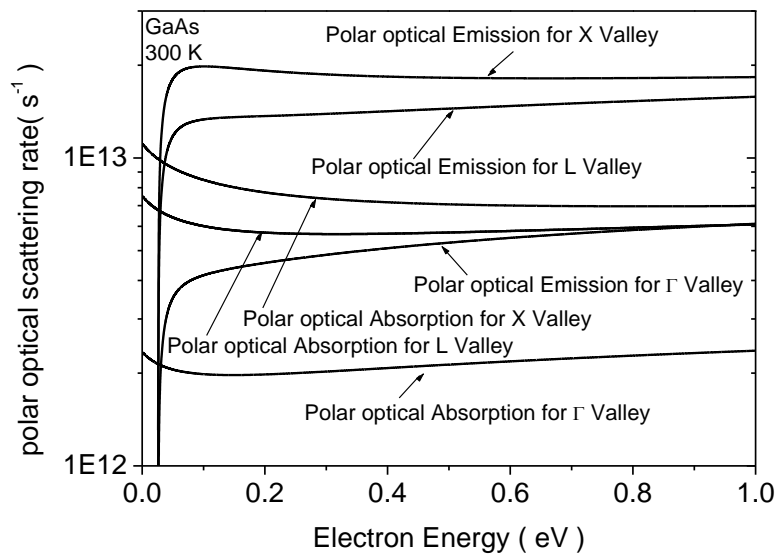
$$N_{op} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{op}}{K_B T}\right) - 1} \quad (۳۳-۲)$$

N_{op} متناظر با پراکندگی بوسیله جذب فونون و $N_{op}+1$ متناظر با پراکندگی به وسیله گسیل فونون است.

در شکل (۲-۱۰) نرخ پراکندگی الکترون از فونون‌های قطبی اپتیکی شبکه در دو حالت جذب و گسیل فونون رسم شده است. جذب فونون از شبکه برای الکترون‌ها در هر انرژی امکان پذیر است ولی برای گسیل فونون، انرژی الکترون‌ها باید حداقل به اندازه انرژی فونون‌های قطبی-اپتیکی شبکه رسیده باشد. با توجه به این شکل در نیمرسانای *GaAs* نرخ پراکندگی از فونون‌های قطبی اپتیکی در دره‌های فضایی انرژی بسیار بیشتر از دره مرکزی می‌باشد که ناشی از زیاد تر بودن جرم موثر الکترونی در دره‌های فضایی در این ماده است. وابستگی دمایی نرخ پراکندگی از فونون‌های قطبی اپتیکی در شکل (۲-۱۱) رسم شده است. با توجه به این شکل این پراکندگی با افزایش دما زیاد می‌شود هر چند که این تغییرات تفاوت قابل توجهی ندارد. مقدار این پراکندگی در دمای ۱۰ کلوین هنوز هم زیاد و قابل مقایسه با مقدارش در دمای اتاق است. از این رو اثر این پراکندگی را حتی در دماهای خیلی پایین نیز نمی‌توان به طور قابل توجهی کاهش داد.

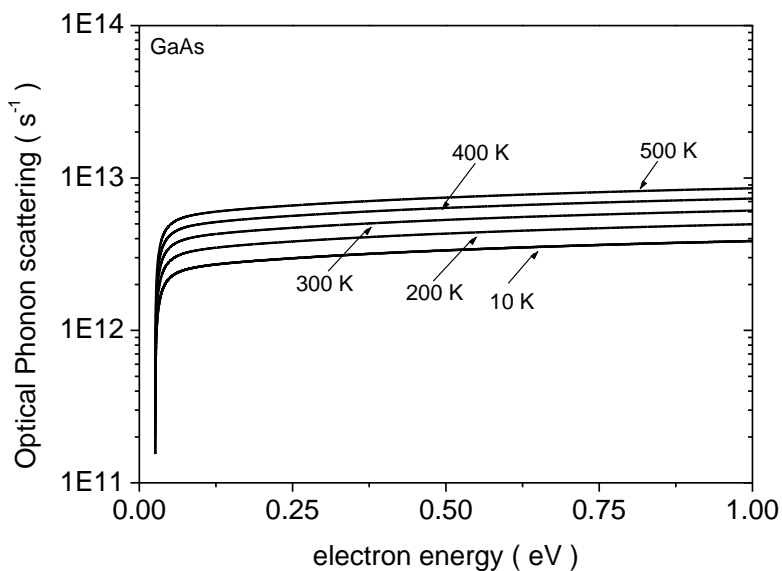
1- Phonon occupancy number

2- Bose-Einstein distribution



شکل ۲-۱۰: نرخ پراکندگی الکترون از فونون های قطبی اپتیکی شبکه در دو حالت جذب و گسیل فونون در نیمرسانای

GaAs



شکل ۲-۱۱: وابستگی دمایی نرخ پراکندگی از فونون های قطبی اپتیکی در حالت جذب فونون، در نیمرسانای *GaAs*

۲-۱۰ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه

ناخالصی های یونیزه به طوری کاتوره ای در سرتاسر بلور توزیع شده اند. الکترون ها در بلور همواره تحت تاثیر بار الکتریکی این ناخالصی ها قرار دارند. به دلیل استتار شدن بار یون توسط ابر الکترونی در اتمهای درون بلور نیمرسانا، همواره پتانسیلی که توسط الکترون ها احساس می شود کمتر از بار یک یون خالص در خلاء است. پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه را می توان به دو شیوه کانول^۱ و ویسکوف^۲ و یا روش هرینگ-بروکس^۳ بررسی نمود [۳]. تفاوت این دو روش در پتانسیل استتار شده ای است که استفاده می کنند. در هر دو روش از تقریب بورن در تئوری پراکندگی استفاده می شود. در این پایان نامه برای تعیین نرخ پراکندگی ناشی از بار های استتار شده از روش هرینگ-بروکس استفاده می نمایم.

اگر اتمهای شبکه خیلی به همدیگر نزدیک نباشند، می توان پتانسل الکتروستاتیکی استتار شده را با حل معادله پواسون در مختصات کروی بدست آورد [۶]:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r^2 V) = \frac{q}{k_s \epsilon_0} [n - N_D^+] \quad (2-34)$$

که در رابطه فوق n چگالی الکترون های ناخالصی ها در حالت تعادلی و N_D غلظت ناخالصی آلاینده و در دمای T در بلور نیمرسانا است. در مقیاس میکروسکوپی یک شرط خنثی بودن محیط حکم می نماید که $n = n_0 = N_D^+$ باشد. اما در مقیاس میکروسکوپی چنین نیست. در حقیقت یک پتانسیل مختل کننده برابر با $V = V_0 + \delta V$ و یک چگالی بار $n = n_0 + \delta n$ در اطراف هر یون وجود خواهد داشت. با در نظر گرفتن پتانسیل و بار اطراف هر یون به این صورت و جایگذاری این مقادیر در معادله (۲-۳۴) خواهیم داشت [۶]:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \delta V}{\partial r} \right) = \frac{q \delta n}{k_s \epsilon_0} \quad (2-35)$$

اگر n به اندازه کافی کوچک باشد به ما این اجازه را میدهد که از تابع توزیع کلاسیکی استفاده نمایم:

¹ Conwell

² Weisskopf

³ Herring – Brooks

$$n = N_C e^{[E_F - E_C(r)]/k_B T} \quad (36-2)$$

اما برای یک نیمرسانای غیر تبهگن می توان نوشت:

$$E_C(r) = \text{Const} - qV(r) \quad (37-2)$$

بنابراین یک اختلال کوچک در چگالی حامل ها می تواند با یک اختلال کوچک در پتانسیل همراه

باشد [۶]:

$$\delta n = \frac{\partial n}{\partial V} \delta V = \frac{qn_0}{k_B T} \delta V \quad (38-2)$$

با قرار دادن این نتیجه در معادله پواسون خواهیم داشت:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \delta V}{\partial r} \right) = \frac{q^2 n_0}{k_s \epsilon_0 k_B T} \delta V = \frac{\delta V}{L_D^2} \quad (39-2)$$

که در آن:

$$L_D = \sqrt{\frac{k_s \epsilon_0 k_B T}{q^2 n_0}} \quad (40-2)$$

پارامتر فوق با نام طول دبای^۱ شناخته می شود و اشاره به طول موثر استتار دارد. برای نیمرساناهای

تبهگن^۲، آمار فرمی دیراک را باید در محاسبات بکار برد.

در نهایت جواب معادله (۳۹-۲) به فرم زیر خواهد بود [۶]:

$$\delta V = \frac{q^2}{4\pi k_s \epsilon_0 r} \exp(r/L_D) \quad (41-2)$$

در نهایت برای نیمرسانای نوع n می توان پتانسیل اختلالی ناشی از پتانسیل استتار شده یونی را به

صورت زیر در نظر گرفت:

¹ Debye length

² Degenerate semiconductors

$$H'_{\text{Ionized-Impurity}} = \frac{q^2}{4\pi k_s \epsilon_0 r} \exp(r / L_D) \quad (42-2)$$

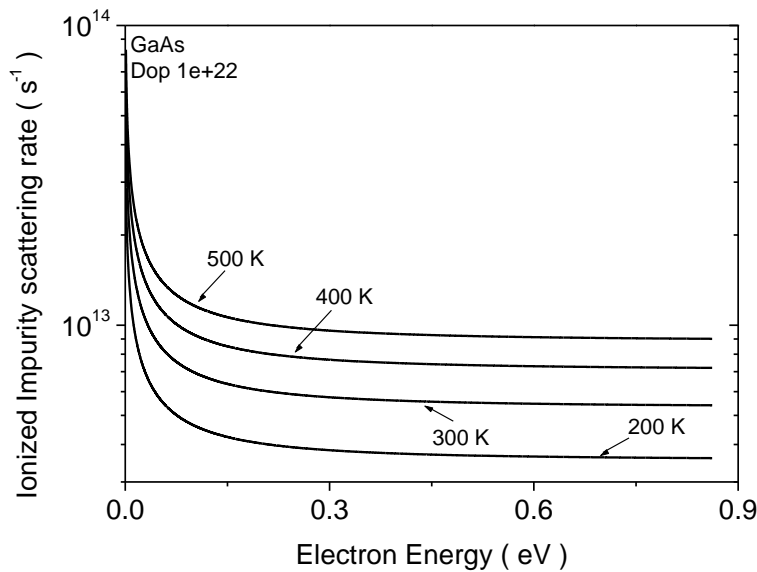
که در آن r فاصله الکترون از یون است. با جایگذاری پتانسیل اختلالی فوق و با استفاده از قاعده طلایی فرمی^۱، نرخ پراکندگی به صورت زیر بدست می آید:

$$W_{im}(\mathbf{k}) = \frac{8\pi N_D e^4}{\epsilon^2 \hbar q_0} (m_i^{*2} m_l^*)^{1/2} \gamma^{1/2}(E) \frac{1 + 2\alpha E}{1 + 4\sqrt{2} \gamma(E) (m_i^{*2} m_l^*)^{1/6} / \hbar q_0} \quad (43-2)$$

که در آن N_D چگالی اتم‌های ناخالصی، q_0 ثابت استتار و ϵ_s ثابت دی‌الکتریک ماده است.

در شکل (۲-۱۲) میزان پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه برای الکترون‌های واقع در دره ی مرکزی در نیمرسانای $GaAs$ و در حضور چگالی ناخالصی‌ها از مرتبه 10^{22} m^{-3} به صورت تابعی از انرژی ذرات رسم شده است. همانگونه که در این شکل مشاهده می‌شود، با زیاد شدن انرژی الکترون‌ها، میزان پراکندگی ناشی از ناخالصی‌های یونیزه کاهش می‌یابد. این کاهش را می‌توان ناشی از زیاد شدن سرعت الکترون‌ها با افزایش انرژی و در نتیجه کاهش میزان برهمکنش الکترون‌ها با پتانسیل کولنی استتار شده ناخالصی‌ها دانست. بنابراین در حد میدان‌های الکتریکی شدید و برای الکترون‌های پر انرژی پراکندگی از اتم‌های ناخالصی اهمیت چندانی در ترابرد حامل‌ها در جامدات بلورین ندارد. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش دمای محیط، میزان پراکندگی ناشی از ناخالصی‌های یونیزه افزایش می‌یابد.

¹ Fermi golden rule



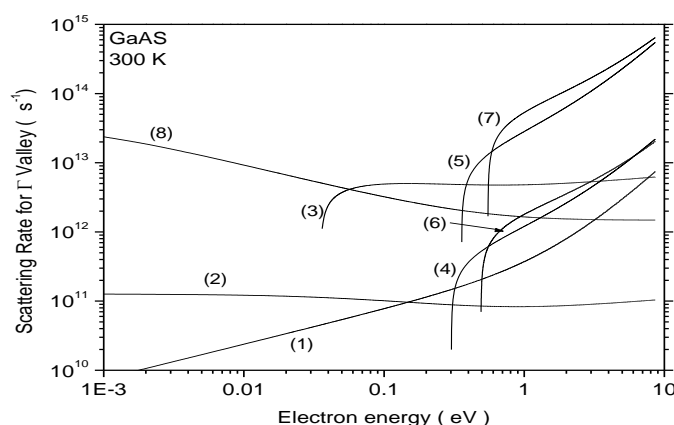
شکل ۲-۱۲: وابستگی نرخ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه برای الکترون های واقع در دره ی مرکزی در نیمرسانای

GaAs و در حضور چگالی ناخالصی ها از مرتبه ی $10^{22} m^{-3}$

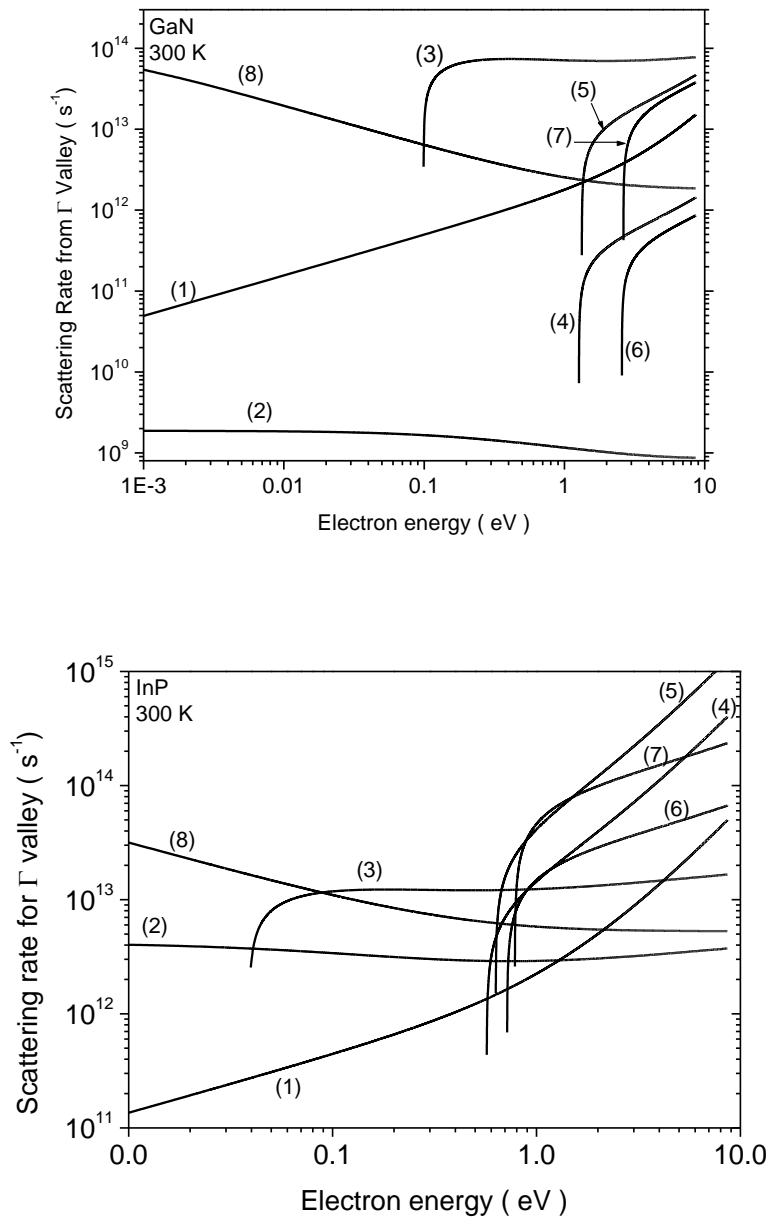
۲-۱۱ مقایسه نرخ پراکندگی در نیمرساناهای *III-V*

همانطور که عنوان شد عوامل پراکندگی برای مواد نیمرسانا یکسان نیست و تابعی از انرژی و سرعت الکترون ها است. در اشکال (۲-۱۳) و (۲-۱۴) و (۲-۱۵) نرخ پراکندگی برای فرآیند های غالب در بعضی از مهمترین نیمرسانا های خانواده *III-V* رسم شده است. این نیمرسانا ها دارای گاف مستقیم می باشند. تمامی نمودار مربوط به دمای اتاق می باشند و چگالی ناخالصی ها از مرتبه $10^{22} m^{-3}$ در نظر گرفته شده است. این نیمرساناها عبارت اند از *GaN, GaAs, InP, InAs, GaSb*. با توجه به این شکل ها، نرخ پراکندگی فونون های بین دره ای در نیمرسانای *InAs* بیشترین مقدار را در بین این نیمرسانا ها دارد. این درحالی است که *GaSb* کمترین نرخ پراکندگی بین دره ای را در بین این گروه دارد. در نیمرسانای *GaN* نرخ پراکندگی ناشی از فونون های قطبی اپتیکی کمترین مقدار را دارد. با توجه به شکل، برای تمامی این مواد در انرژی های پایین فرآیند های آکوستیکی و جذب و گسیل فونون قطبی اپتیکی فرآیند های غالب هستند و با زیاد شدن انرژی الکترون ها

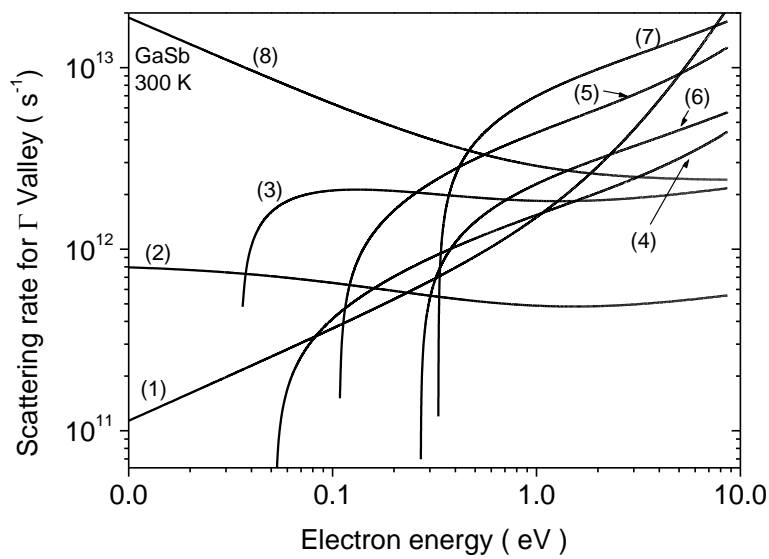
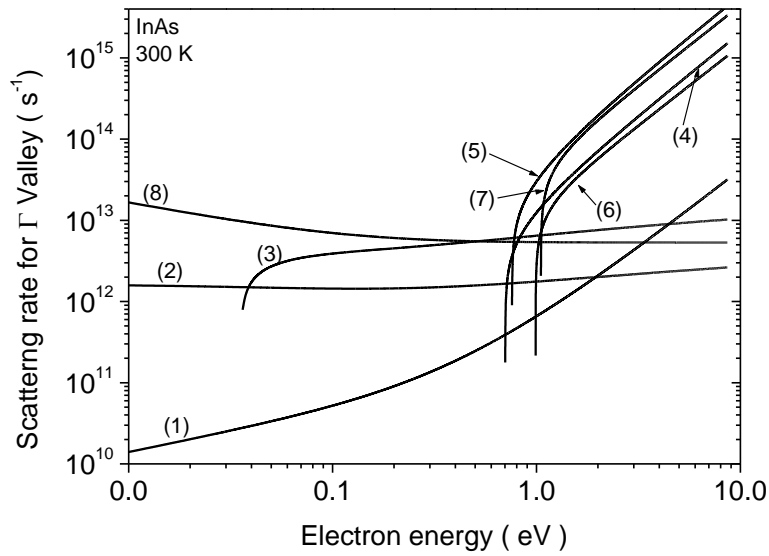
فرآیند های بین دره ای نقش بیشتری در پراکندگی الکترون ها خواهند داشت. همیشه فرآیند پراکندگی از ناخالصی های شبکه مهم ترین عامل پراکندگی الکترون های کم انرژی می باشد. در شکل (۲-۱۶) نمودار نرخ پراکندگی عوامل مختلف برای الکترون های واقع در دره X در نیمرسانای GaP در دمای اتاق و در حضور چگالی ناخالصی های یونیزه از مرتبه $10^{22} m^{-3}$ رسم شده است. این نیمرسانا دارای گاف نواری غیر مستقیم می باشد. از این رو در دره X امکان پراکندگی الکترون ها به دره دیگر X در دو حالت جذب و گسیل فونون وجود دارد. این در حالیکه که در دره مرکزی برای نیمرساناهایی از قبیل $GaAs$ و به دلیل اینکه تنها یک دره مرکزی در منطقه اول بریلوئن دارد، این نوع گذار وجود نداشت.



