



دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک - گرایش حالت جامد

**محاسبه تحرک پذیری الکترونی در نیمرسانای با
گاف نواری مستقیم $InAs$ در حد میدان های
الکتریکی ضعیف**

دانشجو:

امیر مسعود صادقی

اساتید راهنما:


دکتر هادی عربشاهی

دکتر محمد ابراهیم قاضی


تیرماه ۱۳۸۴

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به:

سر چشمه جوشان مهر،  فداکاره

و

شمع فروزان زندگی،  بزرگواره

و

آنانکه تلاش و همت را با محبتی بی دریغ بر گستره های عشق و
ایمان ره توشه ام ساختند و آموختند فرزانه زیستن را.

تشکر و سپاسگزاری

اکنون که با یاری خداوند متعال در این مرحله از زندگی و تحصیل موفق به انجام این پایان نامه شدم، بر خود واجب می دانم زحمات تمامی اعضای خانواده ام، مخصوصاً پدر و مادر مهربانم، که در تمام مراحل زندگی راه گشای مشکلاتم بوده اند را ارج نهاده و مراتب تشکر قلبی و باطنی خویش را از آنها ابراز دارم. همچنین بر خود لازم می دانم از زحمات و راهنمایی های اساتید گرامی، آقایان دکتر هادی عربشاهی از دانشگاه تربیت معلم سبزواری و دکتر محمد ابراهیم قاضی صمیمانه تشکر کنم. بی تردید انجام این پایان نامه بدون همکاری ایشان ممکن نبود.

همچنین از دوستان بسیار عزیزم آقایان محمود صابونی، عبدالله محمدی تبار، مرتضی اسمعیلی و خانم مریم اصغری که در این مرحله از زندگی و تحصیل یار و همراه من بودند و پیشنهادهای آنها برای من راهنما و راهگشا بوده است صمیمانه سپاسگزارم.

این کاری است که توانسته ام، ولی آن نیست که خواسته ام. به امید آن که کار خود را به آنچه خواسته ام نزدیک تر کنم.

امیر مسعود صادقی

تیرماه ۱۳۸۴

چکیده

هدف این پایان نامه محاسبه تحرک پذیری الکترون در نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم در حد میدان های الکتریکی ضعیف با حل معادله ترابری بولتزمن به کمک روش تکرار می باشد. این کار بطور خاص برای نیمرسانای *InAs* انجام پذیرفته است. فرض بر این است که در حد میدان های الکتریکی ضعیف تنها الکترون های واقع در دره مرکزی Γ در ترابری الکترون ها سهمیم هستند و گذار های بین دره ای و بین نواری وجود ندارند.

در بررسی ساختار نواری و تأثیر آن بر خواص ترابری الکترون ها از نظریه *Kane* (روش $k.p$) استفاده شده است. این مسئله باعث غیرسهموی شدن نوار رسانش می شود. تابع موج الکترون هم بصورت ترکیب توابع موج حالت پایه نوار رسانش (نوع s) و توابع موج حالت پایه نوار ظرفیت (نوع p) خواهد بود.

فرایندهای پراکندگی در نظر گرفته شده در این پژوهش عبارتند از پراکندگی کشسان از فونون های آکوستیکی پتانسیل تغییر شکل شبکه، پراکندگی پیزوالکتریک، پراکندگی از ناخالصی های یونیزه و پراکندگی ناکشسان از فونون های اپتیکی قطبی. در هر مورد با در نظر گرفتن این پتانسیل بعنوان یک پتانسیل اختلال از نظریه اختلال وابسته به زمان آهنگ پراکندگی هر یک محاسبه شده است.

معادله ترابری بولتزمن به روش برگشت پذیر بطور عددی به کمک یک برنامه کامپیوتری حل و تحرک پذیری الکترونی برای *InAs* محاسبه شده است. بستگی تحرک پذیری به دما و تراکم الکترون ها هم بررسی شده و مقایسه ای بین نتایج بدست آمده با داده های تجربی انجام پذیرفته است. که توافق نسبتاً خوبی را نشان می دهد.

فهرست مطالب

مقدمه.....	۱
فصل اول : مفاهیم مقدماتی	
۱-۱ رفتار الکترون در بلور.....	۴
۲-۱ تقریب نیمه کلاسیک.....	۵
۳-۱ محدودیت های نظریه نیمه کلاسیکی.....	۶
۴-۱ تابع توزیع الکترون.....	۷
۵-۱ ساختار بلوری.....	۹
۶-۱ ساختار نوار انرژی.....	۱۰
۷-۱ ضرایب ترابری الکترون.....	۱۸
۱-۷-۱ ضریب تحرک رانشی.....	۱۸
مرجع ها.....	۲۰
فصل دوم : فرایندهای پراکندگی الکترون	
۱-۲ مقدمه.....	۲۲
۲-۲ ناکاملی های بلور.....	۲۳
۱-۲-۲ نواقص بلوری.....	۲۳
۲-۲-۲ اتم های ناخالصی.....	۲۴
۳-۲-۲ ارتعاشات شبکه.....	۲۴
۳-۲ روش اختلال وابسته به زمان.....	۲۸
۴-۲ استتار توسط حامل های الکتریکی.....	۳۰
۵-۲ انواع فرایندهای پراکندگی.....	۳۲
۱-۵-۲ پراکندگی ناشی از فونون های آکوستیکی.....	۳۲
۲-۵-۲ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه.....	۳۲
۳-۵-۲ پراکندگی پیزوالکتریک.....	۳۶
۴-۵-۲ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی.....	۳۸
۵-۵-۲ پراکندگی الکترون ناشی از ناخالصی های یونیزه.....	۴۴

مرجع ها ۴۶

فصل سوم : معادله ترابری بولتزمن

۱-۳ مقدمه ۴۹

۲-۳ معادله ترابری بولتزمن ۵۰

۳-۳ حل معادله ترابری بولتزمن به روش تکرار ۵۳

مرجع ها ۵۷

فصل چهارم : نتایج و کارهای انجام شده

۱-۴ مقدمه ۵۹

۲-۴ ساختار بلوری ۶۰

۳-۴ ساختار نوار انرژی ۶۱

۴-۵ محاسبه آهنگ های پراکندگی در *GaAs* و *InAs* ۶۳

۴-۶ محاسبه تحرک پذیری در حد میدانهای الکتریکی ضعیف ۶۸

۴-۷ نتیجه گیری ۷۶

۴-۸ کارهای آینده ۷۷

مرجع ها ۷۸

ضمیمه ۷۹

مقدمه

مطالعه ترابری حامل های الکتریکی در بلورهای نیمرسانا از دو جنبه نظری و کاربرد در بررسی قطعات نیمرسانا اهمیت دارد. مطالعه ترابری حامل های الکتریکی از یک طرف به شناخت برهمکنش الکترون با شبکه بلور، اثر ساختار نوار انرژی بر تحرک پذیری حامل ها و پدیده های دیگر کمک می کند. از طرف دیگر نتایج این مطالعات جهت بررسی قطعات میکروالکترونیک لازم است. در مورد مدارهای مجتمع با مقیاس بسیار کوچک بدلیل کوچکی ابعاد قطعات اعمال یک اختلاف پتانسیل کوچک چند ولتی موجب ایجاد یک میدان قوی الکتریکی می شود. در این حالت بدلیل افزایش انرژی الکترون ها نمی توان از قانون اهم استفاده کرد.

مطالعه ترابری حامل های الکتریکی از نظر ریاضی و فیزیکی مسئله پیچیده ای است. حل تحلیلی معادله ترابری بولتزمن تنها در حالت های خاص میسر است و این حالت های خاص معمولاً جهت بررسی سیستم های واقعی کاربرد ندارند.

