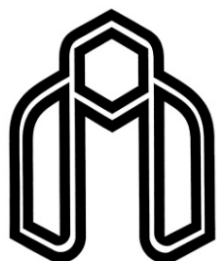


اللَّهُ الرَّحْمَنُ الرَّحِيمُ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان :

بررسی اثر بازپخت و هیدروژندهی بر خواص الکتریکی مواد نیمرسانای

نیتروژندار رقیق

نگارش :

فاطمه تیزرو اسپلی

استاد راهنما :

دکتر حسین عشقی

پایان نامه کارشناسی ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تیر ماه ۱۳۹۰

تقديم به

همسر عزيز و مهربانم

قدردانی و تشکر

سپاس و حمد بی پایان خداوند را که به من توفیق داد تا در راه کسب علم و دانش گام بردارم. مسیری که در آن مرا با بهترین بندگان خود آشنا نمود که با بهره گیری از تجربیات و راهنمایی های آنان آینده را روشن تر و درخشان تر از گذشته می بینم. در ابتدا بر خود واجب می دانم از استاد راهنمای گرامیم جناب دکتر عشقی که افتخار این را داشتم که از راهنمایی های بی دریغ و دلسوزانه ایشان در راستای اتمام این پایان نامه بهره مند شوم سپاس فراوان دارم و از خداوند منان برای ایشان آرزوی سلامت و موفقیت دارم. همچنین از اساتید محترم داور جناب آقایان دکتر ابویی و دکتر حسامی پيله رودی کمال تشکر را می نمایم.

از مادر فداکارم به پاس همه محبت های بی منتش، از پدر بزرگوام که در همه مراحل زندگی یاور و پشتیبان من بوده و نیز برادرهای عزیزم علیرضا و مرتضی به دلیل تمام محبت ها و دلگرمی هایشان قدردانی فراوان می نمایم. در نهایت از همسر صبورم، امین به عنوان مشوق همیشگی من برای دانستن متشکرم.

تعهد نامه

اینجانب فاطمه تیزرو اسپلی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه **بررسی اثر بازپخت و هیدروژن دهی بر خواص الکتریکی مواد نیمرسانای نیتروژندار رقیق**

تحت راهنمایی **دکتر حسین عشقی**، متعهد می شوم .

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

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

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

چکیده:

برخی خواص فیزیکی منحصر بفرد نیمرساناهای نیتروژندار رقیق (In)GaNAs سبب شده است که در دهه ی اخیر به عنوان ماده ای جالب توجه در دیود لیزرهای فروسرخ، سلولهای خورشیدی چند پیوندگاهی با بازده بالا و سایر ابزارهای الکتریکی مورد توجه زیادی قرار گیرند. معلوم شده است که با افزودن نیتروژن به مقدار ناچیز (کمتر از ۰.۵٪) به نیمرسانای GaAs، گرچه گاف انرژی آن را به طور قابل ملاحظه ای کاهش جرم موثر الکترونها افزایش کاهش می یابد. داده های تجربی همچنین حاکی از آن است که نمونه های تازه رشد یافته اغلب دارای تراکم و تحرک الکترونی پایینی هستند.

هدف ما در این رساله بررسی تاثیر بازپخت و هیدروژن دهی بر روی خواص ترابری الکتریکی نیمرسانای نیتروژن دار رقیق GaNAs (آلایش یافته با اتمهای Si و Te) و InGaNAs (خالص و آلایش شده با Si) است. در این مطالعه محاسبات ما در خصوص توصیف رفتار دمایی داده های وابسته به تراکم و تحرک حامل ها در نمونه های گزارش شده بترتیب مبتنی بر در نظرگیری شرط خنثایی بار و نیز سازو کارهای مختلف پراکندگی است.

نتایج ما حاکی از آن است که به طور کلی با انجام عملیات بازپخت حرارتی سریع، تراکم و تحرک الکترونی به دلیل کاهش تراکم تله های الکترونی وابسته به اتمهای نیتروژن افزایش می یابد. همچنین لازم به ذکر است که افزایش تراکم حاملها در نمونه های آلایش یافته با اتمهای Si، بدلیل غیر فعال شدن آنها در اثر ایجاد پیوندهای Si-N، کمتر از افزایش مشاهده شده در نمونه های آلایش یافته با Te می باشد.

مطالعات ما در مورد هیدروژن دهی نمونه ها گویای آن است که: (الف) در نمونه های بدون آلایش به دلیل نقش هیدروژن به عنوان یک اتم بخشنده و تشکیل کمپلکس های تک هیدروژنه و دو هیدروژنه گاف نواری افزایش و خواص ترابری الکتریکی بهبود می یابد، (ب) در نمونه های آلایش یافته نوع n با توجه به آنکه کسری از اتمهای هیدروژن در نقش اتمهای پذیرنده عمل می کنند در نتیجه ناخالصی افزوده شده را غیر فعال ساخته و به کاهش تراکم حاملهای بار منجر می گردند.

کلمات کلیدی: نیمرساناهای نیتروژندار رقیق، GaNAs، InGaNAs، خواص ترابری الکتریکی، ناخالصی بخشنده Si و Te، بازپخت گرمایی، هیدروژندهی.

مقالات مستخرج از پایان نامه:

فاطمه تیزرو اسپلی، حسین عشقی، بررسی کمی تاثیر تراکم نیتروژن و بازپخت بر خواص ترابری الکتریکی در نیمرسانای نیتروژندار رقیق آرایش شده $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}:\text{Te}$ ($x = 0.13$ و 0.19)، ارسال شده به کنفرانس فیزیک ایران ۹۰ (ارومیه).

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول: مروری بر مقالات
۲-۱-۱	مقدمه.....
۳-۲-۱	روش های رشد.....
۴-۳-۱	ساختار نواری.....
۵-۴-۱	جرم موثر الکترون.....
۶-۵-۱	تحرك الکترونی.....
۷-۶-۱	تراکم الکترونی.....
۸-۷-۱	هیدروژن دهی.....
۸-۸-۱	باز پخت.....

فصل دوم: مطالعات نظری مرتبط با ساختار نواری در آلیاژهای نیتروژندار رقیق

(In)GaNAs

۱۱-۲-۱	تأثیر اضافه شدن نیتروژن در GaN_xAs_{1-x}
۱۱-۲-۱-۱	گاف نواری.....
۱۱-۲-۱-۱	الف: گاف نواری و پارامتر خمشی.....
۱۳-۲-۱-۱	ب: نظریه برهم کنش تقاطع نواری (BAC) و تغییرات گاف نواری.....
۱۵-۲-۱-۲	جرم موثر.....
۱۶-۲-۲	تأثیر حضور اتم های In در GaNAs.....
۱۸-۳-۲	تأثیر حضور اتم های هیدروژن در GaNAs.....

۱۸.....	۲-۳-۱- مقدمه
۱۹.....	۲-۳-۲- کمپلکسهای تک هیدروژنه در آلیاژهای نیتروژندار رقیق GaAsN
۲۲.....	۲-۳-۳- کمپلکسهای دو هیدروژنه در آلیاژهای نیتروژندار رقیق GaNAs
۲۸.....	۲-۴ پارامترهای مادی.....

فصل سوم: مبانی نظری

۳۰.....	۳-۱- مقدمه
۳۰.....	۳-۲- تعیین تراکم و نوع حامل‌های بار.....
۳۱.....	۳-۲-۱- نظریه تراکم حامل‌ها در نیمرساناها.....
۳۱.....	۳-۲-۲- نحوه توزیع آماری بار در نیمرسانا.....
۳۲.....	۳-۲-۳- تراکم الکترون‌ها و حفره‌ها در تعادل گرمایی در یک نیمرسانای ذاتی.....
۳۴.....	۳-۲-۴- توزیع تعادلی الکترون‌ها و حفره‌ها در یک نیمرسانای آرایش یافته.....
۳۹.....	۳-۲-۵- معادلات مربوط به خنثایی بار و تراکم الکترون‌ها و حفره‌ها.....
۴۰.....	۳-۳ نظریه پراکندگی و سازوکارهای مؤثر در تحرک.....
۴۰.....	۳-۳-۱- پراکندگی فونون‌های قطبی - نوری.....
۴۱.....	۳-۳-۲- پراکندگی فونون‌های پیزو الکتريکی.....
۴۱.....	۳-۳-۳- پراکندگی فونون‌های آکوستیکی.....
۴۲.....	۳-۳-۴- پراکندگی ناخالصی‌های یونیده.....
۴۲.....	۳-۳-۵- پراکندگی ناخالصی‌های خنثی.....
۴۳.....	۳-۳-۶- پراکندگی از در رفتگی‌ها.....
۴۳.....	۳-۳-۷- پراکندگی آلیاژ کتره ای.....
۴۳.....	۳-۳-۸- پراکندگی آلیاژ خوشه ای.....

فصل چهارم: بررسی نظری داده‌های تجربی

- ۴۷-۱-۴- مقدمه..... ۴۷
- ۴۷-۲-۴- اثر بازپخت بر خواص ترابری الکتریکی در نمونه های
.....($x = 0/8, 1/7$ و $2/2/$) $GaN_xAs_{1-x}:Si$
- ۴۸-۱-۲-۴- تحلیل داده‌های وابسته به تراکم الکترونی..... ۴۸
- ۵۲-۲-۲-۴- تحلیل داده‌های وابسته به تحرک الکترونی..... ۵۲
- ۵۷-۳-۴- اثر بازپخت بر خواص ترابری الکتریکی در نمونه های
.....($x = 1/3$ و $1/7/$) $GaN_xAs_{1-x}:Te$
- ۵۷-۱-۳-۴- تحلیل داده‌های وابسته به تراکم الکترونی..... ۵۷
- ۶۱-۲-۳-۴- تحلیل داده‌های وابسته به تحرک الکترونی..... ۶۱
- ۶۴-۴-۴- اثر بازپخت بر تراکم الکترونی در نمونه ایندیم دار (InGaNAS)..... ۶۴
- ۶۷-۵-۴- بررسی خواص ترابری الکتریکی در نمونه آرایش شده InGaNAS (InGaNAS:Si)..... ۶۷
- ۷۰-۶-۴- اثر هیدروژندهی در نمونه InGaNAS آرایش یافته با اتم های Te..... ۷۰
- ۷۱-۷-۴- اثر بازپخت در نمونه InGaNAS هیدروژندهی شده در حالت‌های بدون آرایش،
آرایش سبک و سنگین..... ۷۱

فهرست اشکال

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱: داده های تجربی چند گروه تحقیقاتی در مورد گاف نواری بر حسب درصد نیتروژن در GaNAs.....	۴
شکل ۱-۲: داده های تجربی جرم موثر بر حسب درصد نیتروژن در ترکیب GaNAs گروه های مختلف تحقیقاتی.....	۵
شکل ۱-۳: داده های تجربی چند گروه تحقیقاتی در مورد تحرک الکتريکی بر حسب درصد نیتروژن در نمونه GaNAs.....	۷
شکل ۱-۴: داده های تجربی تراکم و تحرک الکتريکی بر حسب درصد نیتروژن در GaNAs.....	۷
شکل ۱-۵: داده های تجربی یوجین و همکارانش در مورد تراکم و تحرک الکترونی GaNAs:Te و GaNAs:Si بر حسب دمای بازپخت.....	۹
شکل ۱-۲: (a) نمایش شماتیک از مدل BAC در مورد $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ (b) محاسبات نظری مبتنی بر BAC و اندازه گیری های تجربی گاف نواری $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ بر حسب تابع نیتروژن (x).....	۱۴
شکل ۲-۲: تغییرات جرم موثر الکترون بر حسب کسر مولی نیتروژن در نمونه $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ بنا بر پیش بینی مدل BAC.....	۱۶
شکل ۲-۳: طرح ساده ای از توزیع نیتروژن در نمونه (a) GaNAs (b) InGaNAs.....	۱۶
شکل ۲-۴: بررسی نظری سوزوکی در مورد وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه GaNAs.....	۱۷
شکل ۲-۵: بررسی نظری سوزوکی در مورد وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه InGaNAs.....	۱۸

شکل ۲-۶: تصاویر شماتیکی از کمپلکس های تک هیدروژنه در GaNAs با کمترین انرژی

۲۰.....پیکربندی (a) NH_{BC}^+ (b) NH_{AB}^+

شکل ۲-۷: انرژی تشکیل به عنوان تابعی از انرژی فرمی برای کمپلکس های تک هیدروژنه

با کم ترین انرژی در GaNAs ، انرژی تشکیل کمپلکس های دوتایی هیدروژن $NH_2^*(\alpha)$

و مولکول های درون شبکه ای H_2 نیز برای مقایسه رسم شده است. ۲۲.....

شکل ۲-۸: تصویر شماتیکی از کمپلکس های دو هیدروژنه در GaNAs که از لحاظ

الکتریکی غیر فعالند (a) $NH_2^*(\alpha)$ پایدار (b) $NH_2^*(\beta)$ شبه پایدار..... ۲۳.....

شکل ۲-۹: انرژی تشکیل کمپلکس های دو هیدروژنه در GaNAs..... ۲۴.....

شکل ۲-۱۰: تصویر شماتیکی از فرایند دو مرحله ای غیر فعال شدن نیتروژن با تشکیل

کمپلکس $NH_2^*(\alpha)$ و بزرگ شدن گاف نواری..... ۲۵.....

شکل ۲-۱۱: آنالیز تعادلی بین تشکیل NH_2^* در برابر NH_{BC}^+ در آلیاژ GaNAs در

دمای ۳۵۰ کلوین (a) مقدار NH_2^* و NH_{BC}^+ (مقیاس سمت چپ) و انرژی فرمی اندازه

گرفته شده از محل ماکزیمم نوار ظرفیت (خط رسم شده با نقطه چین و مقیاس

سمت راست) به عنوان تابعی از مقدار کل هیدروژن (b) مقدار نسبی NH_2^* و NH_{BC}^+

به عنوان تابعی از [H]..... ۲۶.....

شکل ۳-۱: تغییرات تابع های چگالی حالت های $g_c(E)$ و $g_v(E)$ به همراه تابع احتمال

فرمی- دیراک به ازای $T > 0 K$ در یک نیمرسانای ذاتی..... ۳۶.....

شکل ۳-۲: چگالی تابع حالت، تابع احتمالی فرمی-دیراک با نمایش نواحی تراکم های الکترون و حفره

وقتی که تراز فرمی بالاتر از وسط گاف قرار دارد..... ۳۵.....

شکل ۳-۳: چگالی تابع حالت، تابع احتمالی فرمی-دیراک با نمایش نواحی تراکم های الکترون و حفره

وقتی که تراز فرمی پایین تر از وسط گاف قرار دارد..... ۳۶.....

شکل ۳-۴: انتگرال فرمی - دیراک $f_{1/2}$ به صورت تابعی از انرژی فرمی ۳۷

شکل ۳-۵: وابستگی دمایی تحرک الکترونی محاسبه شده به صورت نظری در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$

با x های متغییر ۴۴

شکل ۳-۶: مقادیر نظری تحرک الکترونی حاصل از آلیاژ خوشه ای و کتره ای

در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ در بازه $0 < x < 0.02$ ۴۵

شکل ۴-۱: داده های تجربی ای شی کاوار مربوط به وابستگی دمایی: (a) تراکم و (b)

تحرک الکترونی نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 0.18, 0.17, 0.2$ %) ۴۸

شکل ۴-۲: نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تراکم الکترونی برای نمونه های

$\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 0.18, 0.17, 0.2$ %) (a) تازه رشد یافته (b) بازپخت شده ۵۰

شکل ۴-۳: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی $\text{GaN}_{0.8}\text{As}_{0.992}$ (a) تازه رشد

یافته (b) بازپخت شده ۵۴

شکل ۴-۴: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی $\text{GaN}_{0.17}\text{As}_{0.983}$ (a) تازه رشد یافته

(b) بازپخت شده ۵۵

شکل ۴-۵: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی $\text{GaN}_{0.22}\text{As}_{0.978}$ (a) تازه رشد یافته

(b) بازپخت شده ۵۶

شکل ۴-۶: داده های تجربی مربوط به وابستگی دمایی تراکم الکترونی در نمونه های

$\text{GaN}_{0.13}\text{As}_{0.987}\text{Te}$ (a) و $\text{GaN}_{0.19}\text{As}_{0.981}\text{Te}$ (b) ۵۸

شکل ۴-۷: نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تراکم الکترونی

برای نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 1/3$ و $1/9$ %) ۵۹

شکل ۴-۸: داده های تجربی یوجین و آکولا مربوط به وابستگی دمایی تحرک الکترونی

نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 1/3$ و $1/9$ %) ۶۱

شکل ۴-۹: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی $\text{GaN}_{0.13}\text{As}_{0.987}$

۶۳..... (a) تازه رشد یافته (b) بازپخت شده.....

شکل ۴-۱۰: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه $\text{GaN}_{0.19}\text{As}_{0.981}$

۶۴..... (a) تازه رشد یافته (b) بازپخت شده.....

شکل ۴-۱۱: داده های تجربی کورتز و همکارانش مربوط به وابستگی دمایی

تراکم الکترونی نمونه $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.93}\text{N}_{0.2}\text{As}_{0.98}$ ۶۵.....

شکل ۴-۱۲: نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تراکم الکترونی

۶۶..... برای نمونه $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.93}\text{N}_{0.2}\text{As}_{0.98}$

شکل ۴-۱۳: داده های تجربی ای میاشیتا مربوط به وابستگی دمایی (a) تراکم (b) تحرک الکترونی

۶۷..... نمونه های InGaNAs و GaAs

شکل ۴-۱۵: نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تراکم الکترونی برای

۶۸..... نمونه های InGaNAs:Si با میزان آلیش 2×10^{17} و 4×10^{17}

شکل ۴-۱۶: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه InGaNAs با میزان آلیش

۶۹..... (a) $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (b) $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول ۱-۲: مقادیر پارامتر خمش در برخی نیمرسانا های آلیاژی سه تایی.....	۲۲
جدول ۲-۲: پارامترهای مادی در GaAs.....	۲۷
جدول ۱-۴ : پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی GaN_xAs_{1-x} ($x = 0/8$ ٪) قبل و بعد از بازپخت.....	۵۰
جدول ۲-۴ : پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی GaN_xAs_{1-x} ($x = 1/7$ ٪) قبل و بعد از بازپخت.....	۵۱
جدول ۳-۴ : پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی GaN_xAs_{1-x} ($x = 2/2$ ٪) قبل و بعد از بازپخت.....	۵۱
جدول ۴-۴: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی GaN_xAs_{1-x} ($x = 0/8$ ٪).....	۵۴
جدول ۵-۴: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی GaN_xAs_{1-x} ($x = 1/7$ ٪).....	۵۵
جدول ۶-۴: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه GaN_xAs_{1-x} ($x = 2/2$ ٪).....	۵۶
جدول ۷-۴: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه $GaN_xAs_{1-x}:Te$ ($x = 1/3$ و $1/9$ ٪).....	۶۰
جدول ۸-۴ : پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه $GaN_xAs_{1-x}:Te$ ($x = 1/3$ و $1/9$ ٪).....	۶۱
جدول ۹-۴: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه $In_{0.7}Ga_{0.93}N_{0.2}As_{0.97}$	۶۶
جدول ۱۰-۴ : پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی InGaAs.....	۷۰
جدول ۱۱-۴ : پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی InGaAs.....	۷۰
جدول ۱۲-۴: تراکم الکتریکی نمونه های $Ga_{0.934}In_{0.066}N_{0.023}As_{0.977}:Te$ قبل و پس از هیدروژن دهی.....	۷۱

جدول ۴-۱۳: نتایج اندازه گیری اثر هال در نمونه $\text{Ga}_{0.924}\text{In}_{0.076}\text{N}_{0.030}\text{As}_{0.970}$ آرایش یافته نوع n

قبل و پس از بازپخت ۷۲

فصل اول

مروری بر مقالات

۱-۱ مقدمه

نیمرساناها از جمله ترکیباتی هستند که نقش مهمی در پیشرفت‌های سه دهه‌ی اخیر داشته‌اند. از جمله این کاربردها قطعات حالت جامد نورفشان^۱، دیودهای نور گسیل^۲، حسگرها، تصویربرداری پزشکی و ... را می‌توان نام برد. از مهم‌ترین ترکیبات شناخته شده بین نیمرساناهای مرکب^۳ GaAs می‌باشد که از خواص منحصر به فرد از جمله گاف نواری مستقیم^۴ برخوردار است. همچنین این ماده از تحرک^۵ الکترونی بالایی برخوردار است که سبب کاربرد آن در ساخت ترانزیستورهای پر سرعت شده است. علاوه بر این خصوصیات می‌توان به قابلیت آلیاژی شدن آن با عناصر گروه III مانند Al, In و گروه V مانند P و Sb اشاره نمود که این خاصیت می‌تواند در کنترل بزرگی گاف انرژی ماده آلیاژی حاصل مورد استفاده قرار گیرد.

اکثر نیمرساناهای ترکیبی III-V دارای ساختار بلوری مکعبی زینک بلند^۶ بوده و به هنگام آلیاژ شدن، گاف انرژی آنها تغییر می‌کند [۱]. الکترونگاتیوی بالا و شعاع کم نیتروژن در مقایسه با دیگر عناصر گروه پنجم و در نتیجه پیوند قوی نیتروژن با عناصر گروه ۳ باعث ایجاد خواص جالبی در ترکیب نیتروژن با عناصر گروه سوم جدول تناوبی شده، به طوری که این دسته از مواد که جزیی از گروه ترکیبات نیمرسانای III-V می‌باشند با نام تری نیترایدها^۷ شناخته می‌شوند.

اگر در ترکیبات III-V مقدار کمی (کمتر از ۵ درصد) نیتروژن اضافه شود گروه دیگری از نیمرساناها را به وجود می‌آورند که اصطلاحاً به آنها نیمرسانا های نیتروژندار رقیق^۸ (III-N-V) گفته می‌شود. این دسته از نیمرساناها می‌توانند به صورت آلیاژهای سه‌تایی^۹ مانند GaNAs GaNP

1-Solid State light emitting devices

2- Light Emitting Diodes

3- Compound semiconductors

4- Direct band gap

5-Mobility

6-Zinc- belend

7- III- Nitrides

8-Dilute nitride semiconductors

9- Ternary

InNAs, و یا چهارتایی^۱ مانند GaInPN, InGaAs, AlGaAs و ... در شرایط کپه‌ای و یا دو بعدی رشد داده شوند. گزارشات حاکی از آن است که اضافه شدن نیتروژن به مقدار کم سبب مشاهده رفتارهای غیر منتظره‌ای می‌شود که از آن جمله می‌توان به موارد زیر اشاره نمود:

- بزرگی قابل ملاحظه پارامتر خمشی^۲ (این پارامتر در بخش ۲-۱-۱ معرفی خواهد شد).
- افزایش جرم موثر
- کاهش تراکم و تحرک الکترونی

از آنجا که ما در این رساله عمدتاً به نمونه‌های ترکیبی نیتروژندار رقیق (In)GaAs پرداخته ایم، در ادامه به خصوصیات مربوط به این ترکیبات اشاره خواهیم داشت.

۲-۱ روش‌های رشد

نمونه‌های GaN_xAs_{1-x} به روش‌های مختلف از جمله MBE^۳، RFMBE^۴ و MOMBE^۵ همچنین MOVPE^۶، MOCVD^۶ و [۱۱-۲]CBE^۸ رشد داده می‌شوند. در این ترکیبات معمولاً از Si به عنوان عنوان آلاینده نوع n و از Be به عنوان آلاینده نوع p استفاده می‌شود [۴ و ۱۲]. چنانچه در گزارشات آمده است غالباً حتی لایه‌های بدون آلاینش این مواد از خود رسانندگی نوع n نشان می‌دهند [۲ و ۱۳]، اما در مورد معدودی رسانش نوع p نیز مشاهده شده است [۱۴].

در رشد لایه‌های چهارتایی $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ از همان روش‌های مرسوم در آلیاژ سه تایی (GaN_xAs_{1-x}) استفاده می‌شود. از نکات قابل ذکر آنکه به هنگام تهیه لایه‌های InGaAs و GaAs به هنگام ورود نیتروژن لازم است دمای زیرلایه کاهش یابد، لکن این سبب تنزل کیفیت

1- Quaternary

2-Bowing parameter

3-Molecular beam epitaxy

4-Radio frequency molecular beam epitaxy

5-Metal-organic molecular beam epitaxy

6-Metal-organic chemical-vapor deposition

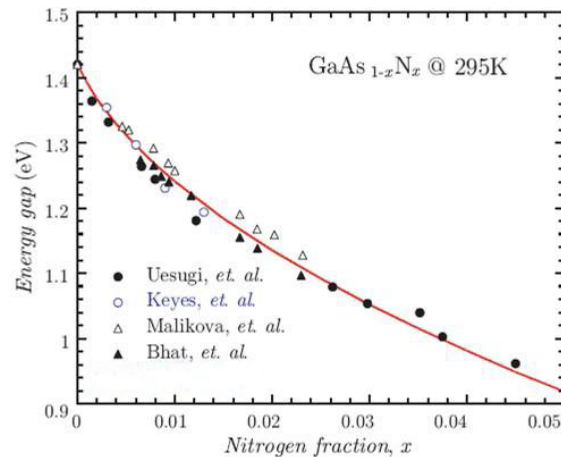
7-Phase epitaxy Metal-organic vapor

8-Chemical beam epitaxy

بلوری در ماده می‌گردد [۱۳، ۱۵]. از زیرلایه های به کار گرفته شده در رشد این لایه ها می توان به Ge، GaAs و InP اشاره کرد. معمولا در رشد این مواد برای دستیابی به شرایط انطباق شبکه‌ای با این زیرلایه ها نسبت $y \approx 3x$ رعایت می‌گردد [۲ و ۱۵-۲۰]. در ادامه به اختصار به معرفی ساختار نواری، جرم موثر، تحرک و تراکم الکترونی در این مواد می‌پردازیم.