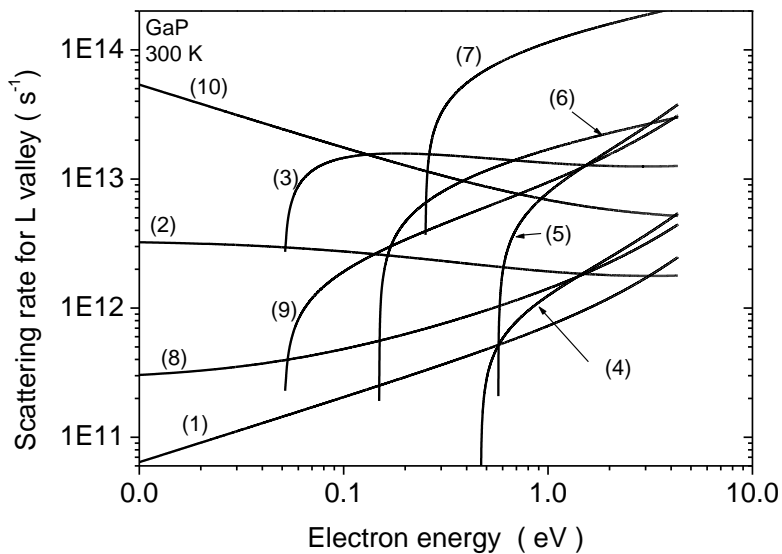
شکل ۲-۱۳: نمونه نمودار نرخ پراکندگی برای تمام فرآیندهای پراکندگی در دره مرکزی نیمرسانای $GaAs$ (نیمرسانای با گاف نواری مستقیم). فرآیند پراکندگی در نظر گرفته شده: (۱) ناشی از فونون آکوستیکی (۲) جذب فونون اپتیکی قطبی (۳) گسیل فونون اپتیکی قطبی (۴) پراکندگی بین دره به دره L با جذب فونون (۵) پراکندگی بین دره به دره L با گسیل فونون (۶) پراکندگی بین دره به دره X با جذب فونون (۷) پراکندگی بین دره به دره X با گسیل فونون (۸) پراکندگی از ناخالصی های یونیزه.



شکل ۲-۱۴: نمونه نمودار نرخ پراکندگی برای تمام فرآیندهای پراکندگی در دره مرکزی نیمرساناهای InP, GaN (نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم). فرآیند پراکندگی در نظر گرفته شده: (۱) ناشی از فونون آکوستیکی (۲) جذب فونون اپتیکی قطبی (۳) گسیل فونون اپتیکی قطبی (۴) پراکندگی بین دره به دره L با جذب فونون (۵) پراکندگی بین دره به دره L با گسیل فونون (۶) پراکندگی بین دره به دره X با جذب فونون (۷) پراکندگی بین دره به دره X با گسیل فونون (۸) پراکندگی از ناخالصی های یونیزه.



شکل ۲-۱۵: نمونه نمودار نرخ پراکندگی برای تمام فرآیندهای پراکندگی در دره مرکزی نیمرساناهای *GaSb InAs* (نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم). فرآیند پراکندگی در نظر گرفته شده: (۱) ناشی از فونون آکوستیکی (۲) جذب فونون اپتیکی قطبی (۳) گسیل فونون اپتیکی قطبی (۴) پراکندگی بین دره به دره L با جذب فونون (۵) پراکندگی بین دره به دره L با گسیل فونون (۶) پراکندگی بین دره به دره X با جذب فونون (۷) پراکندگی بین دره به دره X با گسیل فونون (۸) پراکندگی از ناخالصی های یونیزه.



شکل ۲-۱۶: نمودار نرخ پراکندگی برای تمام فرآیندهای پراکندگی در دره X نیمرسانای GaP با گاف نواری غیر مستقیم. فرآیند پراکندگی در نظر گرفته شده: (۱) ناشی از فونون آکوستیکی (۲) جذب فونون اپتیکی قطبی (۳) گسیل فونون اپتیکی قطبی (۴) پراکندگی بین دره به دره مرکزی با جذب فونون (۵) پراکندگی بین دره به دره مرکزی با گسیل فونون (۶) پراکندگی بین دره به دره X با جذب فونون (۷) پراکندگی بین دره به دره X با گسیل فونون (۸) پراکندگی بین دره به دره های فضایی هم نام L با جذب فونون (۹) پراکندگی بین دره به دره های فضایی هم نام L با گسیل فونون (۱۰) پراکندگی از ناخالصی های یونیزه

فصل سوم

معرفی روش شبیه سازی مونت کارلو

برای بررسی خواص ترابرد حامل ها در بلور نیمرسانا دو روش وجود دارد. روش اول مبتنی بر حل معادله ترابرد بولتزن بر حسب زمان برای مکان و اندازه حرکت هر یک از حامل های قطعه می باشد. حل معادله ترابرد بولتزن اغلب بسیار دشوار و غیر ممکن است. روش دیگری نیز برای بررسی خصوصیات ترابرد حامل ها در بلور وجود دارد. در این روش حرکت هر ذره تحت اثر میدان های اعمالی و پراکندگی های تصادفی بررسی می شود. هرگاه تعداد ذرات شبیه سازی شده در یک سیستم فیزیکی را بسیار زیاد در نظر بگیریم، از رفتار متوسط آنها می توان به رفتار متوسط ذرات واقعی در آن سیستم پی برد. برای شبیه سازی از روش مونت کارلو^۱ که در آن برای تعیین مسیر پویا حامل ها از اعداد تصادفی استفاده می شود، بهره خواهیم جست. برتری روش مونت کارلو نسبت به حل معادله بولتزن در این است که در آن از هیچ معادله صریحی استفاده نمی شود. در اکثر موارد روش مونت کارلو برای شبیه سازی ترابرد الکترون ها در قطعات نیمرسانا بهترین روش است به طوری که دقت و اعتبار مدل های دیگر را با نتایج این روش می توان سنجید.

۳-۲ فرآیندهای آماری و روش مونت کارلو

هر فرآیندی که ماهیت تصادفی داشته باشد یک فرآیند آماری است. بسیاری از فرآیندها در طبیعت نظیر حرکت اتمها در گاز، پراکندگی تابشها، تونل زنی کوانتومی ماهیت آماری دارند. شبیه سازی عددی هر فرآیند آماری یا شبه آماری به کمک اعداد تصادفی امکان پذیر است که به آن روش مونت کارلو می گویند. ساز و کار اصلی در روش مونت کارلو به یکی از دو شکل زیر است [۳۰]:

۱- در صورت امکان خود مسئله شبیه سازی می شود.

¹ Monte Carlo

۲- ابتدا یک مدل آماری مناسب که با مسئله مورد نظر در توافق است ساخته می شود و سپس این مدل آماری شبیه سازی می شود. در هر حالت، پارامترهای تصادفی مورد نیاز بر اساس توزیع های آماری موجود در مسئله چندین بار نمونه گیری می شوند و سرانجام نتایج بدست آمده تحلیل آماری می شوند. از آنجایی که در شبیه سازی مونت کارلو، فرآیند مورد نظر همانند آنچه در واقعیت اتفاق می افتد شبیه سازی می شود، می توان آن را مانند یک آزمایش نظری دانست [۲۸].

۳-۳ تاریخچه روش مونت کارلو

شاید بتوان گفت که اولین گام در کاربرد نمونه گیری تصادفی، منتسب به کنت بوفن^۱ باشد که آنرا برای حل انتگرال بکار برد. چند سال بعد، لاپلاس^۲ پیشنهاد کرد که با اندیشه فوق می توان از پرتاب سوزن عدد π را بدست آورد. اگرچه آهنگ همگرایی آن کند بود [۲۹]. این آزمایش در واقع روش مونت کارلو برای تعیین عدد π بود، که گامی مهم در تبدیل نتایج احتمالی به حسابان آماری است که امروزه آن را محاسبات آنالوگ می نامند. سپس لرد کلونین^۳ تلاش کرد. تا از نمونه گیری تصادفی در محاسبه انتگرال های انرژی جنبشی که در نظریه جنبشی گازها ظاهر می شوند، استفاده کند [۲۹].

پیشرفت های بیشتر در نظریه احتمال و مسئله گام زدن تصادفی^۴ پایه ای برای روش مونت کارلو شد. به عنوان مثال، کورت^۵، فریدریش^۶ و لویی هم آرزی جواب های معادلات دیفرانسیل جزئی را با جواب های گام زدن تصادفی نشان دادند. در دهه ۱۹۵۰ انریکو فرمی^۷ دانشمند بزرگ ایتالیایی، یک سری آزمایشات عددی را برای محاسبه ترابرد نوترون انجام داد [۲۹]. او در مطالعاتش راجع به ذره نوترون که در آن زمان به تازگی کشف شده

¹Conte de Buffon

²Laplace

³Lord kelvin

⁴Random walk

⁵Cort

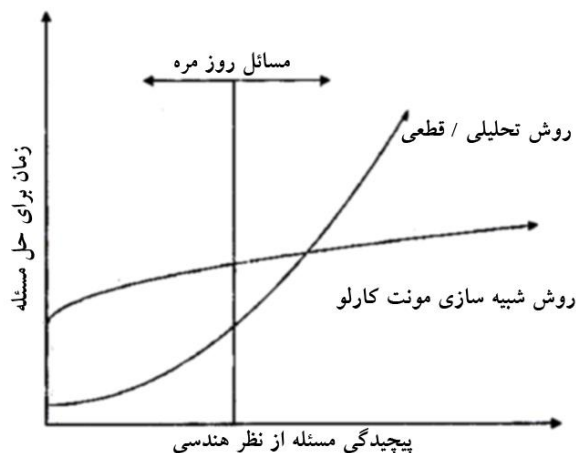
⁶Feredrish

⁷Enrique fermi

بود، از آزمایش‌های نمونه‌گیری برای مدل‌سازی بر هم کنش یک ذره خنثی نظیر نوترون با ماده استفاده کرد، که منجر به پیدایش یک بینش اساسی در نظریه ترابرد و پخش نوترون شد.

در دوران جنگ جهانی دوم، گروهی از دانشمندان همچون ون نیومان، فرمی، یولم و متروپولیس در لوس آلاموس گرد هم آمدند و به کمک کامپیوترهای مدرن، جنبش عظیمی در پیشرفت مونت کارلو بوجود آوردند [۲۹]. در اواخر دهه ۱۹۴۰ و اوایل دهه ۱۹۵۰ توجه چشمگیری در این زمینه ایجاد شد و مقالات متعددی در توصیف روش‌های جدید برای حل مسائل مکانیک آماری، ترابرد تابش‌ها، مدل‌سازی اقتصادی و دیگر زمینه‌ها منتشر گردید. متأسفانه کامپیوترهای آن زمان در انجام محاسبات از قدرت کافی برخوردار نبودند که با افزایش قدرت کامپیوترها، انجام محاسبات بیشتر و پیچیده‌تر امکان‌پذیر شد [۲۹].

امروزه این روش به عنوان یک رقیب قدرتمند برای روش‌های تحلیلی و قطعی مسائل به شمار می‌رود. البته انتخاب نوع حل - شبیه‌سازی و یا حل دقیق - بستگی به پیچیدگی و ماهیت مسئله خواهد داشت. در شکل (۱-۱) طرحواره‌ای برای مقایسه دو روش مونت کارلو و حل تحلیلی دقیق برای بررسی مسائل فیزیکی نشان داده شده است. همانطور که از این شکل می‌توان دریافت، راه حل مناسب برای حل بسیاری از مسائل پیچیده روش مونت کارلو است [۲۸].



شکل ۱-۳: طرحواره مقایسه زمان مورد نیاز بر حسب پیچیدگی مسائل در دو روش مونت کارلو و حل تحلیلی دقیق [۲۸]

۳-۴ شبیه سازی ترابرد الکترون ها در بلورهای نیمرسانا

شکل (۳-۲ الف)، طرحواره مسیر پویش حرکت الکترون در یک بلور نیمرسانا را که تحت تاثیر یک میدان الکتریکی اعمالی در جهت $+Z$ قرار گرفته است رانشان می دهد. الکترون همواره تمایل دارد که در جهت میدان اعمالی حرکت نماید. معادله حرکت الکترون در این میدان به صورت ذیل است [۶]:

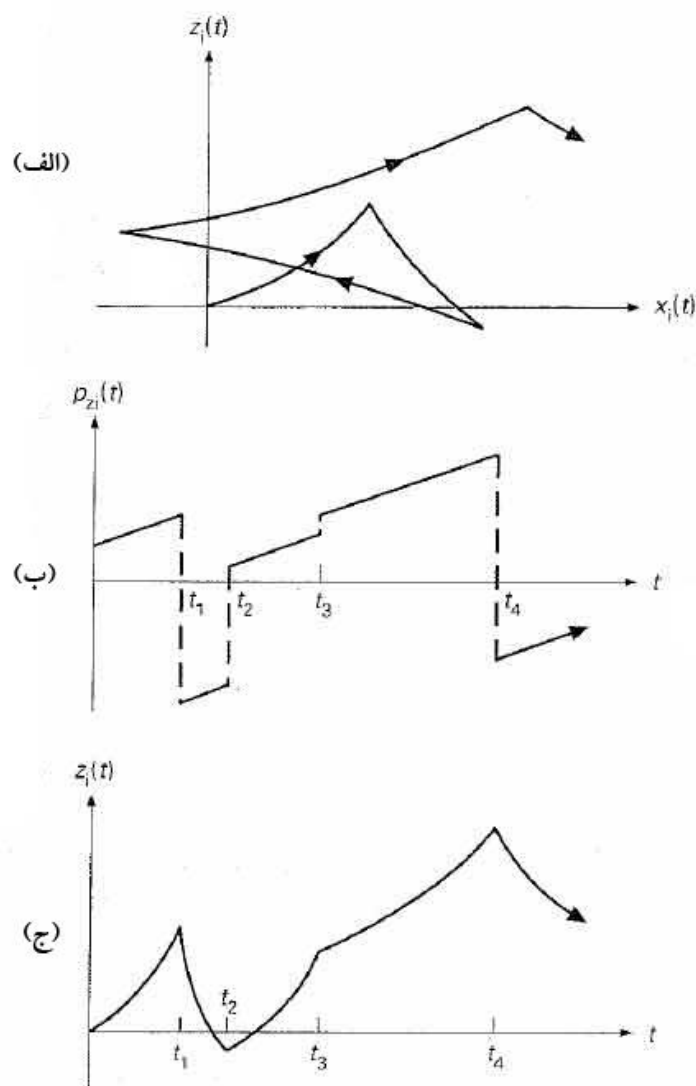
$$F_e = \frac{dp}{dt} = -qe \quad (۱-۳)$$

الکترون در طول مسیر پویش حرکتش در بلور، دائما توسط فونون ها و همچنین اتمهای ناخالصی پراکنده می شود. مدت زمان برخورد هر الکترون با این عوامل بسیار کوتاه تر از زمان پویش آزادی است که الکترون در بین دو برخورد متوالی خود، طی می کند. بنابراین می توان پراکندگی ها را به عنوان وقایع آنی در نظر گرفت [۶]. در شکل (۳-۲ ب) تغییرات اندازه حرکت الکترون ها بر حسب زمان رسم شده است. در طی پویش آزاد الکترون ها، انرژی آن ها بر طبق معادله (۳-۱) به طور یکنواخت افزایش می یابد. در لحظه پراکندگی اندازه حرکت الکترون بطور آنی تغییر می کند. در لحظه برخورد، موقعیت مکانی ذرات تغییر آنی نمی کند. تغییر مکان الکترون ها با زمان با رابطه زیر داده می شود [۶]:

$$r(t) = r(0) + \int_0^t v(t') dt' \quad (۲-۳)$$

که اگر v را سرعت میانگین الکترون در مدت زمان پویش آزاد در نظر بگیریم، داریم:

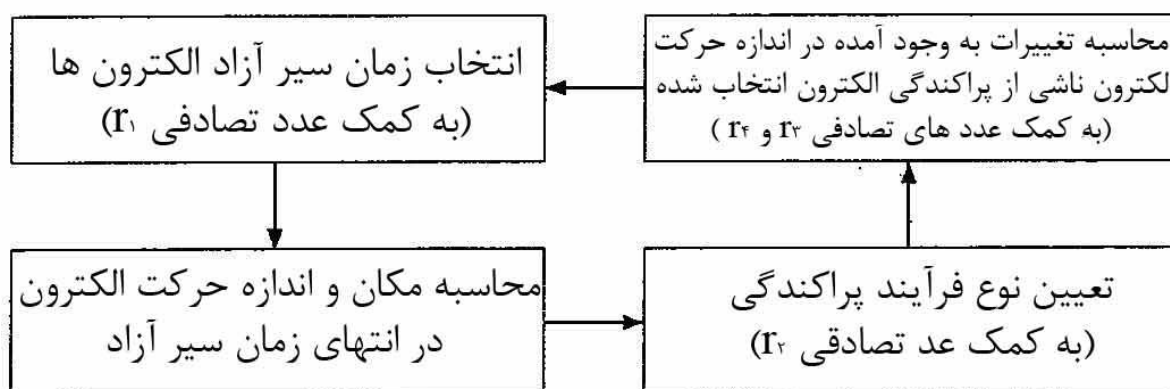
$$\Delta r = v\Delta t \quad (۳-۳)$$



شکل ۳-۲: الف) طرحواره مسیر حرکت الکترون در یک بلور نیمرسانا که تحت تاثیر یک میدان الکتریکی اعمالی در جهت $+Z$ قرار دارد ب) تغییرات اندازه حرکت الکترون ها بر حسب زمان ج) تغییرات مکانی الکترون ها بر حسب زمان [۶].