هدف نظریه ترابری الکترون در بلورهای نیمرسانا تعیین پارامترهای ترابری میکروسکوپی به کمک کمیت های فیزیکی قابل اندازه گیری بلور نیمرسانا می باشد. به عنوان مثال تعدادی از این کمیتها عبارتند از ثابت شبکه بلور، چگالی بلور، ضریب دی الکتریک فرکانس بالا، ضریب دی الکتریک فرکانس پایین و جرم مؤثر الکترون. به کمک این نظریه همچنین می توان نحوه تغییرات خواص ترابری به علت تغییرات میدان های الکتریکی، مغناطیسی، دما، ترکیب ماده نیمرسانا و میزان ناخالصی موجود در ماده نیمرسانا را بررسی کرد.

هدف از این پایان نامه مطالعه ترابری الکترون ها در بلورهای نیمرسانا با استفاده از حل معادله بولتزمن به روش تکرار است. این کار به طور خاص برای نیمرسانای دوتایی *InAs* انجام شده

است. در این مطالعه تحرک پذیری الکترون وقتی که بلور تحت اثر میدان الکتریکی ثابت و ضعیف قرار دارد بررسی شده است.

این پایان نامه در چهار فصل تنظیم شده. در فصل اول مطالبی در مورد ضرایب ترابری الکترون و عوامل مؤثر بر تحرک پذیری حامل ها مانند : ساختار نوار انرژی و ساختار بلوری بیان شده است. در فصل دوم عوامل مختلف پراکندگی حامل ها بررسی شده و با در نظر گرفتن پتانسیل پراکندگی ها به عنوان یک پتانسیل اختلال، آهنگ پراکندگی برای هر یک مورد مطالعه قرار گرفته است. در فصل سوم در مورد معادله ترابری بولتزمن بحث شده و یک رابطه بازگشتی برای محاسبه تابع توزیع اختلالی بدست آمده، تا بتوان این معادله را به کمک روش تکرار حل کرد و رفتار الکترون در فضای فاز را شبیه سازی نمود .

از آنجاییکه نیمرسانای *InAs* کاربرد گسترده ای در قطعات الکترونیک نوری ، از جمله لیزرها و آشکارسازها دارد و به علت تحرک پذیری بالا استفاده از آن در ساخت ترانزیستورهای اثر میدان فرکانس بالا پیشنهاد می شود ، لذا ، در فصل چهارم رفتار الکترون در *InAs* شبیه سازی و تحرک پذیری الکترونی در حد میدان های الکتریکی ضعیف محاسبه شده و سپس بستگی آن به دما و چگالی ناخالصی ها مورد بررسی قرار گرفته است. اثر هریک از فرایندهای پراکندگی در تحرک پذیری الکترون ها بطور مجزا هم بررسی شده است. در انتها یک مقایسه بین تحرک پذیری *InAs* و *GaAs* صورت گرفته و همچنین نتایج با داده های تجربی مقایسه شده است .

فصل اول

مفاهیم مقدماتی

۱-۱ رفتار الکترون در بلور

خواص ترابری الکترون در یک بلور نیمرسانا به ساختار نوار انرژی بلور و خصوصیات فرایندهای پراکندگی^۱ بستگی دارد. به همین علت داشتن اطلاعاتی در مورد نوار انرژی بلور و فرایندهای پراکندگی جهت مطالعه دقیق خواص ترابری الکترون در نیمرسانا لازم است. ساختار نوار انرژی یک جامد از حل معادله شرودینگر، یعنی:

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

بدست می آید. در این رابطه $V(r)$ تابع انرژی پتانسیل است که اتم های تشکیل دهنده بلور بوجود می آورند. چون اتم های بلور دارای تناوب شبکه براوه^۲ هستند پتانسیلی هم که بوجود می آورند دوره ای است، بطوریکه می توان نوشت:

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

که در آن R بردار شبکه مستقیم است. بنابر قضیه بلوخ^۳ بدلیل دوره ای بودن تابع انرژی پتانسیل، تابع موج را می توان به شکل زیر نوشت:

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

که $u_k(r)$ تابعی با تناوب شبکه مستقیم است. یعنی:

$$u_k(r) = u_k(r + R) \quad (4-1)$$

که در آن k بردار موج الکترون است [۱]. با توجه به قضیه بلوخ نشان داده می شود که مجموع بردارهای موج الکترون در فضای فاز که نتوان آنها را به صورت $k' = G + k$ نوشت، تعیین کننده

^۱-Scattering process

^۲-Bravais lattice

^۳-Bloch's theorem

تمامی توابع موج مستقل می باشند. در این رابطه G بردار شبکه وارون، k' برداری از فضای فاز و k بردار موج واقع در منطقه اول بریلوئن است. حجم حاصل از مجموعه این بردارها در فضای وارون، منطقه اول بریلوئن^۱ است. بدین ترتیب می توان از بردارهای موج الکترون واقع در منطقه اول بریلوئن جهت مشخص کردن حالت‌های الکترونی بلور استفاده کرد. با اعمال شرایط مرزی دوره ای بر روی تابع موج الکترون و به کمک قضیه بلوخ نشان داده می شود که تعداد حالت‌های مجاز در منطقه اول بریلوئن برابر تعداد یاخته های بنیادی بلور است. در نتیجه تعداد حالت های مجاز بردار k در منطقه اول بریلوئن بسیار زیاد است در حالیکه حجم منطقه اول بریلوئن کوچک است. به همین علت بردار موج الکترون در محاسبات به صورت متغیر پیوسته در نظر گرفته می شود [۲].

۱-۲ تقریب نیمه کلاسیک^۲

با دانستن رابطه انرژی بلور به جای استفاده از مکانیک کوانتومی می توان رفتار الکترون در بلور را به شکل ساده تری بررسی کرد. بدین منظور از تقریب نیمه کلاسیک استفاده می شود. در تقریب نیمه کلاسیک با در نظر داشتن اصول مکانیک کوانتومی از روابط مکانیک کلاسیک استفاده می شود. در این تقریب الکترون واقع در بلور به صورت یک ذره آزاد با جرم جدید منظور می گردد. این جرم را جرم مؤثر^۳ الکترون می گویند، که با دانستن ساختار نوار انرژی بلور از رابطه زیر یعنی:

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \quad (5-1)$$

بدست می آید. این رابطه بیان می کند که جرم مؤثر الکترون در بیشینه نوارهای انرژی منفی و در کمینه نوارهای انرژی مثبت است. سرعت گروه^۴ بسته موج وابسته به الکترون نیز از رابطه زیر:

$$V = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) \quad (6-1)$$

^۱ - First Brillouin zone

^۲ - Semiclassical approximation

^۳ - Effective mass

^۴ - Group velocity

بدست می آید، که در آن انرژی الکترون است. از اثر عملگر اندازه حرکت بر روی تابع موج الکترون آزاد می توان نوشت:

$$\frac{\hbar}{i} \nabla \Psi(r) = \hbar k \Psi(r) \quad (7-1)$$

که در آن $\hbar k$ را اندازه حرکت بلوری الکترون می گویند. در تقریب نیمه کلاسیک این اندازه حرکت برابر اندازه حرکت الکترون فرض می شود [۳].

با دانستن ساختار نوار انرژی بلور، $E_n(k)$ ، حالت هر الکترون در فضای فاز توسط موقعیت الکترون r ، بردار موج الکترون k ، و شاخص نوار n ، مشخص می گردد. در حضور میدان مغناطیسی $H(r)$ و میدان الکتریکی $E(r)$ با توجه به قوانین زیر، موقعیت، بردار موج و شاخص نوار انرژی که الکترون در آن قرار دارد به دست می آید:

I. شاخص نوار انرژی n یک ثابت حرکت است، یعنی در تقریب نیمه کلاسیکی از احتمال

گذارهای بین نواری توسط الکترون صرف نظر می شود.