۳-۱ ساختار نواری

اندازه گیری‌های جذبی انجام شده نشان دهنده آن است که آلیاژ $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ می‌تواند به عنوان نیمرسانایی با گاف نواری مستقیم عمل کند [۲۱-۲۴]. بنا به گزارش گودیم و همکاران [۲۵] این ماده تا مرز $x=0.0255$ دارای گاف نواری مستقیم و پس از آن دارای گاف نواری غیر مستقیم است و مقدار آن به نیتروژن موجود در ترکیب وابسته است [۱۶، ۲۶ و ۲۷]. شکل ۱-۱ تغییرات گاف نواری GaNAs را در دمای اتاق برحسب کسر مولی نیتروژن نشان می‌دهد [۲۸]. چنانچه ملاحظه می‌شود با اضافه شدن نیتروژن کاهش قابل توجهی در گاف نواری این ماده رخ می‌دهد.

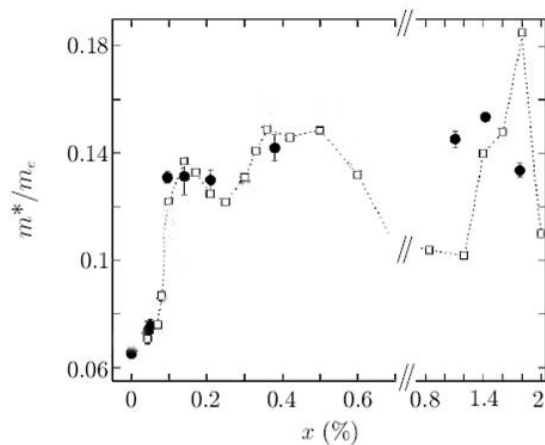


شکل ۱-۱: داده های تجربی چند گروه تحقیقاتی در مورد گاف نواری بر حسب درصد نیتروژن در GaNAs خط ممتد برای راهنمایی چشم کشیده شده است [۲۸].

با توجه به این داده ها با اضافه شدن ۰/۵ درصد نیتروژن به GaAs پایه گاف نواری از $1/4 \text{ eV}$ به $1/3 \text{ eV}$ کاهش می یابد و با اضافه شدن $1/7$ درصد نیتروژن گاف نواری به $1/14 \text{ eV}$ می رسد. کاهش شدید گاف نواری در آلیاژهای نیتروژندار رقیق در بازه ی کوچکتر از ۵ درصد منجر به کاربردهای فراوانی در الکترونیک، اپتو الکترونیک و مخابرات نوری شده است. از جمله این موارد می توان به LEDها، لیزرهای با طول موج بلند ($1/3-1/7 \mu\text{m}$)، سلولهای خورشیدی با بازده بالا، آشکارسازهای نوری و همچنین ترانزیستورهای دو قطبی چندپیوندگاهی ناهمگن^۱ (HBTS) اشاره نمود [۲۹].

۴-۱ جرم موثر الکترون

مشاهدات معمول در نیمرساناهای مرسوم و آلیاژهای وابسته به آنها حاکی از افزایش جرم موثر با افزایش گاف نواری است [۲۹]. اما این ارتباط در مورد ترکیب GaNAs متفاوت بوده، به نحوی که با افزایش گاف نواری جرم موثر کاهش می یابد.



شکل ۱-۲: داده های تجربی جرم موثر برحسب درصد نیتروژن در ترکیب GaNAs گروه های مختلف تحقیقاتی (خط ممتد برای راهنمایی چشم کشیده شده است). [۲۸].

مشاهدات تجربی حاکی از آن است که با افزایش ۱٪ نیتروژن به GaAs، و در نتیجه کاهش گاف نواری آن جرم موثر الکترون از $0.067 m_0$ به $0.1 m_0$ افزایش می‌یابد [۳۰]. شکل ۱-۲ تغییرات جرم موثر بر حسب درصد نیتروژن را در نمونه‌های GaN_xAs_{1-x} که توسط گروه‌های تحقیقاتی مختلف به دست آمده است نشان می‌دهد [۲۸].

۱-۵ تحرک الکترونی

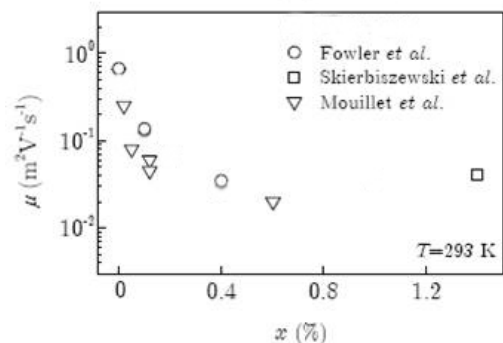
ورود نیتروژن به مقدار کم به شبکه GaAs می‌تواند علاوه بر تغییر در جرم موثر و گاف نواری سبب تغییرات زیادی در خواص ترابری الکتریکی نیمرسانا نیز شود. تحرک الکترونی متأثر از دو عامل عمده است: سازوکارهای پراکندگی^۱ و جرم موثر. بنا به گزارشات [۲ و ۱۳] با افزوده شدن نیتروژن به GaAs مقدار تحرک الکترونی آن در دمای اتاق از $900-1100 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ به $200-400 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ کاهش می‌یابد. یک عامل مهم در این تنزل به پراکندگی‌های آلیاژهای کتره ای^۲ و خوشه ای^۳ نیتروژنی نسبت داده می‌شود. به همین منوال ورود نیتروژن به شبکه بلوری InGaAs تحرک الکترونی را بشدت کاهش می‌دهد، به طوری که مقدار آن از گستره $800-1000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ قبل از ورود نیتروژن به حدود $250-400 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ پس از ورود نیتروژن کاهش می‌یابد [۲، ۱۴ و ۱۵]. همچنین با اضافه شدن ۱٪ درصد نیتروژن به نمونه GaAs آرایش یافته نوع n تحرک الکترونی از $3000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ به 650 و با افزایش ۵٪ درصد نیتروژن به $250 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ کاهش می‌یابد [۱۲].

شکل ۱-۳ داده‌های تجربی وابسته به تحرک الکترونی در نمونه‌های GaN_xAs_{1-x} را نشان می‌دهد. این نتایج همگی گویای کاهش تراکم الکتریکی پس از ورود نیتروژن می‌باشند [۲۸]. با توجه به داده‌های تجربی گزارش شده، که جزییات بیشتر آن در بخش ۲-۲ آمده است، با ورود In به GaNAs تحرک الکتریکی در دمای پایین بهبود می‌یابد [۲ و ۱۳].

1-Scattering mechanisms

2-Random alloy

3-Cluster alloy

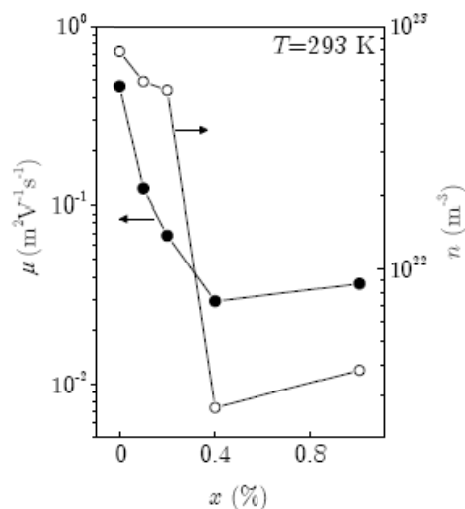


شکل ۳-۱: داده های تجربی چند گروه تحقیقاتی در مورد تحرک الکتریکی

بر حسب درصد نیتروژن در نمونه [۲۸]GaNAs

۶-۱ تراکم الکترونی

اندازه گیری های تجربی اسپاسوو و همکاران [۲۸] در GaNAs نشانگر کاهش تراکم الکترونی با افزایش چگالی نیتروژن در این ترکیب است (شکل ۴-۱). این کاهش معمولاً "به تراز های به دام اندازنده" وابسته به اتم های نیتروژن در گاف نواری ماده نسبت داده می شود [۳]. مشابه چنین تغییراتی در InGaNAs نیز مشاهده شده است [۸، ۳۱ و ۳۲].



شکل ۴-۱: داده های تجربی تراکم و تحرک الکتریکی بر حسب درصد نیتروژن در [۲۸]GaNAs

۷-۱ هیدروژن دهی^۱

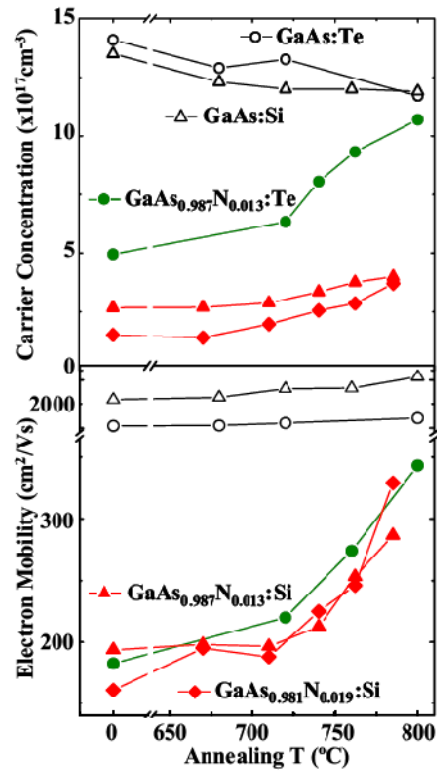
هیدروژن کوچکترین و سبک ترین عنصر موجود در طبیعت است که دارای واکنش پذیری زیادی با دیگر اتم‌هاست. به دلیل وجود این عنصر به مقدار قابل توجه در محیط اطراف، می‌تواند در حین مراحل رشد ترکیبات نیمرسانا حضوری خواسته یا ناخواسته داشته باشد [۲۳ و ۳۳-۳۵]. این عنصر به دلیل پیوند با اتم های نیتروژن که از خاصیت الکترونگاتیوی بالایی برخوردارند می‌تواند سبب غیر فعال کردن آنها شده و تغییرات قابل توجهی بر خواص فیزیکی نمونه ها بگذارد .

۸-۱ باز پخت^۲

در مواد نیمرسانای نیتروژندار رقیق از بازپخت گرمایی برای بالا بردن کیفیت بلوری ماده که به علت حضور اتم های نیتروژن کاهش می‌یابد استفاده می‌شود. شکل ۱-۵ نمونه‌ای از این تاثیر در تغییرات تراکم و تحرک الکترونی بر حسب دمای بازپخت در نمونه های GaNAs خالص و آلایش یافته با Si و Te را نشان می دهد [۳۶]. داده های سیاه مربوط به نمونه های آلایش یافته و داده های سفید مربوط به نمونه های بدون آلایش می‌باشد. چنانچه پیداست با افزایش دمای بازپخت روند کلی تغییر این کمیت ها افزایشی است. در این مورد در فصل ۴ به تاثیر این پدیده بر خواص ترابری الکتریکی نمونه های نیتروژندار رقیق با جزییات بیشتر پرداخته ایم.

1-hydrogenation

2-annealing



شکل ۱-۵: داده های تجربی یوجین و همکارانش در مورد تراکم و تحرک الکترونی GaNAs:Te و GaNAs:Si بر حسب دمای بازپخت [۳۶]

فصل دوم

مطالعات نظری مرتبط با ساختار نواری در آلیاژهای

نیتروژندار رقیق (In)GaNAs

۱-۲ تاثیر اضافه شدن نیتروژن در GaN_xAs_{1-x}

۱-۱-۲ گاف نواری

الف: گاف نواری و پارامتر خمش

آلیاژسازی یکی از روشهای معمول برای اصلاح خواص ساختاری مواد به منظور کاربردهای خاص است. در مواد نیمرسانا گاف نواری از طریق محاسبه میانگین خطی گاف های نواری اجزا به دست می آید [۳۷]. برای مثال، گاف نواری یک آلیاژ دوتایی که از نیمرساناهای A و B به نسبت های مولی x با یکدیگر به صورت کتره ای در شبکه بلوری ترکیب شده باشند (A_xB_{1-x}) با رابطه ی زیر داده می شود [۳۸]:

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

این رابطه به قانون وگارد^۱ موسوم است. در رابطه فوق E_{alloy}^g گاف نواری نیمرسانای آلیاژی، E_A^g و E_B^g به ترتیب گاف های نواری نیمرساناهای پایه است. در نیمرساناهای دیگر، از جمله GaNAs، این کمیت از رابطه:

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

حاصل می شود [۵، ۲۲، ۲۶، ۳۶ و ۳۹]، که در آن ضریب b پارامتر خمش نامیده می شود و معیاری از غیر خطی بودن گاف نواری بر حسب x است. در مورد بسیاری از آلیاژهای ۳ تایی معمول پارامتر خمش مقدار ثابتی را حدود ۱ eV دارا می باشد. نکته جالب آنکه در مورد GaNAs مقدار پارامتر خمش بسیار بزرگ و به شدت به غلظت نیتروژن وابسته است. جدول ۱-۲ مقادیر پارامتر خمش را برای بعضی از آلیاژهای سه تایی معمول نشان می دهد.

1-Vegard's law

جدول (۱-۲): مقادیر پارامتر خمش در برخی نیمرساناهای آلیاژی سه تایی [۲۱ و ۲۲]

ترکیب نیمرسانا	پارامتر خمش (eV)
$Al_xIn_{1-x}As$	۰
$Al_xGa_{1-x}As$	۰/۶۹۸
$Al_{1-x}Ga_xP$	۰/۷۸۶
$InAs_xSb_{1-x}$	۰/۵۶
GaN_xAs_{1-x}	≈ 26 $x < 1\%$
	≈ 18 $0 < x < 1\%$

علت وارد شدن پارامتر خمش این است که آلیاژها معمولا به صورت ایده آل رشد پیدا نکرده و غالبا اتم ها به صورت خوشه هایی در ماده آلیاژی تجمع می یابند. رشد ایده آل در GaN_xAs_{1-x} به این معناست که در اطراف اتم Ga به احتمال $x\%$ اتم های نیتروژن و به احتمال $(1-x)\%$ اتم های As وجود داشته باشند. معمولا چنین اتفاق نمی افتد و مقداری بی نظمی در چینش شبکه بلوری ایجاد می شود. بنابراین بزرگی پارامتر خمش نشان دهنده وجود بی نظمی در شبکه بلوری ماده است. افزایش شدید پارامتر خمش غالبا به کوچک بودن اندازه اتم های نیتروژن نسبت به As و خاصیت الکترون گاتیوی بالای اتم های نیتروژن در مقایسه با اتم های As نسبت داده می شود [۴۵-۴۱، ۳۷، ۴۰].

نکته ی قابل توجه در مورد GaNAs آنکه با اضافه شدن نیتروژن گاف نواری ابتدا کاهش و سپس افزایش می یابد [۴۷]. اما در موارد دیگر تغییرات گاف نواری از قانون وگارد پیروی می کند. برای توجیه رفتار غیر عادی مواد نیمرسانای نیتروژندار رقیق در ادامه از مدل برهم کنش تقاطع نواری (BAC¹) کمک گرفته ایم.

1-band anti_crossing model

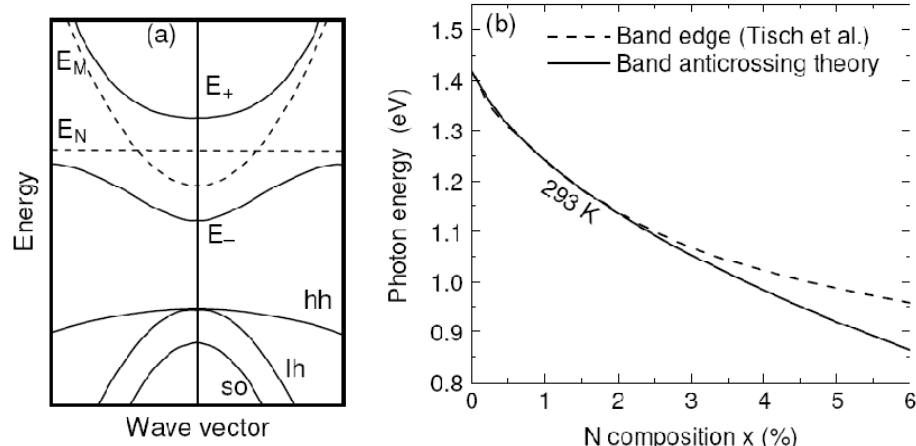
ب: نظریه برهم کنش تقاطع نواری (BAC)

مدل BAC توسط شان و همکاران [۴۶] معرفی شد. بنا بر این نظریه افزوده شدن بسیار کم نیتروژن به GaAs اگرچه تاثیر چندانی بر نوار ظرفیت ندارد، نوار رسانش این ترکیب پایه را به دو زیر نوار سهموی E_+ و E_- می شکافد (شکل ۲-۱-۲) [۴۸]. شکافتگی به علت اختلال ایجاد شده توسط نیتروژن رخ می دهد که با افزایش تراکم نیتروژن، بیشتر می شود. شکل ۲-۱-۲ رفتار برهم کنشی بین حالت جایگزیده نیتروژن های منفرد و نوار رسانش GaAs را نشان می دهد. در این شکل حالت انرژی ایجاد شده توسط نیتروژن، با یک انرژی ثابت E_N به صورت خط چین نشان داده شده است که ناشی از طبیعت جایگزیده حالت الکترونی نیتروژن می باشد. بدین ترتیب بر اثر برهم کنش این تراز و نوار رسانش GaAs، $E_M(k)$ ، نوارهای انرژی E_+ و E_- شکل می گیرد. شرط این برهم کنش وجود تقارن بین حالت های توابع موج وابسته به این تراز و نوار رسانش می باشد. مدل BAC فقط شکافتگی نوار رسانش را توضیح می دهد و بطور موفقیت آمیزی، افزایش جرم موثر را نیز پیش بینی می کند [۴۷] و [۴۹].

بر اساس این نظریه موقعیت لبه نوارهای جدید (E_+ و E_-) از معادله زیر بدست می آیند :

$$E_{\pm}(k) = \frac{1}{2} \{ [E_M(k) + E_N] \pm \sqrt{(E_N - E_M(k))^2 + 4xV^2} \} \quad (3-2)$$

که در آن E_N انرژی حالت های نیتروژن جایگزیده، V پارامتر جفت شدگی، $E_M(K)$ نوار رسانش میزبان و x کسر مولی نیتروژن است. همه انرژی ها نسبت به بالای نوار ظرفیت بلور میزبان مختل نشده، اندازه گیری می شوند. در شکل ۲-۱ (a) خط پر، گاف نواری GaN_xAs_{1-x} بر حسب تابعی از ترکیب نیتروژن را نشان می دهد که از معادله ۲-۳ بدست آمده است. مقادیر استفاده شده برای E_N و V به ترتیب $1/65$ eV و $2/7$ eV می باشند و مقدار $E_M(0) = 1/42$ eV، همان گاف نواری GaAs است. شکل ۲-۱ (b) تغییرات گاف نواری GaN_xAs_{1-x} بر حسب کسر مولی نیتروژن که توسط Tisch و همکاران [۴۸] اندازه گیری شده را به همراه پیش بینی وابسته به این نظریه نشان می دهد.



شکل ۲-۱: (a) نمایش شماتیک از مدل BAC در مورد $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ (b) محاسبات نظری مبتنی بر BAC و اندازه

گیری های تجربی گاف نواری $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ بر حسب تابع نیتروژن (x) [۴۸]

همانگونه که پیداست به ازای $x < 0.03$ مدل BAC با نتایج تجربی همخوانی بسیار خوبی را نشان می دهد و در x های بزرگتر اختلاف به مرور بزرگ و بزرگتر می شود. مدل BAC پیش بینی می کند که گاف نواری در نزدیکی $x \approx 0.3$ به صفر نزدیک شود، در حالی که نتایج تجربی حاکی از آن است که کمترین مقدار گاف نواری به ازای $x = 0.40$ به 300 meV می رسد [۴۸]. بدین ترتیب به نظر می آید مدل BAC تا گستره $x < 0.03$ پیش بینی مناسبی داشته ولی در مقادیر بالاتر چنین نیست [۴۷].

تاثیر حضور اتم های نیتروژن بر گاف نواری را می توان در حالت های زیر مورد بررسی قرار داد:

(۱) اتم های منفرد، غیر منفعل و جایگزین شده

(۲) جفتهای N-N

(۳) اتم های نیتروژن که بوسیله اتم های هیدروژن منفعل شده اند.

هم نظریه و هم آزمایش ها در حد فوق رقیق ($x < 0.1\%$) نشان داده اند که در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ حضور هر اتم نیتروژن منفرد و جانشین شده ترازوی در بالای لبه نوار رسانش ایجاد می کند. (حدود $1/65 \text{ eV}$ بالاتر از قله نوار ظرفیت GaAs) در حالی که جفت های N-N یک تراز در نزدیکی لبه نوار

رسانش ایجاد می کند (eV ۱/۵۱ بالاتر از قله نوار ظرفیت) [۵۰]. در مدل BAC این ترازها، با لبه نوار رسانش مربوط به ماده میزبان (GaAs) بر هم کنش کرده به کاهش گاف نواری می انجامد. این کاهش با زیادتر شدن غلظت نیتروژن های منفرد سرعت بیشتری پیدا می کند [۵۰]. در روش های رشدی که گاز هیدروژن مشارکت دارد، پیوند های N-H تشکیل شده تاثیر حالت های مربوط به نیتروژن را از بین برده و گاف انرژی به مقدار اولیه مربوط به (GaAs) بر می گردد [۵۰ و ۵۱].

۲-۱-۲ جرم موثر

یکی از کمیت های مهم در یک نیمرسانا جرم موثر وابسته به حامل های بار است که در بزرگی تحرک حاملها موثر است، همانگونه که در بخش ۱-۲ اشاره شد، با ورود نیتروژن به شبکه بلوری GaAs اختلال قابل توجهی در نوار رسانش ماده رخ داده و با توجه به رابطه جرم موثر و ساختار نواری به صورت:

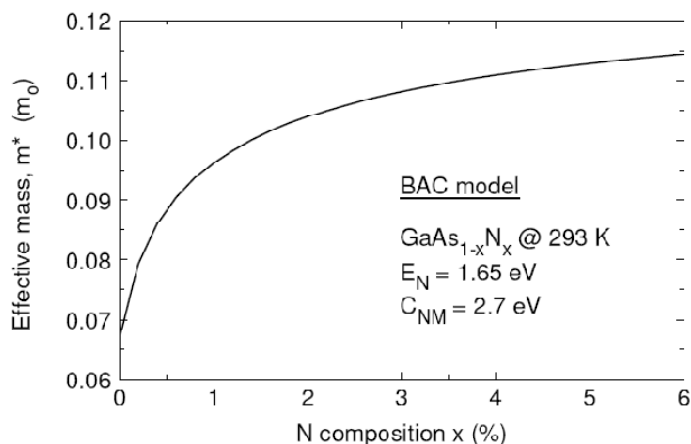
$$m^* = \frac{-\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}} \quad (۴-۲)$$

انتظار می رود این اختلال بر جرم موثر الکترون های نوار رسانش تاثیر بگذارد.

شکل ۲-۲ پیش بینی تغییرات جرم موثر الکترون را در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با توجه به رابطه ی ۴-۲ بر حسب تابعی از کسر مولی نیتروژن نشان می دهد [۴۷]. بنابر پیش بینی این مدل، جرم موثر الکترون تا حدود $x = ۱\%$ با آهنگی سریعتر نسبت به $x < ۱\%$ افزایش می یابد [۳۷]. اگر چه پیش بینی مدل BAC برای گاف نواری بسیار مناسب است، اما در پیش بینی دقیق جرم موثر چندان موفق نمی باشد. با وجود این در توجیه غیر سهمی بودن نوار رسانش و افزایش جرم موثر با نتایج تجربی سازگار است [۴۹، ۵۲ و ۵۳]. مدل BAC با استفاده از معادله ۴-۲ رابطه:

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

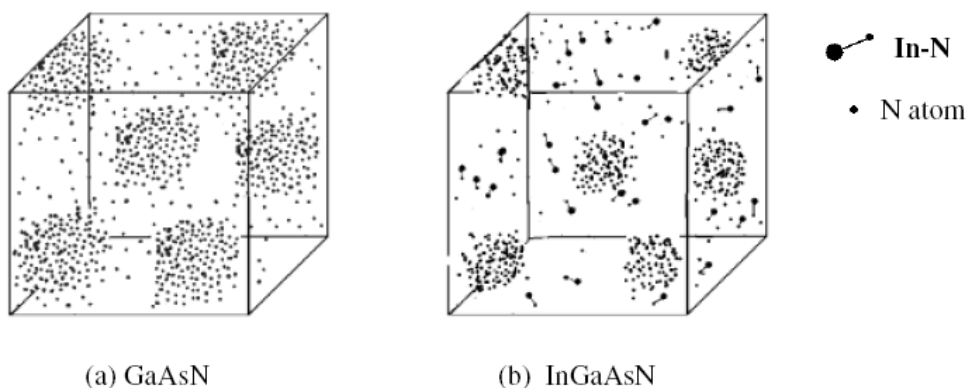
را برای جرم موثر الکترون بدست می دهد. که در آن m_M جرم موثر الکترون در بلور میزبان می باشد.