برای شبیه سازی پویش آزاد الکترون و فرآیند پراکندگی که در انتهای مسیر پویش آزاد رخ می دهد، باید چهار عدد تصادفی ایجاد شود. به کمک اولین عدد تصادفی زمان پویش آزاد الکترون را تعیین می کنیم. در این مدت تغییر در اندازه حرکت الکترون و تغییرات مکانی آن را در انتهای زمان پویش آزاد الکترونی با استفاده از معادلات (۳-۱) و (۳-۲) تعیین می کنیم و این مقادیر را جایگزین مقادیر اولیه می کنیم. [۶،۳] از عدد تصادفی دوم برای تعیین نوع فرآیند پراکندگی که به حرکت آزاد الکترون خاتمه داده است، استفاده می کنیم و

در نهایت بردار اندازه حرکت و جهت الکترون را پس از پراکندگی و با توجه به تغییرات انرژی که در اثر جذب یا گسیل فونون می تواند رخ دهد، مشخص می کنیم. از دو عدد تصادفی باقی مانده، برای مشخص کردن زوایای قطبی θ و سمتی φ استفاده می شود. الگوریتم نشان داده در شکل (۲-۳) این مراحل را نشان می دهد [۶]. در ادامه بیشتر وارد جزئیات هر یک از این چهار قسمت خواهیم شد.



شکل ۳-۳: الگوریتم شبیه سازی حرکت یک تک ذره تحت تاثیر میدان الکتریکی.

۳-۵ پویش آزاد الکترون ها

اگر میدان الکتریکی را در جهت z اعمال نماییم، تغییرات بردار موج و اندازه حرکت الکترون ها با استفاده از معادلات (۱-۳) و (۲-۳) به شکل زیر خواهند بود:

$$P_x(t) = P_x(0)$$

$$P_y(t) = P_y(0) \tag{۴-۳}$$

$$P_z(t) = P_z(0) + (-q)\varepsilon_z t$$

$$x(t) = x(0) + \frac{p_x(0)}{m^*} t$$

$$y(t) = y(0) + \frac{p_y(0)}{m^*} t \tag{۵-۳}$$

$$z(t) = z(0) + \frac{E(t) - E(0)}{(-q)\varepsilon_z}$$

که در آنها پارامتر ε_z میدان الکتریکی اعمالی است. $E(t)$ برای نوار انرژی غیر سهموی را می توان به شکل زیر

در نظر گرفت [۳]:

$$E(t)(1 + \alpha E(t)) = + \frac{P^2(t)}{2m^*} \quad (۶-۳)$$

همانطور که عنوان شد به کمک یک عدد تصادفی زمان پویش آزاد حامل ها را تعیین می نماییم. در حالت کلی زمان پویش آزاد الکترون ها توزیع بسیار پیچیده ای دارد. به عنوان مثال این توزیع را می توان شبیه به تماس های رسیده به یک مرکز تلفن در نظر گرفت. با این فرض که ترافیک تماس های گرفته شده با مرکز تلفن به حد اشباع نرسیده باشد. احتمال این که در واحد زمان چه تعداد تماس گرفته شود را می توان با یک تابع چگالی تماس معرفی کرد. درون نیمرسانا نیز شرایط مشابهی با تعداد تماس های رسیده به مرکز تلفن داریم. همواره احتمال اینکه پویش آزاد الکترون ها به خاطر وقوع یک فرآیند پراکندگی خاتمه یابد، وجود خواهد داشت. احتمال اینکه الکترون در واحد زمان پراکنده شود را با نرخ پراکندگی مشخص می کنیم. هر تماس که به مرکز تلفن گرفته می شود را می توانیم مشابه رخداد یک فرآیند پراکندگی در نظر بگیریم. در این صورت مدت زمانی که بین دو تماس متوالی سپری می شود، مشابه مدت زمان پویش آزاد الکترون ها است. می دانیم که زمان پویش آزاد الکترون ها با نرخ پراکندگی کل متناسب است. به عنوان مثال اگر نرخ پراکندگی زیاد تر شود احتمال پراکندگی الکترون ها بیشتر می شود و در نتیجه زمان پویش آزاد حامل ها بسیار کمتر خواهد بود [۱۲].

نرخ کل پراکندگی حامل ها را می توان با عبارت زیر بیان کرد [۳۰]:

$$\Gamma(E) = \sum_{i=1}^s \frac{1}{\tau_i(E)} \quad (۷-۳)$$

که در آن پارامتر s اشاره به تعداد کل فرآیند های پراکندگی که در نظر گرفته شده است دارد. نرخ کل پراکندگی وابسته همیشه ثابت نیست. همانطور که در فصل گذشته عنوان شد، این کمیت به انرژی الکترون ها وابسته است. برای ساده کردن محاسبات مربوط به ایجاد اعداد تصادفی با توزیعی مشابه توزیع زمان پویش آزاد حامل ها از یک ترفند ریاضی استفاده می کنیم. همانگونه که در ادامه خواهیم دید، با انتخاب فرآیند خود –

پراکندگی^۱، ایرادی در مسئله وارد نمی شود [۶]. برای این منظور نرخ پراکندگی کل $\Gamma(E, t)$ را با یک ثابت Γ_0 جایگزین می نماییم. یک مجموعه آماری از الکترون ها را در لحظه $t=0$ در نظر می گیریم. می توان فرض کرد که در این لحظه هیچ یک از الکترون ها پراکنده نشده اند. از آنجایی که نرخ پراکندگی هر الکترون Γ_0 است، تابع چگالی پراکندگی الکترون ها را می توانیم به شکل زیر بنویسیم [۶]:

$$\frac{dn_C}{dt} = -\Gamma_0 n_C \quad (۸-۳)$$

با حل معادله فوق خواهیم داشت:

$$n_C(t) = n_C(0)e^{-\Gamma_0 t} \quad (۹-۳)$$

پس احتمال اینکه هر الکترون در زمان t پراکنده شود برابر است با:

$$\frac{n_C(t)}{n_C(0)} = e^{-\Gamma_0 t} \quad (۱۰-۳)$$

احتمال پراکندگی الکترون در بازه زمانی t و $t + dt$ عبارت است از [۶]:

$$P(t)dt = \Gamma_0 e^{-\Gamma_0 t} dt \quad (۱۱-۳)$$

باید اعداد تصادفی با توزیع $P(t)$ تولید نماییم. با توجه به اینکه اعداد تصادفی تولید شده در بازه صفر و یک، توزیع کاملاً یکنواخت $P(r)$ دارند؛ باید توزیع $P(t)$ در بازه t و $t + dt$ و همچنین تابع توزیع $P(r)$ در بازه t و $t + dt$ کاملاً برابر باشند. یعنی [۶]:

$$P(r)dr = P(t)dt \quad (۱۲-۳)$$

با توجه به این که توزیع اعداد تصادفی کاملاً یکنواخت است، یعنی در بازه 0 تا 1 همیشه $P(r) = 1$ است [۲۸]. با جایگذاری شرط فوق و معادله (۱۱-۳) در معادله (۱۲-۳) داریم [۶]:

$$dr = \Gamma_0 e^{-\Gamma_0 t} dt \quad (۱۳-۳)$$

¹ Self-scattering

با انتگرال گیری از این عبارت می توان زمان برخورد را بدست آورد:

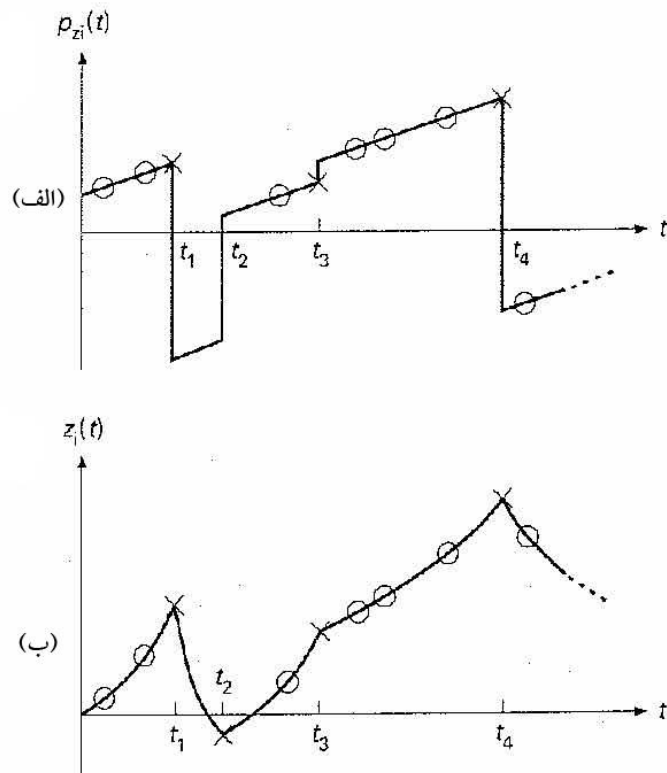
$$\int_0^{r_c} dr = \Gamma_0 \int_0^{t_c} e^{-\Gamma_0 t} dt \longrightarrow r_c = 1 - e^{-\Gamma_0 t_c} \quad (14-3)$$

در نهایت می توان با توزیع یک عدد تصادفی دلخواه، اعداد تصادفی با توزیع معادله (۳-۱۱) را برای هر

برخورد بدست آورد [۱۲]:

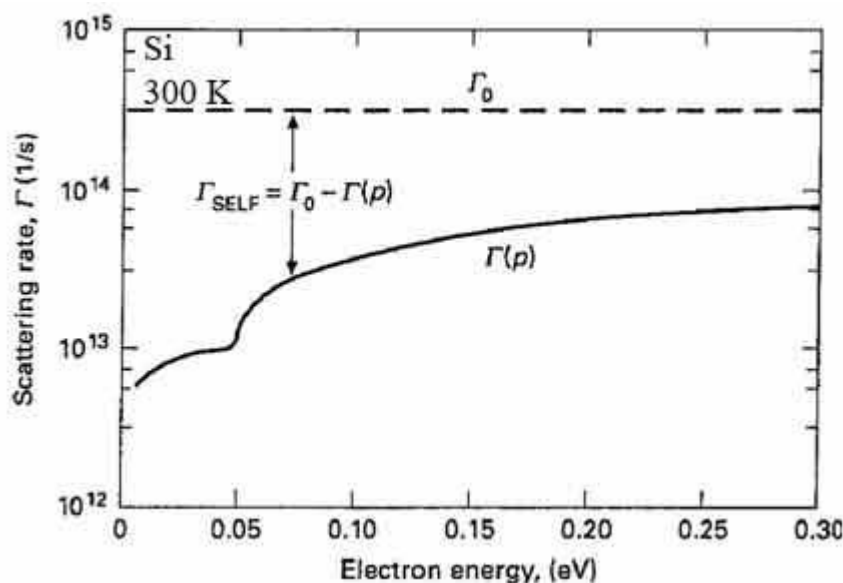
$$t_c = -\frac{1}{\Gamma_0} \ln(r_1) \quad (15-3)$$

به دلیل ثابت در نظر گرفتن ضریب Γ_0 ، فرآیند پراکندگی N ام را فرآیند خود - پراکندگی در نظر می گیریم. این انتخاب به این دلیل است که در نیمرسانا ها نرخ پراکندگی $\Gamma(E)$ بر حسب انرژی الکترون ها متغیر می باشد و ثابت نیست. در حین این فرآیند هیچ تغییری در اندازه حرکت الکترون به وجود نمی آید. هر یک از نقاط مشخص شده با دایره های توخالی در شکل (۳-۴) معرف یک خود - پراکندگی است. با توجه به این شکل، خود - پراکندگی هیچ تاثیری بر اندازه حرکت الکترون ها ندارد. فرآیند های پراکندگی دیگر که عامل تغییر در اندازه حرکت ذره هستند در این شکل با ضربدر مشخص شده اند [۶].



شکل ۳-۴: تفاوت وقایع پراکندگی واقعی (مشخص شده با ضربدر) با وقایع خود پراکندگی (مشخص شده با دایره تو خالی) [۶]

با انتخاب این فرآیند، نرخ پراکندگی کل همواره ثابت خواهد شد. نحوه این انتخاب در شکل (۳-۵) نشان داده شده است. با این فرض نرخ پراکندگی از فرآیند خود-پراکندگی برابر $\Gamma_{Self} = \Gamma_0 - \Gamma(E)$ خواهد شد. در فرآیندهای پراکندگی واقعی بردار اندازه حرکت ذره تحت تاثیر برخورد تغییر می کند ولی در فرآیند خود-پراکندگی هیچ تغییری در مکان و اندازه حرکت ذره نخواهیم داشت و بنابراین هیچ تاثیری بر پویای آزاد و مسیر پویای حرکت الکترون ها نخواهد داشت. بنابراین این فرآیند لطمه ای به کل مسئله وارد نمی کند [۶].



شکل ۳-۵: طرحواره نحوه محاسبه نرخ خود - پراکندگی بر حسب انرژی الکترون ها و با در نظر گرفتن پارامتر Γ_0 [۶].

۶-۳ انتخاب فرآیند پراکندگی

پس از انتخاب مدت زمان پوشش آزاد حامل ها توسط رابطه (۳-۱۵)، مکان و اندازه حرکت الکترون ها در لحظه قبل از برخورد توسط روابط (۳-۴) و (۳-۵) مشخص می شوند. فرآیند های پراکندگی اندازه حرکت ذرات را تغییر می دهند. هر یک از فرآیندهای پراکندگی اثر متفاوتی در تغییر بردار اندازه حرکت دارند. بنابراین مقدار انرژی و اندازه حرکت هر الکترون را دقیقا در لحظه قبل از برخورد شان تعیین می کنیم. در نخستین قدم، باید نوع فرآیند پراکندگی که عامل پراکندگی الکترون ها است را مشخص نماییم. مثلا اینکه نوع فرآیند پراکندگی از نوع خود پراکندگی است و یا هر یک فرآیند های پراکندگی که در فصل ۲ معرفی شده است [۶، ۱۲، ۳].

شکل (۳-۶) نحوه تعیین یک فرآیند پراکندگی را در نیمرسانای *GaAs* به طور طرح وار نشان می دهد. به هر فرآیند پراکندگی یک شماره نسبت می دهیم. به عنوان مثال پراکندگی ناشی از جذب فونون اپتیکی قطبی را با شماره ۱؛ فرآیند ناشی از گسیل فونون اپتیکی قطبی را با شماره ۲ و به همین صورت سایر فرآیند

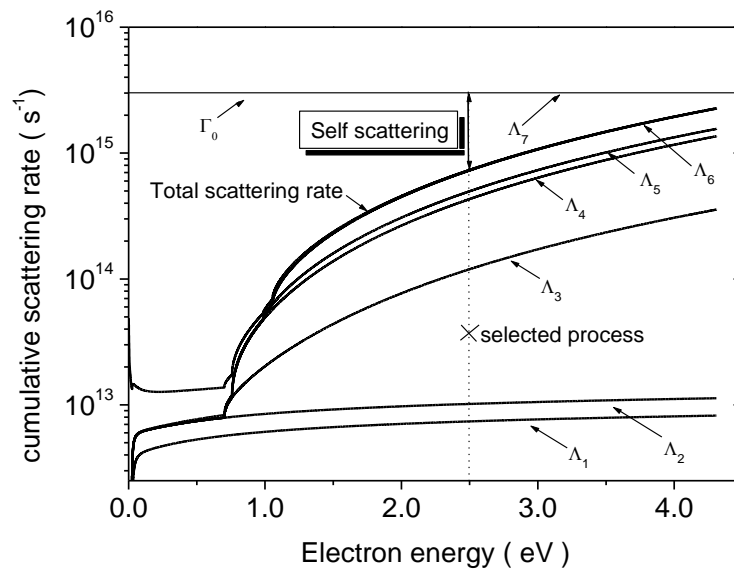
های پراکندگی را شماره گذاری می کنیم. در این شکل منحنی های Λ_i اشاره به جمع کلیه نرخ های پراکندگی فرآیندهایی با شماره ی کمتر از i دارد، یعنی [۳۰]:

$$\Lambda_i(E) = \frac{\sum_1^i W_i(E)}{\Gamma_0} \quad (16-3)$$

برای نرمالیزه به ۱ کردن Λ_i عبارت فوق را بر Γ_0 تقسیم کرده ایم. برای انتخاب فرآیند پراکندگی، یک عدد تصادفی r_2 را در بازه ۰ و ۱ تولید می نماییم. و با روش زیر نوع فرآیند را تعیین می کنیم [۳۰، ۱۲]:

$$\frac{\sum_1^{i-1} W_i(E)}{\Gamma_0} \leq r_2 \leq \frac{\sum_1^i W_i(E)}{\Gamma_0} \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (17-3)$$

که در رابطه فوق E انرژی الکترون ها دقیقاً قبل از برخورد می باشد.



شکل ۳-۶: نحوه تعیین یک فرآیند پراکندگی در نیمرسانای $GaAs$ در دمای اتاق.