II. نحوه تغییرات موقعیت و بردار موج الکترون واقع در نوار انرژی با شاخص n توسط

معادلات زیر مشخص می شود:

$$\dot{r} = V_n(k) = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_n(k) \quad (8-1)$$

$$\hbar \dot{k} = -e[E(r,t) + \frac{1}{c} V_n(k) \times H(r,t)] \quad (9-1)$$

III. بردار موج الکترون تنها منحصر به مقادیری است که در منطقه اول بریلون قرار دارند. با

این شرط در واقع نتایج نظریه بلوخ و شرط مرزی دوره ای جهت بررسی رفتار الکترون در نظر

گرفته می شود.

۳-۱ محدودیت های نظریه نیمه کلاسیکی

در یک نقطه مشخص از فضای k ، معادلات نیمه کلاسیکی برای الکترون واقع در نوار n به شرطی

صحیح است که دامنه شدت میدان الکتریکی و مغناطیسی در روابط زیر صدق کند [۴]:

$$\hbar \omega_c \ll \frac{E_g}{E_f} \quad (10-1)$$

$$eEa \ll \left\langle \frac{E_g^2}{E_f} \right\rangle \quad (11-1)$$

$$\omega_c = \frac{eH}{mc} \quad (12-1)$$

که در آن a ثابت شبکه، E_g گاف نواری و E_f انرژی فرمی و ω_c هم فرکانس زاویه ای سیکلوترونی است. در مورد فلزات شرط دوم همواره برقرار است. زیرا حتی با فرض چگالی جریان با بزرگی 10^2 A/cm^2 و مقاومت الکتریکی با بزرگی $100 \mu\Omega \text{ cm}$ شدت میدان الکتریکی موجود در فلزات از مرتبه 10^{-2} V/cm می باشد. بنابراین eEa از مرتبه 10^{-10} eV خواهد بود. چون E_f از مرتبه 1 eV و یا بیشتر است. رابطه دوم به شرطی نقض می شود که $E_g \ll 10^{-5} \text{ eV}$ باشد. در فلزات گاف انرژی از این مرتبه وجود ندارد. در مورد نیمرساناهای غیرتبهگن و یا در دی الکتریک ها رابطه دوم می تواند نقض شود، زیرا امکان بوجود آمدن میدان های الکتریکی با شدت زیاد در این مواد وجود دارد. میدان الکتریکی قوی می تواند باعث گذار الکترون به یک نوار دیگر شود.

۴-۱ تابع توزیع^۱ الکترون

هنگامی که الکترون ها در حالت تعادل گرمایی با شبکه هستند، نحوه توزیع الکترون ها در N تراز انرژی موجود (N تعداد یاخته های بنیادی) بوسیله تابع توزیع فرمی-دیراک^۲ مشخص می شود. بر اساس این تابع توزیع، احتمال اشغال تراز انرژی E از رابطه زیر بدست می آید:

$$f(E, k) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} \quad (13-1)$$

در این رابطه T دمای حالت تعادل، E_f انرژی فرمی^۳ و k_B ثابت بولتزمن^۴ است. در صفر مطلق تمام حالت های با انرژی پایین تر از E_f اشغال شده اند، در حالیکه تمام حالت های با انرژی بالاتر از E_f خالی هستند. پس این تابع برای انرژی های زیر E_f برابر با یک و برای انرژی های بالای E_f

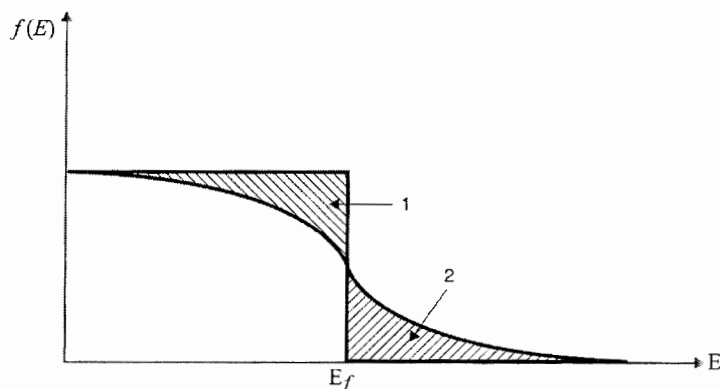
^۱ - Distribution function

^۲ - Fermi-Dirac distribution function

^۳ - Fermi energy

^۴ - Boltzmann constant

برابر با صفر است. به ازای یک دمای معین در انرژی E_f احتمال اشغال برابر 0.5 است. در دماهای بالاتر تابع توزیع همانطور که در شکل ۱-۱ نشان داده شده است به تدریج در اطراف تراز فرمی گسترش می یابد. الکترون ها از ناحیه ۱ به ناحیه ۲ برانگیخته می شوند. تراز فرمی باید به گونه ای باشد که تعداد الکترون هایی که ناحیه ۱ را ترک می کنند برابر با تعداد الکترون هایی باشد که به ناحیه ۲ برانگیخته شده اند. به همین علت در نیمرساناهای ذاتی تراز فرمی در وسط گاف نواری قرار دارد [۱۵].



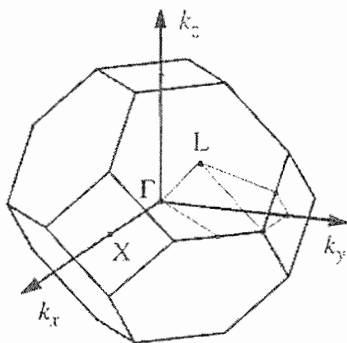
شکل ۱-۱: تابع توزیع فرمی - دیراک بصورت تابعی از انرژی برای دماهای بزرگتر از صفر کلونین [۳].

چون تابع توزیع فرمی- دیراک به انرژی الکترون بستگی دارد، در نتیجه احتمال اشغال یک تراز انرژی به طول و راستای بردار موج الکترون بستگی دارد. پس تابع توزیع فرمی- دیراک نسبت به مبداء مختصات در فضای فاز متقارن بوده و احتمال اشغال یک حالت با بردار موج k برابر احتمال اشغال یک حالت با بردار موج $-k$ است. پس در حالت تعادل گرمایی برآیند حرکت بارهای الکتریکی صفر است. مسئله بررسی ضرایب ترابری الکترون هنگامی مطرح است که عواملی موجب از بین رفتن تعادل گرمایی بین الکترون و اتم های شبکه شود. در صورت عدم وجود تعادل گرمایی بین الکترون و اتم های شبکه تابع توزیع الکترون ها از معادله ترابری بولتزمن^۱ بدست می آید [۱۶].