شکل ۲-۲: تغییرات جرم موثر الکترون بر حسب کسر مولی نیتروژن در نمونه $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ بنا بر پیش بینی مدل BAC [۴۷]

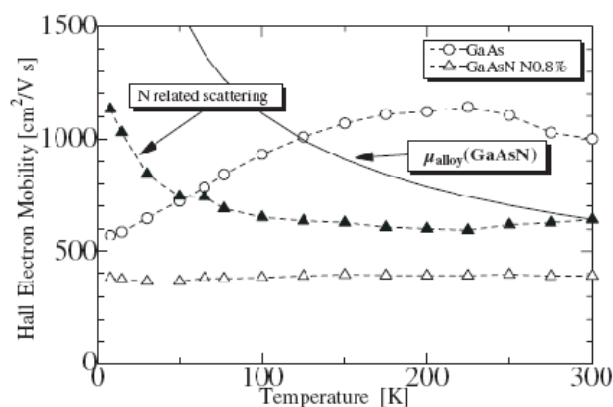
۲-۲ تاثیر حضور اتم های In در GaNAs

همانطور که در فصل قبل گفته شد حضور نیتروژن در شبکه بلوری GaAs و تشکیل نمونه‌های GaNAs سبب کاهش تراکم و تحرک الکترونی و در نتیجه کاهش کیفیت بلوری ماده می‌شود. اضافه شدن In به GaNAs بنا بر پیشنهاد سوزوکی و همکاران [۱۳] سبب کم شدن پیوندهای خوشه‌ای Ga-N بر اثر افزایش پیوند های کتره ای In-N و در نتیجه افزایش تحرک الکترونی می‌گردد (شکل ۲-۳).



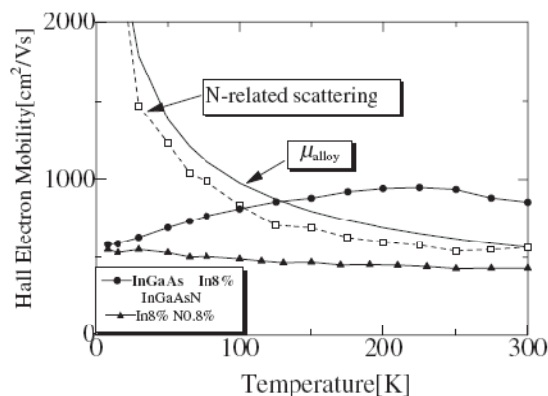
شکل ۲-۳: طرح ساده ای از توزیع نیتروژن در نمونه (a) GaNAs (b) InGaAsN [۲۶]

شکل ۲-۴ داده های تجربی مربوط به بستگی دمایی تحرک الکترونی نمونه های GaAs و GaNAS توسط سوزوکی و همکاران [۱۳] را نشان می دهد. در این شکل نمودار وابسته به مثلث های توپر نشان دهنده تاثیر ناشی از پراکندگی مراکز وابسته به نیتروژن در تحرک الکترونی در نمونه GaNAS در مقایسه با GaAs می باشد. علاوه بر این، خط منحنی رسم شده متناظر با پیش بینی نظری مربوط به تحرک محدود شده توسط توزیع کتره ای اتم های نیتروژن را نشان می دهد. تفاوت بین این خط و نمودار مثلث های توپر حاکی از آن است که رفتار دمایی در GaNAS را نمی توان تنها با پراکندگی وابسته به توزیع کتره ای نیتروژن توجیه نمود، بلکه نوع دیگری از پراکندگی که به نحوه ی توزیع غیر کتره ای اتم های نیتروژن مربوط می گردد نیز در کاهش تحرک تاثیرگذار است.



شکل ۲-۴: بررسی نظری سوزوکی در مورد وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه GaNAS [۲۶]

شکل ۲-۵ (متناظر با شکل ۲-۴) بستگی دمایی تحرک الکترونی را برای نمونه های InGaAs و InGaNAS نشان می دهد. اختلاف تحرک مربوط به این دو نمونه در هر دما (نمودار مربع های توخالی) می تواند ناشی از پراکندگی وابسته به اتم های نیتروژن با توزیع کتره ای و غیر کتره ای باشد. از مقایسه نمودار وابسته به توزیع کتره ای اتم های نیتروژن می توان دریافت در این حالت توزیع اتم های نیتروژن به حالت کتره ای نزدیک شده است، این موضوع با مطالب ارائه شده در شکل ۲-۳ مطابقت دارد.



شکل ۲-۵: بررسی نظری سوزوکی در مورد وابستگی دمایی تحرک الکترونی در نمونه InGaAs [۲۶]

۲-۳ تاثیر حضور اتم های هیدروژن در GaNAs

۲-۳-۱ مقدمه

هیدروژن عنصری است که عموماً به عنوان یک ناخالصی در طول فرآیند رشد نیمرساناها به طور خواسته یا ناخواسته حضور دارد و نسبت به سایر نواقص ذاتی و ناخالصی های موجود در نیمرساناها با غیرفعال کردن ترازهای عمیق و کم عمق و یا مراکز هم الکترون^۱ منجر به اثرگذاری بر خواص الکتریکی نیمرساناها می گردد. اختلاف قابل توجه بین الکترون گاتیوی اتم های نیتروژن با سایر عناصر گروه پنجم جدول تناوبی و همراه شدن آن با فعالیت شیمیایی زیاد اتم های هیدروژن باعث بوجود آمدن اثرات فیزیکی و شیمیایی در نیمرساناها ی نیتروژندار رقیق شده است که تئوری های موجود در صدد توجیه این رفتار هیدروژن هستند [۵۴ و ۵۵]. در این بخش ما با مطالعه مقالات و تحقیقات انجام شده توسط محققین، به بررسی این موضوع که چگونه نیتروژن و هیدروژن می توانند متقابلاً رفتار الکترونیکی یکدیگر را تغییر دهند پرداخته ایم.

1-Isoelectronic centers

در GaNAs یک اتم هیدروژن با برقراری پیوند با نیتروژن می‌تواند صرفاً به عنوان یک دهنده الکترون رفتار کند در حالی که در مواد GaAs و GaN هیدروژن به عنوان یک اتم خنثی (آمفوتر^۱) رفتار می‌کند. وجود نیتروژن به مقدار کم در GaNAs نیز منجر به پایداری کمپلکسهای $N-H^*$ در مقابل مولکول های H_2 که قبلاً در GaAs پایدار بوده‌اند می‌شود. تصور می‌شود که تشکیل کمپلکسهای دوتایی هیدروژن (H-N-H) با تقارن مثلثی که فرض می‌شود دو اتم هیدروژن مستقیماً به یک اتم نیتروژن پیوند خورده‌اند مسئول بوجود آمدن تغییرات ایجاد شده در ترکیب GaNAs با انجام عمل هیدروژندهی باشند [۵۶ و ۵۷]. اما در این مدل نیتروژن با پنج اتم همسایه خود پیوند برقرار کرده است (عدد کئوردیناسیون آن ۵ خواهد بود) که این امر در هیچ نیترایدی مشاهده نشده است. بنابراین تشکیل کمپلکسهای دوتایی هیدروژن (N-H-N) با تقارن مثلثی که احتمالاً تشکیل آن بیان شده است بسیار عجیب است.

در بخش های ۲-۳-۲ و ۳-۳-۲ با استفاده از روش‌های تئوری پایه در محاسبه ساختار الکترونیکی به بررسی ساختار و پایداری کمپلکسهای تک هیدروژنه و دو هیدروژنه در آلیاژ نیتروژندار رقیق GaNAs می‌پردازیم [۵۸].

۲-۳-۲ کمپلکسهای (ترکیبات) تک هیدروژنه در آلیاژهای نیتروژندار رقیق GaAsN

بنا به گزارشات منتشر شده [۵۸] اتم‌های هیدروژن می‌توانند در پیکربندی‌های مختلف در شبکه بلوری GaAs قرار گیرند: در مرکز پیوند Ga-N نزدیک به نیتروژن (NH_{BC}) و یا دور از نیتروژن به سمت Ga (GaH_{BC})، خارج از فاصله پیوند Ga-N نزدیک به نیتروژن (NH_{AB})، نزدیک به As (AsH_{AB}) و یا نزدیک به Ga (GaH_{AB}) و یا دیگر پیکربندی‌های ممکن، مشخص شده است که پیکر بندی (NH_{BC}) در تمام حالات باری هیدروژن دارای کمترین انرژی پیکربندی است (مکان‌های بین

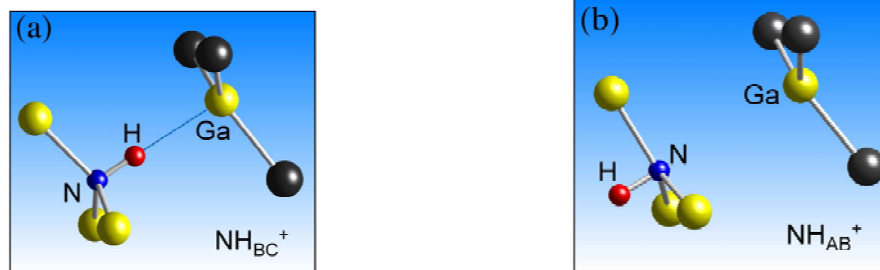
2-Amphoter

Ga و N، BC و مکان های خارج از آن AB نام گذاری شده است). انرژی سایر پیکربندی ها حداقل ۱ eV بیشتر از این پیکربندی است. البته بجز (NH_{AB}) در حالت هیدروژن دهنده الکترون که انرژی حدود ۰/۴ eV بیشتر از (NH_{BC}) است. در شکل (۲-۶) تصویر شماتیک دو پیکر بندی (NH_{BC}⁺) و (NH_{AB}⁺) نشان داده شده است. علامت (+) نشانگر آن است که هیدروژن، دهنده الکترون است.

در پیکربندی (NH_{BC}⁺) شکل ۲-۶-۱ اتم هیدروژن قویاً با اتم نیتروژن پیوند دارد و طول پیوند آن ۱/۰۵ Å است. اتم گالیم نیز در جهت [111] نسبت به صفحه اصلی تشکیل شده از سه اتم از نزدیکترین اتم های As، قرار گرفته است و طول پیوند Ga-H نیز ۰/۵۰٪ بزرگتر از مجموع شعاع کوالانسی شان می باشد. اتم نیتروژن نیز در راستای [111] قرار گرفته است.

در پیکربندی (NH_{AB}⁺) شکل ۲-۶-۲ اتم هیدروژن در مکان غیر پیوندی (AB)^۱ قویاً به اتم نیتروژن پیوند خورده و طول پیوند N-H (۱/۰۵ Å) است. در این مورد نیز اتم های H، N و Ga در یک جهت نسبت به همان صفحه تشکیل شده از سه اتم آرسناید [111] قرار گرفته اند.

همانطور که گفتیم انرژی پیکربندی (NH_{AB}⁺) در حدود ۰/۴ eV بیشتر از پیکربندی (NH_{BC}⁺) می باشد و این امر به این دلیل است که چگالی باری الکترونها در فاصله Ga-N (یعنی مکان (BC)) بیشتر از خارج این فاصله است. بنا براین انرژی بستگی کولنی برای H⁺ در مکان (BC) بزرگتر است.



شکل ۲-۶: طرحی از کمپلکس های تک هیدروژنه در GaNAs با کمترین انرژی پیکربندی (a) NH_{BC}⁺ (b) NH_{AB}⁺

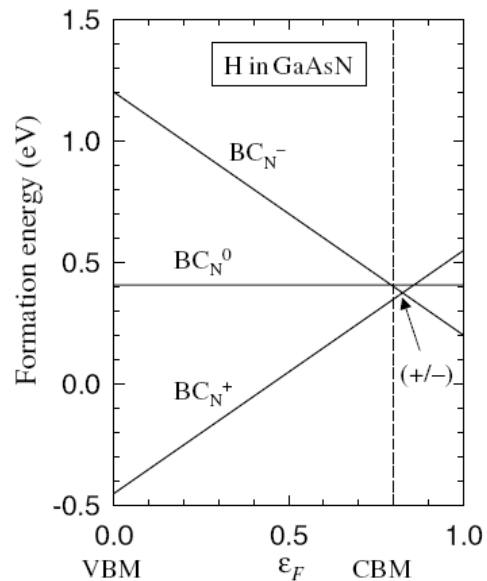
[۵۸]. گوی های سیاه بزرگ اتم های As را نشان می دهند.

1-Antibonding site

شکل ۲-۷ انرژی تشکیل کمپلکسهای تک هیدروژنه که کمترین انرژی را نسبت به سایر کمپلکسهای ممکن داشته‌اند به عنوان تابعی از انرژی فرمی (ϵ_f) در آلیاژ GaNAs نشان داده است، به طوری که BC_N نشانگر آن است که اتم هیدروژن در مکان BC با اتم نیتروژن پیوند برقرار کند. همچنین علامت های +، - و 0 به ترتیب مربوط به حالت های دهنده، پذیرنده و آمفوتر اتم های هیدروژن است. چنانچه دیده می شود بازای تمام مقادیر ممکن برای انرژی فرمی، هیدروژن بشکل کمپلکسهای تک اتمی منحصراً یک دهنده الکترون خواهند بود زیرا تا زمانی که انرژی فرمی بیشتر از مینیمم نوار رسانش¹ (CBM) شود انرژی تشکیل کمپلکسهای تک هیدروژنه با این حالت باری هیدروژن (NH_{BC}^+) کمترین مقدار را نسبت به سایر حالات باری هیدروژن (NH_{BC}^0, NH_{BC}^-) خواهد داشت.

با توجه به همین شکل علت ظاهر شدن هیدروژن بصورت آمفوتر در ترکیباتی مثل (GaAs, GaN) دارا بودن گاف انرژی بزرگتر است که در نتیجه آن مینیمم نوار رسانش، خط نقطه چین در شکل ۲-۷، به سمت انرژی های بیشتر جابجا می شود و بنابراین در این حالت با افزایش انرژی فرمی به نقطه ای می رسیم که به ازای آن انرژی، انرژی تشکیل کمپلکسهای تک هیدروژنه با حالات باری (NH_{BC}^+, NH_{BC}^-) با هم برابر می شود و با افزایش بیشتر انرژی فرمی از آن به بعد انرژی تشکیل کمپلکسی که هیدروژن در آن پذیرنده الکترون (حالت باری منفی NH_{BC}^-) است کمتر می شود و در واقع هیدروژن در این آلیاژها بصورت آمفوتر رفتار خواهد کرد [۵۴، ۵۹ و ۶۰]. رفتار متفاوت هیدروژن در آلیاژ GaNAs می تواند به بزرگی پارامتر خمش ناشی از نیتروژن مربوط باشد، به طوری که نیتروژن ها در واقع محل مینیمم نوار رسانش GaNAs را بسیار پایین آورده و هیدروژن منحصراً بشکل یک دهنده الکترون رفتار می کند. بطور کلی هرگاه مینیمم نوار رسانش ماده میزبان بسیار پایین باشد آنگاه تک اتم هیدروژن می تواند منحصراً بشکل یک دهنده الکترون رفتار کند [۶۱].

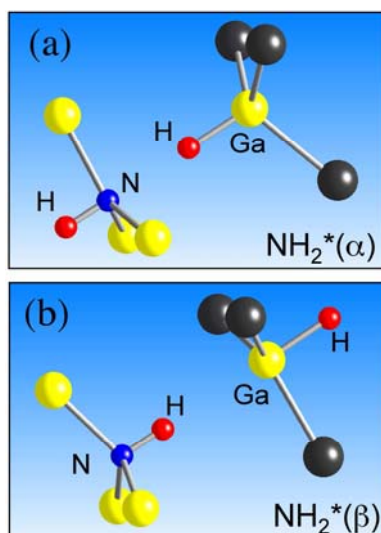
1-conduction band minimum



شکل ۲-۷: انرژی تشکیل به عنوان تابعی از انرژی فرمی برای کمپلکس های تک هیدروژنه با کم ترین انرژی در GaNAs، انرژی تشکیل کمپلکس های دوتایی هیدروژن $\text{NH}_2^*(\alpha)$ و مولکول های درون شبکه ای H_2 نیز برای مقایسه رسم شده است. [۵۸]

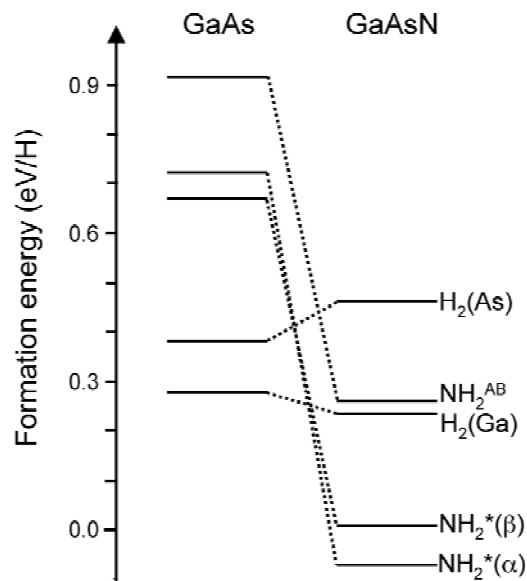
۲-۳-۳ کمپلکس های دو هیدروژنه در آلیاژهای نیتروژندار رقیق GaNAs

محاسبات مختلف انجام شده نشان داده اند که تشکیل کمپلکسهای تک هیدروژنه NH_{BC}^+ اثر بسیار ضعیفی بر گاف انرژی خواهند داشت [۵۸]. بنابراین حضور ناخالصی دیگری غیر از کمپلکس فعال NH_{BC}^+ می تواند مسئول افزایش گاف انرژی آلیاژهای نیتروژندار رقیق پس از عملیات هیدروژندهی باشد [۶۲ و ۶۳]. برای شناختن این ناخالصی دیگر، کمپلکسهای دو هیدروژنه مختلفی که در آنها دو اتم هیدروژن در نزدیکی یک اتم نیتروژن قرار داشته باشد، مورد مطالعه قرار گرفته اند. شکل ۲-۸ کمپلکسهای پایداری مثل (NH_2^*) را نشان می دهد که در آن یک اتم هیدروژن مستقیماً به اتم نیتروژن پیوند خورده و اتم هیدروژن دوم با اتم گالیمی که در نزدیکی نیتروژن قرار دارد پیوند برقرار می کند.



شکل ۲-۸: طرحی از کمپلکس های دو هیدروژنه در GaNAs که از لحاظ الکتریکی غیر فعالند (a) $NH_2^*(\alpha)$ پایدار
 (b) $NH_2^*(\beta)$ شبه پایدار [۵۸]. گوی های سیاه بزرگ اتم های As را نشان می دهد.

کمپلکس $NH_2^*(\alpha)$ که تصویر شماتیک آن در شکل ۲-۸-a نشان داده شده است، کمپلکس دو هیدروژنه با کمترین انرژی تشکیل ($E_f = 0.07 \text{ eV/H}$) در ترکیبات GaNAs می باشد. در این کمپلکس، مشابه کمپلکس تک هیدروژنه NH_{AB}^+ نشان داده شده در شکل ۲-۶-b یک اتم هیدروژن در محل (AB) با اتم نیتروژن پیوند می خورد که طول این پیوند 1.05 \AA است. هیدروژن دوم در مکان (BC) با اتم گالیم پیوند دارد و طول این پیوند نیز در GaNAs، 1.54 \AA می باشد. بین هیدروژن دوم واقع در مکان (BC) و نیتروژن هیچ پیوند شیمیایی وجود ندارد زیرا جدایی N-H بیش از ۹۰٪ بزرگتر از مجموع شعاع کوالانسیشان یعنی 1.07 \AA است [۶۴]. کمپلکس دو هیدروژنه ممکن دیگر $NH_2^*(\beta)$ است. تصویر شماتیک این کمپلکس در شکل ۲-۸-b نشان داده شده است. طول پیوند N-H در این کمپلکس 1.05 \AA و طول پیوند Ga-H 1.60 \AA می باشد. انرژی تشکیل این کمپلکس در حدود 0.1 eV/H از انرژی تشکیل کمپلکس $NH_2^*(\alpha)$ بیشتر است. به علت این اختلاف انرژی احتمال تشکیل آن ضعیف می باشد.



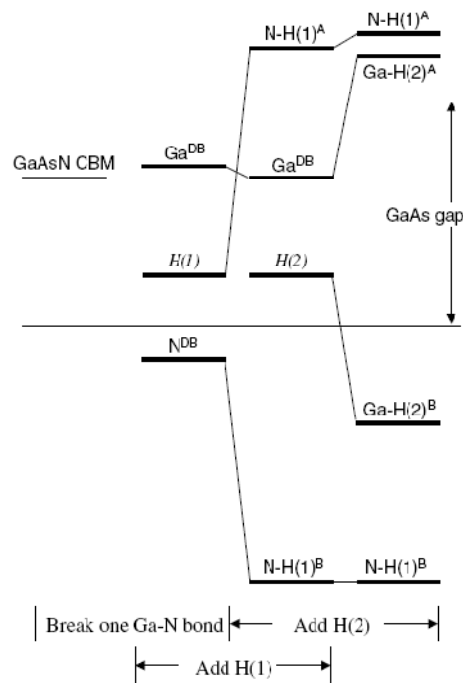
شکل ۲-۹: انرژی تشکیل کمپلکس های دو هیدروژنه در GaAsN [۵۸]

همانطور که در شکل ۲-۹ نشان داده شده است انرژی کمپلکس (β) NH_2^* در آلیاژ GaAsN حدود 0.3 eV/H کمتر از انرژی مولکول های درون شبکه ای H_2 است. در حالی که در ترکیب GaAs مولکول های H_2 بسیار پایدارتر از کمپلکس های ممکن دوتایی هیدروژن H_2^* تشکیل شده در این ترکیب می باشند. لازم به ذکر است که انرژی کمپلکس های NH_2^* در GaAsN حدود 0.7 eV/H نسبت به کمپلکس های H_2^* متناظرشان در ترکیب GaAs کاهش یافته است. این کاهش احتمالاً بدلیل اختلاف انرژی $1/5$ الکترون ولت بین پیوندهای N-H و As-H در مولکول های آمونیاک NH_3 و AsH_3 است [۵۸]. اثرات بوجود آمده را می توان بطور کیفی در شکل شماتیک ۲-۱۰ بررسی کرد.

همانطور که در این شکل نشان داده شده است بعد از انجام عملیات هیدروژندهی دو فرآیند کلی در نظر گرفته می شود. اول: شکستن پیوند Ga-N و در نتیجه ایجاد دو پیوند معلق^۱ یکی مربوط به نیتروژن در نوار ظرفیت و دیگری مربوط به گالیم در نزدیکی نوار رسانش و دوم: ایجاد پیوند اولین اتم هیدروژن با نیتروژن معلق و در نتیجه دو تراز، که یکی با ($N-H^B$) نشان داده شده است و در

1-Dangling

عمق نوار ظرفیت قرار دارد و تراز دوم که با $(N-H^A)$ نشان داده شده است و در نوار رسانش GaAs قرار گرفته است. در نهایت پیوند هیدروژن دوم با گالیوم معلق باعث به وجود آمدن تراز های مشابهی در فاصله نوار ظرفیت و نوار رسانش GaAs می شود [۶۵ و ۶۶]. نتیجه نهایی این فرایند غیر فعال شدن کامل یک اتم نیتروژن با تشکیل کمپلکس NH_2^* و شرکت نکردن آن اتم در فرآیند کاهش گاف انرژی در GaAs می باشد .

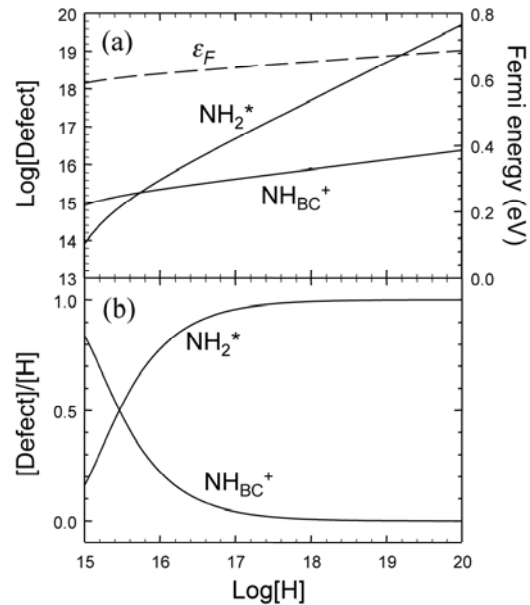


شکل ۲-۱۰: تصویر شماتیکی از فرایند دو مرحله ای غیر فعال شدن نیتروژن با تشکیل کمپلکس $NH_2^*(\alpha)$ و بزرگ

شدن گاف نواری [۵۸]

همانطور که در شکل ۲-۷ نشان داده شده انرژی تشکیل کمپلکس تک هیدروژنه NH_{BC}^+ با افزایش انرژی فرمی افزایش می یابد. در شکل ۲-۱۱ نتایج حاصل از بررسی و مقایسات انجام شده با دقت زیاد بین دو کمپلکس تک هیدروژنه NH_{BC}^+ و دو هیدروژنه NH_2 نشان داده شده است. در این

تحلیل فرض شده است که مقدار هیدروژن [H] کمتر از مقدار نیتروژن [N] موجود در آلیاژ GaNAs باشد.



شکل ۲-۱۱: آنالیز تعادلی بین تشکیل NH_2^* در برابر NH_{BC}^+ در آلیاژ GaNAs در دمای ۳۵۰ کلوین (a) مقدار NH_2^* و NH_{BC}^+ (مقیاس سمت چپ) و انرژی فرمی اندازه گرفته شده از محل ماکزیمم نوار ظرفیت (خط رسم شده با نقطه چین و مقیاس سمت راست) به عنوان تابعی از مقدار کل هیدروژن (b) مقدار نسبی NH_2^* و NH_{BC}^+ به عنوان تابعی از [H]. فرض شده است که مقدار هیدروژن از نیتروژن کمتر بوده و اثر هیدروژن بر گاف انرژی قابل نظر باشد [۵۸].