۳-۶-۱ انتخاب حالت نهایی پس از پراکندگی

در لحظه پراکندگی هم اندازه بردار موج و هم جهت آن ممکن است تغییر می کند. برای ترازهای انرژی سهموی اندازه حرکت الکترون مقدار زیر را دارد:

$$p' = p(t_c^+) = \sqrt{2m^*[E(t_c^-) + \Delta E]} \quad (18-3)$$

که در اینجا ΔE تغییر در انرژی الکترون در اثر هر فرآیند پراکندگی می باشد. برای فرآیندهای پراکندگی الاستیک $\Delta E = 0$ و برای فرایندهای پراکندگی غیر الاستیک ΔE برابر انرژی فتون جذبی و یا گسیلی می باشد. جهت بردار اندازه حرکت پس از پراکندگی را به کمک دو عدد تصادفی r_3 و r_4 تعیین می کنیم. برای سادگی کار در دستگاه مختصات دکارتی کار می کنیم. اندازه حرکت اولیه را در جهت $+z$ دستگاه مختصات اولیه فرض می کنیم. بنابراین تغییرات بردار اندازه حرکت پس از پراکندگی را می توانیم به وسیله چرخش دستگاه مختصات به اندازه Φ درجه حول محور z ها و سپس θ درجه حول محور y ها در نظر بگیریم (شکل ۳-۷). تعداد حالات ممکن برای جهتی که بردار اندازه حرکت در فضا می تواند اشغال کند برابر است با [۳۰]:

$$p(\theta, \phi) = \frac{1}{4\pi} \sin \theta d\theta d\phi \quad (19-3)$$

بنابراین احتمال پراکنده شدن الکترون در زاویه سمتی بین ϕ و $\phi + d\phi$ عبارت است از

$$p(\phi') = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\phi'} d\phi = \frac{\phi'}{2\pi} \quad (20-3)$$

و احتمال اینکه زاویه قطبی اندازه حرکت نهایی p' در بازه بین β و $\beta + d\beta$ باشد:

$$p(\theta') = \frac{1}{2} \int_0^{\theta'} \sin \theta d\theta = 1 - \cos \theta' \quad (21-3)$$

برای تولید اعداد تصادفی با دو توزیع فوق از روابط زیر استفاده می کنیم:

$$p(\theta)d\theta = p(r)dr \quad (22-3)$$

$$p(\phi)d\phi = p(r)dr \quad (23-3)$$

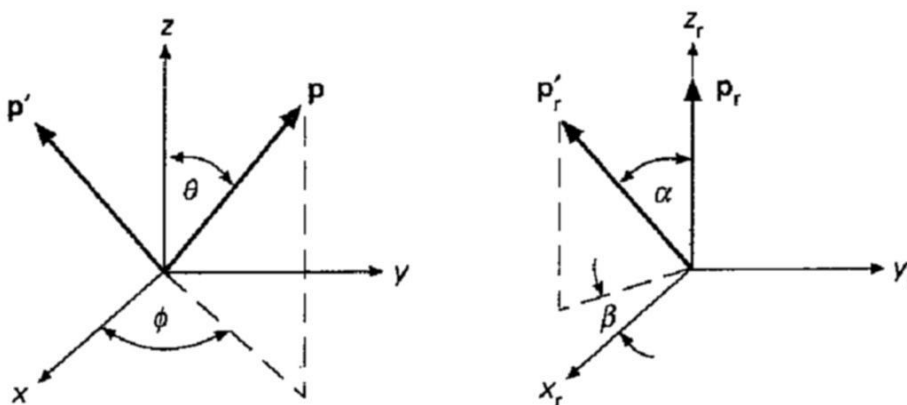
که در روابط فوق $p(r)=1$ است. با جایگذاری روابط (۲۰-۳) و (۲۱-۳) در این دو رابطه (۲۲-۳) و (۲۳-۳)

(۲۳) و انتگرال گیری از آنها خواهیم داشت [۳۰]:

$$\cos\theta = 1 - 2r_4 \quad \& \quad \phi' = 2\pi r_3 \quad (24-3)$$

در نهایت با تبدیل این مختصات جدید از دستگاه مختصات کروی به دستگاه کارتزین خواهیم داشت

$$\begin{aligned} p'_x &= |p'| \sin\theta \cos\phi \\ p'_y &= |p'| \sin\theta \sin\phi \\ p'_z &= |p'| \cos\theta \end{aligned} \quad (25-3)$$

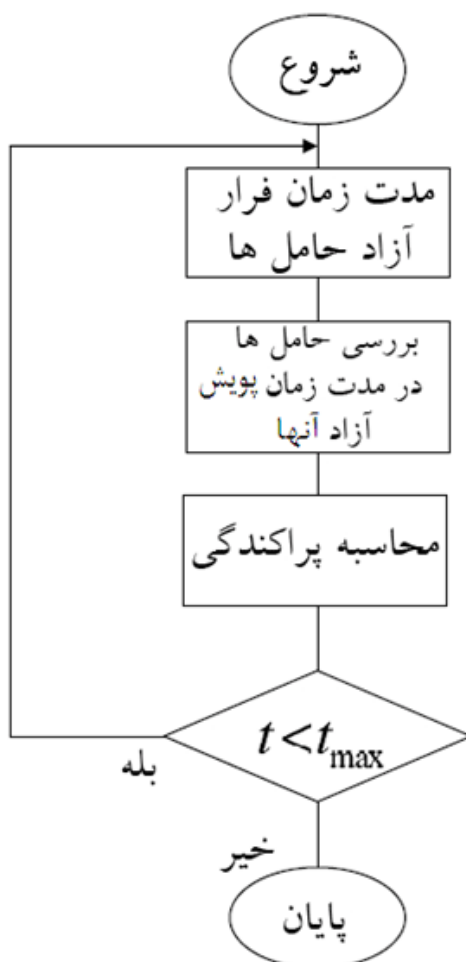


شکل ۳-۷: تعیین جهت بردار اندازه حرکت پس از پراکندگی

۳-۷ شبیه سازی نیمرساناهای کپه ای

در بخش های گذشته، روش استفاده از مدل مونت کارلو را برای شبیه سازی مسیر پویش یک تک ذره بیان کردیم. حال می توانیم مدل مورد استفاده برای شبیه سازی ترابرد الکترون ها تحت اثر یک میدان الکتریکی اعمالی درون یک بلور کپه ای نیمرسانا را معرفی نماییم. الگوریتم حلقه اصلی برنامه نوشته شده در شکل (۳-۹) رسم شده است. تعدادی زیادی از الکترون ها (N الکترون) را درون بلور در نظر می گیریم به طوری که هر الکترون اندازه حرکت اولیه p_N داشته باشد. به دلیل اینکه خواص ترابرد را در زمان های خیلی طولانی

بعد از اعمال میدان الکتریکی بررسی می کنیم، تعیین مقدار دقیق اندازه حرکت اولیه، اهمیت چندانی ندارد، زیرا در این بازه زمانی بی نهایت سیستم به حالت تعادل می رسد [۳]. شبیه سازی مونت کارلو را برای حرکت تک تک الکترون ها در بازه های زمانی متوالی کوچک Δt انجام می دهیم. این بازه زمانی باید قابل مقایسه با زمان متوسط پویش حامل ها درون بلور نیمرسانا باشد. در هر بازه زمانی مطابق الگوریتم ارائه شده در شکل (۳-۳) حرکت حامل درون بلور و تحت تاثیر عوامل پراکندگی بررسی می شود. در پایان هر Δt ثانیه، حالت نهایی الکترون ها محاسبه می شود و با متوسط گیری از پارامترهای میکروسکوپییک ترا برد الکترون ها، انرژی و سرعت الکترون ها بدست می آید.



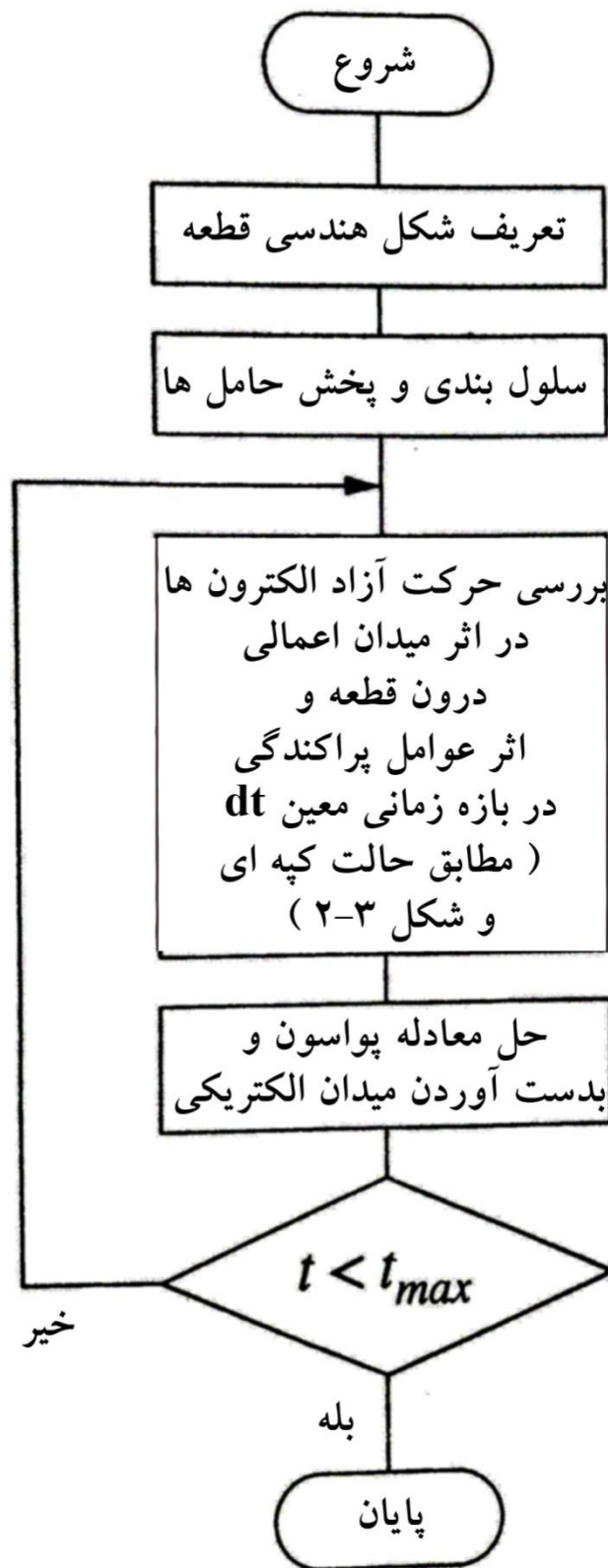
شکل ۳-۸: الگوریتم حلقه اصلی کد مونت کارلو برای شبیه سازی نیمرساناهای کپه ای

۸-۳ شبیه سازی قطعات نیمرسانا

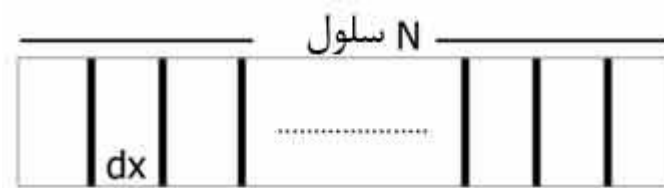
روش شبیه سازی مونت کارلو برای بررسی ترابرد الکترون ها در بلورهای کپه ای نیمرسانا، مبنای شبیه سازی قطعات نیمرسانا می باشد. در حقیقت یک قطعه نیمرسانا ممکن است حاصل رشد دادن چندین ماده نیمرسانا در کنار یکدیگر باشد. این قطعات می توانند مانند یک دیود بالیستیک ساده و یا بسیار پیچیده باشند. در هر صورت اساس کار تقریباً یکسان است و مدل بکار برده شده برای حالت کپه ای نیمرساناها را می توان با در نظر گرفتن ظاهر هندسی و ساختار قطعه، تعمیم داد.

در گسترش مدل جهت شبیه سازی قطعات نیمرسانا باید نکات عنوان شده در فصل ۱ را بکار ببریم. در شکل (۳-۱۰) الگوریتم برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی خواص ترابرد الکترون ها در قطعات نیمرسانا رسم شده است [۶]. با توجه به این الگوریتم در ابتدا باید مشخصات ظاهر هندسی قطعه و پارامترهای ناحیه های متفاوت - از قبیل چگالی ناخالصی ها و - را برای برنامه کامپیوتری تعریف نماییم. برای ساده کردن مسئله، قطعه را به سلول های مربعی کوچکی تقسیم می کنیم (شکل ۳-۱۱). در ابتدا سلول ها^۱ را با الکترون هایی که اندازه حرکت و انرژی آن ها به طور تصادفی بر طبق تابع توزیع ماکسول بولتزمن انتخاب شده اند، پر می کنیم و سپس ترابرد الکترون ها را در هر سلول محاسبه می کنیم [۳، ۱۲]. در پایان هر بازه ی زمانی، به منظور پیدا کردن توزیع فضایی پتانسیل الکتریکی و میدان الکتریکی درون قطعه باید معادله پواسون را حل نماییم [۳]. برای این کار بار الکتریکی درون هر سلول را بدست می آوریم و معادله پواسون را در کل قطعه حل می کنیم.

¹ Cells



شکل ۳-۹: الگوریتم برنامه کامپیوتری برای شبیه سازی خواص ترابرد الکترون ها در قطعات نیم رسانا [۶].



شکل ۳-۱۰: تقسیم دیود بالستیک به سلول های کوچک با طول dx

بر خلاف ظاهر ساده معادله پواسون، حل این معادله اغلب ساده نیست و با زیاد شدن تعداد سلول ها و ابعاد قطعه، حل عددی آن مشکل تر می شود. روش های زیادی برای حل این معادله وجود دارد. در این کار پژوهشی از روش جداسازی LU^1 که روشی بسیار قدرتمند و سریع است استفاده شده است. برای حل عددی معادله پواسون از الگوی المان های محدود^۲ استفاده می کنیم [۳]. معادله پواسون در یک بعد به صورت زیر است:

$$\frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} = \rho(x) \quad (۲۶-۳)$$

که در معادله فوق $\rho(x)$ چگالی بار الکتریکی درون قطعه است که تابعی معلوم می باشد و $\phi(x)$ پتانسیل درون قطعه است که باید با توجه به $\rho(x)$ مشخص شود. ابعاد هر سلول را برابر Δx در نظر بگیریم. با جایگذاری عملگر لاپلاسی با توجه به الگو المان های محدود برای سلول i ام خواهیم داشت [۳۹]:

$$\frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\Delta x^2} = \rho_j \quad (۲۷-۳)$$

اگر تعداد کل مش ها را N در نظر بگیریم، N معادله و N مجهول خواهیم داشت. معادله پواسون فوق به فرم زیر تبدیل می شود

$$[A] \cdot [\phi] = [\rho] \quad (۲۹-۳)$$

که در آن ماتریس $[A]$ به شکل زیر است [۳]:

¹ LU decomposition

² Finite element

$$[A]=\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & & & & & & & & & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & & & & & & & & \\ & & 1 & -2 & \ddots & & & & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & & & & & & & \\ & & & & & \ddots & & & & & & \\ & & & & & & \ddots & & & & & \\ & & & & & & & -2 & 1 & & & \\ & & & & & & & 1 & -2 & 1 & & \\ 0 & & & & & & & 0 & 1 & -2 & & \end{bmatrix} \quad (30-3)$$

۳-۸-۱ روش تجزیه LU

در این روش ماتریس A را به صورت ضرب دو ماتریس بالا مثلثی U و پایین مثلثی L تجزیه می کنیم:

$$[L] \cdot [U] = [A] \quad (31-3)$$

برای مثال تجزیه LU برای یک ماتریس 4×4 به این صورت است [۳۵]:

$$\begin{bmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & 0 \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{31} \\ 0 & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{32} \\ 0 & 0 & \beta_{33} & \beta_{34} \\ 0 & 0 & 0 & \beta_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \quad (32-3)$$

تجزیه ماتریس ها به روش LU به سادگی صورت می پذیرد و در کتاب های محاسبات عددی در مورد این روش و روش های دیگر حل عددی معادله پواسون بسیار بحث شده است. برای مثال مراجع [۳] و [۳۱ الی ۳۵] را ببینید. پس از تجزیه فوق به سادگی می توانیم معادله (۳۱-۳) را حل نماییم. بنابراین خواهیم داشت:

$$[A] \cdot [\phi] = [\rho] \rightarrow ([L] \cdot [U]) \cdot [\phi] = [L] \cdot ([U] \cdot [\phi]) = [\rho] \quad (32-3)$$

برای حل این معادله، ابتدا ماتریس y را چنان در نظر می گیریم که:

$$[L] \cdot [y] = [\rho] \quad (33-3)$$

و سپس معادله ماتریسی زیر را حل می کنیم:

$$[U] \cdot [x] = [y] \quad (34-3)$$

مزیت این تجزیه در آن است که حل مجموعه معادلات فوق کاملاً ساده تر است و با کمک یک برنامه کامپیوتری در یک حلقه بازگشتی به راحتی قابل اجرا می باشد [۳۵]. بر خلاف دیگر روش های حل مستقیم که نیازمند محاسبه ماتریس معکوس می باشد، این روش فقط با یک سری جمع و ضرب ساده اعداد کار می کند. این حلقه به این صورت می باشد:

$$y_1 = \frac{b_1}{\alpha_{11}}$$

$$y_i = \frac{1}{\alpha_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} y_j \right] \quad i = 2, 3, 4, \dots, N \quad (35-3)$$

که با جایگذاری مقادیر فوق در حلقه جایگشتی زیر، تابع پتانسیل بدست می آید [۳۵]:

$$\phi_N = \frac{y_N}{\beta_{11}}$$

$$\phi_i = \frac{1}{\beta_{ii}} \left[y_i - \sum_{j=i+1}^N \beta_{ij} \phi_j \right] \quad i = N-1, N-2, \dots, 1 \quad (36-3)$$

فصل چهارم

نتایج شبیه سازی مونت کارلو برای

قطعات نیمرسانای گروه III-V در

حضور میدان های الکتریکی شدید

در حد میدان های اعمالی ضعیف، تغییر سرعت سوق الکترون ها بر حسب میدان الکتریکی اعمالی از رابطه خطی $v_d = \mu F$ پیروی می کند [۳]. با این حال در اکثر قطعات الکترونیکی با ابعاد زیر میکرون میدان های الکتریکی بسیار شدیدی درون قطعه نیمرسانا ایجاد می شوند. در حد میدان های الکتریکی شدید، رابطه سرعت سوق الکترون ها بر حسب قدرت میدان الکتریکی اعمالی دیگر به شکل خطی نیست و رفتار کاملا پیچیده ای خواهد داشت. معمولا برای مشخص کردن این رابطه از روش های محاسباتی استفاده می کنند. در حد میدان های شدید اصطلاحا گفته می شود که الکترون ها داغ می شوند. الکترون ها وقتی داغ می شوند که انرژی جنبشی متوسط آنها از انرژی گرمایی شان $(\frac{3}{2}k_B T)$ بیشتر شود.

هدف از انجام این پایان نامه، محاسبه و مقایسه خواص ترابرد الکترون ها در ترکیبات نیمرسانای گروه III-V می باشد. برای این منظور نخست خواص ترابرد الکترون ها را در نیمرساناهای کپه ای این خانواده از نیمرساناها را مورد بررسی قرار داده ایم. این بررسی ها در دو حالت پایدار^۱ و ناپایدار^۲ انجام شده است. همچنین تاثیر کیفی تغییرات دمای محیط بر ترابرد الکترون ها بررسی شده است. سپس نتایج شبیه سازی مونت کارلو برای بررسی ترابرد الکترون ها در دیوهای بالستیک ساخته شده از ترکیبات نیمرسانای گروه III-V را بررسی کرده ایم. در این حالت نیز به بررسی اثر دما بر کارایی قطعه پرداخته شده است.

در نهایت نتایج بدست آمده از این کارها با نتایج تجربی موجود مقایسه شده است. این مقایسه نشان می دهد که نتایج مدل مونت کارلو در توافق بسیار خوبی با نتایج تجربی است.