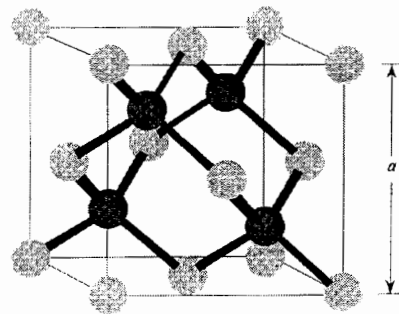
^۱ - Boltzmann transport equation

۱-۵ ساختار بلوری^۱

همانطور که قبلاً اشاره شد دانستن جزئیات نوار انرژی بلور و فرایندهای پراکندگی به منظور مطالعه دقیق خواص ترابری ضروری است. ساختار نوار انرژی بلور از حل معادله مستقل از زمان شرودینگر به دست می آید. چون تابع پتانسیل شبکه به ساختار بلوری نیمرسانا بستگی دارد، در نتیجه خصوصیات کلی نوار انرژی تا حدی تابع ساختار بلوری نیمرسانا است. اکثر نیمرساناهای ترکیبی گروه های III-V دارای ساختار بلور مکعبی زینک-بلند^۲ یا شش گوشه وورتسایت^۳ می باشند. در آرایش بلوری زینک-بلند اتم سه ظرفیتی (پنج ظرفیتی) در مرکز یک هرم قرار گرفته و توسط چهار اتم پنج ظرفیتی (سه ظرفیتی) که در رئوس هرم قرار گرفته احاطه شده است. این آرایش بلوری دارای شبکه براوه fcc ^۴ با دو اتم در هر پایه است. این اتم ها در امتداد قطر اصلی و به فاصله یک چهارم قطر اصلی از یکدیگر قرار دارند (شکل ۱-۲).



ب



الف

شکل ۱-۲: الف) ساختار بلوری زینک-بلند. متشکل از دو ساختار fcc که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در یکدیگر فرو رفته اند [۷] ب) منطقه اول بریلونن در ساختار بلوری زینک-بلند [۱]

همانطور که در شکل ۱-۳ الف نشان داده شده است ساختار وورتسایت سلول واحد هگزاگونال^۵ دارد و در نتیجه دو ثابت شبکه a و c خواهد داشت و شامل شش اتم از هر نوع در سلول واحد

^۱ - Crystal structure

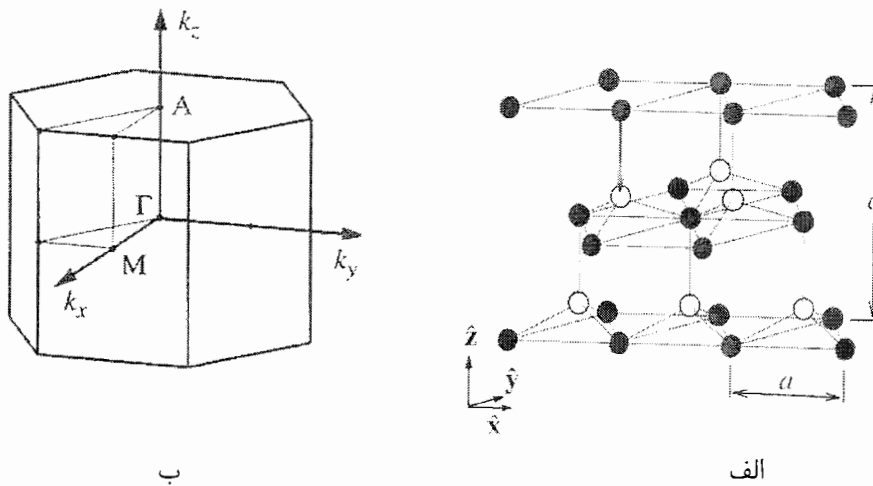
^۲ - zinc-blende

^۳ - Wurtzite

^۴ - Face-centered cubic

^۵ - hexagonal

است. ساختار وورتسایت از دو شبکه hcp^1 که به اندازه سه هشتم بردار c در هم فرو رفته اند ساخته شده. منطقه اول بریلوئن نیز در شکل ۱-۳ ب نشان داده شده است [۸].



شکل ۱-۳: الف) ساختار بلوری وورتسایت. متشکل از دو ساختار hcp که به اندازه سه هشتم محور c در یکدیگر فرو رفته اند. ب) منطقه اول بریلوئن در ساختار بلوری وورتسایت [۸].

۱-۶ ساختار نوار انرژی^۲

منظور از ساختار نوار انرژی یک بلور رابطه ای است که انرژی الکترون را برحسب بردار موج آن تعیین می کند. مشخصات نوارهای انرژی معمولاً بوسیله ترسیم انرژی های ممکن الکترون برای مقادیر متفاوت بردار موج الکترون در راستاهای متفاوت در منطقه اول بریلوئن نمایش داده می شود. به دلیل اختلاف فواصل اتم ها در راستاهای مختلف بلور، مقدار انرژی نه تنها به طول بردار موج الکترون بلکه به راستای آن نیز بستگی دارد.

مشخصات عمومی ساختار نوار انرژی بلور با آرایش مکعبی زینک-بلند به شرح زیر است:

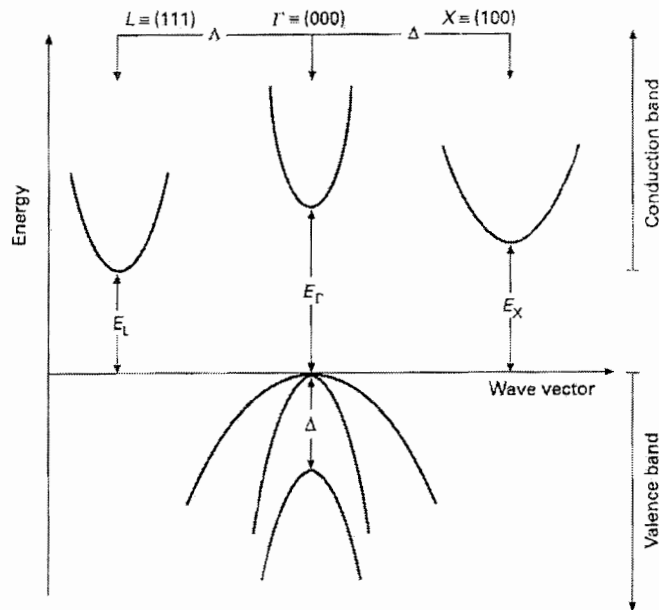
۱. نوار رسانش^۳ در مرکز منطقه اول بریلوئن (نقطه Γ) دارای یک کمینه (دره^۴) و در راستای $[111]$ در نقطه L و همچنین در راستای $[100]$ در نقطه X دارای کمینه های دیگر است (شکل ۱-۴).

^۱ - hexagonal close- packed

^۲ - band structure

^۳ - Conduction band

^۴ - Valley



شکل ۱-۴: ساختار نوار رسانش در نیمرساناهای ترکیبی گروه های III-V شامل سه دره L , X , Γ [۹].

۲. نوار ظرفیت^۱ شامل سه شاخه است که بیشینه آنها در مرکز منطقه اول بریلوئن واقع

است. دو تا از این شاخه ها در نقطه Γ تبهگن هستند و شاخه سوم به دلیل

برهمکنش اسپین-مدار از دو شاخه دیگر جدا شده است. نیمرساناهایی که در آنها

کمینه نوار رسانش و بیشینه نوار ظرفیت در یک نقطه قرار دارند، نیمرساناهای با

گاف مستقیم^۲ نامیده می شوند. در بعضی نیمرساناهای ترکیبی گروه های III-V

کمینه نوار رسانش و بیشینه نوار ظرفیت در یک نقطه قرار ندارد، که به آنها

نیمرساناهای با گاف غیرمستقیم^۳ گویند (شکل ۱-۵) [۹].