همانطور که در شکل ۲-۱۱-b دیده می شود مقدار نسبی $[\text{NH}_{\text{BC}}^+]/[\text{H}]$ با افزایش مقدار [H] کاهش می یابد در حالی که مقدار نسبی $[\text{NH}_2^*]/[\text{H}]$ با افزایش مقدار هیدروژن افزایش می یابد. البته این موضوع جالب توجه است که مقدار مطلق $[\text{NH}_{\text{BC}}^+]$ همراه با افزایش [H] افزایش می یابد. در شکل ۲-۱۱-a تغییرات انرژی فرمی نیز نشان داده شده است. همانطور که دیده می شود در آلیاژهای GaNAs با افزایش مقدار هیدروژن انرژی فرمی افزایش می یابد.

در مقدار هیدروژن $[\text{H}] = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ مقدار کمپلکس تک هیدروژنه $[\text{NH}_{\text{BC}}^+]$ محاسبه شده برابر 10^{16} cm^{-3} می باشد که با مقدار تجربی الکترون های آزاد ($7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) سازگاری خوبی

دارد [۳۸]. این موضوع پیش‌بینی می‌کند که اکثریت هیدروژن‌های منفرد یونیزه شده باشند. زمانی که با افزایش مقدار [H] مقدار آن نسبت به [N] قابل مقایسه می‌شود نقش هیدروژن با تشکیل کمپلکس‌های NH_2^* به سمت عامل بازگرداننده گاف GaAs سوق پیدا می‌کند. همانطور که هیدروژن به تدریج در طول عملیات هیدروژندهی بعد از رشد، در ترکیبات زیاد می‌شود غلظت کمپلکس NH_2^* نیز افزایش می‌یابد [۶۲ و ۶۳]. با کاهش غلظت نیتروژن‌های فعال غیر هیدروژنی شده^۱ گاف انرژی افزایش می‌یابد. چرا که کاهش گاف انرژی بوجود آمده توسط نیتروژن‌ها متناسب با غلظت نیتروژن موجود در نمونه می‌باشد. همین نتایج مستقیماً برای آلیاژ InGaAsN نیز قابل تصور است زیرا محل مینیمم نوار رسانش آن حتی از GaNAs نیز پایینتر است [۵۸].

۲-۴ پارامترهای مادی^۲

در فصل ۴ برای برازش داده‌های وابسته به تراکم و تحرک الکترونی به پارامترهای مادی GaNAs و InGaAs نیاز است. به دلیل در دست نبودن مقدار دقیق این داده‌ها از پارامترهای مادی GaAs استفاده نموده ایم که در جدول ۲-۲ آمده است.

قابل ذکر است که در ترکیبات $In_yGa_{1-y}N_xAs_{1-x}$ در صورتی که $y \leq 10\%$ باشد، جز گاف نواری و جرم موثر حامل‌ها بین ثابت‌های مادی از جمله چگالی جرمی و ثابت دی‌الکتریک فرکانس بالا و پایین، چگالی جرمی و این ماده و GaNAs تفاوت چندانی مشاهده نشده است [۶۷].

1-Non hydrogenated N

2-Material parameter

جدول ۲-۲: پارامترهای مادی در [۶۷]GaAs

ثابت دی الکتتریک فرکانس بالا	۱۰/۹۰
ثابت دی الکتتریک استاتیک	۱۲/۵۳
دمای فونون قطبی_نوری (K)	۴۲۳
انرژی پتانسیل تغییر شکل (eV)	۶/۳
ثابت الاستیک طولی (10^{12} dyn/cm ²)	۱/۴۴
ثابت پیزوالکتتریک (10^3 V ² /dyn)	۲/۰۴

فصل سوم

مبانی نظری

۱-۳ مقدمه

خواص ترابری یک نیمرسانا شامل تراکم حامل‌های رسانشی و تحرک آنها، تحت تاثیر اتم‌های ناخالصی بخشنده و پذیرنده، و سایر فرآیندهای پراکندگی در شبکه‌ی بلوری است. هدف ما در این فصل معرفی نظریه‌ی های حاکم در این مورد بوده که در بررسی خواص ترابری الکتریکی مواد نیتروژندار رقیق که در فصل ۴ آمده است، به کار گرفته شده اند.

۲-۳ تعیین تراکم و نوع حامل های بار

به منظور به کارگیری یک نیمرسانا در یک قطعه بخصوص لازم است از تراکم حامل‌های بار در دماهای مختلف، تراکم اتم‌های بخشنده و پذیرنده و نیز مکان ترازهای انرژی وابسته به ناخالصی در ماده آگاه باشیم. یک روش مرسوم در تعیین این ویژگی‌ها استفاده از اثر هال^۱ و تحلیل داده های وابسته به آن است. در این پدیده، با عبور جریان از نیمرسانا، میدان مغناطیسی عرضی به آن اعمال می‌گردد. در این شرایط حامل های بار متحمل نیروی عرضی (عمود بر جهت سرعت و راستای میدان مغناطیسی) می‌شوند. این نیرو حامل های بار را منحرف ساخته و در وجهی از نیمرسانا انباشته می‌شوند. همین امر سبب ایجاد یک اختلاف پتانسیل عرضی می‌شود که به ولتاژ هال V_H موسوم است [۶۸].

در آزمایش هال برای تراکم حامل داریم: $n = \frac{r}{eR_H}$ که در آن R_H ضریب و r فاکتور هال می

باشد که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$r_H = \frac{\overline{\tau^2}}{\tau}$$

1-Hall effect

که در آن $\bar{\tau}$ نشان دهنده میانگین زمان واهلش پراکندگی هاست که در حالت کلی می تواند به صورت $\tau = aE^{-s}$ باشد. که در آن a و s کمیت هایی ثابت هستند. در صورت برقراری توزیع بولتزمن و در نیمرساناهای غیر تبهگن مقدار متوسط از رابطه زیر قابل محاسبه است:

$$\bar{\tau}^m = \int_0^{\infty} \tau^m E^{3/2} \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) dE / \int_0^{\infty} E^{3/2} \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) dE$$

با توجه به مطالب فوق تحرک حال را می توان به کمک رابطه $\mu_H = \frac{R_H}{\rho}$ ، که در آن ρ مقاومت ویژه ماده است، به دست آورد. از آنجا که $\sigma = en\mu$ است (که در آن μ تحرک الکترونی است) می توان نوشت $\mu = \frac{\mu_H}{r}$. برای نیمرسانای (In)GaNAs فاکتور حال را برابر یک در نظر می گیرند [۶۹].
بنابر این در این مورد می توان نوشت : $\mu = \mu_H$.

۳-۲-۱ نظریه تراکم حامل ها در نیمرساناها

برای بررسی خواص ترابری الکتریکی یک نیمرسانا در حضور میدان الکتریکی، تراکم حامل های بار آزاد کمیت مهمی به شمار می آید. از آنجا که تعداد حامل های بار (الکترونها و حفره ها) در واحد حجم (تقریباً $10^{17} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) در مقایسه با تراکم حامل های ذاتی (تقریباً 10^{10} cm^{-3}) بسیار زیاد است نمی توان رفتار هر ذره را به صورت منفرد بررسی کرد. بنابراین باید به رفتار آماری آنها بر اساس اصل طرد پاولی در بلور پرداخت.

۳-۲-۲ مطالعه آماری توزیع بار در نیمرسانا

برای تعیین رفتار آماری ذرات باید قوانینی که ذرات مورد نظر با توجه به ماهیتشان از آنها پیروی می کنند را بدانیم. سه شیوه برای بررسی توزیع ذرات در بین حالت های قابل دسترس وجود دارد. اولین شیوه توزیع مبتنی بر تابع احتمال ماکسول - بولتزمن است. در این مورد ذرات مورد نظر تشخیص

پذیر بوده و برای تعداد ذراتی که در یک حالت مجاز قرار می‌گیرند محدودیتی وجود ندارد. شیوه دوم مبتنی بر تابع احتمال بوز- انیشتین است که برای ذرات تشخیص‌ناپذیر با اسپین صحیح به کار می‌رود و مانند حالت قبل برای تعداد ذراتی که در هر حالت کوانتومی قرار می‌گیرند محدودیتی وجود ندارد. شیوه سوم، مبتنی بر تابع احتمال فرمی-دیراک است. این آمار جهت بررسی توزیع ذرات غیر قابل تشخیص با اسپین نیم صحیح بوده و مطابق با آن در هر حالت کوانتومی تنها یک ذره می‌تواند قرار گیرد. توزیع الکترونها در یک بلور از توزیع اخیر تبعیت می‌کند. به دلیل اهمیت این آمار برای ما در این رساله به شرح کوتاهی از این تابع توزیع می‌پردازیم .

محتمل ترین توزیع الکترون‌ها بین ترازهای انرژی E توسط تابع فرمی - دیراک به صورت [۷۰] :

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

داده می‌شود، که در آن انرژی فرمی، k_B ثابت بولتزمن و T دمای مطلق است. $f_f(E)$ نشان دهنده احتمالی است که یک حالت کوانتومی در انرژی E به وسیله یک الکترون اشغال شده باشد. در صفر کلوین الکترون‌ها در پایین‌ترین حالت‌های انرژی ممکن خود قرار دارند. در این حالت به ازای انرژی‌های پایین تر از انرژی فرمی ($E < E_F$) احتمال اشغال آن حالت‌ها برابر یک و به ازای ($E > E_F$) احتمال اشغال برابر صفر است. در صورتی که اگر $T \neq 0K$ باشد، الکترون‌ها انرژی گرمایی کسب نموده و به ترازهای انرژی بالاتر برانگیخته می‌شوند. در این شرایط توزیع الکترون‌ها در حوالی انرژی فرمی در میان حالت‌های انرژی قابل دسترس تغییر می‌کند. در شرایطی که $E - E_F \gg k_B T$ باشد، عبارت نمایی در مخرج معادله ی (۱-۳) خیلی بزرگتر از مقدار واحد شده و می‌توان از عدد ۱ چشم پوشی کرد. به این ترتیب می‌توان تابع توزیع فرمی - دیراک را به تابع ماکسول - بولتزمن تقریب زد:

$$f_f(E) \approx \exp\left(\frac{-(E - E_F)}{k_B T}\right) \quad (2-3)$$

در شرایط تعادل گرمایی تراکم الکترون های با انرژی E را می توان از رابطه ی زیر بدست آورد :

$$(۳-۳)$$

$$n(E) = g_c(E) f_E(E)$$

که در آن $g_c(E)$ چگالی حالت های کوانتومی مجاز در تراز E است. تراکم الکترونی کل در واحد حجم در نوار رسانش با انتگرال گیری از معادله (۳-۳) بر روی کل ترازهای انرژی در نوار رسانش به دست می آید. به طور مشابه توزیع حفره ها (در نوار ظرفیت) از حاصل ضرب چگالی حالت های کوانتومی مجاز در نوار ظرفیت در احتمال عدم اشغال حالت مجاز کوانتومی به دست می آید :

$$P(E) = g_v(E)(1 - f_F(E)) \quad (۴-۳)$$

و تراکم کل حفره ها در واحد حجم با انتگرال گیری از معادله (۴-۳) روی کل انرژی نوار ظرفیت به دست می آید [۷۰].

۳-۲-۳ تراکم الکترون ها و حفره ها در تعادل گرمایی در یک نیمرسانای ذاتی

برای پیدا کردن تراکم الکترون ها و حفره ها در شرایط تعادل گرمایی، باید موقعیت انرژی فرمی را نسبت به لبه نوار رسانش (E_c) و یا نوار ظرفیت (E_v) پیدا کرد. در $T = 0K$ همه حالت های انرژی در نوار رسانش خالی از الکترون هستند ، بنابراین انرژی فرمی در وسط انرژی های E_c , E_v (با فرض یکسان بودن جرم الکترون و حفره) قرار می گیرد [۷۱].

وقتی که دما به بالاتر از صفر کلویین افزایش می یابد الکترون های نوار ظرفیت انرژی گرمایی گرفته و تعدادی از آنها با به دست آوردن انرژی کافی به نوار رسانش می روند، که در این صورت جفت های الکترون-حفره ایجاد می شود. از آنجا که جرم مؤثر الکترون ها و حفره ها کاملاً با هم یکسان نیستند، توابع چگالی حالت $g_c(E)$ و $g_v(E)$ نسبت به وسط گاف انرژی متقارن نبوده و برای نیمرسانای ذاتی (بدون هیچ گونه نقص و ناخالصی) به مقدار جزئی از وسط گاف انرژی به گونه ای انتقال می یابد که چگالی الکترون ها و حفره ها با هم برابر شوند [۷۰]. با فرض اینکه E_F در یک نیمرسانای ذاتی در

وسط گاف نواری باشد و تراکم الکترون و حفره را به ترتیب برای این نیمرسانا با n , P نشان دهیم،

برای الکترونها در نوار رسانش ($E > E_c$) با در نظر داشتن تابع احتمال فرمی - دیراک داریم [۷۱]:

$$n = \frac{(2^{1/2} m^*)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^2} \int_{E_c}^{\infty} \frac{(E - E_c)^{1/2} dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \quad (5-3)$$

به طوری که m^* جرم مؤثر الکترون و E_c انرژی کمینه ی نوار رسانش است. در صورتی که

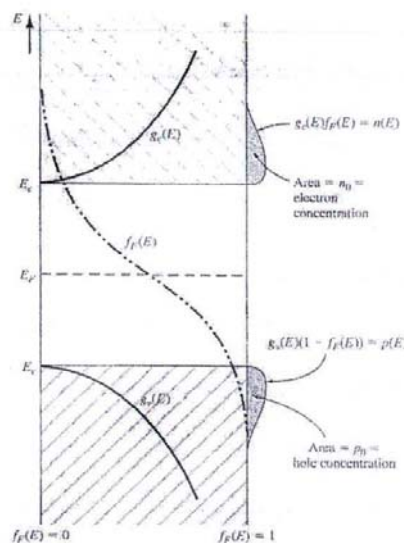
$E_c - E_F \gg k_B T$ باشد آنگاه تابع فرمی - دیراک را می توان به تابع ماکسول - بولتزمن تقریب زد.

در این صورت با انتگرال گیری و انجام عملیات جبری داریم:

$$n = N_c \exp\left(\frac{-(E_c - E_F)}{k_B T}\right) \quad (6-3)$$

که در آن N_c چگالی مؤثر حالت ها در لبه نوار رسانش می باشد و از رابطه ی زیر بدست می آید:

$$N_c = 2 \left(\frac{m^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \quad (7-3)$$



شکل ۳-۱: تغییرات تابع های چگالی حالت های $g_c(E)$ و $g_v(E)$ به همراه تابع احتمال فرمی - دیراک

به ازای $T > 0$ K در یک نیمرسانای ذاتی [۷۰]

در مورد حفره ها نیز با جایگزین کردن E_v ، N_v و جرم مؤثر حفره m_p^* به ترتیب به جای E_c ، N_c و m^* رابطه‌ای مشابه به دست می آید:

$$P = N_v \exp\left(\frac{-(E_F - E_v)}{k_B T}\right) \quad (۸-۳)$$

شکل ۳-۱ تغییرات چگالی حالت های الکترون و حفره ای، همچنین تابع توزیع فرمی- دیراک در یک دمای متناهی را در یک نیمرسانای ذاتی نوعی نشان می‌دهد.

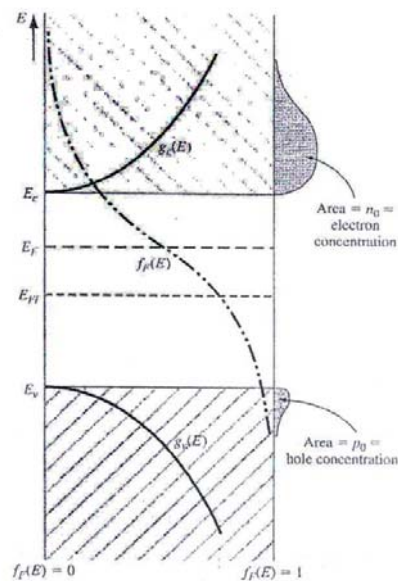
۳-۲-۴ توزیع تعادلی الکترون ها و حفره ها در یک نیمرسانای آلیش یافته

برای به کارگیری نیمرساناها در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی غالباً لازم است تا ماده‌ی مورد نظر با اتم‌های یک ناخالصی بخصوص آلیش داده شود. این عمل غالباً به تشکیل ترازهای ناخالصی در بین گاف نواری ماده می‌انجامد. حضور این ترازها در گاف انرژی، توزیع الکترون‌ها و حفره‌ها را نسبت به حالت ذاتی تغییر می‌دهد. علت این امر را می‌توان با توجه به تغییر موضع تراز E_F نسبت به وسط گاف نواری توضیح داد. شکل های (۳-۲) و (۳-۳) تغییر موقعیت تراز فرمی را در حالت های $E_F > E_{midgap}$ که نیمرساناها عمدتاً با اتم‌های بخشنده آلیش شده باشد و $E_F < E_{midgap}$ هنگامی که با اتم‌های پذیرنده آلائیده شده باشند، نشان می‌دهند. در وضعیت اول که تراکم الکترون‌ها از حفره‌ها بزرگتر است نیمرسانا نوع n و در حالت دوم که تراکم حفره‌ها از الکترون‌ها بیشتر است نیمرسانا را نوع p می‌گویند.

در یک نیمرسانای ذاتی، تراکم الکترون‌ها در نوار رسانش n_i با تراکم حفره‌ها p_i در نوار ظرفیت مساوی است. با توجه به مقادیر تراکم ذاتی و تراز فرمی ذاتی E_{Fi} می‌توان تراکم الکترون‌ها و حفره‌ها را در شرایط تعادل گرمایی از روابط زیر بدست آورد [۳۸]:

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{k_B T}\right) \text{ و } P = n_i \exp\left(\frac{-(E_F - E_{Fi})}{k_B T}\right) \quad (۹-۳)$$

بنابراین وقتی نیمرسانایی نوع n (یا نوع p) باشد، تراز فرمی به سمت لبه ی نوار رسانش (یا ظرفیت) نزدیک می‌شود.



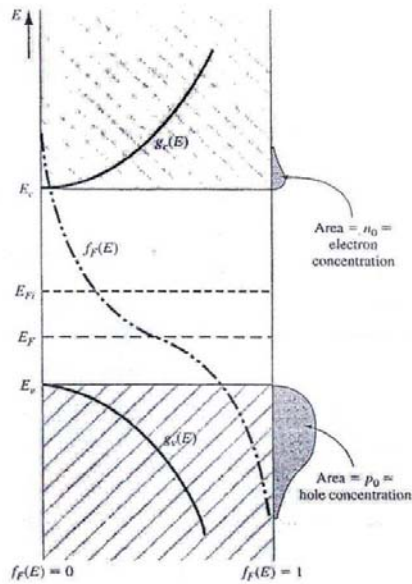
شکل ۳-۲: چگالی تابع حالت، تابع احتمالی فرمی-دیراک با نمایش نواحی تراکم های الکترون و حفره وقتی که تراز فرمی بالاتر از وسط گاف قرار دارد [۷۰].

در مواردی که مقدار $E_c - E_F$ در حدود $k_B T$ یا کمتر باشد، تقریب ماکسول-بولتزمن از دقت کافی برخوردار نبوده و رابطه (۳-۵) را می‌توان با تغییر متغیرهای زیر حل کرد:

$$\eta = \frac{E - E_C}{k_B T} \quad \text{و} \quad \eta_F = \frac{E_F - E_C}{k_B T} \quad (۱۰-۳)$$

بدین ترتیب خواهیم داشت:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_0^* k_B T}{h^3} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2} d\eta}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} \quad (۱۱-۳)$$



شکل ۳-۳: چگالی تابع حالت، تابع احتمالی فرمی-دیراک با نمایش نواحی تراکم های الکترون و حفره وقتی که تراز فرمی پایین تر از وسط گاف قرار دارد [۷۰].

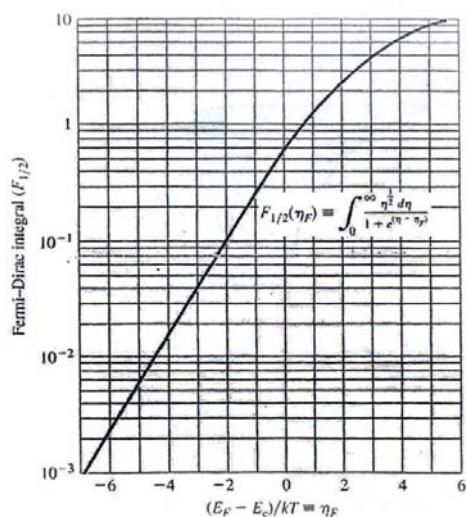
عبارت انتگرالی به انتگرال فرمی - دیراک موسوم است که به صورت زیر نمایش داده می شود :

$$F_{\frac{1}{2}}(\eta_F) = \int_0^{\infty} \frac{\eta^{1/2} d\eta}{\exp(\eta - \eta_F) + 1} \quad (12-3)$$

که با توجه به تعریف چگالی مؤثر حالتها N_C داریم :

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C F_{\frac{1}{2}}(\eta_F) \quad (13-3)$$

مقادیر انتگرال فرمی - دیراک در شکل (۳-۴) رسم شده است که در محاسبات می توان از آن استفاده کرد.



شکل ۳-۴: انتگرال فرمی-دیراک $f_{1/2}$ به صورت تابعی از انرژی فرمی [۷۰].

۳-۲-۵ معادلات مربوط به خنثایی بار و تراکم الکترونها و حفره ها

در یک نیمرسانا با ناخالصی های بخشنده و پذیرنده معادله خنثایی بار به صورت زیر خواهد بود [۷۲]:

$$n + N_a^- = p + N_d^+ \quad (۱۴-۳)$$

که N_a^- و N_d^+ به ترتیب چگالی ناخالصی های پذیرنده و بخشنده ی یونیده هستند. اگر نیمرسانای مورد بررسی نوع n باشد، می توان نوشت [۷۲]:

$$2n = (N_a^+ - N_a^-) + [(N_d^+ - N_a^-)^2 + 4n_i^2]^{1/2} \quad (۱۵-۳)$$

در صورتی که در دمای مورد نظر تراکم حامل ذاتی در نمونه ی مورد بررسی بسیار کوچک باشد می توان از آن در معادله فوق صرف نظر کرد که در این صورت خواهیم داشت $n = N_d^+ - N_a^-$. با در نظر

داشتن رابطه (۳-۶) و نیز رابطه بین بخشنده های یونیده و تراکم بخشنده کل به صورت [۷۳]:

$$\frac{N_d^+}{N_d} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \exp[(E_d - E_F)/k_B T]} \quad (۱۶-۳)$$

که در آن g ضریب واگنی است، اکنون با اندکی عملیات جبری بر روی رابطه (۳-۱۳) خواهیم داشت :

$$\frac{N_d^+}{N_d} = 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \exp[(E_d - E_F)/k_B T] \exp[(E_C - E_F)/k_B T]} \quad (۱۷-۳)$$

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

$$n(T) = \frac{N_d}{1 + \frac{N_d}{N_C(T) \exp(\Delta E_d / k_B T)}} - N_a \quad (۱۸-۳)$$

در روابط فوق ΔE_d انرژی فعالسازی ناخالصی ها است.

در نیمرسانای نیتروژندار رقیق (In)GaNAs اتم‌های نیتروژن بسته به نحوه قرارگیری در شبکه می‌توانند نقش دهنده و یا پذیرنده داشته باشند [۷۴]. در این مورد شرط خنثایی بار طبق رابطه‌ی ۳-۱۹ به دست می‌آید [۷۵].

$$n = \frac{1}{\sqrt{2}} (N_t N_C)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E_t}{2k_B T}\right) + N_d - N_a \quad (۱۹-۳)$$

در این رابطه n تراکم الکترونی، N_C چگالی موثر حالت‌ها، N_t تراکم اتم‌های نیتروژن موجود در نمونه که نقش دهنده دارند، E_t تراز انرژی مربوط به آنها، N_a تراکم اتم‌های پذیرنده و N_d تراکم ماده‌ی آلاینده‌ی مؤثر را نشان می‌دهد.

۳-۳ نظریه پراکندگی و ساز و کارهای مؤثر در تحرک

در یک نیمرسانا در حالت تعادل گرمایی، حامل‌های بار به صورت کترهای با سرعت بالا در تمام راستا ها در حال حرکت هستند و با اتم‌های شبکه و ناخالصی‌ها برخورد می‌کنند که این امر موجب می‌شود تا مسافت کل طی شده توسط هر حامل بار در یک دوره زمانی صفر باشد. هنگامی که میدان الکتریکی به ماده اعمال می‌گردد حامل‌ها از میدان الکتریکی نیرو دریافت کرده و در فاصله میان دو

برخورد در امتداد میدان شتاب می‌گیرند، بنابراین یک مولفه سرعت اضافی به حرکت گرمایی اضافه می‌شود که سرعت سوق^۱ نام دارد. بزرگی این سرعت در حد میدان‌های الکتریکی ضعیف با میدان الکتریکی متناسب است.

$$v_d \propto E \quad (20-3)$$

ثابت تناسب در این رابطه را تحرک حامل بار می‌نامند. بنابراین:

$$v_d = \mu \cdot E \quad (21-3)$$

سازوکارهای پراکندگی مختلف، تحرک الکترون‌ها و حفره‌ها را کنترل می‌کنند. با شناخت این سازوکارها و تاثیر آنها در بازه‌های دمایی گوناگون می‌توان به شرایط بهینه رشد بلور مورد نظر پی برد. برای تحرک الکترون‌های آزاد در یک نیمرسانا داریم:

$$\mu = \frac{q\tau}{m_n^*} \quad (22-3)$$

که در آن μ تحرک حامل‌ها، m^* جرم مؤثر حامل، τ زمان میانگین بین دو برخورد متوالی در نیمرساناست. در حالت کلی کمیت τ تابع انرژی حامل هاست ولی با فرض حضور سازوکارهای مستقل پراکندگی که هرکدام با کمیت τ_i (زمان واهلش متناظر با سازوکار پراکندگی i ام) معرفی می‌شوند می‌توان انتظار داشت که احتمال پراکندگی کل در مدت زمان dt از رابطه زیر پیروی کند [۳۸].

$$\frac{dt}{\tau} = \sum_i \frac{dt}{\tau_i} \quad (23-3)$$

یا

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} + \dots \quad (24-3)$$

با توجه به رابطه (۲۲-۳) رابطه اخیر را می‌توان به صورت زیر نوشت که به قاعده ماتیسین موسوم است:

1-Drift velocity

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2} + \dots \quad (25-3)$$

ما در این رساله به چند عامل مهم از سازوکارهای پراکندگی که تاثیر بیشتری بر تحرک حامل‌ها در ترکیبات نیتروژندار رقیق دارند، می‌پردازیم. از جمله این پراکندگی‌ها می‌توان به پراکندگی‌های ذاتی شامل پراکندگی فونونی (قطبی - نوری، پیزو الکتریکی، آکوستیکی) و پراکندگی غیر ذاتی شامل پراکندگی‌های وابسته به ناخالصی‌های یونیده و خنثی، پراکندگی حاصل از در رفتگی‌ها و نیز پراکندگی‌های آلیاژی اشاره کرد.