¹ Steady state

² Transient

۲-۴ نتایج شبیه سازی خواص ترابرد نیمرساناهای کپه ای گروه III-V در دمای اتاق

۱-۲-۴ شبیه سازی حالت پایدار ترابرد الکترون ها

حالت پایدار ترابرد الکترون ها در نیمرساناهای کپه ای به حالتی که مشخصات ترابرد الکترون ها در اثر اعمال میدان الکتریکی اعمالی با گذشت زمان به تعادل رسیده باشد گفته می شود. در این حالت می توان گفت که تمامی اثرات موثر بر ترابرد الکترون ها از قبیل فرآیندهای پراکندگی به شرایط تعادل رسیده اند [۳].

در شکل (۱-۴) و (۲-۴) مشخصه حالت پایدار سرعت سوق الکترون ها بر حسب میدان الکتریکی اعمالی برای بعضی ترکیبات دوتایی مطرح از خانواده نیمرساناهای گروه III-V رسم شده است. تمامی این نمودارها مربوط به دمای اتاق و چگالی ناخالصی از مرتبه $10^{-22} m^{-3}$ می باشد. این نتایج با استفاده از یک برنامه کامپیوتری - با الگوریتم شرح داده شده در فصل ۳ - بدست آمده است. در این محاسبه تمام فرآیندهای پراکندگی معرفی شده در فصل ۲ در نظر گرفته شده اند. تعداد ۱۵۰۰۰۰ ذره در هنگام شبیه سازی در نظر گرفته شده است. انرژی کمینه هر یک از دره های فضایی و جرم موثر الکترونی نیمرساناهای مطالعه شده در جدول (۱-۴) آورده شده است.

جدول ۱-۴: مقادیر انرژی کمینه دره های انرژی و جرم موثر الکترونی در دره های انرژی [۴۱]

ترکیب	دره	(m^*/m_0) جرم مؤثر الکترون	$E_x(eV)$
GaN(ZB)	Γ	۰/۱۵	۳/۴
	X	۰/۶	۴/۷
	L	۰/۴	۶/۰
GaAs(ZB)	Γ	۰/۰۶۷	۱/۴۳
	L	۰/۲۲	۱/۷۶

	X	۰/۵۸	۱/۹۵
$InP(ZB)$	Γ	۰/۰۷۳	۱/۳۵
	L	۰/۳	۱/۹۵
	X	۰/۱۶	۲/۱
$InAs(ZB)$	Γ	۰/۰۲۷	۰/۳۵
	L	۰/۲۸۶	۱/۰۲
	X	۰/۱۶۴	۱/۳۸
$InN(Wz)$	Γ	۰/۱۱	۱/۹۵
	Γ_3	۱/۰	۲/۴۵
	A	۱/۰	۴/۵۵
$GaSb(ZB)$	Γ	۰/۰۶۷	۳/۵
	L	۰/۲۲	۵/۵
	X	۰/۱۶۴	۶/۸۷

شکل (۴-۱) مربوط به ترکیبات نیمرساناهای $InAs$ ، $GaAs$ ، InP و $GaSb$ می باشند. همانگونه که در این

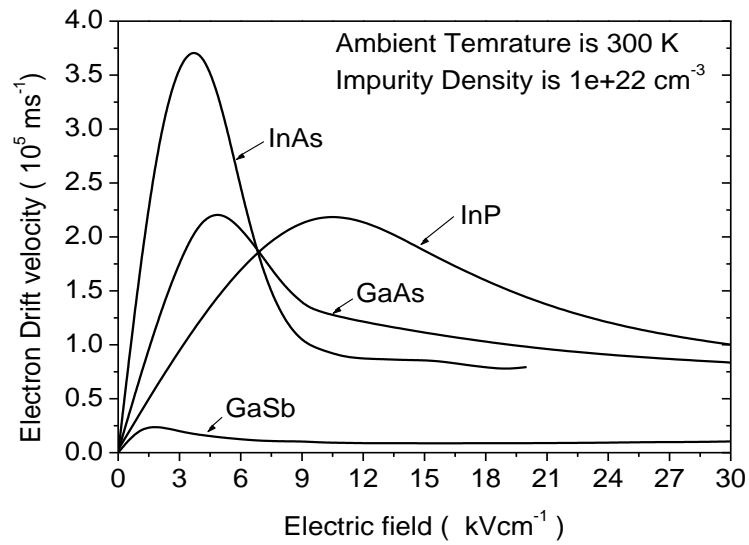
شکل دیده می شود، در تمامی این مواد در ابتدا با افزایش میدان الکتریکی سرعت سوق الکترون ها افزایش می

یابد. این افزایش سرعت به طور خطی با افزایش میدان الکتریکی اعمالی ادامه می یابد تا این که میدان

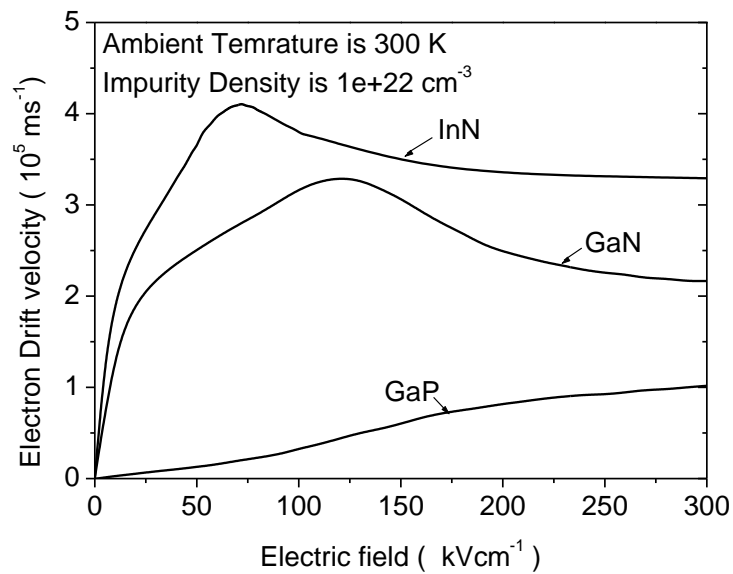
الکتريکی اعمالی به حد خاصی برسد. این حد خاص را اصطلاحاً میدان آستانه می نامند [۳]. از این پس با افزایش میدان اعمالی سرعت سوق الکترون ها کاهش می یابد و در نهایت با مقدار ثابتی همگرا می شوند یعنی در میدان های بسیار شدید، زیاد تر شدن میدان خارجی اثر بر روی سرعت سوق الکترون ها ندارد. این همگرایی ناشی از افزایش انرژی الکترون ها در میدان های شدید تر و در نتیجه افزایش احتمال پراکندگی الکترون ها با افزایش انرژی آنها است. میدان آستانه برای تمامی این ترکیبات کمتر از حدود 10 kVcm^{-1} رخ می دهد [۳].

پایین ترین و بالاترین میدان آستانه در این مواد به ترتیب متعلق به GaSb و InP با مقادیری از مرتبه $1/2 \text{ kVcm}^{-1}$ و 10 kVcm^{-1} می باشند. بیشترین و کمترین مقدار قله سرعت سوق به ترتیب مربوط به نیمرساناهای InAs و GaSb می باشد. در حد میدان های بسیار بیشتر از میدان آستانه، سرعت سوق ثابت و به ترتیب از بزرگ به کوچک مربوط به نیمرساناهای InP ، GaAs ، InAs و GaSb می باشد. همچنین سرعت سوق الکترونی در تمامی این مواد و در حضور میدان های الکتريکی اعمالی بیشتر از 30 kVcm^{-1} همگرا خواهد شد.

در شکل (۲-۴) نیز حالت پایدار تغییرات سرعت سوق - میدان، برای ترکیبات نیمرسانای InN ، GaN و GaP رسم شده است. با توجه به نتایج بدست آمده، در مواد فوق میدان آستانه و حد میدان خیلی شدید، بسیار بزرگتر از نتایج بدست آمده برای نیمرساناهای مشخص شده در شکل (۴-۱) می باشد. در این گروه از نیمرساناهای III-V هم در میدان آستانه و هم در حد میدان های بسیار بزرگتر از میدان آستانه، سرعت سوق به ترتیب از بزرگ به کوچک مربوط به نیمرساناهای InN ، GaN و GaP می باشد. از مقایسه اشکال (۴-۱) و (۲-۴) در می یابیم که تحرک پذیری الکترونی در میدان های پایین تر از 6 kVcm^{-1} در نیمرسانای InAs و در میدان های بالاتر از 6 kVcm^{-1} نیمرسانای InN بیشتر از بقیه است.



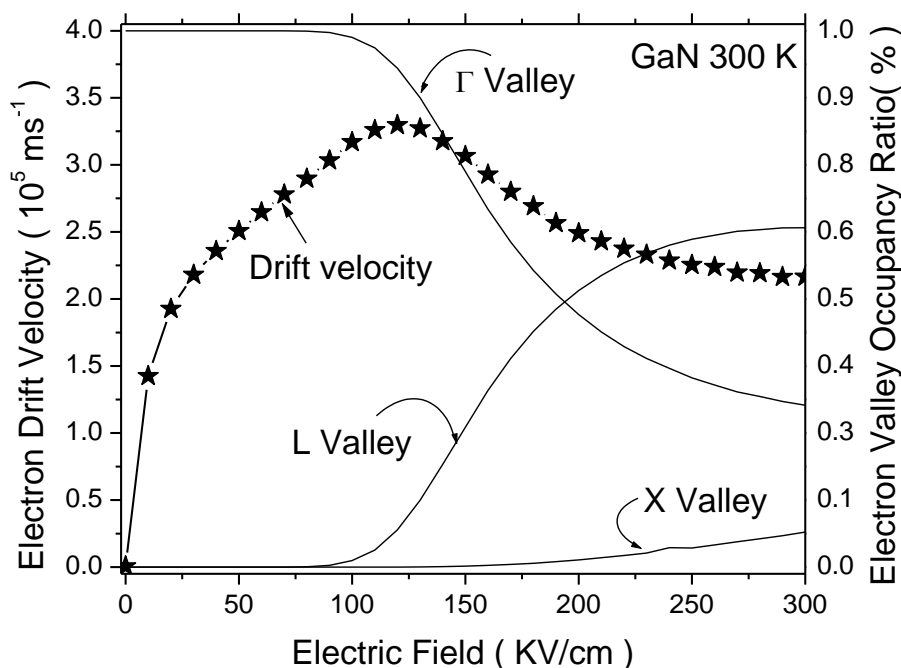
شکل ۴-۱: نمودار حالت پایدار سرعت سوق الکترونی در ترکیبات نیمرساناهای *InAs*، *InP*، *GaSb* و *GaAs* با میدان آستانه کمتر از 30 kVcm^{-1} در دمای اتاق.



شکل ۴-۲: نمودار حالت پایدار سرعت سوق الکترونی در نیمرساناهای *InN*، *GaN* و *GaP* با میدان آستانه بیشتر از 30 kVcm^{-1} در دمای اتاق.

این پیچیدگی رفتار تغییرات سرعت سوق الکترونی بر حسب میدان الکتریکی اعمالی، ناشی از اثر رسانندگی دیفرانسیلی منفی^۱ است. با توجه به اصل فوق، الکترون ها در دره های با جرم موثر بیشتر دارای تحرک پذیری کمتری خواهند بود و برعکس [۳۷]. برای روشن تر شدن این موضوع، دلایل این پیچیدگی رفتار را برای GaN شرح می دهیم. بقیه ترکیبات نیمرسانای مطالعه شده در این کار رفتاری مشابه خواهند داشت. با توجه به جدول (۱-۴) جرم موثر دره مرکزی برای نیمرسانای GaN برابر 0.15 و برای دره های فضایی L و X به ترتیب برابر $0.4 m_0$ و $0.6 m_0$ خواهد بود. در شکل (۳-۴) نتایج بدست آمده توسط روش مونت کارلو برای درصد اشغال الکترونی دره های فضایی در حالت ترابرد پایدار الکترون ها در نیمرسانای GaN و در دمای اتاق رسم شده است. با توجه به این شکل مشاهده می شود که در میدان های الکتریکی کمتر از میدان آستانه تمام الکترون ها دره مرکزی (I) را اشغال نموده اند. به عبارت دیگر هنوز فرآیندهای پراکندگی بین دره ای آغاز نشده است. بنابراین با شدید تر شدن میدان اعمالی، سرعت الکترون ها به طور یکنواخت افزایش می یابد. در میدان های شدید تر از میدان آستانه، الکترون ها انرژی لازم برای پراکنده شدن به دره های بالاتر انرژی را از میدان دریافت کرده اند و در نتیجه کسری از الکترون ها از دره مرکزی به دره های فضایی (X, L) پراکنده شده اند. بتدریج با شدید تر شدن مقدار میدان اعمالی، درصد اشغال الکترونی در دره مرکزی کاهش و در دره های فضایی دیگر افزایش می یابد. همزمان با این گذار های بین دره ای و به دلیل اینکه کسری از الکترون به دره های فضایی با جرم موثر بیشتر منتقل شده اند، اثر رسانندگی منفی ایجاد می شود و سرعت سوق متوسط الکترون ها کاهش می یابد. سرانجام در اثر به تعادل رسیدن فرآیندهای پراکندگی بین دره ای، درصد اشغال دره ای به حد ثابت میل می کند. سرعت سوق نیز از یک سو در اثر رسیدن به این تعادل و از سوی دیگر به دلیل زیاد تر شدن پراکندگی از فونون های قطبی اپتیکی و آکوستیکی (برای الکترون های پر انرژی که سبب از بین بردن اثر میدان اعمالی شدید تر می شود) به تعادل می رسد و دیگر تغییری در سرعت سوق الکترون ها نخواهیم داشت.

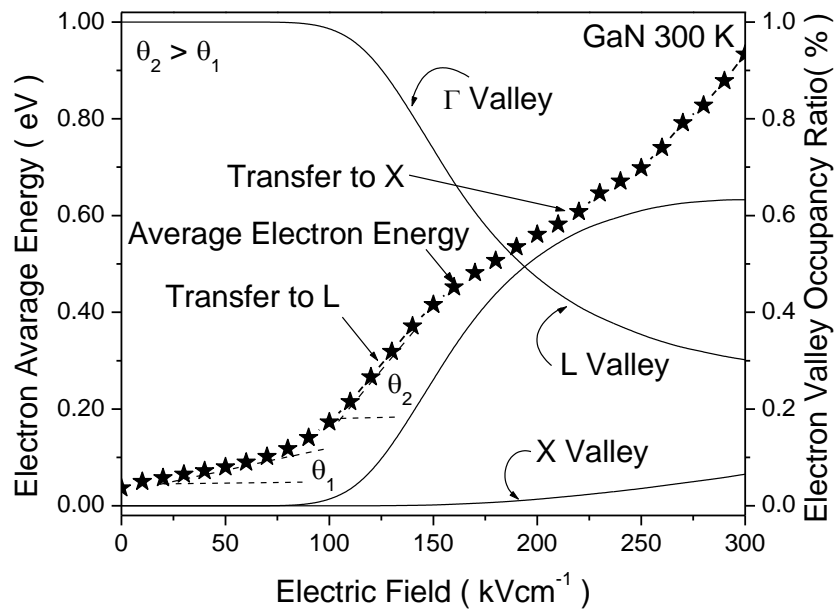
¹ Negative differential conductivity



شکل ۴-۳: وابستگی تغییرات سرعت سوق الکترون ها (منحنی ستاره دار) و درصد اشغال الکترونی دره های انرژی (خط) به

میدان الکتریکی اعمالی در بلور نیمرسانای *GaN*.

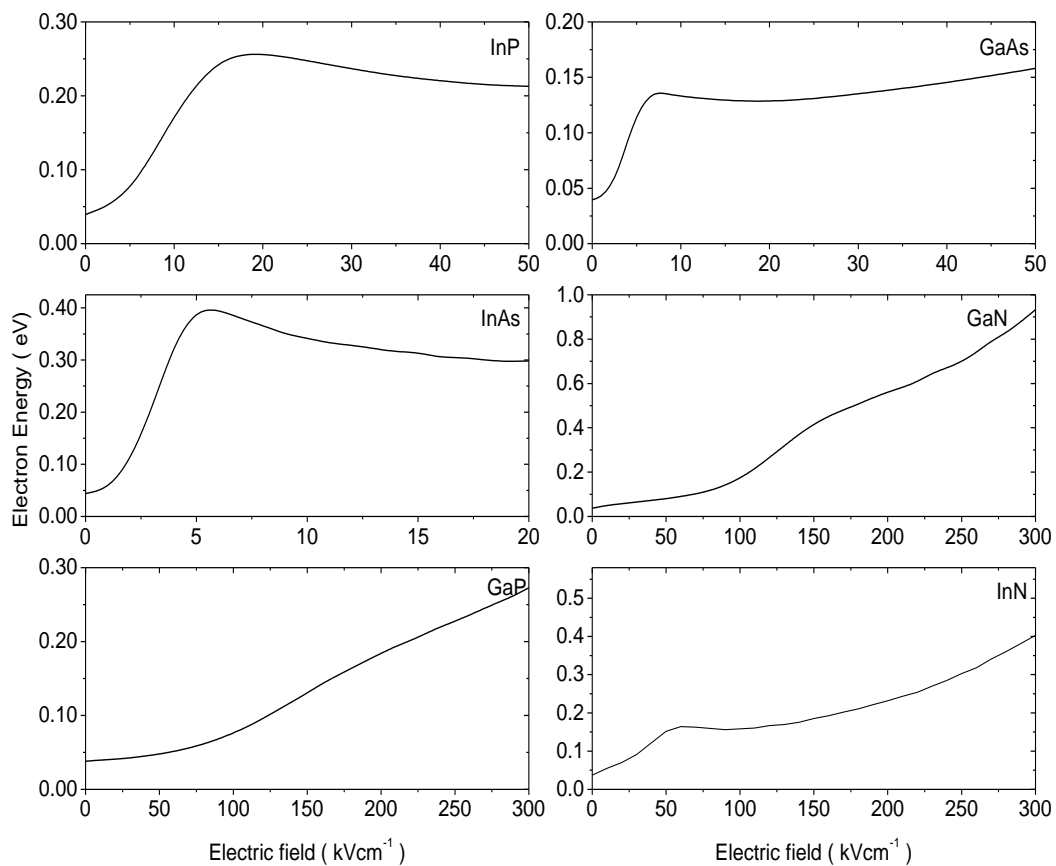
در شکل (۴-۴) نمودارهای تغییر انرژی متوسط الکترون ها و درصد اشغال دره ای بر حسب میدان الکتریکی اعمالی برای نیمرسانای *GaN* و در دمای اتاق نشان داده شده است. با مقایسه این دو نمودار در می یابیم که با آغاز فرآیند های پراکندگی بین دره ای، شیب منحنی تغییر انرژی الکترون ها تغییر می کند. با توجه به ماهیت غیر الاستیک فرآیندهای پراکندگی بین دره ای و جذب و یا گسیل انرژی توسط فونون ها، انتظار داریم که شیب تغییرات سرعت سوق در اثر گذارهای بین دره ای متفاوت با آنچه قبلا بوده است، باشد. بنابراین از روی منحنی تغییرات انرژی بر حسب میدان الکتریکی اعمالی می توان شروع گذارهای بین دره ای را تعیین نمود.