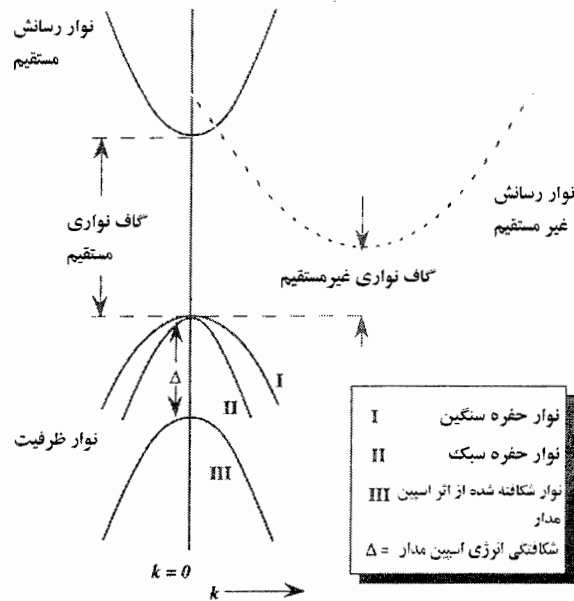
هنگامی که شدت میدان الکتریکی خیلی بزرگ نباشد، تنها کمینه های نوار هدایت و

بیشینه های نوار ظرفیت توسط الکترون ها و حفره ها اشغال خواهند شد .

^۱ - Valence band

^۲ - Direct-gap semiconductors

^۳ - Indirect-gap semiconductors



شکل ۱-۵: نمایی از نوار ظرفیت، نوار رسانش مستقیم و نوار رسانش غیرمستقیم. منحنی های I و II و III در نوار ظرفیت به ترتیب نوار حفره سنگین، نوار حفره سبک و نوار حاصل از اثر اسپین - مدار نامیده می شوند [۱۰].

با توجه به موقعیت الکترون در فضای k رابطه انرژی برحسب بردار موج الکترون را می توان بصورت های زیر نوشت [۱۱]:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (14-1)$$

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} \right) \quad (15-1)$$

$$E(k) = ak^2 [1 \pm g(\theta, \phi)] \quad (16-1)$$

معادله (۱۴-۱) یک نوار با سطح انرژی ثابت کروی^۱ در فضای k است (شکل ۱-۶ الف). در این حالت جرم مؤثر الکترون یک کمیت عددی است. این رابطه جهت توصیف کمینه نوار هدایت واقع در نقطه Γ و برای بیشینه ای از نوار ظرفیت که به دلیل برهمکنش اسپین - مدار از دو نوار دیگر جدا شده مناسب است. این رابطه ساده ترین مدل نوار رسانش جهت بررسی تقریبی خواص ترابری در هر نیمرسانا می باشد.

^۱ -Spherical constant energy surface

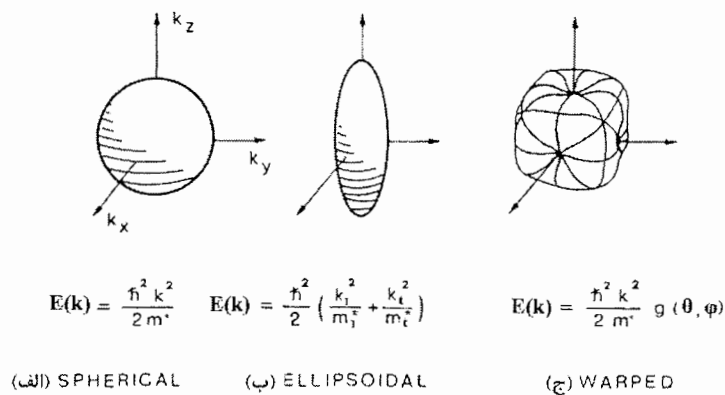
معادله (۱-۱۵) یک نوار با سطح انرژی ثابت بیضی گون^۱ در فضای k است (شکل ۱-۶ ب). در این حالت جرم مؤثر الکترون یک کمیت تانسوری است. این رابطه جهت توصیف کمینه نوار هدایت واقع در راستای [۱۰۰] و [۱۱۱] مناسب است. در این رابطه k_x و k_y مؤلفه های بردار موج الکترون در راستای موازی و عمود بر راستاهای [۱۰۰] و [۱۱۱] است. m_x^* و m_y^* مؤلفه های طولی و عرضی جرم مؤثر هستند [۱۲].

رابطه (۱-۱۶) جهت توصیف بیشینه های نوار ظرفیت که در نقطه $k=0$ تیهگن هستند بکار می رود. این نوارها دارای سطح انرژی ثابت پیچ خورده^۲ در فضای k هستند (شکل ۱-۶ ج). تابع $g(\theta, \phi)$ شامل بستگی زاویه ای جرم مؤثر است و بصورت زیر تعریف می شود:

$$g(\theta, \phi) = [b^2 + c^2 (\sin^4 \theta \cos^2 \phi \sin^2 \phi + \sin^2 \theta \cos^2 \theta)]^{1/2} \quad (1-17)$$

در این تابع θ و ϕ زوایای قطبی و سمتی بردار موج الکترون نسبت به محورهای بلوری است. a ، b و c پارامترهای مربوط به نوار ظرفیت هستند. علامت های + و - به ترتیب مربوط به نوار حفره های سنگین و سبک است [۱۱].

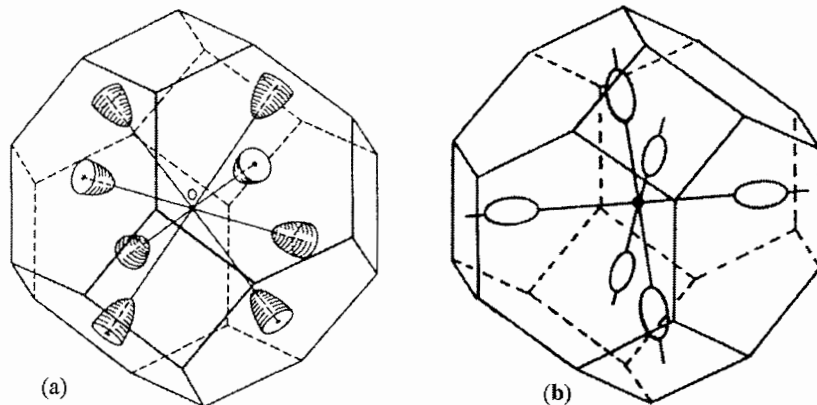
SURFACES OF CONSTANT ENERGY



شکل ۱-۶: نمایشی از سطوح انرژی ثابت برای الکترون ها در یک نیم رسانای با ساختار مکعبی [۱۲]

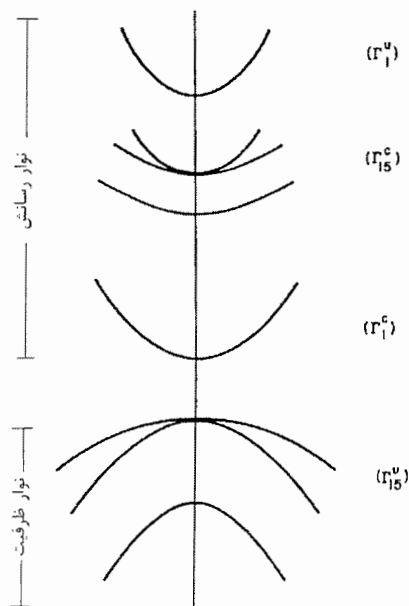
^۱ - Ellipsoidal constant energy surface

^۲ - Warped constant energy surface



شکل ۷-۱: سطوح انرژی ثابت برای الکترون های نوار رسانش در منطقه اول بریلوئن در ساختار مکعبی (a) در حالتیکه کمینه نوار رسانش در نقطه L است. شامل هشت بیضی گون در امتداد راستای [۱۱۱]. (b) در حالتیکه کمینه نوار رسانش در نقطه X است. شامل شش بیضی گون در امتداد راستای [۱۰۰]. [۱۲].