۱-۳-۳ پراکندگی فونون‌های قطبی - نوری

غالباً در دماهای بالا از پراکندگی فونون‌های قطبی - نوری به عنوان سازوکار غالب محدود کننده تحرک حامل‌ها نام برده می‌شود. ارزیج تحرک محدود شده به وسیله این پراکندگی را به صورت فرمول زیر ارائه داده است [۷۶]:

$$\mu_{pop} = 0.199 \left[\frac{T}{300} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{q}{\varepsilon_c^*} \right]^2 \left[\frac{m_0}{m_n^*} \right]^{\frac{3}{2}} (10^{22} M) (10^{23} V_a) (10^{-13} \omega_{Lo}) (e^Z - 1) (G(z)) \quad (26-3)$$

که در آن ε_c^* به صورت

$$\varepsilon_c^* = \sqrt{M \omega_{Lo}^2 V_a \varepsilon_o \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon} \right)} \quad (27-3)$$

می‌باشد. در این رابطه q اندازه بار الکتریکی، T دمای مطلق، m_n^* جرم موثر الکترون، ε_∞ ثابت دی الکتریک نوری (فرکانس بالا)، ε ثابت دی الکتریک فرکانس پایین و M جرم کاهش یافته‌ی نزدیکترین اتم‌های همسایه می‌باشد. همچنین V_a حجم یک سلول واحد است که مقدار آن $5 \times 10^{-22} \text{ cm}^{-3}$ در نظر گرفته شده است [۷۷]. θ_{Lo} دمای فونونی در GaNAs می‌باشد که مقدار آن 423 K گزارش شده است [۶۹]. بدین ترتیب مقدار ω_{Lo} برای GaNAs برابر با $5/5 \times 10^{14} \text{ rad/s}$

بدست می‌آید. در رابطه (۳-۲۶) عبارت $G(z)$ تابعی از z با تغییرات آهسته است که Z تابعی از دماست :

$$Z = \frac{\hbar\omega_{Lo}}{K_B T} = \frac{\theta_{Lo}}{T} \quad (۳-۲۸)$$

۳-۳-۲ پراکندگی فونون های پیزوالکتریکی

تحرك محدود شده تحت تاثیر پراکندگی فونون های پیزوالکتریک با رابطه زیر داده می شود [۷۱]:

$$\mu_{pZ} = \frac{16(2\pi)^{\frac{1}{2}} \rho v_s^2 \hbar^2 q}{3 \left(\frac{qh_{pZ}}{\epsilon_s} \right)^2 (m^*)^{\frac{1}{2}} (k_B T)^{\frac{1}{2}}} \quad (۳-۲۹)$$

که v_s سرعت صوت در ماده، ρ چگالی جرمی و h_{pZ} ضریب پیزوالکتریک می‌باشد. این مقادیر در مورد GaAs به ترتیب برابر 6.59×10^3 m/s، 5.32 gr/cm^۳ و 0.211 c/m^۳ می باشند [۶۹].

۳-۳-۳ پراکندگی فونون های آکوستیکی

یکی دیگر از سازوکارهای مهم پراکندگی در نیمرساناها ، پراکندگی فونون های آکوستیکی است. تحرك محدود شده با این ساز و کار به وسیله ی فرمول زیر داده شده است [۷۸]:

$$\mu_{ac} = \frac{2(2\pi)^{\frac{1}{2}} \rho v_s^2 \hbar^4 q}{4E_{ds}^2 (m^*)^{\frac{5}{2}} (k_B T)^{\frac{3}{2}}} \quad (۳-۳۰)$$

که در آن E_{ds} پتانسیل تغییر شکل بوده و مقدار آن برای GaAs برابر با $3/9$ eV می‌باشد [۶۹].

۳-۳-۴ پراکندگی ناخالصی های یونیده

پراکندگی ناخالصی های یونیده در دماهای پائین غالب است زیرا سرعت گرمایی حامل‌ها در دمای پایین کاهش یافته و همین عامل موجب آن می‌شود تا اثر بر همکنش کولنی ناخالصیهای یونیده بر

حرکت حامل‌ها افزایش یابد، در این شرایط پراکندگی ناخالصی‌های یونیده می‌تواند از جمله سازوکارهای غالب در محدود سازی تحرک حامل‌ها باشد که به صورت زیر قابل پیش بینی است [۷۹]:

$$\mu_l = \frac{128(2\pi)^{\frac{1}{2}} \varepsilon_s^2 (k_B T)^{\frac{3}{2}}}{q^3 (m^*)^{\frac{1}{2}} (n + 2N_a)} \left[1n(1+b) - \frac{b}{1+b} \right]^{-1} \quad (31-3)$$

که در آن:

$$b = \frac{24m^* \varepsilon_s (k_B T)^{\frac{1}{2}}}{q^2 \hbar^2 n'} \quad (32-3)$$

$$n' = n + \frac{(N_d - N_a - n)(n + N_a)}{N_d} \quad (33-3)$$

۵-۳-۳ پراکندگی ناخالصی های خنثی

یکی دیگر از عوامل محدود کننده تحرک حامل‌ها در دماهای پائین پراکندگی ناشی از اتم‌های ناخالصی خنثی است. با توجه به محاسبات انجام شده توسط ارگینسوی [۸۰] احتمال پراکندگی توسط اتم های ناخالصی خنثی با رابطه زیر داده می شود [۷۳]:

$$\frac{1}{\tau_N} = 1.22 \times 10^{-2} \varepsilon_s(0) N_N \left[\frac{m}{m^*} \right]^2 \quad (34-3)$$

که N_N تراکم کل ناخالصی های خنثی است و $\varepsilon_s(0)$ ثابت دی الکتریک می باشد که در مورد GaAs مقداری برابر ۱۲/۵۳ دارد [۷۳].

۶-۳-۳ پراکندگی از در رفتگی ها

نواقص بلوری وابسته به در رفتگی‌های موجود در نمونه می‌توانند نقش مهمی را در کاهش تحرک الکترونی ایفا کنند. رابطه (۳-۳۵) بیانگر تحرک محدود شده توسط این سازوکار پراکندگی است که توسط پردور ارائه شده است [۸۱]:

$$\mu_{dis} = \frac{30\sqrt{2\pi}\epsilon_s^2\epsilon_0^2d^2(k_B T)^{\frac{3}{2}}}{q^3 N_{dis} f^2 L_D m^{*1/2}} \quad (3-35)$$

که در آن d فاصله بین مراکز نقایص در امتداد خط در رفتگی هاست که در حدود ثابت شبکه می‌باشد، N_{dis} چگالی در رفتگی‌ها در واحد سطح، f کسری از مراکز است که اشغال شده‌اند که معمولا آن را برابر با یک در نظر می‌گیرند. L_D طول دبای است که با رابطه زیر داده می‌شود:

$$L_D = \sqrt{\epsilon_s \epsilon_0 \frac{k_B T}{q^2 n(T)}} \quad (3-36)$$

در این رابطه $n(T)$ بستگی دمایی تراکم حامل‌ها را نشان می‌دهد.

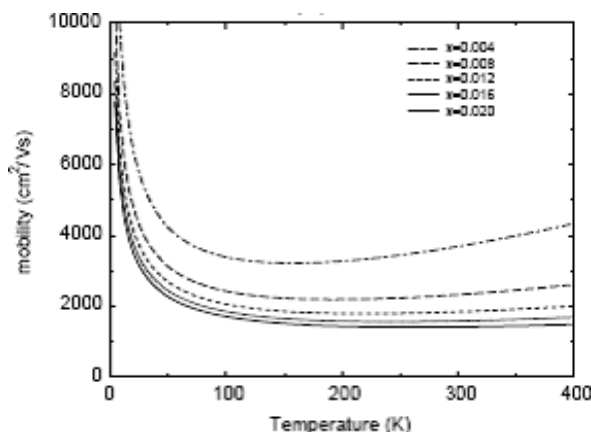
۷-۳-۳ پراکندگی آلیاژ کتره ای

در مواد نیتروژندار رقیق و بخصوص GaNAs، یافتن مدل پیشرفته و کاملی برای یک آلیاژ بلور کتره ای کاری دشوار است، به ویژه آنکه وجود اتم‌های نیتروژن موجب اختلال بزرگی در ساختار نواری می‌شود که این امر منجر به پراکندگی قوی الکترونی می‌گردد.

با استفاده از فرمولبندی‌های ارائه شده، تحرک محدود کننده الکترونی با رابطه [۸۲]:

$$\mu^{-1} = \frac{\sqrt{3m^* k_B T}}{e} \pi \left(\frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left(\frac{dE_c}{dx} \right) a_0^3 x \quad (3-37)$$

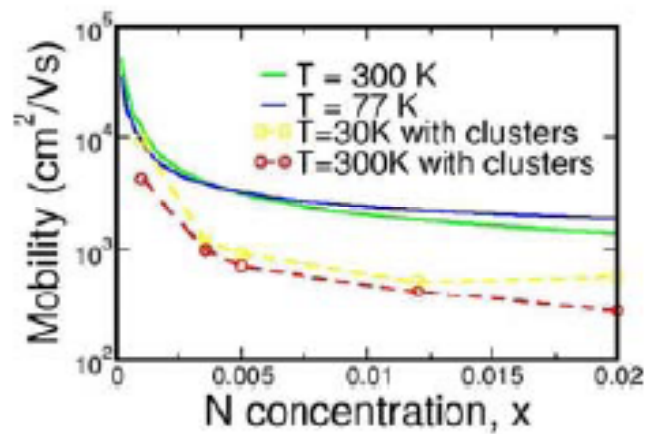
ارائه می شود. که در آن a_0 ثابت شبکه بلور و $\left(\frac{dE_c}{dx}\right)$ تغییرات لبه گاف نواری بر حسب غلظت نیتروژن می باشد. شکل (۳-۵) میزان تحرک انتظاری از این محاسبات را در نمونه های مختلف با کسرهای مولی نیتروژن متفاوت (x) را نشان می دهد [۸۲].



شکل ۳-۵: وابستگی دمایی تحرک الکترونی محاسبه شده به صورت نظری در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ با Xهای متغییر [۸۲].

۳-۲-۸ پراکندگی آلیاژ خوشه ای

از آنجا که در بعضی از آلیاژها از جمله $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ، توزیع فضایی اتمها تماماً به صورت کتره ای صورت نمی گیرد و خوشه هایی در آلیاژ تشکیل می شوند لازم است پراکندگی حاصل از آنها نیز محاسبه شود. این کار توسط فاهی و اوریلی [۸۲] انجام شده که نتایج آن در شکل (۳-۶) نشان داده شده است. در این شکل منحنی های خط چین پراکندگی آلیاژی خوشه ای را در دماهای ۳۰ و ۳۰۰ کلوین و منحنی های خط پر، پراکندگی آلیاژی کتره ای در دماهای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین را بر حسب تابعی از کسر مولی نیتروژن (X) نشان می دهد. در مواد نیتروژندار رقیق حضور این سازوکار تا حد زیادی از تحرک الکترونی می کاهد.



شکل ۳-۶: مقادیر نظری تحرک الکترونی حاصل از آلیاژ خوشه ای و کتره ای در $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ در بازه $0 < x < 0.02$ [۸۲].

اکنون با توجه به شناخت سازوکارهای محدود کننده ی تحرک به طور جداگانه ، می توان اثر کلی این عوامل در حامل ها را با توجه به قاعده ماتیسین (معادله ۳-۲۵) پیدا کرد.

فصل چهارم

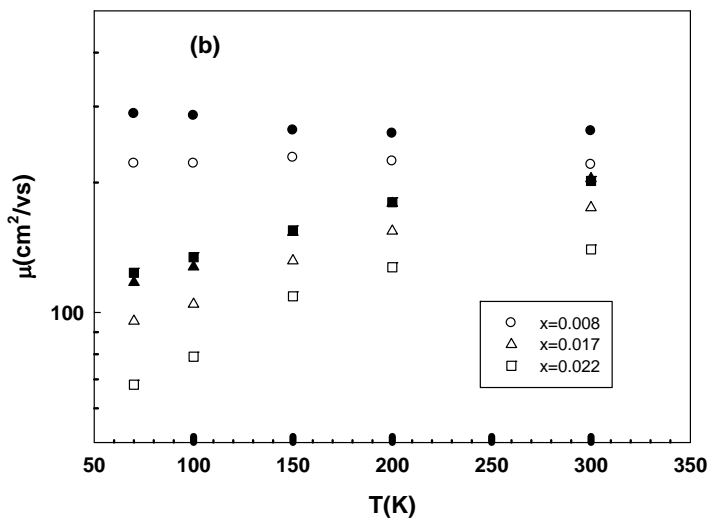
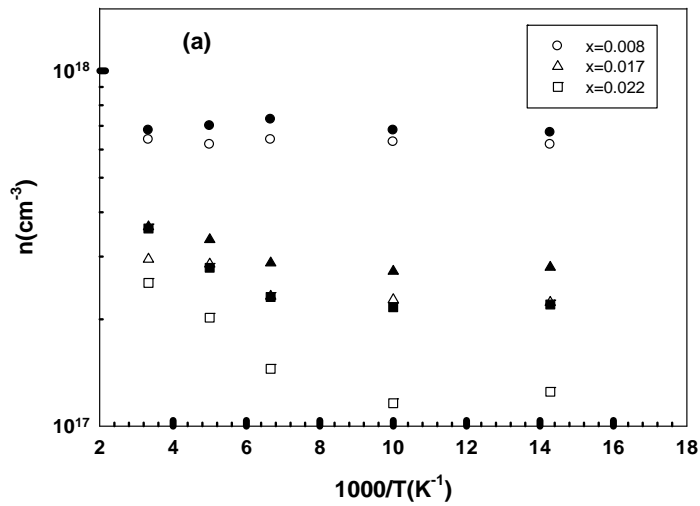
بررسی نظری داده های تجربی

۴-۱: مقدمه

هدف ما در این فصل بررسی تاثیر بازپخت و هیدروژندهی بر خواص ترابری الکتریکی مواد نیمرسانای نیتروژن دار رقیق شامل GaNAs و InGaNAs است. در این خصوص مطالب ارائه شده به بخش های زیر تقسیم شده است. ابتدا در بخش های ۴-۲ و ۴-۳ به تاثیر بازپخت بر خواص ترابری الکتریکی نمونه های GaNAs آلاینش شده به ترتیب با عناصر گروه ۴(Si) و ۶(Te) پرداخته ایم. در بخش های ۴-۴ و ۴-۵ اثر بازپخت روی خواص ترابری الکتریکی مواد نیمرسانای نیتروژن دار رقیق ایندیم دار InGaNAs را در شرایط بدون آلاینش خواسته و نیز آلاینش یافته با Si مورد بررسی قرار داده ایم. در بخش ۴-۶ به تاثیر هیدروژندهی بر نمونه InGaNAs نوع n و در نهایت در بخش ۴-۷ به مقایسه ی رفتار هیدروژندهی در ترکیب InGaNAs در حالت های بدون آلاینش و آلاینش سبک و سنگین پرداخته ایم.

۴-۲- بررسی اثر بازپخت بر تراکم و تحرک الکترونی در نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}:\text{Si}$ ($x = 0/8, 1/7, 2/2$)

شکل (۴-۱) داده های تجربی ای شی کاوا و همکاران [۸۳] مربوط به بستگی دمایی تراکم و تحرک الکترونی حامل ها را در بازه ی دمایی ۷۰ تا ۳۰۰ کلوین در شرایط قبل و پس از بازپخت برای نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 0/8, 1/7, 2/2$) نشان می دهد. این نمونه ها به روش رو آراستی باریکه ی مولکولی (MBE) در دمای 450°C روی زیرلایه ی GaAs با ضخامت حدود ۵۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر رشد یافته اند. این لایه ها دارای آلاینش نوع n با ماده ی آلاینده ی Si به مقدار $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ می باشند. عملیات بازپخت حرارتی سریع در دمای 800°C به مدت ۶۰s صورت گرفته است. داده های سفید مربوط به نمونه های تازه رشد داده شده و داده های سیاه مقادیر اندازه گیری شده را پس از بازپخت نشان می دهند.



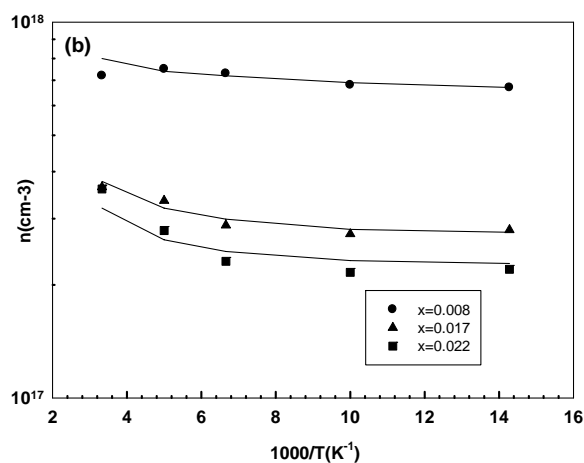
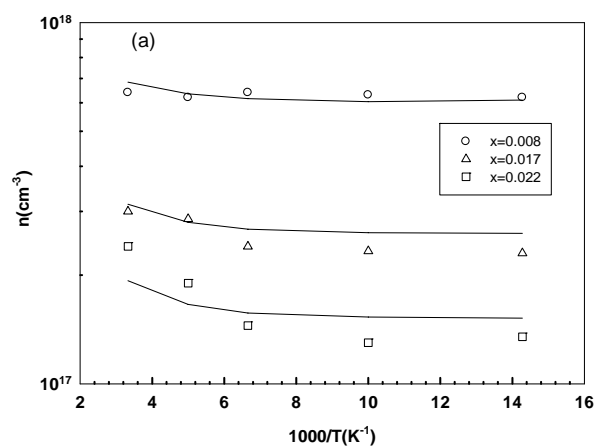
شکل ۴-۱: داده های تجربی ای شی کاوار مربوط به وابستگی دمایی: (a) تراکم و (b) تحرک الکترونی نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 0.008, 0.017, 0.022$) [۸۳].

۴-۲-۱ تحلیل داده های وابسته به تراکم الکترونی

با توجه به داده های گزارش شده در شکل (۴-۱-۲) ملاحظه می شود که با افزایش درصد نیتروژن به مرور از تراکم و تحرک الکتریکی نمونه ها کاسته شده است. این تغییرات غالباً به افزایش ترازهای به دام اندازنده الکترونی وابسته به اتم های نیتروژن نسبت داده شده است [۷۵]. این داده ها

همچنین نشان دهنده آن است که پس از عملیات بازپخت هم تراکم و هم تحرک حامل های الکترونی افزایش لکن وابستگی دمایی آنها کاهش یافته است، به طوری که در دمای اتاق نمونه های بازپخت شده تقریباً دارای تراکم الکترونی دو برابر نسبت به نمونه های تازه رشد یافته هستند. همچنین وابستگی دمایی تراکم حامل ها پس از بازپخت کاهش یافته است. در ادامه به تحلیل این پدیده ها می پردازیم:

با توجه به مطالب ارائه شده در فصول گذشته، تراکم الکترون ها می تواند تحت تاثیر عواملی همچون تراکم ناخالصی های افزوده شده به ماده و یا تراکم نقایص بلوری باشد. با توجه به مطالب بخش ۳-۲-۵ اتم های نیتروژن در نیم رسانای نیتروژندار رقیق GaNAs بسته به نحوه قرارگیری در شبکه بلوری می توانند به صورت اتم های دهنده و یا پذیرنده ایفای نقش کنند. به منظور تعیین تراکم وابسته به اتم های ناخالصی، در اینجا Si، و نیز تراکم ترازهای نیتروژنی (دهنده و پذیرنده) از شرط خنثایی بار معادله (۳-۱۹) استفاده کرده ایم. نتیجه حاصل از این برازش ها در شکل (۴-۲) به صورت خطوط منحنی نشان داده شده است که با دقت خوبی بر داده های تجربی منطبق است. در این انطباق کمیت های N_t (تراکم اتم های نیتروژن دهنده)، E_t (تراز انرژی اتم های نیتروژن دهنده)، N_a (تراکم اتم های دهنده)، N_d (تراکم اتم های آلاینده ی موثر) و همچنین ϕ (نسبت جبران یعنی نسبت تراکم اتم های پذیرنده به تراکم اتم های دهنده) به عنوان پارامترهای برازشی در نظر گرفته شده اند (جدول ۴-۱ الی ۴-۳). نتایج به دست آمده در این جداول شامل مقادیر برازشی در شرایط قبل و پس از بازپخت است. ما در محاسبات خود جرم مؤثر الکترون را برای نمونه های مورد بررسی با درصد های مولی نیتروژنی ۰/۸، ۱/۷ و ۲/۲٪ با توجه به پیش بینی نظریه ی BAC (شکل ۲-۲) به ترتیب ۰/۰۹۴m، ۰/۱۰۳m و ۰/۱۰۶m در نظر گرفته ایم. برای پارامترهای مادی به کار گرفته شده به دلیل در دست نبودن مقادیر دقیق آنها در ترکیب بندی GaNAs از پارامترهای مادی مربوط به GaAs در جدول ۲-۲ استفاده کرده ایم.



شکل ۴-۲: نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تراکم الکترونی برای نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 0.008, 0.017, 0.022$) تازه رشد یافته (a) بازپخت شده (b)

جدول ۴-۱: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 0.008$) قبل و بعد از بازپخت. حرف a درستون اول نشان دهنده نمونه های بازپخت شده است.

x	$N_d(\text{cm}^{-3})$	$E_t(\text{meV})$	$N_t(\text{cm}^{-3})$	$N_a(\text{cm}^{-3})$	ضریب جبران \emptyset
0/008	1×10^{18}	۶۰	2×10^{17}	4×10^{17}	۰/۳۳
۰/۰۰۸(a)	$9/5 \times 10^{17}$	۴۰	2×10^{17}	3×10^{17}	۰/۲۶

جدول ۴-۲: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x=1/7\%$) قبل و بعد از بازپخت. حرف a درستون اول نشان دهنده نمونه های بازپخت شده است.

x	$N_d(\text{cm}^{-3})$	$E_t(\text{meV})$	$N_t(\text{cm}^{-3})$	$N_a(\text{cm}^{-3})$	ضریب جبران \emptyset
۰/۰۱۷	$4/76 \times 10^{17}$	۸۰	$1/5 \times 10^{17}$	$2/14 \times 10^{17}$	۰/۳۴
۰/۰۱۷(a)	$4/2 \times 10^{17}$	۴۵	$1/5 \times 10^{17}$	$1/47 \times 10^{17}$	۰/۲۷

جدول ۴-۳: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x=2/2\%$) قبل و بعد از بازپخت. حرف a درستون اول نشان دهنده نمونه های بازپخت شده است.

x	$N_d(\text{cm}^{-3})$	$E_t(\text{meV})$	$N_t(\text{cm}^{-3})$	$N_a(\text{cm}^{-3})$	ضریب جبران \emptyset
۰/۰۲۲	$3/64 \times 10^{17}$	۸۵	1×10^{17}	$2/11 \times 10^{17}$	۰/۴۵
۰/۰۲۲(a)	$3/5 \times 10^{17}$	۵۰	1×10^{17}	$1/22 \times 10^{17}$	۰/۲۷

با توجه به نتایج بدست آمده در جداول بالا می توان دریافت: (۱) با افزایش درصد نیتروژن در این نمونه ها تراکم اتم های Si فعال (N_d) و نیز تراکم مراکز پذیرنده در نمونه کاسته شده است. علت این امر می تواند ناشی از این واقعیت باشد که با اضافه شدن درصد نیتروژن تعداد پیوند های Si-N در نمونه افزایش یافته و در نتیجه موجب غیر فعال شدن بخشی از اتم های آلاینده Si و N می گردد که به ترتیب غالباً در این ماده در نقش دهنده و پذیرنده عمل می کنند. (۲) با افزوده شدن کسر مولی

نیترژن در نمونه‌ها انرژی فعال‌سازی اتم‌های بخشنده (E_t) رو به افزایش گذارده و از ۶۰ meV در نمونه‌ی ۰/۸٪ به ۸۰ meV در نمونه‌ی ۱/۷٪ و سرانجام به ۸۵ meV در نمونه‌ی ۲/۲٪ می‌رسد. با عمیق‌تر شدن این ترازهای انرژی و نیز کاهش تراکم آلاینده‌های قابل دسترس به عنوان اتم‌های بخشنده تغییرات تراکم الکترونی در این نمونه‌ها در تمامی گستره دمایی و نیز در دمای اتاق با مقادیر $۶/۴ \times 10^{17}$ ، $۲/۹۵ \times 10^{17}$ و $۲/۵۳ \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ امری منطقی است. (۳) چنانچه ملاحظه شد با انجام بازپخت سریع در نمونه‌ها تراکم الکترونی آنها افزایش می‌یابد. با توجه به گزارش جین و همکاران [۳۶] در نمونه‌های آلیش شده با Si، N روی زیرلایه‌ی As و Si روی زیرلایه‌ی Ga قرار می‌گیرد. بازپخت و افزایش دمای آن انرژی لازم را برای اتم‌های Si فراهم می‌کند که برای رسیدن به انرژی پایین‌تر در شبکه‌ی بلوری توزیع شوند. از آنجایی که اتم N از As الکترون‌گاتیوتر است پیوند Si-N از Si-As پایدارتر است، بنابراین ۴ نزدیک‌ترین همسایه‌ی اتم N_{As} در محل Ga به یک تله‌ی مؤثر برای اتم Si تبدیل می‌شوند. نتیجه‌ی این فرآیند ایجاد پیوند $Si_{Ga}-N_{As}$ و شرکت ۴ الکترون ظرفیت اتم Si در پیوند با نیترژن و غیر فعال شدن آن می‌باشد. از طرفی عمل بازپخت سبب تغییر موضع ترازهای دهنده از حالت عمیق به کم عمق شده و تله‌های الکترونی (نیترژن‌های دهنده) را کاهش می‌دهد. رقابت بین این دو فرآیند سبب ایجاد مقاومت در برابر افزایش تراکم الکترونی می‌گردد، به نظر می‌رسد که از بین این دو فرآیند رقابتی مورد دوم قوی‌تر بوده و در نتیجه تراکم الکترونی حامل‌ها افزایش یافته است.