شکل ۴-۴: وابستگی تغییرات انرژی متوسط الکترون ها (منحنی ستاره دار) و درصد اشغال الکترونی دره های انرژی به میدان

الکتریکی اعمالی در بلور نیمرسانای GaN.

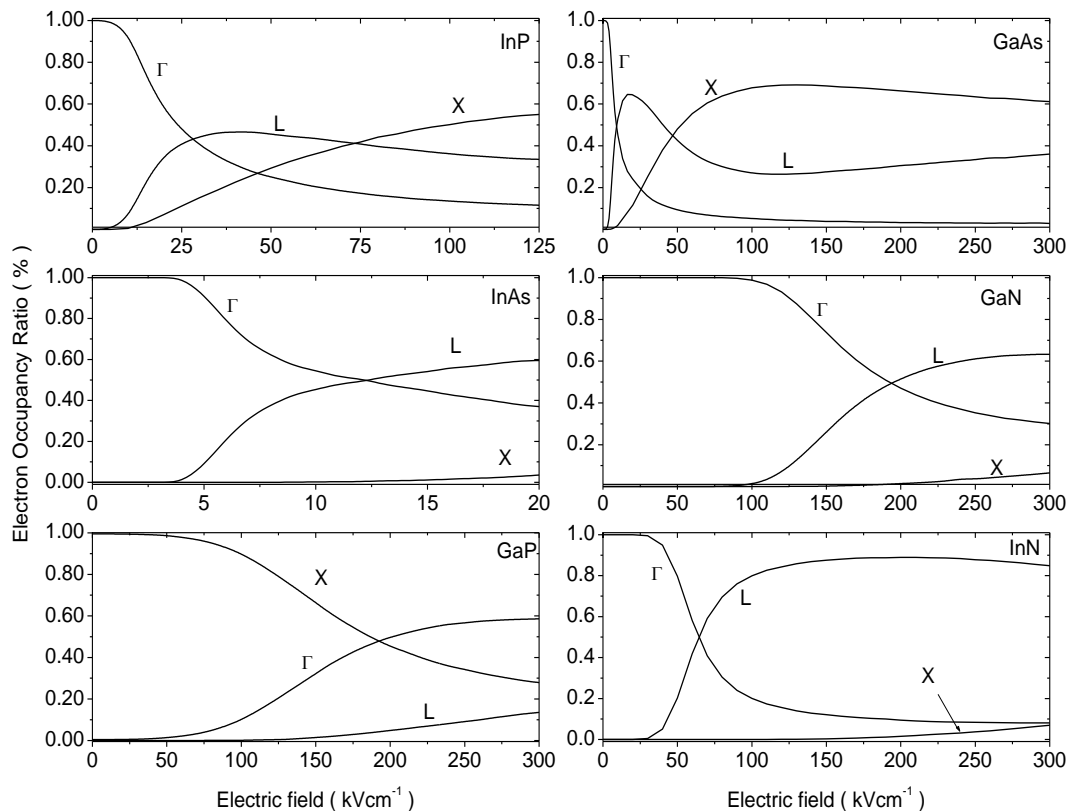
در شکل (۴-۵) منحنی تغییرات انرژی جنبشی متوسط الکترون ها در ترکیبات نیمرسانای گروه III-V مورد مطالعه در این کار را تحت تاثیر میدان الکتریکی اعمالی نشان داده شده است. همانگونه که عنوان شد، تحت تاثیر عوامل پراکندگی بین دره ای، تغییراتی در شیب منحنی انرژی برای تمام ترکیبات اتفاق می افتد. با توجه به این نمودارها انرژی الکترون ها برای گروه اول ترکیبات III-V و در حضور میدان های الکتریکی پایین تر از 20 kVcm^{-1} در نیمرسانای InAs بیشترین مقدار و در نیمرسانای GaP کمترین مقدار (پایین تر از 0.40 eV) را دارد. در گروه دوم بالاترین انرژی را الکترون های نیمرسانای GaN و کمترین مقادیر انرژی را GaP کسب می کنند.



شکل ۴-۵: نمودار انرژی جنبشی الکترون ها بر حسب میدان الکتریکی اعمالی در تعدادی از ترکیبات نیمرساناهای III-V در دمای اتاق.

در شکل (۴-۶) نمودار درصد اشغال الکترونی دره های انرژی به صورت تابعی از میدان الکتریکی اعمالی رسم شده است. با توجه به این نمودار ها مشخص است که برای میدان های پایین تر از حد آستانه در تمامی ترکیبات گروه III-V به غیر از GaP درصد اشغال الکترونی دره ی مرکزی تقریباً نزدیک به یک است. در میدان های بالاتر از میدان آستانه درصد اشغال دره مرکزی افت پیدا می کند و در نتیجه درصد اشغال دره های فضایی دیگر بیشتر خواهد شد. سرانجام با به تعادل رسیدن فرآیند های پراکندگی بین دره ای و درصد اشغال بین دره ای به حد تعادل خواهد رسید. کاهش تراکم الکترونی در دره ی مرکزی نیمرسانای GaAs بیشتر از سایر اعضای این گروه است به طوری که در میدان های بسیار شدید بسیار به صفر نزدیک می شود. در نیمرسانای GaP در

میدان های اعمالی ضعیف تر تمام الکترون ها در پایین ترین موقعیت انرژی واقع در دره X به سر می برند و با افزایش شدت میدان اعمالی به دره مرکزی و L پراکنده می شوند.

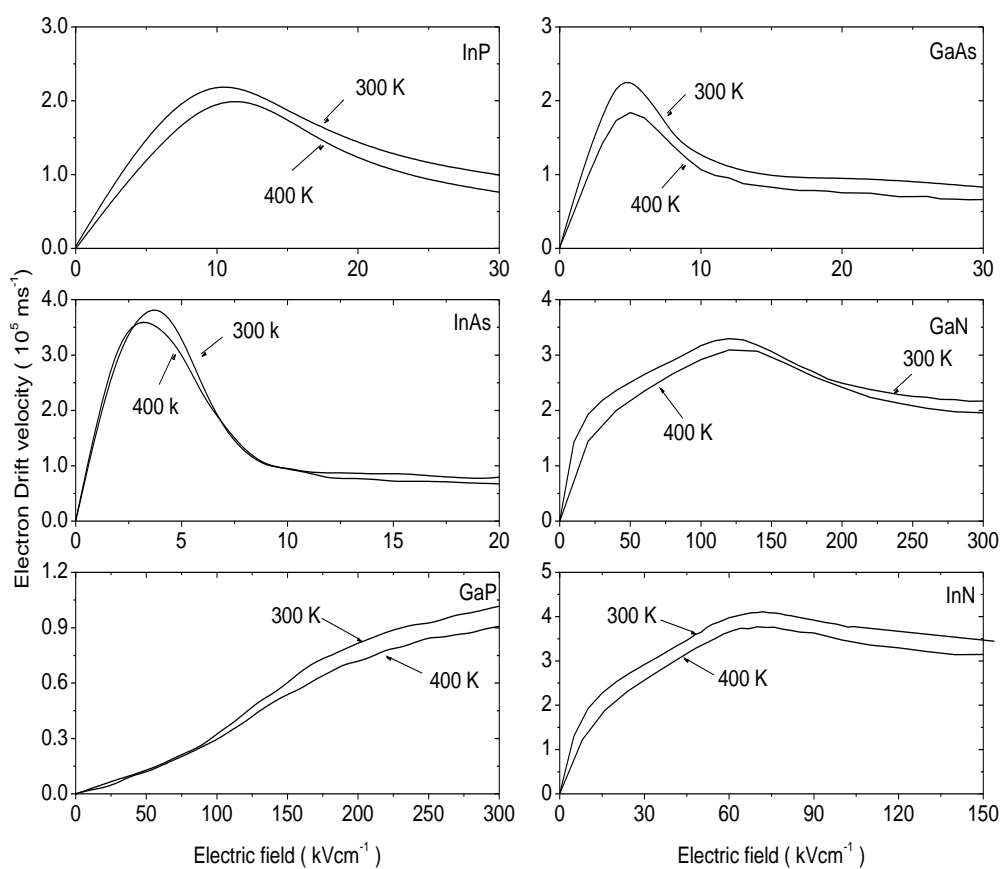


شکل ۴-۶: نمودار درصد اشغال الکترونی دره های انرژی توسط الکترون ها در تعدادی از ترکیبات نیمرساناهای گروه III-V در دمای اتاق.

۴-۲-۱-۱ مقایسه وابستگی دمایی نیمرساناها در حالت پایدار

در شکل (۴-۷) تاثیر تغییرات دمای محیط بر منحنی سرعت-میدان برای ترکیبات مورد مطالعه رسم شده است. برای این منظور محاسبات مونت کارلو در دو دمای ۳۰۰ و ۴۰۰ کلوین در حضور چگالی ناخالصی از مرتبه $10^{22} m^{-3}$ انجام داده شده است. افزایش دما در تمامی این ترکیبات، سبب کم شدن سرعت سوق الکترون ها می شود [۳]. همچنین قله نمودار سرعت سوق - میدان به سمت میدان های الکتریکی بالاتر جابجا می شود. این تغییرات را می توان ناشی از افزایش ارتعاشات شبکه و در نتیجه افزایش پراکندگی از فونون های قطبی -

اپتیکی و پراکندگی های بین دره ای دانست [۳۸]. بنابراین انتظار داریم با افزایش دما، عوامل کاهنده سرعت سوق الکترون ها بیشتر شوند. با توجه به نمودار های بدست آمده دیده می شود که تراورد الکترون ها در نیمرسانای *InAs* بسیار کمتر از سایر اعضای این گروه به تغییرات دمایی محیط حساس است. همچنین در نیمرسانای *GaP* در میدان های پایینتر از 100 kVcm^{-1} وابستگی دمایی سرعت سوق بسیار ناچیز می باشد.



شکل ۴-۷: نمودار سرعت سوق الکترون هابر حسب میدان الکتریکی اعمالی در حضور میدان های الکتریکی اعمالی

شدید در گروهی از ترکیبات نیمرساناهای *III-V*

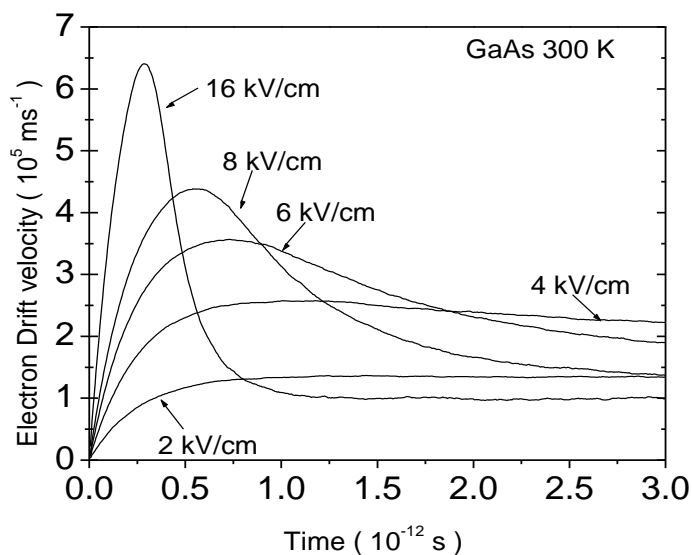
۴-۲-۲ شبیه سازی حالت ناپایدار ترابرد الکترون ها

حالت ناپایدار ترابرد الکترون ها، اشاره به پاسخ زمانی مواد نیمرسانا به میدان الکتریکی اعمالی دارد. یعنی مراحل تغییرات به وجود آمده از لحظه ای که میدان الکتریکی اعمال می شود تا لحظه ای که سیستم به حال تعادل برسد بررسی شود. زمان رسیدن سیستم به حالت پایدار را زمان ناپایداری ترابرد می نامند [۳]. این زمان وابسته به دمای محیط و شدت میدان الکتریکی اعمالی در هر نیمرسانا است. علاوه بر بررسی این تغییرات زمانی تا رسیدن الکترون ها به حالت پایدار و آگاهی از فرآیند های میکروسکوپی ترابرد، بررسی این زمان کاربرد مهم دیگری نیز دارد. اگر در قطعات الکترونیکی با ناحیه ای بسیار کوچک میدان الکتریکی بسیار شدید اعمال شود، الکترونی که از یک سوی این قطعه وارد شود، بسیار سریع از سوی دیگر این ناحیه خارج خواهد شد. بنابراین ترابرد الکترون ها در این ناحیه به حالت پایدار نخواهد رسید. از این رو معین کردن این خصوصیت مهم ترابرد الکترونی می تواند عامل بسیار مهمی در بررسی قطعات نیمرسانا به شمار آید. بنابراین سعی می شود که در طراحی قطعاتی که در آنها میدان های بسیار شدید ایجاد می شود، زمان واهلش بیشتر از زمان ناپایداری ترابرد باشد. در غیر این صورت نیز باید اثرات این ناپایداری لحاظ شود [۳].

بررسی تحلیلی حالت ناپایدار ترابرد الکترون ها با استفاده از حل معادله بولتزمن، بسیار پیچیده تر از حل این معادله برای حالت پایدار ترابرد الکترون ها است. بنابراین امکان بررسی حالت ناپایدار با استفاده از روش مونت کارلو، به عنوان یک مزیت بسیار مهم این روش به شمار می آید [۳].

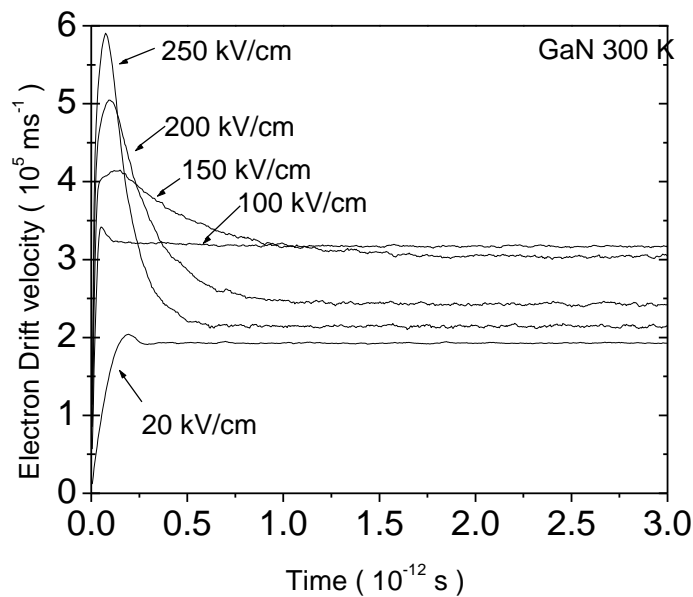
در ادامه نتایج خواص ترابرد ناپایدار را در دو نیمرسانای GaN و $GaAs$ به طور کامل بررسی می کنیم. به عبارت دیگر بررسی دقیق را برای یکی از ترکیبات $III-V$ با میدان آستانه کمتر از 30 kVcm^{-1} و دیگری با میدان آستانه بیشتر از 30 kVcm^{-1} را به طور کامل انجام می دهیم. در اشکال (۴-۸) و (۴-۹) منحنی وابستگی زمانی سرعت سوق در نیمرسانای GaN و $GaAs$ رسم شده است. این نتایج در دمای اتاق و در حضور چگالی ناخالصی از مرتبه 10^{22} m^{-3} بدست آمده است. بررسی ترابرد ناپایدار در میدان های 2 kVcm^{-1} ، 4 kVcm^{-1} ، 6 kVcm^{-1} ، 8 kVcm^{-1} و 16 kVcm^{-1} برای $GaAs$ و 20 kVcm^{-1} ، 100 kVcm^{-1} ، 150 kVcm^{-1} ، 200 kVcm^{-1} و 250 kVcm^{-1} برای GaN انجام شده است. این مقادیر به گونه ای انتخاب شده اند که میدان های قبل و بعد

از میدان آستانه در حالت پایدار را در بر بگیرند. همانگونه که در شکل (۴-۸) دیده می شود پس از اعمال میدانی کمتر از میدان آستانه، در هر دو مورد، الکترون ها شتاب می گیرند. در این حالت سرعت الکترون ها پیوسته افزایش می یابد تا اینکه سرانجام سرعت با زمان به تعادل برسند. زمان حالت ناپایدار ترابرد برای *GaAs* حدوداً ۰/۵ پیکو ثانیه و برای *GaN* حدوداً ۰/۲ پیکو ثانیه می باشد. در میدان هایی برابر و یا بیشتر از میدان آستانه، در نمودار سرعت سوق قله ای مشاهده می شود. سپس سرعت سوق کاهش می یابد تا اینکه به حد تعادل و پایدار بر حسب زمان برسد. با توجه به این نتایج بیشتر شدن میدان الکتریکی اعمالی، زمان ناپایدار ترابرد الکترون ها را در میدان های اعمالی بزرگتر از میدان آستانه، کاهش می دهد. به عنوان مثال برای میدان $6kVcm^{-1}$ این زمان ۳ پیکو ثانیه است در حالی که در میدان $16kVcm^{-1}$ این زمان به حدود ۱ پیکو ثانیه کاهش می یابد. با توجه به شکل (۴-۹) سرعت سوق در حالت ناپایدار ترابرد الکترون ها در نیمرسانای *GaN* سریع تر به حالت پایدار می رسد.



شکل ۴-۸: نمودار تغییرات حالت ناپایدار سرعت سوق الکترونی بر حسب تابعی از زمان در نیمرسانای *GaAs* در دمای

اتاق و برای میدان های اعمالی در بازه $2kVcm^{-1}$ تا $16kVcm^{-1}$.

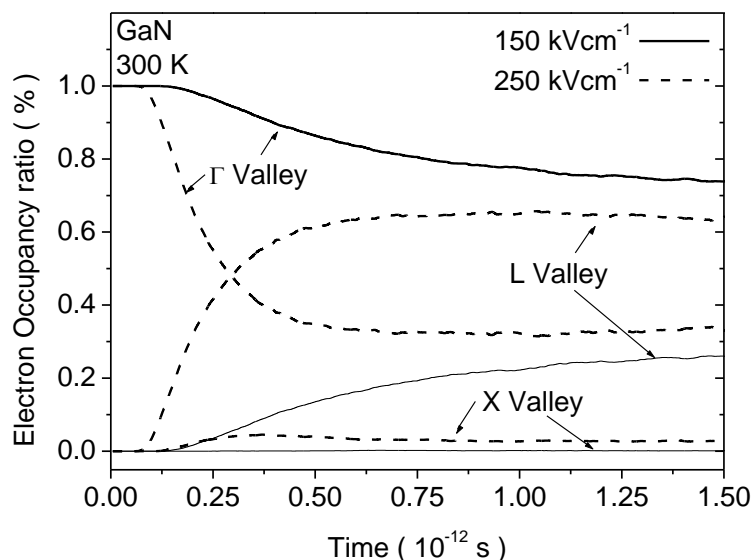


شکل ۴-۹: نمودار تغییرات حالت ناپایدار سرعت سوق الکترونی بر حسب تابعی از زمان در نیمرسانای GaN در

دمای اتاق و برای میدان های اعمالی در بازه 20 kVcm^{-1} تا 250 kVcm^{-1} .