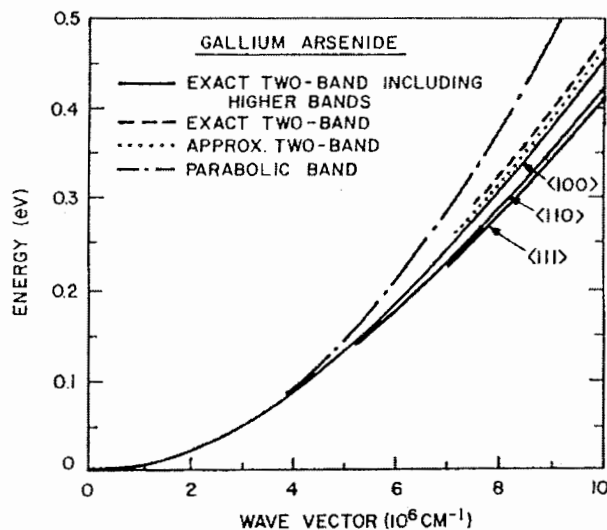
ساختار نوار انرژی نیمرساناهای با ساختار بلوری الماسی و زینک-بلند در نزدیکی مرکز منطقه اول بریلوئن با جزئیات کامل توسط کین^۱ مورد مطالعه قرار گرفته است. طبق این نظریه تنها برهمکنش بالاترین نوار ظرفیت (Γ_{15V}) و پائین ترین نوار رسانش (Γ_{1C}) در نظر گرفته می شود (شکل ۸-۱) و از تأثیر نوارهای بالاتر صرف نظر می گردد،



شکل ۸-۱: نوارهای انرژی مختلف در منطقه اول بریلوئن. [۱۱].

^۱ - Kane

زیرا وارد کردن اثر برهمکنش اسپین-مدار^۱ در یک طرف و برهمکنش با نوارهای رسانش بالاتر در طرف دیگر باعث می شود که این دو، اثر یکدیگر را خنثی کنند. برهمکنش $\Gamma_{15V}-\Gamma_{1C}$ موجب می شود که نوار رسانش از حالت سهموی^۲ کامل خارج شده و اصطلاحاً نوارها غیرسهموی^۳ باشند. نتایج برای نیمرسانای *GaAs* در شکل ۹-۱ نشان داده شده است.



شکل ۹-۱: نوار رسانش *GaAs*. در منحنی توپر برهمکنش نوار رسانش با نوارهای بالاتر و شکافتگی اسپین - مدار هر دو در نظر گرفته شده است. در منحنی خط چین اثر شکافتگی اسپین - مدار وارد شده اما از اثر نوارهای بالاتر صرف نظر شده است. در منحنی نقطه چین اثر شکافتگی اسپین - مدار هم حذف شده و همانطور که ملاحظه می شود این منحنی به خط توپر نزدیک تر است. در منحنی خط - نقطه نوار رسانش بصورت سهموی در نظر گرفته شده است [۱۳].

همانطور که مشخص است صرف نظر کردن از اثر اسپین-مدار و همچنین برهمکنش با نوارهای بالاتر یک تقریب خوب در نوار رسانش را می دهد.

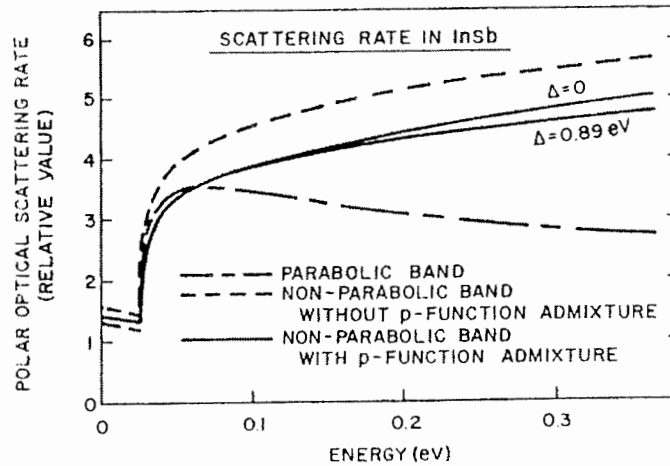
تابع موج الکترون هم بصورت ترکیب توابع موج حالت پایه نوار رسانش (نوع *S*) و توابع موج حالت پایه نوار ظرفیت (نوع *p*) خواهد بود، یعنی نمی توان یک نوار رسانش غیرسهموی را با توابع موج

^۱ - Spin-orbit interaction

^۲ - Parabolic band

^۳ - Nonparabolic band

نوع s خالص در نظر گرفت. این ترکیب توابع موج حالت پایه در نوارهای انرژی غیرسهومی تأثیر مستقیم در آهنگ های پراکندگی الکترون دارد [۱۳]. تصحیحات ناشی از تقریب های مختلف در شکل ۱-۱۰ برای پراکندگی اپتیکی قطبی در نیمرسانای *InSb* نشان داده شده است:



شکل ۱-۱۰: آهنگ پراکندگی الکترون ها از مد اپتیکی قطبی در نیمرسانای *InSb* در دمای اتاق. اگر نوار رسانش سهومی در نظر گرفته شود (منحنی خط - نقطه) آهنگ پراکندگی اختلاف زیادی با منحنی واقعی (خط توپر) خواهد داشت که منحنی رسم شده به ازای $\Delta = 0.189 \text{ eV}$ است. در بالاترین منحنی (منحنی خط چین) نوار رسانش غیرسهومی در نظر گرفته شده، ولی از برهنه توابع موج حالت پایه نوع s و p صرف نظر شده است. همانطور که کاملاً مشخص است در انرژی های بالای 0.1 eV خطای زیادی دارد. در اینجا از تقریب $\Delta = 0$ استفاده شده است [۱۳].

نتایج تحلیل کین توسط روش k.P ساختار نوار رسانش را با دقت زیادی که مورد نیاز محاسبات ترابری است توصیف می کند. به همین علت در این پایان نامه ما از نتایج این روش برای نیمرسانای *InAs* استفاده کرده ایم.

اگر نوارها سهومی باشند رابطه انرژی بصورت:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (18-1)$$

است. اما از آنجاییکه نوارها سهومی کامل نیستند این رابطه بصورت زیر اصلاح می شود:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \gamma(E) = E(1 + \alpha E) \quad (19-1)$$

در این رابطه α ضریب غیرسه‌موی^۱ بودن نوار انرژی است و بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m}\right)^2 \quad (20-1)$$

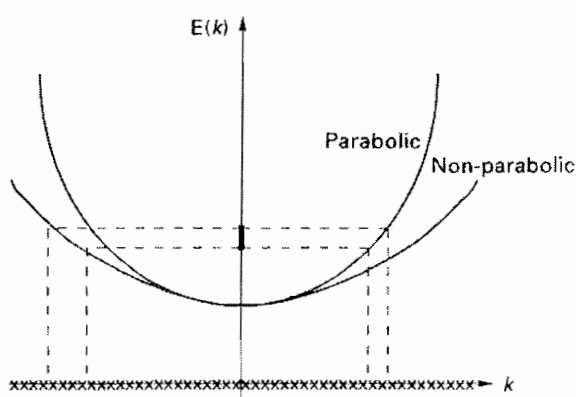
که در آن E_g گاف نواری^۲، m^* جرم مؤثر الکترون و m جرم الکترون آزاد است [۱۴].

در نوارهای انرژی سه‌موی چگالی حالت^۳ ها در فضای انرژی بصورت زیر است:

$$g_c(E) = \frac{m^* \sqrt{2m^* E}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (21-1)$$

یعنی بصورت تابعی از $E^{1/2}$ تغییر می‌کند. در محاسبه چگالی حالت ها برای نوارهای غیرسه‌موی باید از رابطه (۱۹-۱) به جای رابطه (۱۸-۱) استفاده کرد.