۲-۲-۴ تحلیل داده‌های وابسته به تحرک الکترونی

برای بررسی تحرک حامل‌ها عوامل پراکندگی مختلف اعم از ذاتی و غیر ذاتی که در فصل ۳ مطرح شد، در نظر گرفته و سپس تاثیر کلی آنها را با استفاده از قاعده‌ی ماتیسن (معادله ۳-۲۵) محاسبه کرده ایم.

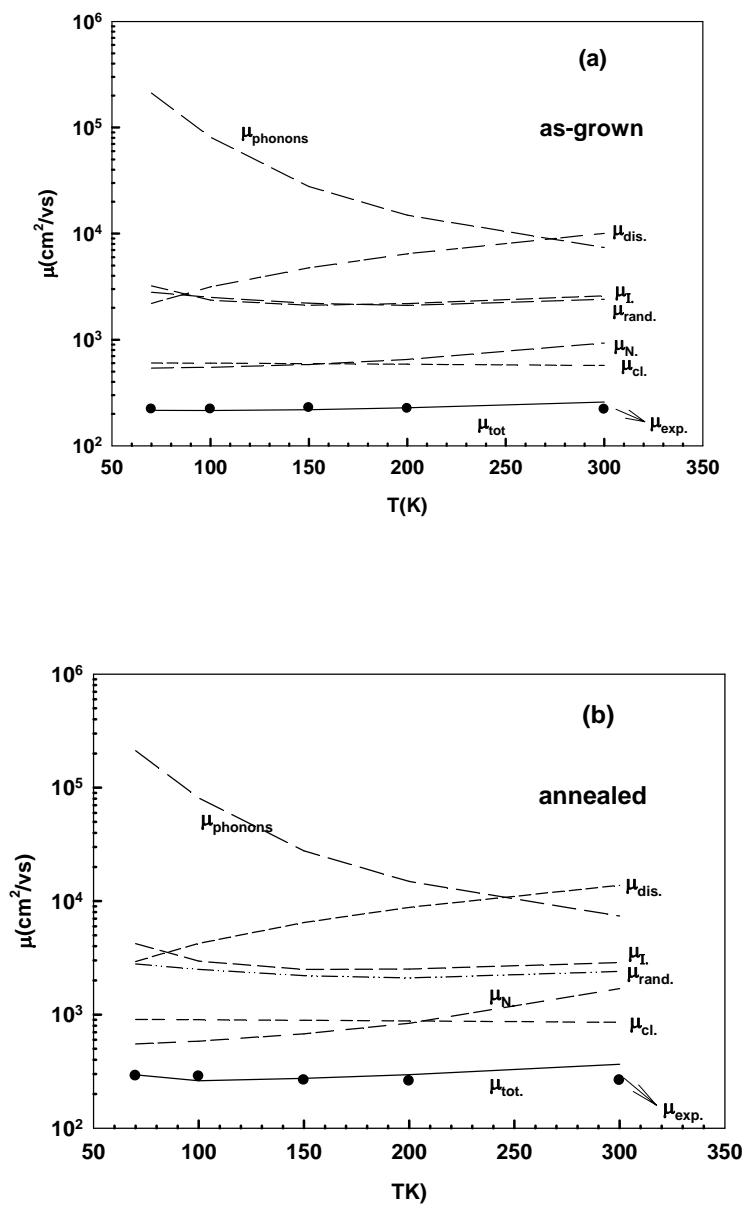
در بررسی و محاسبه تاثیر پراکندگی‌های ذاتی این نمونه‌ها از پارامترهای مادی مربوط به GaAs (جدول ۲-۲) استفاده کرده‌ایم. در مطالعه سازوکارهای پراکندگی‌های غیرذاتی از پراکندگی‌های وابسته به ناخالصی‌های یونیده و خنثی، همچنین دررفتگی‌ها و آلیاژهای کتره‌ای و خوشه‌ای استفاده کرده‌ایم. با توجه به معلوم شدن مقادیر مربوط به تراکم ناخالصی‌ها و انرژی فعال سازی آنها از بخش قبل لازم است سهم مربوط به تاثیر پراکندگی‌های دیگر در کنترل تحرک حامل‌ها در نظر گرفته شود. بدین منظور یکی از پارامترهای برازشی در این مرحله تراکم دررفتگی‌ها (N_{dis}) است. در مورد سازوکار پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای و کتره‌ای از داده‌های گزارش شده اوریلی و همکاران که در شکل ۳-۶ نشان داده شده استفاده نموده‌ایم، به طوری که برای پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای از داده‌های گزارش شده در دماهای ۳۰ و ۳۰۰ کلوین برای درصد‌های مختلف نیتروژن و در نظر گرفتن رابطه‌ی خطی بین این دو دما استفاده نموده‌ایم و نیز در مورد پراکندگی آلیاژ کتره‌ای به همین ترتیب از تقریب خطی بین دو دمای ۷۷ و ۳۰۰ کلوین بهره برده‌ایم. نتایج مربوط به این نمونه‌ها به همراه موقعیت تاثیرگذاری هر کدام از سازوکارهای موثر در پراکندگی حامل‌ها در جداول و شکل‌های زیر نشان داده شده است. چنانچه دیده می‌شود بین داده‌های تجربی و نتیجه‌ی محاسبات ما در تمامی نمونه‌های مورد مطالعه انطباق بسیار خوبی برقرار است.

این نتایج حاکی از آن است که در نمونه با کسر مولی نیتروژن ۰/۸ درصد در شرایط قبل از بازپخت، سازوکار اصلی محدود کننده تحرک الکترونی، پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای است که پس از بازپخت به دلیل شکسته شدن پیوندهای خوشه‌ای Ga-N و تشکیل پیوندهای کتره‌ای Si-N سهم حاصل از این سازوکار به نصف کاهش می‌یابد. همچنین در این نمونه پس از عملیات بازپخت سریع تراکم در رفتگی‌های موجود در نمونه به نصف رسیده است.

جدول ۴-۴: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_{0.8}\text{As}_{0.2}$ ($x = 0.2$).

حرف a نشان دهنده نمونه های بازپخت شده می باشد.

X	0.2	0.2(a)
$N_{\text{dis}}(\text{cm}^{-2})$	1×10^9	0.5×10^9

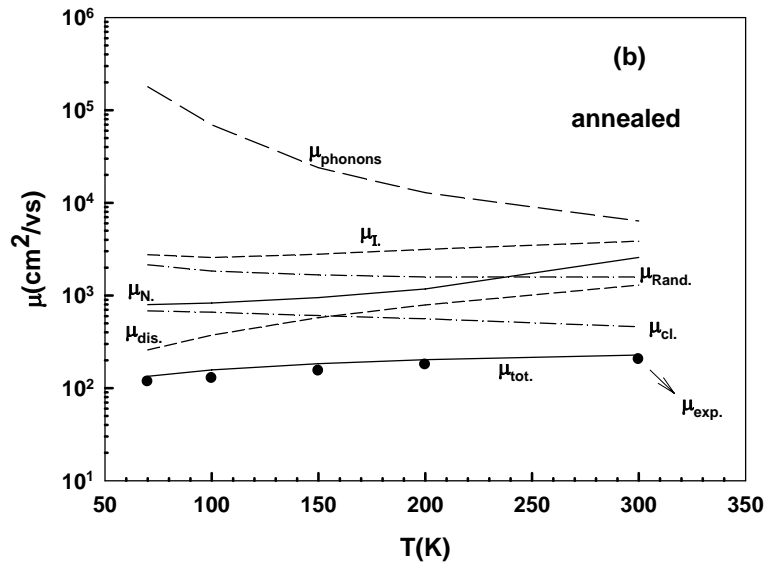
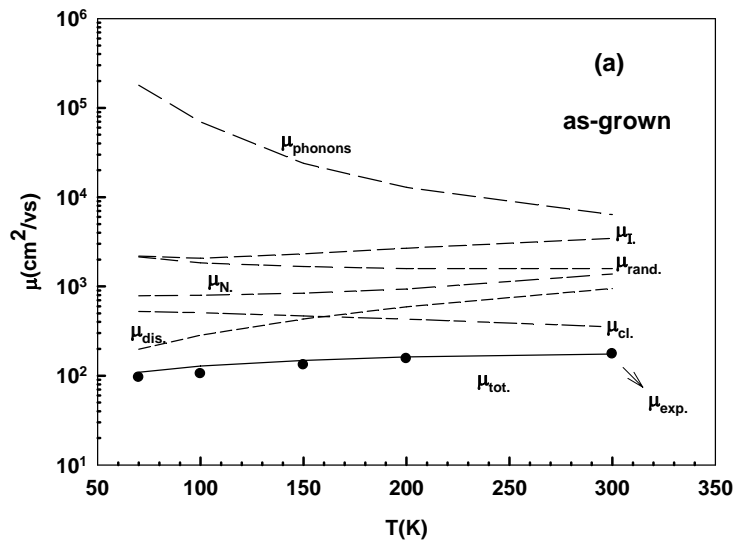


شکل ۴-۳: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی $\text{GaN}_{0.8}\text{As}_{0.2}$ (a) تازه رشد یافته (b) بازپخت شده

جدول ۴-۵: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_{1-x}\text{As}_x$ ($x = 1/7$ %).

حرف a نشان دهنده نمونه های بازیخت شده می باشد.

X	۰/۰۱۷	۰/۰۱۷(a)
$N_{\text{dis}}(\text{cm}^{-2})$	7×10^9	$5/5 \times 10^9$

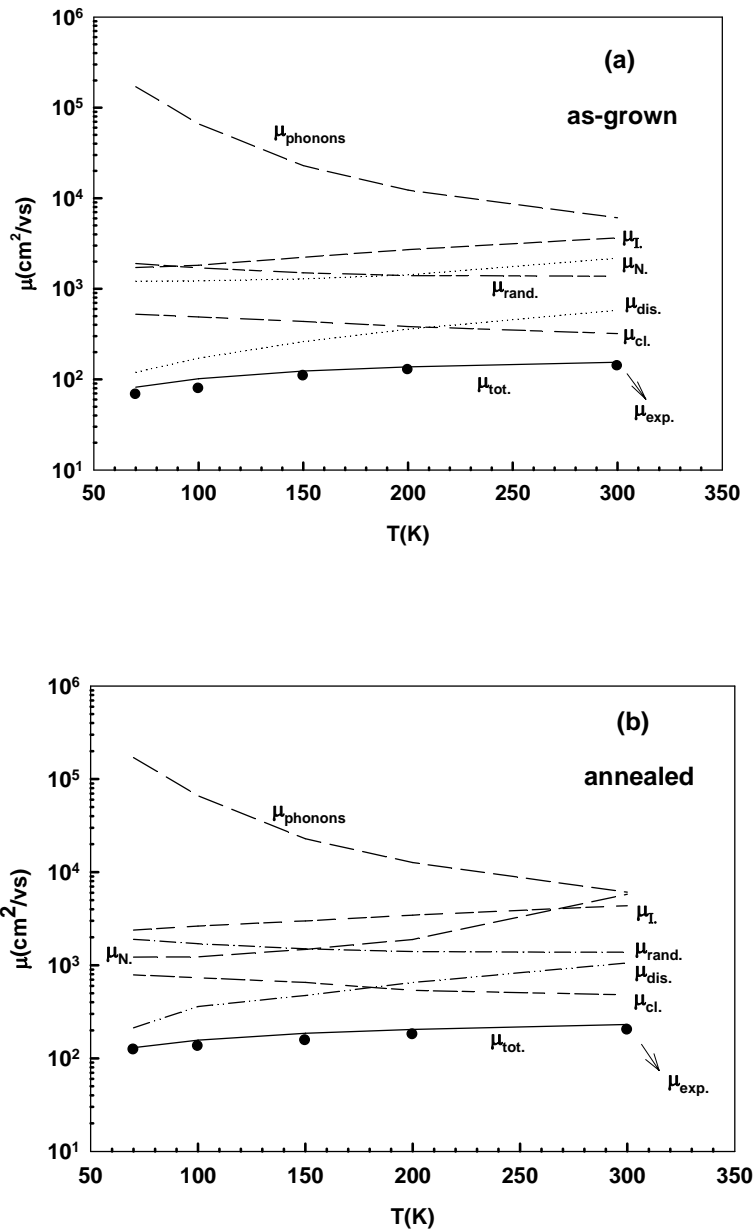


شکل ۴-۴: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی $\text{GaN}_{1-0.17}\text{As}_{0.17}$ (a) تازه رشد یافته (b) بازیخت شده.

جدول ۴-۶: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_{0.78}\text{As}_{0.22}$ ($x=2/2\%$)

حرف a نشان دهنده نمونه های بازپخت شده می باشد.

x	۰/۰۲۲	۰/۰۲۲(a)
$N_{\text{dis}}(\text{cm}^{-2})$	8×10^9	6×10^9



شکل ۴-۵: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی $\text{GaN}_{0.78}\text{As}_{0.22}$ (a) تازه رشد یافته (b) بازپخت شده

با افزایش درصد نیتروژن به ۱/۷ درصد، همانطور که در شکل ۴-۴ دیده می‌شود سهم پراکندگی حاصل از دررفتگی‌ها افزایش یافته است. این امر را می‌توان به دلیل اختلاف اندازه‌ی اتم‌های As و N دانست که با افزایش درصد نیتروژن این اختلاف سبب ایجاد دررفتگی‌های بیشتری در نمونه می‌گردد. چنانکه در این نمونه‌ها با افزایش درصد نیتروژن از ۰/۸ به ۱/۷٪ تراکم دررفتگی‌ها از $1 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ به $7 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ افزایش یافته است. در این نمونه سازوکارهای اصلی محدود کننده تحرک الکترونی در شرایط قبل از بازپخت سازوکارهای پراکندگی خوشه‌ای و دررفتگی‌ها هستند که پس از بازپخت به ترتیب ۳۰ و ۳۵ درصد کاهش یافته‌اند.

در نمونه با کسر مولی نیتروژن ۲/۲ درصد، با افزایش درصد نیتروژن، همانند قسمت قبل تراکم دررفتگی‌ها افزایش یافته، به طوری که به $8 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ می‌رسد. در این نمونه سهم سازوکارهای اصلی محدود کننده الکترونی، پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای و دررفتگی‌ها، پس از بازپخت ۵۰ و ۲۵ درصد کاهش یافته است.

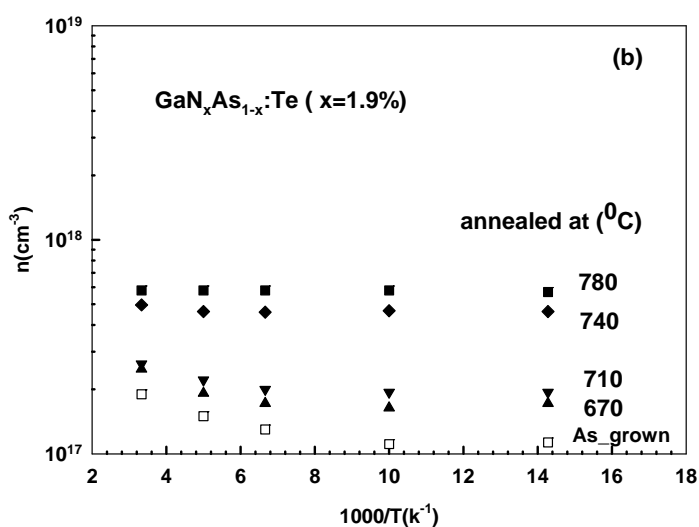
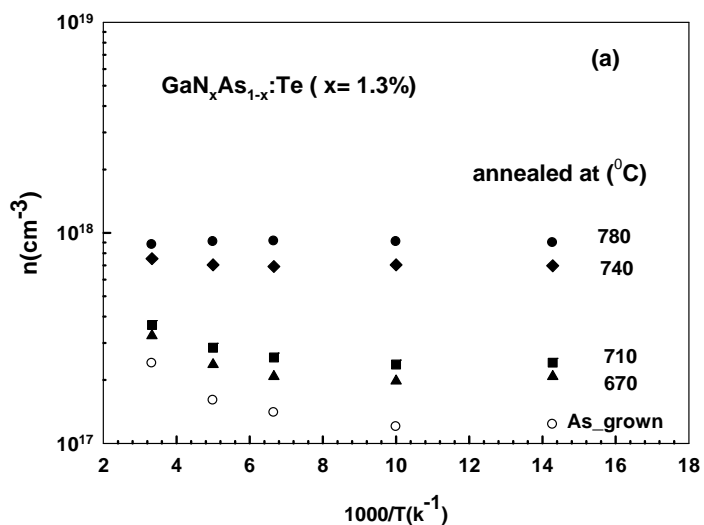
بنابراین در همه نمونه‌ها بازپخت سریع سبب کاهش توزیع خوشه‌ای نیتروژن‌ها و دررفتگی‌های موجود در نمونه و افزایش توزیع کتره‌ای نیتروژن‌ها شده و به بهبود تحرک الکترونیکی نمونه‌ها می‌انجامد.

۳-۴ اثر بازپخت بر خواص ترابری الکتریکی در نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}:\text{Te}$ (x= ۱/۳ و ۱/۷٪)

۱-۳-۴ تحلیل داده‌های وابسته به تراکم الکترونی

شکل ۴-۶ داده‌های تجربی گروه تحقیقاتی جین و آکولا [۸۴ و ۸۵] در مورد وابستگی دمایی تراکم الکترونیکی را در ترکیب $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}:\text{Te}$ به ازای کسرهای مولی نیتروژن ۱/۳ و ۱/۷ درصد در شرایط تازه رشد یافته و بازپخت شده در دماهای مختلف (۶۷۰، ۷۱۰، ۷۴۰ و 780°C) نشان می‌دهد. این

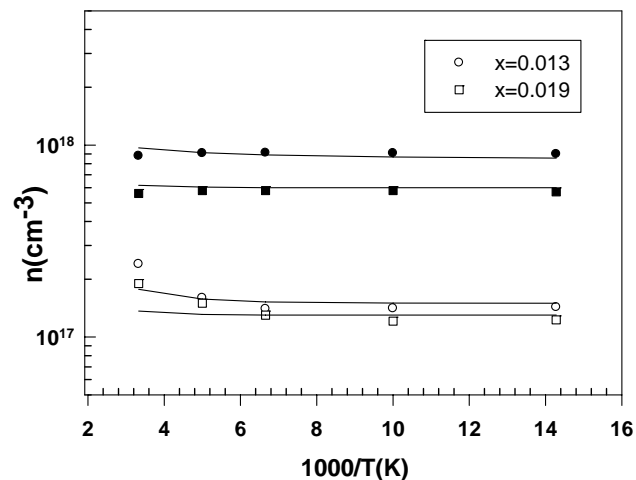
نمونه ها به روش روآرستی باریکه ی مولکولی (MBE) در دمای 400°C رشد داده شده‌اند. در این نمونه ها از Te به عنوان مادهی آلاینده نوع n به میزان $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ استفاده شده است. پس از رشد لایه ها عملیات بازپخت حرارتی سریع از 650°C تا 800°C به مدت ۶۰ ثانیه در حضور گاز N_2 انجام شده است.



شکل ۴-۶: داده های تجربی مربوط به وابستگی دمایی تراکم الکترونی در نمونه های $\text{GaN}_{0.13}\text{As}_{0.987}:\text{Te}$ (a) و $\text{GaN}_{0.19}\text{As}_{0.981}:\text{Te}$ (b) [۸۴ و ۸۵].

چنانکه مشاهده می‌شود در نمونه‌های تازه رشد یافته وابستگی دمایی تراکم حامل‌ها برخلاف دماهای بالا ($T > 150\text{K}$) در دماهای پایین‌تر بسیار کم بوده و با انجام بازپخت سریع و افزایش دمای آن تراکم الکترونی رو به فزونی گذارده لکن وابستگی دمایی آنها کم و کمتر می‌شود. هم‌چنین از مقایسه‌ی تراکم حامل‌ها در این دو نمونه می‌توان دریافت که نمونه با کسر مولی نیتروژنی کمتر از تراکم الکترونی بالاتری برخوردار است. این امر می‌تواند به علت کمتر بودن تراکم تله‌های الکترونی در نمونه با کسر مولی نیتروژن پایین‌تر باشد.

به منظور بررسی و علت‌یابی تغییر داده‌ها به لحاظ مقداری و رفتار دمایی‌شان قبل و پس از بازپخت از معادله خنثایی بار (۳-۱۹) استفاده کرده‌ایم. در این محاسبات جرم مؤثر الکترونی را برابر مقدار تقریبی $0.1 m_0$ قرار داده و کمیت‌های N_t (تراکم اتم‌های نیتروژن دهنده)، E_t (انرژی فعال‌سازی)، N_a (تراکم اتم‌های پذیرنده (تله‌های الکترونی)) و N_d (تراکم ماده‌ی آلاینده‌ی دهنده مؤثر) را به عنوان پارامترهای برازشی مورد استفاده قرار داده‌ایم. نتایج بررسی ما در شکل ۴-۶ ارائه شده است. در این شکل داده‌های توخالی مربوط به نمونه‌های تازه رشد یافته و داده‌های توپر مربوط به نمونه‌های بازپخت شده (در دمای 780°C) است. نتایج حاصل از پارامترهای برازشی در جدول ۴-۷ آمده است.



شکل ۴-۷: نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تراکم الکترونی برای نمونه‌های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 1/3$ و $1/9$ %).

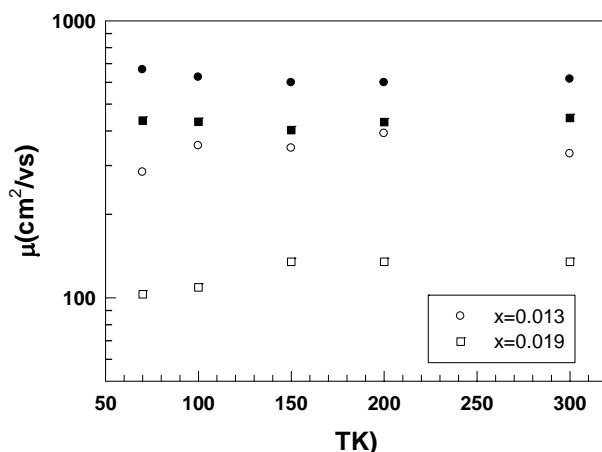
جدول ۴-۷: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}\text{:Te}$ ($x=1/3$ و $1/9$ %).
(a) نشان دهنده نمونه های بازپخت شده است.

x	$E_t(\text{meV})$	$N_t(\text{cm}^{-3})$	$N_a(\text{cm}^{-3})$	\emptyset
۰/۱۳	۱۰۰	1×10^{17}	$8/5 \times 10^{17}$	۰/۷۷
۰/۱۳(a)	۳۰	$1/2 \times 10^{17}$	$1/5 \times 10^{17}$	۰/۱۳
۰/۱۹	۱۵۰	$0/4 \times 10^{17}$	$8/7 \times 10^{17}$	۰/۸۳
۰/۱۹(a)	۱۱۰	$0/5 \times 10^{17}$	4×10^{17}	۰/۳۸

چنانچه دیده می شود بین داده های تجربی و نتیجه ی محاسبات ما انطباق خوبی برقرار است. وقتی GaNAs را با عناصر گروه ۶ مانند Te آرایش می دهیم این عناصر با نیتروژن پیوند برقرار نمی کنند [۳۶]، بلکه به عنوان ترازهای کم عمق در نمونه عمل می کنند. با افزایش درصد نیتروژن از $1/3$ به $1/9$ درصد در حالت تازه رشد داده تراکم الکترونی از $2/4 \times 10^{17}$ به $1/9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ کاهش یافته است. علت این امر این است که با افزایش درصد نیتروژن تعداد نیتروژن هایی که حالت درون شبکه ای و در نتیجه نقش پذیرنده دارند [۷۴] افزایش یافته، و همچنین تراکم اتم های نیتروژن دهنده کاهش و تراز انرژی مربوط به آنها از حالت کم عمق به عمیق رسیده است. با انجام عملیات بازپخت سریع به دلیل توزیع کتره ای بیشتر در نمونه و کاهش نیتروژن های درون شبکه ای و در نتیجه کاهش تله های الکترونی و همچنین کم عمق شدن تراز انرژی مربوط به اتم های دهنده، تراکم الکترونی در ماده افزایش می یابد، به طوری که در دمای اتاق در نمونه ی $1/3$ % به $8/78 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ و در نمونه - ی $1/9$ % به $5/6 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ می رسد.