به منظور بررسی بیشتر جزییات گذار از حالت ناپایدار به حالت پایدار برای ترابرد الکترون های درون بلور، روند تغییرات درصد اشغال دره ها را بر حسب زمان و در دو میدان الکتریکی اعمالی 150 kVcm^{-1} و 250 kVcm^{-1} بررسی کرده و نتایج آن در شکل (۴-۱۰) رسم شده است. این نمودار ها مربوط به نیمرسانای کپه ای GaN و در دمای 300 K کلومین می باشد. درصد اشغال در میدان های اعمالی 150 kVcm^{-1} با خطوط سیاه و 250 kVcm^{-1} با خط چین مشخص شده است. با توجه به این نمودار ها دیده می شود که تحت اثر میدان اعمالی 150 kVcm^{-1} در حدود 0.12 پیکو ثانیه طول خواهد کشید تا گذار های بین دره ای شروع شود. در این بازه ی زمانی الکترون ها کاملا در دره مرکزی قرار دارند و اعمال میدان سبب شتاب گرفتن آنها می شود. با گذشت زمان به تدریج الکترون ها از دره مرکزی به دره های فضایی دیگر پراکنده می شوند. در نهایت پس از گذشت 1 پیکو ثانیه درصد اشغال دره ای الکترون ها در تمامی دره ها به حالت پایدار می رسد. به عبارت دیگر، در این حالت فرآیندهای پراکندگی بین دره ای به تعادل می رسند. در نتیجه به تعادل رسیدن فرآیند های

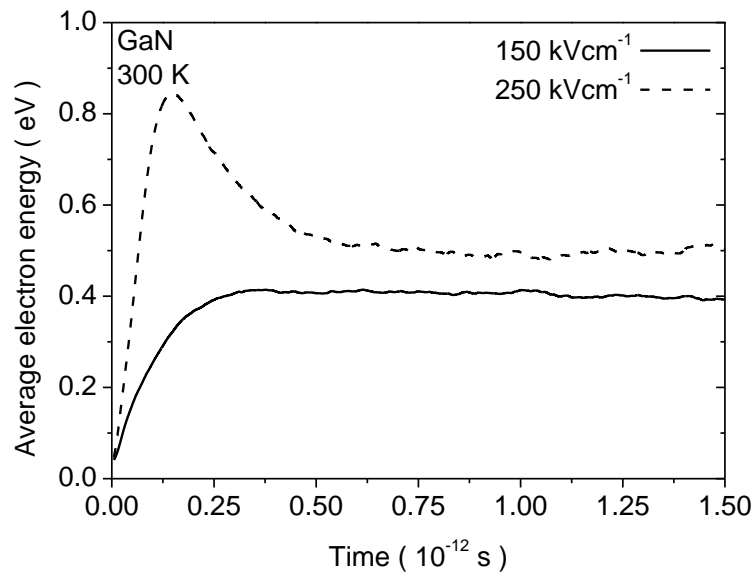
پراکندگی، ترابرد الکترون ها به حالت پایدار می رسد. الکترون ها در میدان اعمالی 150 kVcm^{-1} نسبت به 250 kVcm^{-1} بیشتر در دره مرکزی باقی می مانند. همچنین در میدان 150 kVcm^{-1} درصد اشغال دره X در تمام زمان ها صفر می باشد.



شکل ۴-۱۰: نمودار تغییرات حالت ناپایدار درصد اشغال الکترونی دره های انرژی بر حسب تابعی از زمان برای نیمرسانای

GaN در دمای اتاق و در میدان های اعمالی 150 kVcm^{-1} و 250 kVcm^{-1} .

وابستگی زمانی تغییرات انرژی متوسط الکترون ها بر حسب زمان برای نیمرسانای GaN و در دمای اتاق در شکل (۴-۱۱) نشان داده شده است. همانطور که در توضیحات شکل قبل بیان شد، در زمان های کمتر از 0.12 پیکو ثانیه الکترون ها کاملاً دره مرکزی را اشغال کرده اند. بنابراین در میدان اعمالی قوی تر و با توجه به یکسان بودن جرم موثر الکترون ها در هر دو حالت، الکترون ها در میدان اعمالی شدید تر شتاب بیشتری می گیرند و انرژی بیشتری از میدان کسب خواهند نمود. در زمان های بیشتر از 0.12 پیکو ثانیه و به دلیل افزایش فرآیندهای پراکندگی بین دره ای انرژی الکترون ها کاهش می یابد. سرانجام با به تعادل رسیدن فرآیندهای پراکندگی، انرژی الکترون ها نیز به حالت تعادل می رسد.



شکل ۴-۱۱: نمودار تغییرات حالت ناپایدار انرژی متوسط الکترون ها بر حسب تابعی از زمان در دمای اتاق و برای میدان

های اعمالی 150 kVcm^{-1} و 250 kVcm^{-1} برای نیمرسانای GaN .

۳-۴ شبیه سازی ترابرد الکترون ها در قطعات نیمرسانا

در این بخش به بررسی نتایج شبیه سازی مونت کارلو برای بررسی خواص ترابرد الکترون ها در دیود های

بالستیک خواهیم پرداخت. ساختار دیود شبیه سازی شده را اینگونه در نظر گرفته ایم:

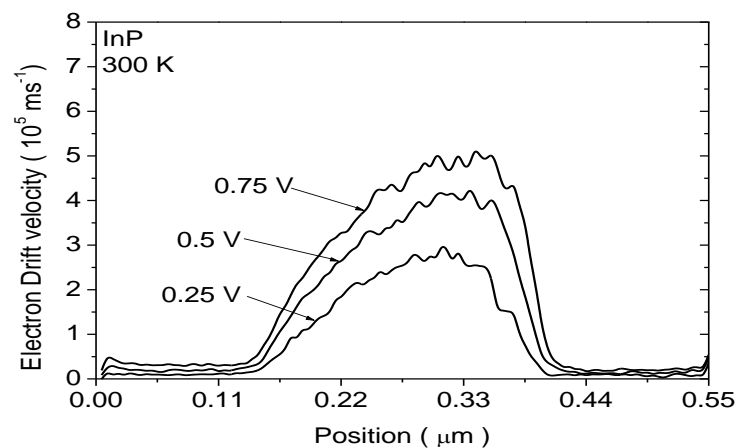
- طول قطعه 0.55 میکرو متر
- طول قسمت های بسیار آلاینده شده 0.15 میکرومتر و طول کانال 0.25 میکرومتر
- غلظت ناخالصی ها در نواحی بسیار آلاینده از مرتبه 10^{+23} m^{-3} و در ناحیه کانال از مرتبه 10^{+21} m^{-3}

شکل (۴-۱۲) مشخصه سرعت سوق الکترون ها را در دیود های ساخته شده از نیمرسانای InP در

دمای اتاق بر حسب تابعی از موقعیت الکترون ها در درون قطعه نشان می دهد. نمودار ها برای سه ولتاژ اعمالی

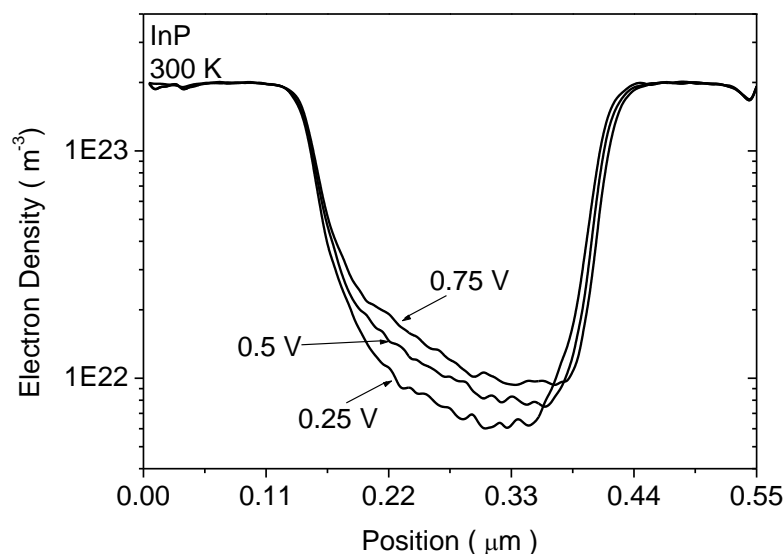
۰/۲۵، ۰/۵ و ۰/۷۵ ولت رسم شده است. با اعمال ولتاژ، الکترون ها در ناحیه میانی در این قطعه شتاب می گیرند و در دو ناحیه آند و کاتد سرعت سوق الکترونی صفر می باشد. بیشترین سرعت سوق مربوط به الکترون های مرکز کانال می باشد و هر چه به طرف نواحی آند و کاتد نزدیک می شویم، سرعت سوق کاهش می یابد. همچنین افزایش ولتاژ اعمالی، سرعت سوق بیشتری را در کانال ایجاد می کند.

برای بررسی دلایل این رفتار، نتایج شبیه سازی مونت کارلو را برای چگالی الکترون ها به صورت تابعی از مکان و در حضور سه ولتاژ اعمالی ۰/۲۵، ۰/۵ و ۰/۷۵ ولت در شکل (۴-۱۳) نشان داده شده است. با توجه به این شکل، در اثر اعمال ولتاژ، الکترون ها از نواحی آند و کاتد به ناحیه کانال تزریق می شوند و چگالی الکترون ها از مرتبه $10^{21} m^{-3}$ تا مرتبه $10^{22} m^{-3}$ افزایش می یابد. بنابراین الکترون های زیادی به ناحیه ای تزریق می شوند که چگالی ناخالصی ها در آن ناحیه بسیار کم است و از این رو پراکندگی های ناشی از ناخالصی های یونیزه سهم بسیار کمتری در ترابرد الکترون ها خواهند داشت. این یکی از عوامل مهم شتاب گرفتن الکترون ها در ناحیه کانال است. همچنین با زیاد شدن ولتاژ اعمالی، الکترون های بیشتری به کانال تزریق می شوند.



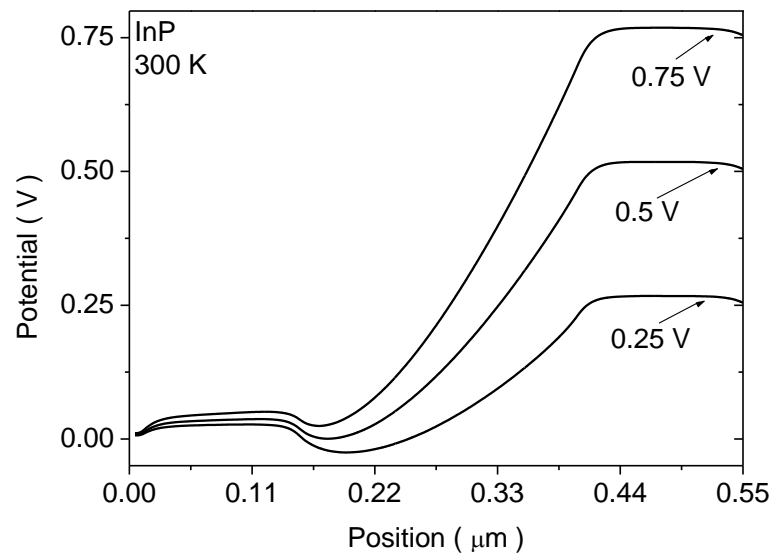
شکل ۴-۱۲: نمودار تغییرات سرعت سوق الکترون ها بر حسب تابعی از مکان الکترون ها در دیوهای بالستیک *InP*

و در حضور سه ولتاژ اعمالی ۰/۲۵ و ۰/۵ و ۰/۷۵ ولت در دمای اتاق

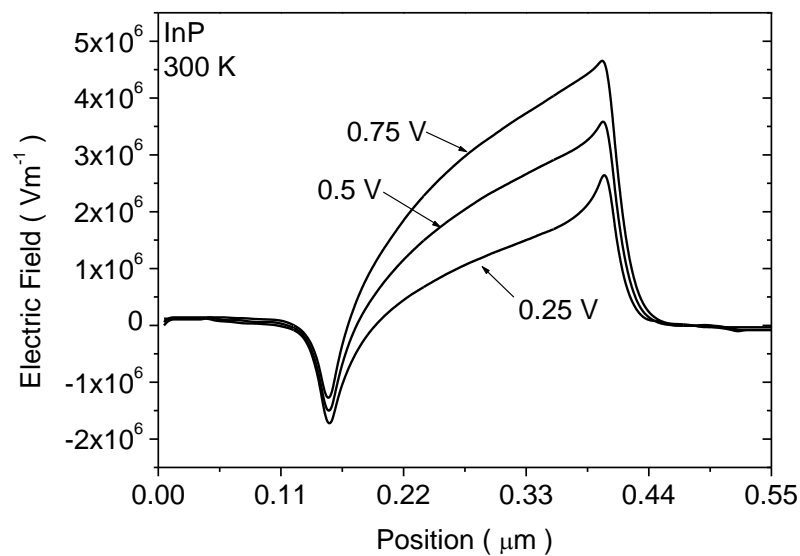


شکل ۴-۱۳: نمودار تغییرات چگالی الکترون ها بر حسب تابعی از مکان در دیود بالستیک *InP* و در حضور سه ولتاژ اعمالی ۰/۲۵، ۰/۵ و ۰/۷۵ ولت و در دمای اتاق.

چگالی الکترونی غیر یکنواخت به وجود آمده در طول قطعه سبب ایجاد یک پتانسیل الکتریکی و در نتیجه یک میدان الکتریکی غیر یکنواخت در طول قطعه خواهد شد. در شکل (۴-۱۴) پتانسیل الکتریکی ایجاد شده در طول قطعه و برای سه ولتاژ اعمالی ۰/۲۵، ۰/۵ و ۰/۷۵ ولت برای دیود بالیستیک *InP* و در دمای اتاق رسم شده است. پتانسیل به وجود آمده در ناحیه کانال غیر یکنواخت است و در نواحی بسیار آلائیده تقریباً ثابت (برابر با صفر و یا مقدار ولتاژ اعمالی) می باشد. در شکل (۴-۱۵) میدان الکتریکی حاصل از پتانسیل فوق به صورت تابعی از طول قطعه در دمای اتاق رسم شده است. با توجه به شکل، در ناحیه کانال میدان الکتریکی بسیار شدیدی به وجود می آید. اندازه این میدان برای ولتاژ اعمالی ۰/۲۵ ولت بسیار بیشتر از میدان آستانه در بلور *InP* و از مرتبه 10^6 می باشد. همچنین با افزایش ولتاژ میدان به وجود آمده در ناحیه کانال، شدید تر می شود.

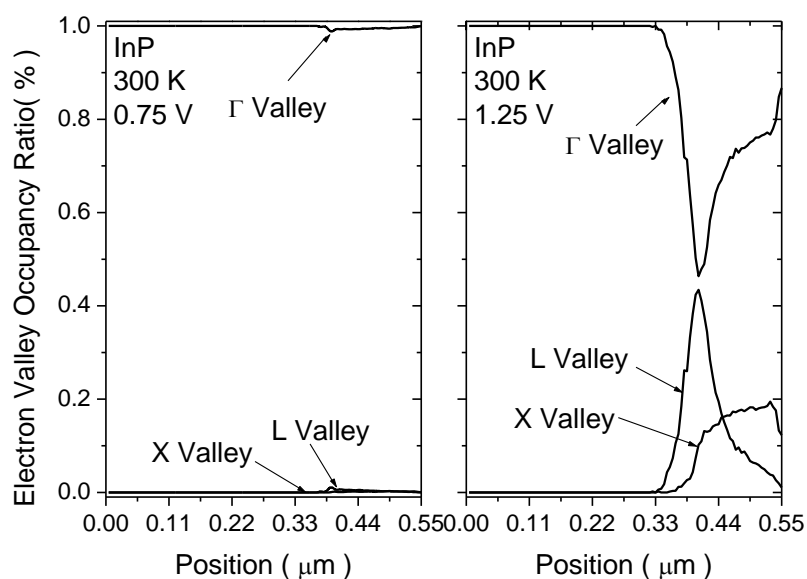


شکل ۴-۱۴: نمودار تغییرات پتانسیل الکتریکی ایجاد شده بر حسب تابعی از مکان در دیود بالستیک *InP* و در حضور سه ولتاژ اعمالی ۰/۲۵ و ۰/۵ و ۰/۷۵ ولت و در دمای اتاق.



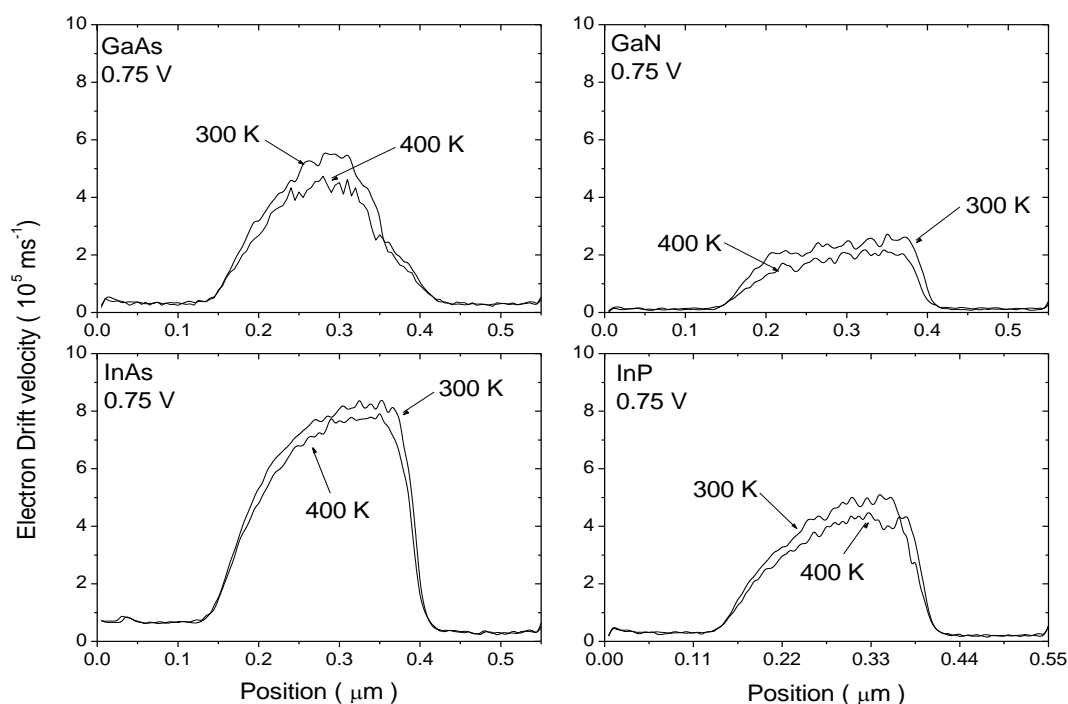
شکل ۴-۱۵: نمودار تغییرات میدان الکتریکی ایجاد بر حسب تابعی از مکان در دیود بالستیک *InP* و در حضور سه ولتاژ اعمالی ۰/۲۵ و ۰/۵ و ۰/۷۵ ولت و در دمای اتاق.