چگالی حالت ها در این حالت بصورت حاصلضرب عامل $\sqrt{1 + \alpha E}(1 + 2\alpha E)$ در رابطه (۲۱-۱) خواهد بود. همانطور که از شکل ۱۱-۱ مشخص است غیرسه‌موی بودن نوارهای انرژی را هموار می‌کند. بطوریکه حالت های k مجاز بیشتری بین انرژی E و $E+dE$ وجود دارد و چگالی حالت ها افزایش می‌یابد [۱۵].



شکل ۱۱-۱: غیرسه‌موی بودن نوار رسانش رابطه انرژی $E(k)$ را هموار می‌کند و چگالی حالتها را در فضای انرژی افزایش می‌دهد. در یک dE معین، همانطور که در روی محور انرژی مشخص شده است تعداد حالت‌های مجاز k برای نوارهای انرژی غیرسه‌موی نسبت به نوارهای انرژی سه‌موی بیشتر است [۱۵].

^۱ - Nonparabolicity coefficient

^۲ - Band gap

^۳ - Density of states

۱-۷ ضرایب ترابری^۱ الکترون

مطالعه ضرایب ترابری الکترون در یک نیمرسانا جهت تعیین خواص ترابری، در حضور نیروهای خارجی مانند میدان های الکترومغناطیسی، گرادیان دما و چگالی الکترون انجام می شود. با مطالعه ضرایب ترابری مختلف می توان مناسب بودن یک نیمرسانا جهت ساخت قطعه الکترونیکی خاص را مورد بررسی قرار داد. یکی از ضرایب ترابری نیمرسانا، ضریب تحرک است. ضریب تحرک الکترون در میدان الکتریکی را ضریب تحرک رانشی^۲ گویند. به منظور مطالعه ویژگی های رسانندگی الکتریکی مواد مختلف داشتن اطلاعات در مورد ضریب تحرک رانشی ضروری است. ضرایب ترابری الکترون مربوط به گرادیان دما و چگالی الکترون ها را به ترتیب ضریب ترموالکتریک^۳ و ضریب پخش^۴ گویند. ضرایب ترابری الکترون در حضور میدان مغناطیسی ثابت، شامل ضریب هال^۵ و ضریب مغناطو مقاومت^۶ است.

۱-۷-۱ ضریب تحرک رانشی (تحرک پذیری)

متوسط سرعت حرکت الکترون های نیمرسانا در میدان الکتریکی را سرعت رانش الکترون گویند. در صورت کم بودن شدت میدان الکتریکی اعمال شده سرعت رانش الکترون با شدت میدان متناسب است. بطوریکه می توان نوشت:

$$V = \mu E \quad (22-1)$$

که در آن μ ضریب تحرک رانشی در شدت میدان کم است. با توجه به مدل درود^۷ معادله حرکت الکترون در بلور به دلیل اعمال نیروی خارجی $f(t)$ را می توان به شکل زیر نوشت [۱۶]:

$$m \frac{dV}{dt} = -\frac{mV}{\tau} + f(t) \quad (23-1)$$

^۱ - Transport coefficients
^۲ - Drift mobility
^۳ - Thermoelectric coefficient
^۴ - Diffusion coefficients
^۵ - Hall coefficient
^۶ - Magneto resistance
^۷ - Drude

که در آن جرم الکترون آزاد، V سرعت حرکت الکترون و τ زمان متوسط بین دو برخورد است. با جایگزین کردن جرم مؤثر الکترون m^* به جای جرم الکترون آزاد نتایج دقیقتری بدست می آید، زیرا با این کار اثر پتانسیل ناشی از شبکه بلور که درود از آن صرف نظر کرده بود، در نظر گرفته می شود. در رابطه بالا اثر برهمکنش هایی که الکترون با ناکاملی های بلوری انجام می دهد و باعث محدود شدن سرعت الکترون می شود بصورت $-\frac{m^*V}{\tau}$ در می آید. در حالت مانا^۱ (اعمال میدان الکتریکی ثابت) سرعت حرکت الکترون مستقل از زمان است. لذا خواهیم داشت:

$$eE = -\frac{m^*V}{\tau} \Rightarrow \mu = -\frac{e\tau}{m^*} \quad (۲۴-۱)$$

که در آن E شدت میدان الکتریکی و e بار الکترون است. رابطه (۲۴-۱) حرکت الکترون را بخوبی توصیف می کند [۱۷].

^۱ - Steady state

- [1] N. W. Ashcroft, N.D. Mermin "Solid State Physics" Philadelphia: W. B. Saunders (1976) p 11
- [2] N. W. Ashcroft, N.D. Mermin "Solid State Physics" Philadelphia: W. B. Saunders (1976) p141
- [3] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p 65-66 p139
- [4] N. W. Ashcroft, N.D. Mermin, "Solid State Physics" Philadelphia: W. B. Saunders (1976) p217-219
- [5] David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991) p181
- [6] Charles M. Wolfe; Nick Holonak ,Jr. ; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p139
- [7] Jasprit Singh "Semiconductor Optoelectronics "McGRAW-HILL (1995) p4
- [^۸] آشنایی با فیزیک حالت جامد، چارلز کیتل، ترجمه اعظم پور قاضی، مهدی صفا و جمشید عمیقیان، مرکز نشر دانشگاهی (۱۳۶۷) صفحات ۳۶-۳۷
- [9] Mark Lundstrom "Fundamental of Carrier Transport" Second edition Cambridge University Press (2000) p13
- [10] Jasprit Singh "Semiconductor Optoelectronics" McGRAW-HILL (1995) p62
- [11] Mark Lundstrom "Fundamental of Carrier Transport" Second Edition Cambridge University Press (2000) 14-16
- [12] Michael Shure "GaAs Devices and Circuits", (1990) p17-18
- [13] D.L. Rode Semiconductor and Semimetal p 8-11
- [14] W. Fawcett, A.D. Boardman and S. Swain J. Phys.Chem.Solid "Monte Carlo Determination of Electron Transport Properties in GaAs" (1970), Vol 31 , p1963-1990
- [15] Mark Lundstrom "Fundamental of Carrier Transport" Second Edition Cambridge University Press(2000) p29-30
- [16] N. W. Ashcroft, N.D. Mermin "Solid State Physics" Philadelphia: W. B. Saunders (1976) p11
- [17] Michael Shure "GaAs Devices and Circuits" (1990) p 37

۱-۲ مقدمه

در یک بلور کامل حالت الکترون توسط تابع موج وابسته به آن توصیف می شود. چون در این حالت عملگر هامیلتونی مستقل از زمان است، انرژی و اندازه حرکت الکترون با زمان تغییر نمی کند. در تقریب نیمه کلاسیک الکترون در بلور کامل به صورت ذره آزاد با جرمی معادل جرم مؤثر در نظر گرفته می شود. به عبارت دیگر برهمکنش الکترون با پتانسیل دوره ای شبکه در جرم الکترون منظور شده و الکترون برهمکنش دیگری با اتم های شبکه نخواهد داشت. بنابراین در یک بلور کامل انتظار می رود با اعمال میدان الکتریکی سرعت الکترون ها با شتاب ثابتی افزایش یابد، اما در عمل سرعت الکترون ها به مقدار ثابتی محدود می گردد. علت محدود شدن سرعت الکترون برهمکنش آن با ناکاملی های بلور است. به این برهمکنش ها فرایندهای برخورد یا پراکندگی^۱ گفته می شود. اثر این برهمکنش ها به صورت اختلال در پتانسیل دوره ای اتم های شبکه منظور می شود. به این ترتیب می توان اثر ناکاملی های بلور بر حرکت الکترون را به کمک روش اختلال وابسته به زمان^۲ بررسی کرد [۱]. برای محاسبه ضرایب ترابری در نیمرسانا باید اطلاعات دقیق و کاملی در مورد فرایندهای مختلف پراکندگی در آن ماده داشت. به همین علت در این فصل ابتدا انواع ناکاملی های بلور را معرفی کرده، سپس پتانسیل اختلالی که هر یک از آنها تولید می کنند را بررسی می کنیم و به کمک آن آهنگ پراکندگی دیفرانسیلی را بدست می آوریم. با انتگرال گیری از این رابطه روی تمام حالت های نهایی مجاز بردار موج می توان آهنگ پراکندگی کل را محاسبه کرد.