۲-۳-۴ تحلیل داده های وابسته به تحرک الکترونی

شکل (۸-۴) داده های تجربی مربوط به نحوه تغییرات تحرک الکترونی بر حسب دما را در این نمونه ها قبل و بعد از بازپخت سریع نشان می دهد. چنانچه ملاحظه می شود در این نمونه ها تحرک الکترونی نیز همانند تراکم با افزایش کسر مولی نیتروژن کاهش و با انجام عملیات بازپخت سریع افزایش یافته است. همچنین نمونه های بازپخت شده از وابستگی دمایی کمتری برخوردارند.



شکل ۸-۴: داده های تجربی یوجین و آکولا مربوط به وابستگی دمایی تحرک الکترونی نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ ($x = 1/3$ و $1/9$ %). (۸۴ و ۸۵)

برای بررسی بستگی دمایی تحرک الکترونی در این نمونه ها متناظر با بخش قبل عمل کرده ایم. نتیجه ی محاسبات ما که حاصل در نظریه ی تاثیر سازوکارهای مختلف پراکندگی است در شکل های ۹-۴ و ۱۰-۴ به همراه مقادیر N_{dis} به عنوان پارامترهای برازشی (جدول ۸-۴) نشان داده شده است.

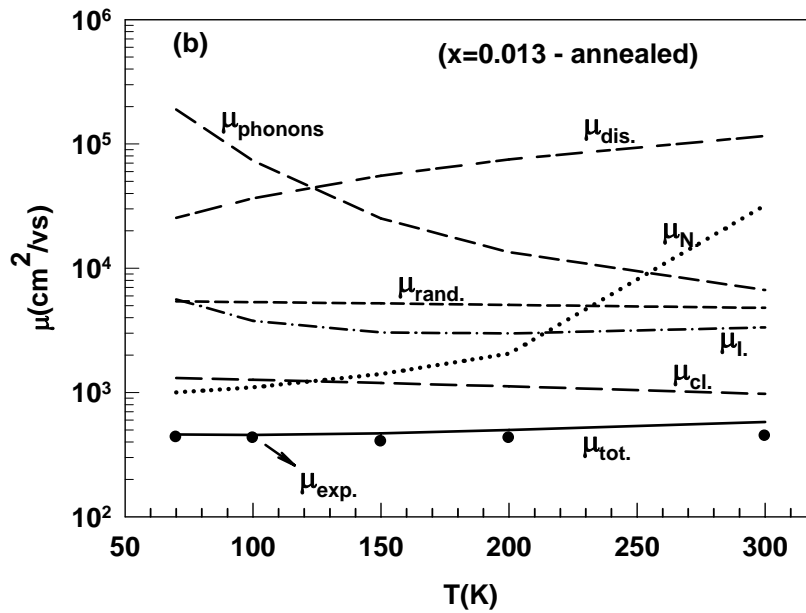
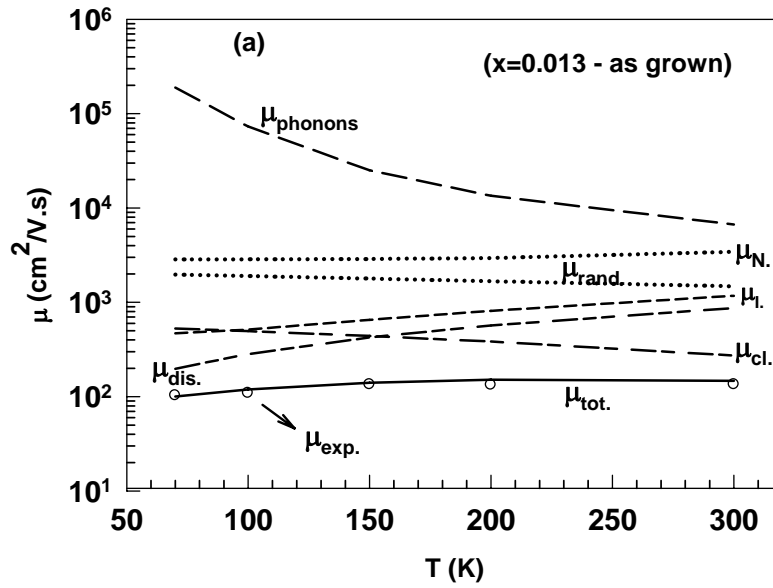
جدول ۸-۴: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}\cdot\text{Te}$ ($x = 1/3$ و $1/9$ %).

(a) نشان دهنده نمونه های بازپخت شده است.

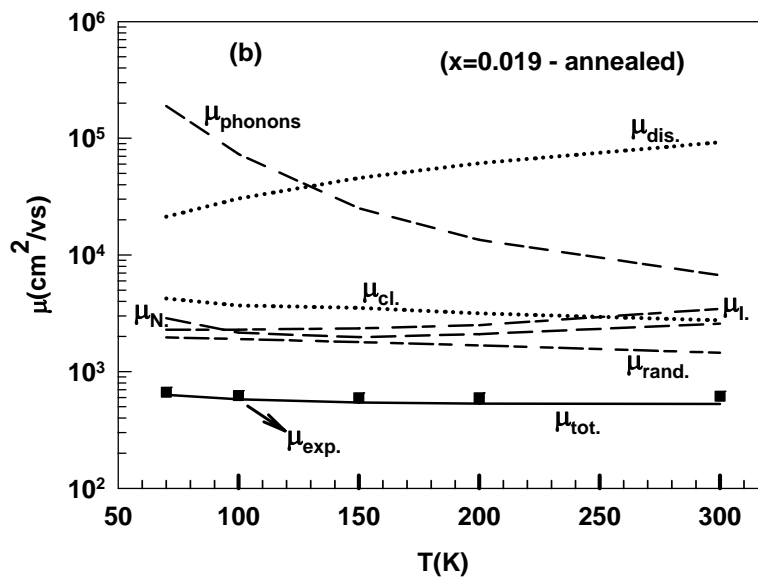
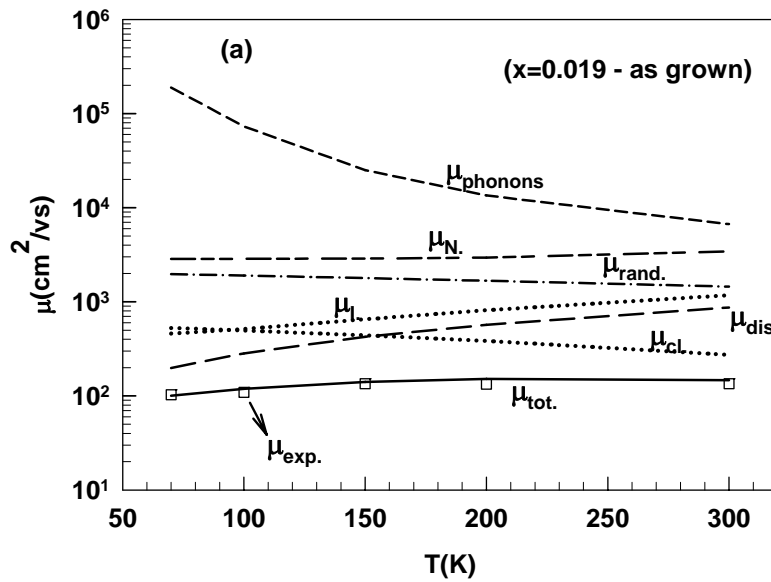
x	۰/۰۱۳	۰/۰۱۳(a)	۰/۰۱۹	۰/۰۱۹(a)
$N_{dis}(\text{cm}^{-2})$	$۰/۳ \times ۱۰^۹$	$۰/۱ \times ۱۰^۹$	۵×۱۰^۹	$۰/۱ \times ۱۰^۹$

در نمونه $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}\text{:Te}$ ($x = 0.13$) با توجه به موقعیت قرارگیری منحنی‌های وابسته به سازوکارهای مختلف پراکندگی در شکل ۴-۹-۴ می‌توان دریافت پراکندگی‌های ناشی از دررفتگی‌ها، ناخالصی یونیده در دماهای پایین و آلیاژ خوشه‌ای در محدوده دمای بالا نقش اصلی را در کنترل تحرک الکترون‌ها بر عهده دارند. با مقایسه این نتایج با شکل ۴-۹-۴ b ملاحظه می‌شود که تاثیر پراکندگی‌های مربوط به دررفتگی‌ها بسیار کم و پراکندگی وابسته به ناخالصی‌های خنثی جایگزین آن گردیده است، که با توجه به کاهش تراکم دررفتگی‌های موجود در نمونه از $3 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$ به $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-2}$ ، افزایش توزیع کتره‌ای، افزایش اتم‌های دهنده و کاهش اتم‌های پذیرنده موجود در نمونه امری قابل انتظار است.

در نمونه $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}\text{:Te}$ ($x = 0.19$)، با مقایسه مقادیر N_{dis} در این نمونه و نمونه قبل ملاحظه می‌شود که میزان تراکم دررفتگی‌ها از $0.3 \times 10^{19} \text{cm}^{-2}$ به $5 \times 10^9 \text{cm}^{-2}$ تغییر پیدا کرده است. همچنین تراکم اتم‌های پذیرنده و در نتیجه تله‌های الکترونی به دلیل اختلاف الکترونگاتیوی اتم‌های As و N زیاد می‌شود. در نتیجه‌ی این تغییرات سازوکار اصلی پراکندگی را سازوکارهای پراکندگی حاصل از دررفتگی‌ها و خوشه‌های نیتروژنی تشکیل می‌دهد که پس از بازپخت با منظم شدن شبکه و توزیع کتره‌ای اتم‌های نیتروژن از تاثیر این سازوکارها کاسته شده و سازوکار اصلی مربوط به پراکندگی آلیاژ کتره‌ای است. در این مورد کاهش سهم پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای ۸ برابر است. بنابراین انجام عمل بازپخت سریع باعث می‌شود که اتم‌های درون شبکه‌ای در جایگاه‌های شبکه قرار گیرند و خوشه‌های نیتروژنی موجود در نمونه کمتر شده و توزیع کتره‌ای حاصل شده و در نتیجه تحرک حامل‌ها بهبود یابد.



شکل ۴-۹: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه $\text{GaN}_{0.987}\text{As}_{0.013}$ (a) تازه رشد یافته (b) بازپخت شده.



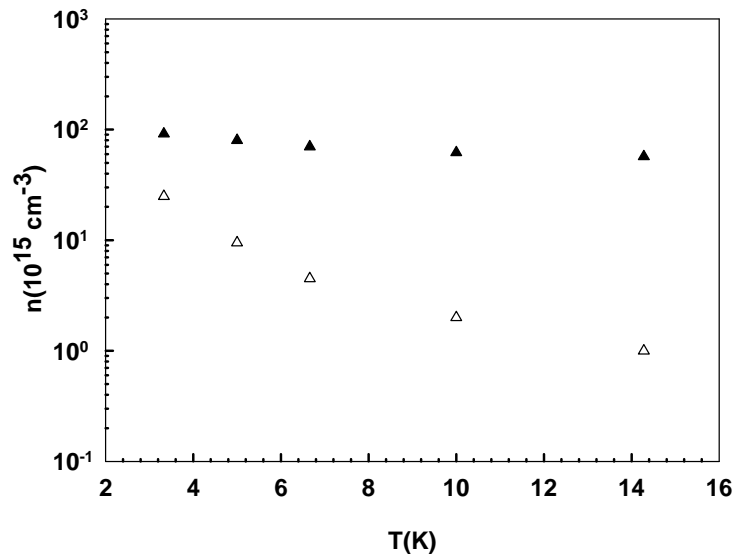
شکل ۴-۱۰: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی $\text{GaN}_{0.981}\text{As}_{0.019}$ (a) تازه رشد یافته (b) بازپخت شده.

۴-۴: اثر بازپخت بر تراکم الکترونی در نمونه ایندیم دار (InGaNAs)

در بخش های قبل به بررسی تاثیر بازپخت روی نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}$ پرداختیم. در این بخش به مطالعه اثر بازپخت بر ترکیب ایندیم دار این ماده یعنی InGaNAs به طور خاص به صورت

In_{0.1}Ga_{0.93}N_{0.2}As_{0.98} که توسط کورتز و همکاران [۸۶] رشد داده شده است می پردازیم. با این کار تاثیر حضور اتم های ایندیم در ماده مورد بحث ما یعنی GaNAS بهتر مشخص می شود. این نمونه که به روش روآراستی باریکه ی مولکولی در دمای ۴۳۰ °C روی زیر لایه GaAs رشد یافته از آرایش خواسته برخوردار نمی باشد. در این نمونه عملیات بازپخت سریع در دمای ۹۰۰ °C به مدت ۱۰s صورت گرفته است.

شکل ۴-۱۱ داده های تجربی مربوط به وابستگی دمایی تراکم حامل ها را قبل و پس از بازپخت نشان می دهد. داده های توخالی نمونه های تازه رشد یافته و داده های توپر نمونه های بازپخت شده را نشان می دهند. همان طور که پیداست پس از بازپخت تراکم الکترونی افزایش یافته و بستگی دمایی آن کاهش یافته است.

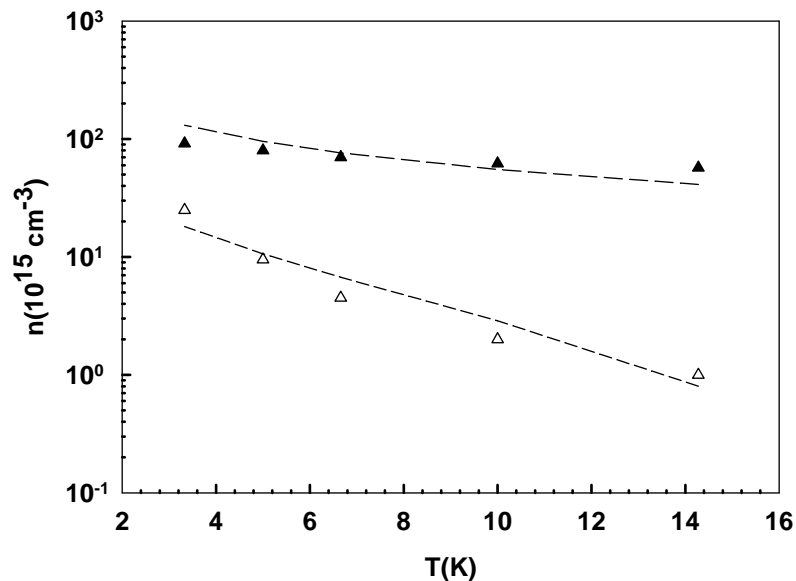


شکل ۴-۱۱: داده های تجربی کورتز و همکارانش مربوط به وابستگی دمایی تراکم الکترونی نمونه $[\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.93}\text{N}_{0.2}\text{As}_{0.98}]$.

برای بررسی اثر بازپخت روی تراکم الکترونی این نمونه معادله ی خنثایی بار را طبق معادله ی ۳-۱۹ به کار برده ایم. هم چنین کمیت های برازشی همانند قسمت های قبل به کار برده شده اند. نتیجه ی محاسبات ما در شکل ۴-۱۲ و پارامترهای برازشی در جدول ۴-۹ آمده است. نتیجه ی

محاسبات گویای آن است که عملیات بازپخت سریع سبب شده است که تراکم نیتروژن های درون شبکه ای که نقش پذیرنده دارند و در نتیجه تراکم تله های الکترونی در نمونه پس از بازپخت کاهش پیدا کند و این نیتروژن ها در جایگاههای شبکه قرار گیرند. هم چنین عملیات بازپخت حرارتی سریع سبب افزایش نیتروژن های دهنده در نمونه و تبدیل شدن تراز انرژی آنها از حالت عمیق به کم عمق می گردد. نتیجه ی این تغییرات بهبود تراکم الکتریکی حامل ها در نمونه خواهد بود.

نکته جالب توجه آن که در این نمونه تراکم تله های الکترونی (نیتروژن های پذیرنده) و نیز تراز اتم های نیتروژن دهنده به دلیل حضور ایندیم نسبت به نمونه های قبل بسیار پایین است.



شکل ۴-۱۲: نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تراکم الکترونی

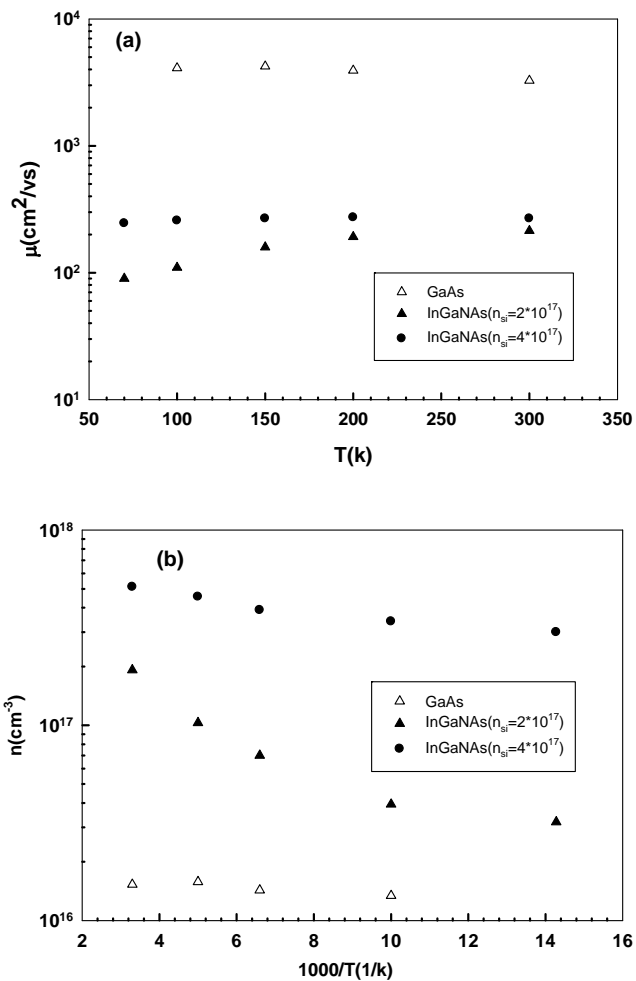
برای نمونه $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.93}\text{N}_{0.2}\text{As}_{0.98}$

جدول ۴-۹: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه $\text{In}_{0.7}\text{Ga}_{0.93}\text{N}_{0.2}\text{As}_{0.98}$

نمونه	$E_t(\text{meV})$	$N_t(\text{cm}^{-3})$	$N_a(\text{cm}^{-3})$
تازه رشد یافته	۲۰	2×10^{15}	1×10^{15}
بازپخت شده	۱	$4/5 \times 10^{16}$	1×10^{14}

۴-۵- بررسی خواص ترابری الکتریکی در نمونه آلیش شده (InGaNAS:Si) InGaNAS

در این بخش به بررسی تاثیر میزان آلیش بر خواص ترابری الکتریکی نمونه (In)GaNAS:Si می پردازیم.



شکل ۴-۱۳: داده های تجربی ای میاشیتا مربوط به وابستگی دمایی (a) تراکم (b) تحرک الکترونی نمونه های GaAs و InGaNAS [۸۷].

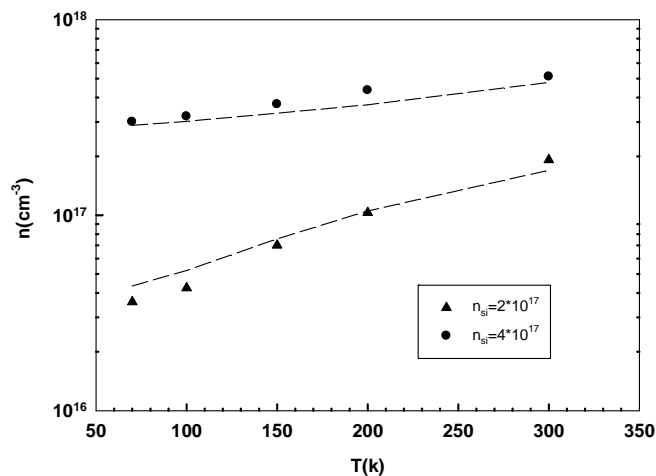
شکل ۴-۱۳ داده های تجربی میاشیتا و همکاران [۸۷] مربوط به وابستگی دمایی ترابری حامل ها

را برای نمونه های GaAs و $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}_{0.01}\text{As}_{0.99}\text{Si}$ ($x = 0.3$ و 0.6) با میزان آلیش متفاوت در

بازه‌ی دمایی ۷۰ تا ۳۰۰ کلوین نشان می‌دهد. این نمونه‌ها به روش رو آراستی باریکه مولکولی (MBE) روی زیر لایه ی GaAs در دمای 480°C رشد یافته و دارای آرایش نوع n با ماده آلاینده‌ی Si به مقدار 2×10^{17} و $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ می‌باشند. داده‌های مثلث توخالی مربوط به نمونه GaAs و داده‌های مثلث و مربع توپر به ترتیب مربوط به نمونه‌ها با میزان آرایش 2×10^{17} و $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ می‌باشند.

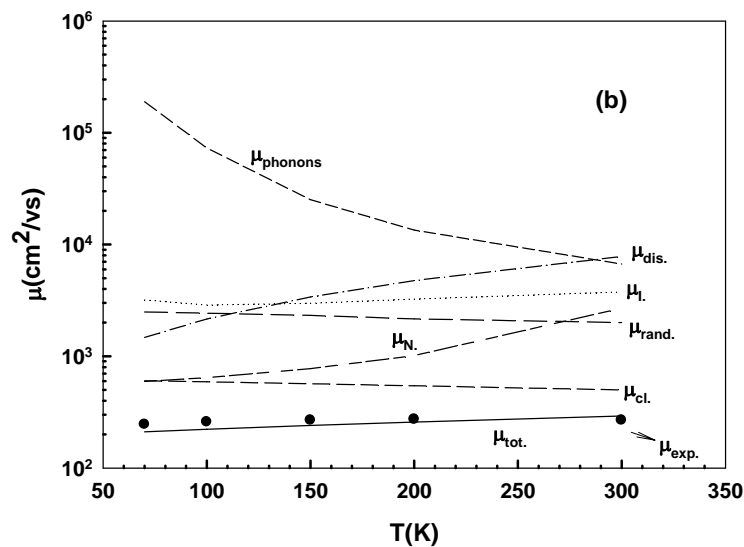
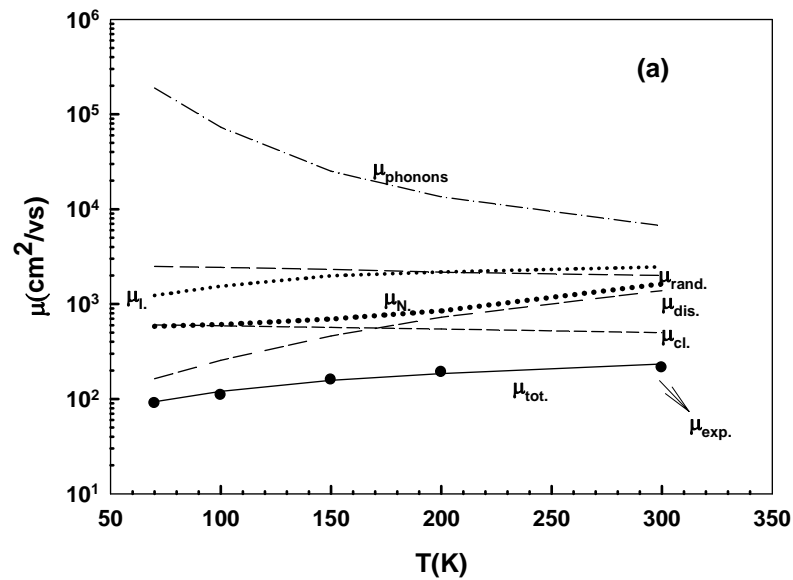
چنانچه ملاحظه می‌شود نمونه‌های نیتروژن دار رقیق نسبت به نمونه GaAs دارای تراکم و تحرک الکتریکی پایین‌تری هستند. هم‌چنین با افزایش میزان آرایش نمونه از 2×10^{17} به $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ تراکم و تحرک الکتریکی افزایش یافته و وابستگی دمایی ترابری الکتریکی کاسته شده است.

به منظور یافتن دلیلی برای این پدیده طبق معادله ی ۳-۱۹ به بررسی نظری تراکم حامل‌ها پرداخته ایم. پارامترهای برازشی همانند قسمت‌های قبل به کار برده شده و نتایج به دست آمده در شکل ۴-۱۴ و پارامترهای برازشی در جدول ۴-۱۰ آمده است.



شکل ۴-۱۴: نتایج بررسی نظری وابستگی دمایی تراکم الکترونی برای نمونه‌های InGaAs:Si با میزان آرایش 2×10^{17} و $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

نتایج به دست آمده حاکی از آن است که با افزایش میزان آلاینش، اتم های Si افزوده شده با نیتروژن های پذیرنده ی موجود در نمونه پیوند برقرار کرده و در نتیجه تراکم اتم های پذیرنده ی موجود در نمونه کاهش یافته است، همچنین از تراکم دررفتگی های موجود در نمونه کاسته شده و تراز نیتروژن های دهنده از حالت عمیق به کم عمق تبدیل شده است.



شکل ۴-۱۵: نتایج بررسی نظری تحرک الکترونی در نمونه ی InGaNAS با میزان آلاینش $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (a) $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (b)

جدول ۴-۱۰: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی InGaNaS

	$E_t(\text{mev})$	$N_t(\text{cm}^{-3})$	$N_d(\text{cm}^{-3})$	$N_a(\text{cm}^{-3})$
InGaNaS	۴۰	۲×10^{17}	۲×10^{17}	$۱/۶ \times 10^{17}$
InGaNaS	۳۰	۲×10^{17}	۴×10^{17}	$۱/۲ \times 10^{17}$

شکل ۴-۱۵ نتیجه‌ی محاسبات ما را در مورد وابستگی دمایی تحرک حامل‌ها براساس قاعده‌ی ماتیسن (معادله ۳-۲۵) برای این نمونه‌ها نشان می‌دهد. همچنین پارامترهای برازشی گرفته شده در جدول ۴-۱۱ آمده است. نتیجه‌ی محاسبات نشان دهنده این است که با افزایش میزان آلاینش در نمونه تراکم دررفتگی‌های موجود در نمونه ۷۰٪ کاهش یافته و سهم سازوکار پراکندگی حاصل از دررفتگی‌ها و آلیاژ خوشه‌ای کاسته شده است.