در شکل (۴-۱۶) نمودار درصد اشغال الکترونی دره های انرژی در دیود بالستیک *InP* برای دو ولتاژ مختلف ۰/۷۵ و ۱/۲۵ ولت در دمای اتاق رسم شده است. با توجه به این شکل اکثر الکترون ها در اثر ولتاژ اعمالی ۰/۷۵ ولت، در دره ی مرکزی قرار دارند. تنها تعدادی بسیار ناچیزی از آنها از دره مرکزی به دره فضایی *L* پراکنده می شوند. با افزایش ولتاژ و افزایش شدت میدان الکتریکی، الکترون ها انرژی لازم برای پراکندگی به دره های فضایی را از میدان کسب می نمایند و به دره های بالاتر پراکنده می شوند. با این حال فقط الکترونهايي که موقعیت فضایی آنها درون قطعه بیشتر از ۰/۳۳ میکرومتر است، انرژی مورد نیاز برای پراکندگی بین دره ای را دریافت می نمایند. بنابراین می توان در حد ولتاژهای بالاتر از ۰/۷۵ هر سه دره در ترابرد الکترون ها نقش دارند و باید اثرات آنها نیز منظور شود. می توان در حد پایین تر از این مقدار، خواص ترابرد را کاملاً به دره مرکزی مرتبط دانست.



شکل ۴-۱۶: نمودار درصد اشغال الکترونی دره ها در سه دره انرژی بر حسب تابعی از مکان الکترون ها در دیود بالستیک *InP* و در حضور دو ولتاژ متفاوت ۰/۷۵ و ۱/۲۵ ولت.

در شکل (۴-۱۷) مشخصه سرعت سوق برای ولتاژ اعمالی ۰/۷۵ ولت در دیودهای بالستیک ساخته شده از نیمرساناهای *GaN*، *InP*، *InAs* و *GaAs* در دماهای ۳۰۰ و ۴۰۰ کلوین نشان داده شده است. ساختار هندسی دیود های شبیه سازی شده برای تمامی این مواد یکسان می باشد. همچنین غلظت ناخالصی ها در نواحی متفاوت هر دیود، برای تمامی مواد یکسان در نظر گرفته شده است. با توجه به این شکل، نتایج شبیه سازی نشان میدهد که در شرایط یکسان برای این مواد، بیشترین سرعت سوق در ناحیه میانی دیود، مربوط به دیود ساخته شده از *InAs* و کمترین سرعت سوق مربوط به *GaN* می باشد. با افزایش دمای محیط سرعت سوق الکترونی در تمامی نقاط واقع در ناحیه کانال کاهش می یابد. این کاهش سرعت سوق ناشی از افزایش پراکندگی الکترون ها با دما است. افزایش دما اثر بیشتری بر افت سرعت سوق در قطعه ساخته شده از *GaAs* و اثر کمتری در دیود *InAs* دارد.

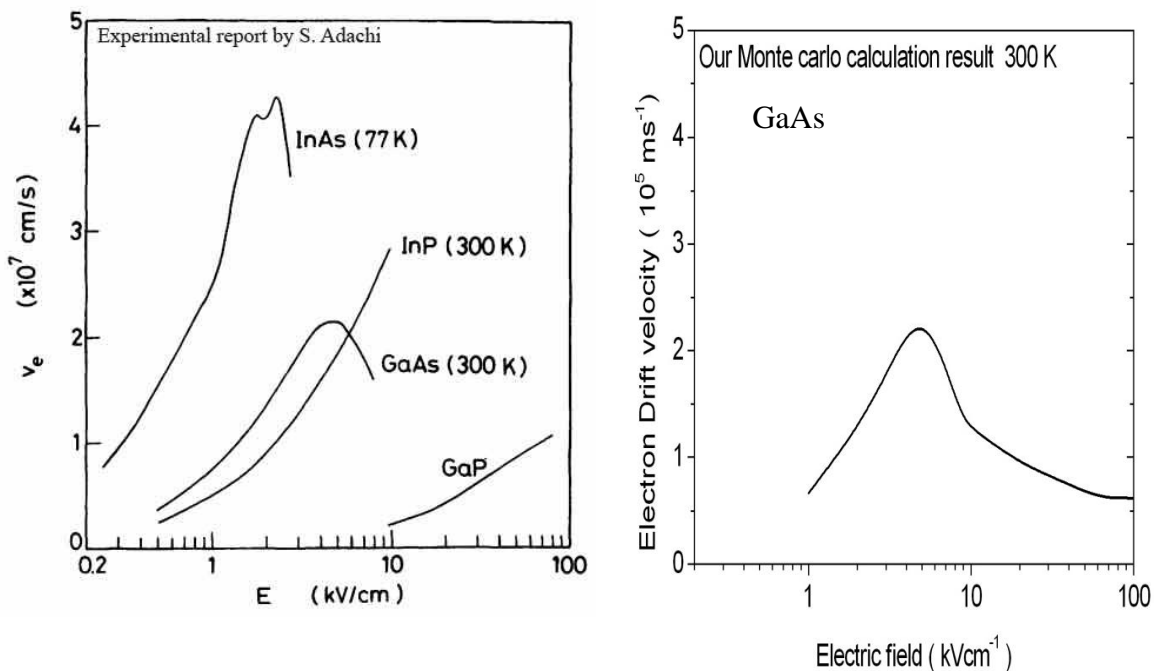


شکل ۴-۱۷: نمودار تغییرات سرعت سوق الکترون ها بر حسب تابعی از مکان در تعدادی از نیمرسانای گروه III-V و در دو

دمای ۳۰۰ و ۴۰۰ کلوین و در حضور ولتاژ اعمالی ۰/۷۵ ولت.

۴-۴ بررسی اعتبار شبیه سازی قطعات نیمرسانا به روش مونت کارلو

مطالعه تجربی قطعات نیمرسانا با ابعاد زیر میکرون بسیار دشوار است و وابسته به شکل هندسی قطعات و همچنین نوع نیمرساناهای به کار برده شده و غلظت ناخالصی ها است. به همین دلیل به منظور طراحی و بهینه سازی این گونه قطعات، غالباً از روش های محاسباتی استفاده می شود. همانگونه که عنوان شد روش شبیه سازی مونت کارلو به عنوان یکی از روش های کارآمد موجود برای شبیه سازی قطعات نیمرسانا باشد. با این حال به دلیل کاربردهای فراوان این روش برای شبیه سازی خصوصیات ترابرد الکترونی در قطعات الکترونیکی، ضروریست که نخست اعتبار مدل بکار برده شده، را بررسی نماییم. برای این منظور نتایج حالت پایدار ترابرد الکترون ها درون بلور نیمرسانا را با نتایج تجربی موجود مقایسه خواهیم کرد. متأسفانه داده های تجربی زیادی برای بررسی خواص ترابرد الکترونی در بلورهای نیمرسانا وجود ندارد. با این حال آزمایش های بعضی تجربی برای بررسی حالت پایدار ترابرد الکترون ها درون بلور کپه ای برخی از نیمرساناها از قبیل *GaAs* انجام شده است. از این رو به مقایسه نتایج شبیه سازی مونت کارلو با نتایج تجربی موجود خواهیم پرداخت. در شکل (۴-۱۸) نتایج بدست آمده برای مشخصه سرعت سوق - میدان نیمرسانای *GaAs* در دمای اتاق که توسط برنامه کامپیوتری به روش شبیه سازی مونت کارلو بدست آمده است را همراه با داده های تجربی [۴۰] موجود برای این ماده در دمای اتاق رسم شده است. با توجه به این شکل مطابقت بسیار خوبی بین این نتایج وجود دارد.



شکل ۴-۱۸: مقایسه نتیجه بدست آمده توسط روش شبیه سازی مونت کارلو با نتیجه تجربی گزارش شده توسط

[۴۰]Adachi

۴-۵ نتیجه گیری

در این پایان نامه خواص ترابرد الکترونی در قطعات نیمرسانای ساخته شده از گروه نیمرساناهای ترکیبات دو تایی $III-V$ مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور از مدلی سه دره ای و بر اساس تکنیک شبیه سازی مونت کارلو استفاده شده است. همچنین اثرات غیر سهموی بودن دره های انرژی در نظر گرفته شده است. اثرات پراکندگی الکترون ها از ناخالصی ها و فونون های شبکه به صورت کوانتومی و با استفاده از قاعده طلایی فرمی در نظر گرفته شده است. در پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه از تقریب هرینگ-بروکس استفاده شده است. فرآیندهای پراکندگی ناشی از فونون آکوستیکی، اپتیکی قطبی و اپتیکی غیر قطبی در نظر گرفته شده است.

در ابتدا، خصوصیات حالت پایدار ترابرد الکترون ها در حضور میدان های الکتریکی شدید برای تعدادی از مطرح ترین ترکیبات دوتایی $III-V$ مورد بررسی و مقایسه قرار گرفت. خصوصیات محاسبه شده شامل نمودارهای سرعت سوق بر حسب میدان الکتریکی، انرژی بر حسب میدان الکتریکی و درصد اشغال الکترونی دره های انرژی بر حسب میدان الکتریکی می باشد. این محاسبات نشان می دهد که مقدار سرعت سوق الکترون ها با افزایش میدان الکتریکی اعمالی در ابتدا افزایش می یابد و پس از رسیدن به حد آستانه کاهش می یابد و نهایتاً با افزایش میدان به تعادل می رسد. همچنین با افزایش دمای محیط سرعت سوق الکترون ها کاهش می یابد و میدان آستانه به سمت میدان های اعمالی بالاتر جابجا می شود. در بین این گروه از نیمرساناها، بیشترین میدان آستانه مربوط به GaN می باشد و بزرگترین و کمترین مقادیر سرعت سوق مربوط به نیمرسانای InN و $GaSb$ است.

سپس حالت ناپایدار ترابرد الکترون ها در بلور را معرفی کردیم. این حالت تغییرات زمانی خصوصیات سیستم را تا رسیدن به حالت پایدار نشان می دهد. با توجه به نمودار های بدست آمده مشخص شد که با افزایش شدت میدان زمان ناپایداری ترابرد کاهش می یابد و مقدار پیک سرعت افزایش می یابد. همچنین از نمودارها دیده می شود که زمان رسیدن به حالت پایدار در نیمرسانای GaN بسیار کمتر از $GaAs$ می باشد.

همانطور که عنوان شد، با گسترش مدل بکار برده برای شبیه سازی نیمرساناهای کپه ای را می توان خواص ترابرد الکترون ها در قطعات نیمرسانا مختلف را تحلیل و بررسی نمود. برای این منظور باید ساختار هندسی قطعه، شرایط مرزی و اثر پتانسیل بار ناشی از چگالی ناخالصی های آلاینده را به مدل قبلی بیفزاییم. در ساده ترین حالت ممکن برای شبیه سازی قطعات نیمرسانا، خواص ترابرد الکترون ها مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج شبیه سازی نشان می دهد که در این قطعه الکترون های واقع در ناحیه کانال در اثر ولتاژ اعمالی شتاب می گیرند. نمودارهای بدست آمده نشان می دهند بیشترین تحرک پذیری الکترون ها در کانال دیود معرفی شده به وجود می آید. همچنین با توجه به نتایج بدست آمده دیده می شود در اثر ولتاژ 0.75 ولت، در

کانال دیود InP بیشترین تحرک پذیری و در دیود GaN کمترین تحرک پذیری ایجاد می شود. همچنین این نتایج نشان می دهند که با افزایش دمای محیط تحرک پذیری الکترون ها در این ناحیه کاهش می یابد.

مراجع

- ۱- Elliot T. B. (2006), "New Research on Semiconductors", Nova Science Publishers, Inc
- ۲- Orton J. (2004) , "The Story of Semiconductors", Oxford University Press
- ۳- Jacoboni C. , Lugli P. (1989), "The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation", Springer- Verlag
- ۴- Kalos M. H. , Whitlock P. A. , (1986), "Monte Carlo Methods Volume I: Basics", John Wiley & Sons, Inc
- ۵- Ashcroft N. W., mermain , N , D. ,(1976), "solid state physics", Harcourt college
- ۶- Lundstrom M. (2000), "Fundamentals of Carrier Transport", Cambridge university press
- ۷- Martienssen W., Warlimont H. (2005), "Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data", Springer
- ۸- Singh J. (1995), "Semiconductor Optoelectronics", McGRAW-HILL.
- ۹- Jacoboni C. , Reggiani L. , (1983), Reviews of Modern Physics, Vol 55, NO 3, 648, "The monte Carlo Method for the solution of charge transport in Semiconductors with applications to covalent materials"
- ۱۰- آشنایی با فیزیک حالت جامد، چارلز کیتل، ترجمه اعظم پورقازی و مهدی صفا و جمشید عمیقیان، مرکز نشر دانشگاهی (۱۳۶۷)
- ۱۱- مقدمه ای بر اپتیک نیمرسانا، ناصر پیغمبریان، استفان. و. کوخ، آندره میسروویچ، ترجمه اکبر حریری، سازمان انرژی اتمی ایران، (۱۳۷۵)
- ۱۲- Moglestue C, (1993), "Monte Carlo simulation of semiconductor devices", Chapman& Hall
- ۱۳- Wang S. (1989), "Fundamentals of Semiconductor theory and device physics", Prentice- Hall International, Inc
- ۱۴- Singh J,(2001), "Semiconductor devices basic principle", John Wiley & Sons, Inc.
- ۱۵- Sze S. M.,(1981) "Physics of semiconductor Devices 2th edition", John Wiley & Sons, Inc.
- ۱۶- G. F. Formicone^{2†} , D. Vasileska, and D. K. Ferry, (1997), "Modeling of Submicron Si_{1-x}Ge_x-Based MOSFETs by Self-Consistent Monte Carlo Simulation"phys. stat. sol. (b) 204, 531 (1997)
- ۱۷- Ducan. A, Ravzioli U, Jakumeit J, (1998) "Full-Band Monte Carlo Investigation of Hot Carrier Trends in the Scaling of Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistors", IEEE Transactions on electron Devices, Vol 45, No 4
- ۱۸- Weng X. M., Cui H. L. , (1998), "Simulation of a submicron 3C-SiC ballistic diode based on the Lei-Ting hydrodynamic balance equations", JOURNAL OF APPLIED PHYSICS, Vol 83, N 6
- ۱۹- Byrappa K., Ohachi H., (2003), "Crystal growth technology", Springer-Verlag

- ۲۰- Duffer T. (2010), "**Crystal Growth Processes Based on Capillarity**", John Wiley & Sons
- ۲۱- Rinaldi F. , (2002) , "**Basics of molecular beam epitaxy**", Annual report, University of Ulm
- ۲۲- اچ پی مایرز ترجمه ناصر تجبر، (۱۳۷۷)، "مبانی فیزیک حالت جامد"، انتشارات دانشگاه فردوسی مشهد
- ۲۳- گاسیروویچ. ا.، ترجمه محمدرضا مطلوب، آریایی جمیل، (۱۳۷۹) "فیزیک کوانتومی"، مرکز جهاد دانشگاهی تربیت معلم
- ۲۴- Hess. K, (2000), "**Advance theory of semiconductor devices**", IEEE press.
- ۲۵- Kelsall R. W.,(1995), "**THE MONTE CARLO METHOD FOR SEMICONDUCTOR DEVICE SIMULATION**", IEEE
- ۲۶- Chen C, Dutta M, Stroschio M A, (2004), "**Electron scattering via interactions with optical phonons in wurtzite crystals**",PHYSICAL REVIEW B 70, 075316
- ۲۷- Ridley B. K., (1999), "**Quantum processes in Semiconductors**", 4th edition, Oxford university press.
- ۲۸- مولوی، علی اصغر، (۱۳۸۵)، "کاربرد کامپیوتر در فیزیک"، انتشارات دانشگاه تربیت معلم سبزوار
- ۲۹- Kalos M H, Whitlock P A,(1986),"**Monte Carlo Methods Volume 1: Basics**", John wiley & Sons
- ۳۰- Akarsu M, Özbaş Ö, (2005), "Monte Carlo simulation for electron dynamics in semiconductor devices", Mathematical and Computational Applications
- ۳۱- Bara S, Zimmermann J, (1999), "**Ultra - fast poisson's equation solvers using wired-up processors for virtual devices architectures**",IEEE.
- ۳۲- Molenaar J, Hemker P. W., (1990), "**A multi grid approach for the solution of the 2D Semiconductor equations**", impact of computing in science and engineering
- ۳۳- Lo S C, Li Y,Yuc S M, (2007), "**Analytical solution of nonlinear Poisson equation for symmetric double-gate metal-oxide-semicond**", Mathematical and Computer Modelling
- ۳۴- Ethridge F, Greenugard L, (2001), "**A new fast-multipole accelerated Poisson solver in two dimensions**", SIAM J. Sci. Comput. ,Vol 23, No 3, 741-460
- ۳۵- Press W.H., Teukolsky S.A., Vetterling W.T., Flannery B.P. (1992) "**Numerical recipes in Fortran 77**", Cambridge University Press
- ۳۶- Boardman A. D., (1980), "**Physics programs**", John wiley & Sons
- ۳۷- Brennan K F, Brown A, (1997),"**Theory of modern electronic semiconductor devices**", john wiley & sons
- ۳۸- Ando Y, Hori Y, Contrata W, Samoto N, (1999), "**Full band Monte Carlo simulation for temperature-dependent electron transport in gallium nitride**", Physica B, 272, 253-255
- ۳۹- Hockney R W, Eastwood J W,(1988), "**Computer simulation Using particles**", IOP publishing ltd
- ۴۰- Adachi S, (1992), "**Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds - InP, InAs, GaAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP**", Wiley-Interscience,pp. 241

୧୧- Martienssen W, Warlimont H,(2005) "**Springer hand book of condensed Matter and Materials Data**", Springer

مقالات مستخرج از پایان نامه

Abstract

The investigation of electron transport at the presence of intense electric fields in the semiconductor devices has always an interested issue for researchers and optoelectronic industries. In this thesis we used the Monte Carlo simulation method to investigate the steady state and transient case of electron transport (semi classical) in group III-V compound semiconductors. We also developed our model in order to simulate electron transport properties inside a ballistic diode. This model includes three sets of non-parabolic conduction band valleys which can be occupied by electrons due to high electric field.

The effects of impurities and the acoustic phonon scattering, polar-optical and non-polar optical mechanisms have been considered. The dependence of temperature variations on the electron transport was also discussed.

Key words: Monte Carlo method, High Electric field, Electron transport, III-V compound semiconductors, ballistic diode.



Shahrood University of Technology

Physics Faculty

Solid state group

Master of Science Thesis

**Study of electron transport properties in sub micrometers III-V
semiconductors in strong electric field using Monte Carlo simulation**

Mohammad Reza Khalvati

Supervisors:

Dr. Morteza Izadifard

Dr. Hadi Arabshahi

July 2010