جدول ۴-۱۱: پارامترهای برازشی محاسبه شده در نمونه ی InGaNaS

N_d	۲×10^{17}	۴×10^{17}
$N_{\text{dis}}(\text{cm}^{-2})$	$۳/۵ \times 10^9$	۱×10^9

۴-۶: تاثیر هیدروژن دهی در نمونه InGaNaS آلاینش یافته با اتم های Te

در فصل ۲ گفته شد که افزودن هیدروژن به نمونه (In)GaNaS بدون آلاینش خواسته با تشکیل کمپلکس‌های تک هیدروژنه NH_{BC}^+ و دو هیدروژنه $\text{NH}_2^*(\alpha)$ سبب افزایش گاف نواری و بهبود خواص ترابری الکتریکی (افزایش تراکم و تحرک الکترونی) نمونه می‌گردد. جدول ۴-۱۲ تراکم الکتریکی چند نمونه را در حالت‌های قبل و بعد از هیدروژندهی نشان می‌دهد [۸۸]. این نمونه‌ها به روش MOVPE روی زیر لایه GaAs رشد داده شده‌اند. در این نمونه‌ها از Te به عنوان ماده آلاینده استفاده شده است.

جدول ۴-۱۲: تراکم الکترونی نمونه های $\text{Ga}_{0.934}\text{In}_{0.066}\text{N}_{0.023}\text{As}_{0.977}\text{Te}$ قبل و پس از هیدروژن دهی [۸۸]

نمونه	$n(280\text{ K})$	$n(280\text{ K}) / \text{hydrogenated}$
۱	4×10^{17}	$1/2 \times 10^{17}$
۲	$2/4 \times 10^{18}$	$9/8 \times 10^{16}$
۳	$2/2 \times 10^{19}$	$1/2 \times 10^{17}$

همانطور که در جدول مشاهده می شود با انجام عمل هیدروژندهی بر خلاف نمونه بدون آلیش تراکم الکترونی نمونه ها کاهش یافته است. علت این امر این است که هیدروژن اضافه شده به نمونه با اتم های Te پیوند برقرار کرده و آنها را غیر فعال ساخته و در پی آن تراکم الکترونی نمونه ها کاهش یافته است.

۴-۷: تاثیر بازپخت بر نمونه **InGaNAs** هیدروژن دهی شده در حالت های بدون

آلیش، آلیش سبک و سنگین

همانطور که در فصل ۲ گفته شد اتم هیدروژن در نمونه (In)GaNAs بدون آلیش خواسته به عنوان یک دهنده الکترون رفتار می کند، بنابراین نمونه تازه رشد یافته دارای آلیش ناخواسته نوع n است. اندازه گیری تراکم الکترونی نمونه $\text{Ga}_{0.924}\text{In}_{0.076}\text{N}_{0.030}\text{As}_{0.970}$ که به روش GSMBE رشد داده شده و ماده پایه آن GaAs بوده نشان می دهد که این نمونه در حالت تازه رشد یافته دارای آلیش ناخواسته نوع n بوده و مقدار تراکم الکترونی آن $6/9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ می باشد، اما پس از عملیات بازپخت حرارتی سریع نمونه به حالت p-type تبدیل شده و از تراکم الکترونی $5/7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ برخوردار است [۸۹]. دلیل این امر این است که عملیات بازپخت حرارتی سریع سبب شکسته شدن کمپلکس های تک و دو هیدروژنه شده و در نتیجه تله های الکترونی ناشی از اتم های نیتروژن افزایش می یابند.

جدول ۴-۱۳: نتایج اندازه گیری اثر هال در نمونه $\text{Ga}_{0.924}\text{In}_{0.076}\text{N}_{0.030}\text{As}_{0.970}$ آلیس یافته نوع n

قبل و پس از بازپخت. (a نمونه های بازپخت شده را نشان می دهد.) [۸۹]

نمونه	تراکم Si (cm^{-3})	مقاومت الکترونی (Ωcm)	تراکم الکترونی (cm^{-3})	تحرك الکترونی ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)
۱	5×10^{17}	۰/۴۰	1×10^{17}	۱۵۷
۱(a)	5×10^{17}	۰/۵۷	$5/8 \times 10^{16}$	۱۹۱
۲	1×10^{18}	۳/۴	$1/8 \times 10^{16}$	۱۰۱
۲(a)	1×10^{18}	۰/۲۲	$1/1 \times 10^{17}$	۲۴۶
۳	5×10^{18}	۰/۰۲۲	$1/7 \times 10^{18}$	۱۶۷
۳(a)	5×10^{18}	۰/۰۱۶	$2/1 \times 10^{18}$	۱۹۶

جدول ۴-۱۳ مقادیر مربوط به ترابری الکتريکی $\text{Ga}_{0.924}\text{In}_{0.076}\text{N}_{0.030}\text{As}_{0.970}$ آلیس یافته با Si را قبل و پس از بازپخت نشان می دهد [۸۹]. این نمونه ها به روش GSMBE رشد داده شده اند و ماده پایه آنها GaAs بوده است. داده های این جدول را می توان به دو بخش آلیس سبک و سنگین تقسیم کرد. در مورد تحرك الکترونی در هر ۲ مورد عملیات بازپخت سریع سبب کاهش دررفتگی ها و خوشه های نیتروژنی و بهبود تحرك حامل ها می گردد. در مورد تراکم الکترونی در حالت آلیس سبک (5×10^{17}) تراکم الکترونی نمونه پایین است. دلیل این امر این است که بعضی از هیدروژن های موجود در نمونه در نقش پذیرنده ظاهر شده و سبب غیر فعال شدن اتم های آلاینده (Si) دهنده می شوند و نیز بعضی از هیدروژن ها در نقش دهنده ظاهر شده و چنانچه در فصل ۲ گفته شد با تشکیل کمپلکس هایی سبب غیر فعال شدن نیتروژن های پذیرنده می گردند. رقابت بین این ۲ عامل سبب پایین بودن تراکم الکترونی این نمونه می گردد. پس از عملیات بازپخت مشاهده می شود که تراکم الکترونی کاهش یافته است، زیرا پس از بازپخت از هیدروژن های دهنده موجود در نمونه کاسته شده و غیر فعال شدن نیتروژن های پذیرنده کمتر شده است و در نتیجه تراکم الکترونی نمونه پایین تر

می باشد. اما در حالت آلاینش سنگین ($n_{Si} > 1 \times 10^{18}$) سیلیکون های موجود در نمونه زیاد بوده و سبب غیر فعال شدن تمام هیدروژن های پذیرنده می شوند، بنابراین پس از بازیخت به دلیل از بین رفتن تله های الکترونی تراکم الکتریکی زیاد می شود.

نتیجه گیری:

در سال‌های اخیر مطالعه روی خواص اپتوالکتریکی نیمرساناهای مرکب (III-N-V) با درصد نیتروژن پایین (کمتر از ۵ درصد) به دلیل کاربرد های فراوان آنها در قطعات گوناگون مورد توجه بسیار قرار گرفته‌اند. ویژگی منحصر به فرد این مواد نیتروژندار رقیق، خمش بزرگ در گاف نواری آنهاست که در نیمرساناهای بدون نیتروژن مشاهده نشده است. داده‌های تجربی گویای کاهش تراکم و تحرک الکترونی با افزایش درصد نیتروژن در این نمونه هاست. همچنین عملیلت بازپخت سریع در این نمونه ها سبب افزایش تراکم و تحرک الکترونی آنها شده است.

محاسبات نظری ما در مورد تغییرات تراکم الکترونی در نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}:\text{Si}$ (۲/۲٪ و ۱/۷ ، $x = 0.8$) نشانگر آن است که در این نمونه‌ها بر اثر بازپخت سریع پیوندهای Si-N رو به افزایش می‌گذارد، که واکنشی در جهت غیر فعال سازی اتم های Si می‌باشد، از طرف دیگر سبب کاهش تله های الکترونی موجود در این نمونه‌ها و همچنین تغییر موضع تراز انرژی اتم‌های دهنده از حالت عمیق به کم عمق می‌گردد. نهایتاً این تغییرات رقابتی سبب افزایش تراکم الکترونی در نمونه‌ها می‌شود. تحلیل داده‌های مربوط به تحرک الکترونی این نمونه ها نشان می‌دهد که افزایش کسر مولی نیتروژن سبب افزایش تراکم دررفتگی ها و همچنین خوشه‌های نیتروژنی موجود در نمونه می‌گردد. بازپخت سریع سهم حاصل از پراکندگی آلیاژ خوشه‌ای و پراکندگی حاصل از دررفتگی ها را در نمونه های با کسر مولی نیتروژن ۰/۸، ۱/۷ و ۲/۲ درصد کاهش می‌دهد.

تحلیل داده‌های تراکم الکترونی وابسته به نمونه های $\text{GaN}_x\text{As}_{1-x}:\text{Te}$ (۱/۷٪ و ۱/۳ $x =$) گویای آن است که پس از بازپخت سریع تراکم تله های الکترونی کاهش و اتم های دهنده موثر افزایش یافته‌اند. همچنین افزایش درصد نیتروژن در این نمونه ها سبب افزایش تراکم نیتروژن های پذیرنده و در نتیجه تله‌های الکترونی شده است. تغییرات تحرک الکترونی در این نمونه ها به گونه ایست که پس

از بازپخت از تراکم دررفتگی ها و خوشه‌های نیتروژنی کاسته شده و توزیع اتم های نیتروژن به حالت کتره ای نزدیک شده است.

بررسی داده های تغییرات تراکم در نمونه ایندیم‌دار (InGaNAS) نشان می‌دهد که پس از بازپخت، تراکم تله های الکترونی در این نمونه ها کاهش می‌یابد. نتایج نشانگر آن است که این نمونه ها نسبت به نمونه های بدون ایندیم از تراکم تله ای پایین تری برخوردارند.

بررسی خواص ترابری الکتریکی در نمونه ی آلیش شده InGaNAS:Si گویای آن است که افزودن اتم های Si سبب افزایش تراکم تله های الکترونی در مقایسه با نمونه بدون آلیش با ضریبی در حدود 10^2 تا 10^3 شده است.

در مورد اثر هیدروژندهی در نمونه InGaNAS ملاحظه شده است که در نمونه بدون آلیش هیدروژن افزوده شده به صورت دهنده رفتار کرده و سبب افزایش تراکم و تحرک الکترونی می‌شود. اما در نمونه آلیش یافته با اتم‌های Te از آنجا که تعدادی از اتم‌های هیدروژن در نقش پذیرنده ظاهر می‌شوند و سبب غیرفعال شدن اتم‌های آلاینده Te می‌گردند تراکم الکترونی پس از هیدروژندهی کم می‌شود. بازپخت نمونه های هیدروژندهی شده InGaNAS در حالت بدون آلیش به دلیل شکسته شدن کمپلکس های تک و دو هیدروژنه و افزایش تله‌های الکترونی سبب تبدیل این نمونه ها به p-type و در نمونه‌های هیدروژندهی شده، با آلیش سبک با اتم های Si، در همین ماده به دلیل زیاد شدن پیوند اتم های آلاینده با اتم های H پذیرنده بر اثر بازپخت، این اتم ها غیر فعال شده و سبب کاهش تراکم الکترونی می‌شود. اما در نمونه های با آلیش سنگین به دلیل غیرفعال شدن تمام هیدروژن‌های پذیرنده، بازپخت سریع سبب کاهش تله‌های الکترونی وابسته به اتم های نیتروژن پذیرنده و افزایش تراکم می‌گردد.

- [1] E.Co.Young, *GaNAs and GaAs:Bi structural and electronic properties of two resonant state semiconductor alloys*, PHD thesis, University of British Columbia (2006).
- [2] A. Hashimoto, T. Yamaguchi, T. Suzuki, A. Yamamoto; J. Cryst. Growth **278** (2005) 532.
- [3] M.Adamcyke, *Epitaxial growth of dilute nitride-arsenide compound semiconductors by molecular beam epitaxial*, Phd thesis, University of British Columbia (2002).
- [4] C. W. Tu, W. M. Chen, I. A. Buyanova, J. S. Hwang: J. Cryst. Growth **228** (2006) 7.
- [5] G.Pozina, I.Ivano B. Monemar,J.V.Thordson, G.Anderson, J.Appl.**84** (1998) 3830.
- [6] I.A.Buyanova, M. Izadifard, W. M. Chen, A. Polimeni, M. Capizzi, H. P. Xin, and C. W. Tu, Phys. Lett. **82** (2003) 3662.
- [7] F.Dimroth, A. Howard, J. K. Shurtleff, and G. B. Stringfellow, J.Appl. Phys., **91** (2002) 3687.
- [8] S.Ahmed, J. LIN, A. Haq ,B. Sealy, Nucl.Instr. and Meth in Phys. Res. B **237** (2005)102.
- [9] H.F.Liu, N. Xiang, S. Tripathy and S.J. Chua ,Thin solid film **515** (2005) 759-763.
- [10] J.D. Perkins,A.Mascarenhas, Y. zhang, J. F. Geisz, D. J. Feriedman, J. M. Olson, sarah, R. Kurtz, Phys.Rev.Lett. **82** (1999) 3312.
- [11] J.Salzman, H.Temkin,Material Since and Engineering **B50** (1997) 148.
- [12] E.Strohm, *Optical and electrical properties of dilute nitride GaN_xAs_{1-x} alloys*, master of science thesis, University of British Colombia (2002).
- [13] T.Suzuki, T.Yammaguchi,Phys. Stat. Sol.(b),**7** (2003) 2769-2772.
- [14] J.F.Geisz, D.J.Friedman, J.Cryst. Growth **195** (1998) 401-408.
- [15] Y. Shimizu, N. Miyashita, Y. Mura, A. Uedono and Y. Okada , J.Cryst. Growth. **278** (2007) 301 579-582.
- [16] I.A.Buyanova, W.M.Chen.,Taylor& Francis Books. INC (2004).
- [17] K.Volz, J.Koch, B.Kurent,W.Stolz, J.Cryst. Growth. **284** (2003) 451-456.
- [18] Y.shimizu,N.kobayashi, J.Cryst. Growth.278 (2005) 553.
- [19] L.Ballaiche,A.Zunger,GaInAs alloys,Phys.Rev.B.**57** (1998) 4425-4431.
- [20] L.Ballaiche,Appl.Phys.Lett. **75** (1999) 2578.
- [21] M.Weyers,M.Sato,H.Ando, Jpn.J.Appl.Phys. **31** (1992) L853.
- [22]W.G.Bi,W.Tu, Appl.Phys.Lett. **70** (1997)1608.
- [23] M.Sato, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. **395** (1996) 285.
- [24] M. Kondow, K.Uomi, K.Hosomi, T.Mozume, Jpn.J.Appl.Phys.**33** (1994) L1056.
- [25] A.Gueddim, R. Zerdoum and N. Bouarissa, Jurnal of Phycics and Chemistry of Solid **67** (2006) 1618.
- [26] P.R.C. Kent, A.Zunger,Phys. Rev. B **64** (2001) 115208.
- [27] I.A.Buyanova, W.M.Chen., B.Monemar, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **6** (2001) 2.
- [28] S. Spasov, *Non-linear electron dynamics in dilute nitride alloys*, PHD Thesis, University of Nottingham (2009).
- [29] N.Balken, IEEE Proc. Optoelectron, **1** (2003) 150.
- [30] C. Skierbiszewski, S. P. epkowski, P. Perlin, T. Suski, W. Jantsch, J. F. Geisz: Physica E **13**, (2002) 1078.

- [31] Wei Li and Markus Pess, Phys. Rev. B. **64** (2003)113308.
- [32] A.Felk, B.J.Robinson, Appl. Phys. Lett. **78** (2001)1694-1696.
- [33] S.Kurtz, J.Webb, L.Gedvilas, D.Friedman, J.Geisz, J.Olson, R.King, D.Joslin and N.Karam, Appl. Phys. Lett. **78** (2001) 748.
- [34] H.P. Xin, C.W.Tu and M.Geva, Appl. Phys. Lett. **75** (1999)1416.
- [35] H.P. Xin, C.W.Tu and M.Geva, J.Vac. Sci. Technol. B **18** (2000)1476.
- [36] Y.jin,Y.He,H.Cheng,R.M.Jock, T.Dannecker, M.Reason, A.M.Minitor, C.Kurdak, J.L.Merz, R.S.Goldman, Appl. Phys. Lett. **95** (2009) 092109.
- [37] I. A. Buyavova, W. M. Chen, *Physics And Application Of Dilute Nitrides*, Taylor & Francis Books. INC (2004).
- [38] J. Singh, *Semiconductor Optoelectronics*, Mc-Graw Hill, Inc. (1995).
- [39] J. Salzman, H. Temkin,Material Siencce and Engineering B **50** (1997) 148.
- [40] H. P. Hjalmarson, Pvogl, D. J. Wolford, J. D. Dow, Phys. Rev. Lett. **44** (1980) 810.
- [41] J. Toivonen, T. Hakkariainen, M. Sopenan, H. Lipsanen, J. Cryst. Growth **221** (2000) 456.
- [42] I. A. Buyanova, W. M. Chen, B. Monemar, MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. **6** (2001) 2.
- [43] S. H. Wei, A. Zunger, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 664.
- [44] P. Vogl, Adv. Electron. Electron Phys. **62** (1984) 101.
- [45] A. Lindsay, E.P. O'Reilly, Physica E **434** (2003) 40-342.
- [46] W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager III, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, and Sarah R. Kurtz,Phys.Rev.Lett.**82** (1999) 1221.
- [47] J. Toivonen, *Growth and properties of GaNAs structures*, PhD Thesis, Helsinki University of Technology, Espoo, Finland (2003).
- [48] U. Tisch, E. Finkman, and J. Salzman, Appl. Phys. Lett. **81** (2002) 463.
- [49] C. Skierbiszewski, P. Perlin, P. Wisniewski, W. Knap, T. Suski, W. Walukiewicz, W. Shan, K. M. Yu, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, and J. M. Olson, Appl. Phys.Lett. **76** (2002)2409.
- [50] M. Sato, S. J. Pearton, GaN and related materials 32, Gordon and Breach Science Publishers, The Netherlands (1997).
- [51] S. Fahy, E. P. O'Reilly, Physica E **21** (2004) 881-885.
- [52] C. Skierbiszewski, et al.Phys.Rev. B. **V65**(2001) 035207.
- [53]P. N. Hai, W. M. Chen, I. A. Buyanova, H. P. Xin, C. W. Tu: Appl. Phys. Lett. **77** (2002) 1843.
- [54] S. K. Estreicher, Mat. Sci. Engr. Reports **14** (1995) 319.
- [55] S. Limpijumngong and C. G. Van de Walle, Phys. Stat. Sol. (b) **228** (2001) 303.
- [56] B. Clerjaud, D. Cote, W.-S. Hahn, A. Lebkiri, W. Ulrici, and D. Wasik, Phys. Rev. Lett. **77** (1996) 4930.
- [57] B. Clerjaud, D. Cote, W.-S. Hahn, A. Lebkiri, W. Ulrici, and D. Wasik, Phys. Stat. Sol. (a) **159** (1997) 121.
- [58] A.Janotti, Mat. Res. Soc., Symp. Proc. Vol. **813** (2004) @ Mater-ials Research Society.
- [59] J. Neugebauer and C. G. Van de Walle, Phys. Rev. Lett. **75** (1995) 452.
- [60] L. Pavesi and P. Giannozi, Phys. Rev. B **46** (1992) 4621.

- [61] S. H. Wei and A. Zunger, *Appl. Phys. Lett.* **72** (1998) 2011.
- [62] G. Baldassarri H. V., H. M. Bissiri, A. Polimeni, M. Capizzi, M. Fischer. M. Reinhardt, and A. Forchel, *Appl. Phys. Lett.* **78** (2001) 3472.
- [63] A. Polimeni, G. Baldassarri H. V., H. M. Bissiri, M. Capizzi, I M. Fischer, M. Reinhardt, and A. Forchel, *Phys. Rev. B* **63** (2001) 201304I.
- [64] A. Janotti, S. B. Zhang, and Su-Huai Wei, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 125506.
- [65] A. Janotti, S. B. Zhang, Su-Huai Wei, and C. G. van de Walle, *Phys. Rev. Lett.* **89** (2002) 86403.
- [66] A. Janotti, S. B. Zhang, Su-Huai Wei, and C. G. van de Walle, *Optical Materials* **25** (2004) 261.
- [67] G. E. Stillman, C. M. Wolfe, *Thin Solid Films*, **31**(1976) 69-88.
- [68] R. A. Serway, *Physics for scientists and Engineers*, Saunders College Publishing Toronto (1992).
- [69] D. C. Look, *Electrical characterization of GaAs Materials and Devices*, John Wiley & Sons (1989).
- [70] D. A. Neaman, *Semiconductor Physics and Devices*, Third Edition, Mc-Graw Hill (2003).
- [71] H. Markoc, *Nitide Semiconductors and Devices*, Springer Verlag Berlin Heidelberg, New York (1999).
- [72] H. Nakamaya, P. Hack, *et al.* *Jpn. K. Appl. Phys.* **35** (1996) L283.
- [73] C. M. Wolf, N. Holonyak, JR, G. E. Stillman, *Physical Properties of Semiconductors*, Prentice Hall (1989).
- [74] A. Felck, B. J. Robinson, D. A. Thompson, *Appl. Phys. Lett.* **78**(2001)12.
- [75] M. Reason, Y. Jin, H. A. McKay, N. Mangan, D. Mao, R. S. Goldman, X. Bai, C. Kurdak; *J. Appl. Phys* **102** (2007) 103710.
- [76] H. Ehrenreich, *J. Phys. Chem. Solid.* **8** (1959) 130.
- [77] S. A. Choulis, *et al.* *Phys. Rev. B.* **66** (2002) 163321.
- [78] W. Shockley, *Electron Hole in Semiconductors*, Van no strand. Princeton, NJ(1950).
- [79] H. Brooks, *Adv. Electron. Phys.* **7**(1995), 85
- [80] Erginosy, *Phys. Rev.* **79**(1950)1013.
- [81] B. Podor, *Phys. Stat. sol.* **16** (1966) 197.
- [82] S. Fahy, A. Lindsay, E. P. Oreily, *Theory of electron mobility in dilute nitride semiconductors*, NivIRC And Department of Physics, University College Cork, Irland (2004).
- [83] F. Ishikawa, G. Mussler, K. J. Friedland, H. Kostial, K. Hagenstein, *Appl. Phys. Lett.* **87**(2005) 262112.
- [84] Y. Jin, R. M. Jock, H. Cheng, Y. He, M. Mintarov, Y. Wang, C. Kurdak, J. L. Merz, R. S. Goldman; *J. Appl. Phys* **95** (2009) 062109.
- [85] C. Akoula, NNIN REU Research Accomplishments, **66** (2008).
- [86] S. R. Kurtz, N. A. Modine, E. D. Jones, A. Allerman and J. F. Klem, *Semicond. Technol*, **17** (2002) 843-850.
- [87] N. Miyashita, Y. Shimizu and Y. Okada, *J. Appl. Phys.*, **102** (2007) 044904.
- [88] J. Teubert, P. J. Klar, W. Heimbrodt, K. Volz, W. Stolz, A. Polimeni and M. Capizzi, *Physica E* **32**(2006) 218-221.
- [89] H. P. Xin, C. W. Tu and M. Geva, *J. Vac. Sci. Technol. B* **18**(3) (2000) 1476.

Abstract

Some unique physical properties of (In)GaNAs as dilute nitride semiconductors caused to be as an interesting material for infrared diode lasers, high efficiency multiple junction solar cells and other electronic devices. It is found that the addition of a small fraction of nitrogen mole fraction (less than 5%) to GaAs could lead to a drastic reduction in the band gap of this material, while the electrons' effective mass increases. The experimental data also show that the as-grown samples have a low electron mobility and density.

Here in this theoretical research work we are interested to study the effects of annealing and hydrogenation on electrical transport properties of dilute nitride semiconductors, GaNAs (doped with Si and Te) and InGaNAs (pure and doped with Si). Through this investigation our analysis on reported temperature dependence of electron density and mobility data is based on charge neutrality condition and various important scattering mechanisms, respectively.

Our data analysis show that in general applying the rapid thermal annealing process could reduce the density of the electron trap centers related to nitrogen atoms which in turn lead to an increment in carriers' concentration and mobility. It should also be noted that the increments of carrier density in Si-doped samples are not as much as those which are doped with Te. This could be due to Si-passivation effect of Si-N pair formations in these samples.

In hydrogenated materials it is found that: (a) in undoped samples due to the role of hydrogen as a donor atom and formation of mono and di- hydrogenate complexes lead to an increase band gap and also improvement in the electrical transport properties of the material; (b) in n-type doped samples part of the hydrogen atoms act as acceptor centers and therefore passivate their donation characteristic. This will lead to a reduction in the carriers' concentration.

Keywords: Dilute nitride semiconductor, GaNAs, InGaNAs, electrical transport properties, donor impurity (Si and Te), thermal annealing, hydrogenation.



Shahrood University of Technology

Physic Department

**An investigation for the effect of annealing and hydrogenation
on the electronic properties of dilute nitrides semiconductor
material**

Fatemeh Tizro Espeli

Supervisor:

Dr. Hosein Eshghi

July 2011