^۱ - Scattering processes

^۲ - Time-dependent perturbation method

۲-۲ ناکاملی های بلور^۱

بلور کامل بلوری است که تمامی اتم های تشکیل دهنده آن از نظم شبکه برآوه بلور تبعیت کنند. در عمل عوامل مختلفی موجب از بین رفتن نظم اتم های شبکه و پتانسیل تناوبی آن می شوند. از جمله، نواقص بلوری^۲، اتم های ناخالصی یونیزه^۳ و نوسانات شبکه^۴. در این حالت بلور را ناکامل گویند

۱-۲-۲ نواقص بلوری

منظور از نواقص بلوری قرار نگرفتن گروهی از اتم های تشکیل دهنده بلور در نقاط شبکه است . نواقص بلوری به انواع زیر تقسیم می شوند :

نواقص نقطه ای^۵ : در این نقص بلوری اتم ها بصورت منفرد در نقاط شبکه قرار ندارند. مانند تهی جاها^۶.

نواقص خطی^۷ : در این نقص بلوری اتم ها در یک بعد در نقاط شبکه قرار ندارند . مانند دررفتگی ها^۸.

نواقص سطحی^۹ : در این نقص بلوری اتم ها در دو بعد در نقاط شبکه قرار ندارند (به علت پایان یافتن بلور)^[۲].

در این کار پژوهشی بلور بصورت خالص و بدون هیچ یک از نواقص بلوری مذکور در نظر گرفته شده است.

^۱ - Crystal imperfections

^۲ - Crystal defects

^۳ - Ionized impurities

^۴ - Crystal vibrations

^۵ - Point defects

^۶ - Vacancies

^۷ - Line defects

^۸ - Dislocations

^۹ - Surface defects

۲-۲-۲ اتم های ناخالصی

به دلیل تفاوت پتانسیل بوجود آمده از اتم های ناخالصی با اتم های تشکیل دهنده بلور، اتم های ناخالصی موجب مختل شدن پتانسیل دوره ای بلور کامل می شوند. چون امکان رشد بلورهای کاملاً خالص در عمل میسر نیست و جهت ساخت قطعات نیم رسانای مختلف به شکل کنترل شده ناخالصی به بلور وارد می شود، جهت مطالعه رفتار الکترون در بلور همواره باید فرآیند پراکندگی الکترون به دلیل اتم های ناخالصی در نظر گرفته شود. اتم های ناخالصی ترازهایی در گاف انرژی بوجود می آورند، در دماهای بسیار پائین ترازهای انرژی مربوط به ناخالصی های از نوع دهنده کاملاً پر و ترازهای انرژی مربوط به ناخالصی های پذیرنده کاملاً خالی است. با افزایش دما امکان گذار الکترون از ترازهای پر به ترازهای خالی امکان پذیر است، که نتیجه آن یونیزه شدن اتم های ناخالصی است. در دماهای معمولی پراکندگی الکترون به دلیل اتم های ناخالصی یونیزه در نظر گرفته می شود [۳].

۳-۲-۲ ارتعاشات شبکه

در یک ساختار تناوبی کامل فرض می شود اتم ها در نقاط شبکه برآه ثابت باشند سپس نوارهای انرژی بلور را بررسی می کنیم. ما می دانیم اتم ها حول مکان تعادلشان ارتعاشات تصادفی گرمایی انجام می دهند که دامنه آن بستگی به دما دارد. این ارتعاشات موجب مختل شدن پتانسیل دوره ای شبکه می شوند. بر خلاف اتم های ناخالصی و نواقص بلوری که با خالص کردن بلور و بهبود بخشیدن فرآیند رشد بلور می توان اثرات آن را کم کرد، نوسانات شبکه همیشه وجود دارند. بخاطر نیروهای پیوندی که ساختار بلوری را ایجاد می کنند، حرکت تصادفی اتم ها به شدت با یکدیگر جفت شده اند. وقتی الکترون ها و حفره ها در بلور حرکت می کنند، می توانند با اتم های شبکه انرژی و اندازه حرکت مبادله کنند. در این مورد حامل های الکتریکی توسط ارتعاشات گرمایی بلور پراکنده می شوند و یک تعادل ترمودینامیکی بین بلور و الکترون ها و

حفره ها برقرار می شود. از آنجاییکه این رخدادهای پراکندگی نقش مهمی در خواص ترابری نیمرساناها بازی می کنند ضروری است که یک توصیف ریاضی از نوسانات شبکه بدست آوریم [۴]. کوانتم انرژی نوسانات شبکه فونون^۱ نامیده می شود. فونون ها ذراتی از نوع بوزون^۲ هستند با انرژی $\hbar\omega_q$ و اندازه حرکت $\hbar q$ ، که ω_q فرکانس زاویه ای و q بردار موج مربوط به آن مد نوسانی است. انرژی یک مد نوسانی مشخص شبکه بر اساس تعداد فونون های مربوط به آن مد تعیین می شود و رابطه آن به شکل:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_q \quad (1-2)$$

است. که در آن n تعداد فونون های مربوط به آن مد نوسانی با فرکانس زاویه ای ω_q است و فقط مقادیر صحیح را می گیرد.

از دیدگاه مکانیک آماری، تعداد ذرات هر مد نوسانی برابر با احتمال اشغال آن مد است. پس تعداد فونون ها در تعادل گرمایی در یک مد نوسانی با فرکانس ω_q به صورت:

$$n = \frac{1}{\exp(\frac{\hbar\omega_q}{k_B T}) - 1} \quad (2-2)$$

است، که در آن k_B ثابت بولتزمن و T دمای شبکه است. از رابطه بالا می توان نوشت:

$$E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega_q + \frac{\hbar\omega_q}{\exp(\hbar\omega_q/k_B T) - 1} \quad (3-2)$$

این انرژی است که می تواند در فرایند پراکندگی مبادله شود [۵].

اگر $\hbar\omega_q \ll k_B T$ معادله (۲-۲) را می توان بصورت زیر ساده کرد:

$$n \cong \frac{k_B T}{\hbar\omega_q} \quad (4-2)$$

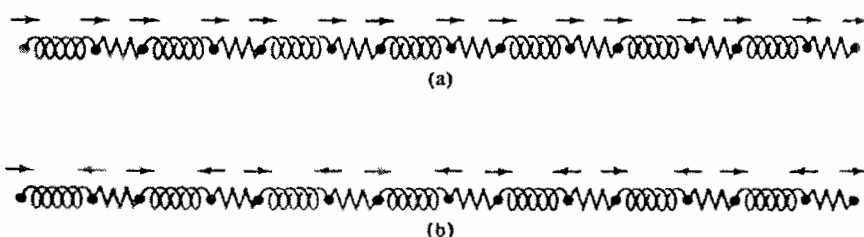
که رابطه همپاری^۳ نام دارد. رابطه (۴-۲) به سادگی تعداد فونون ها در هر انرژی گرمایی را مشخص می کند [۶].

^۱ - Phonon

^۲ - Bosone

^۳ - Equipartition relation

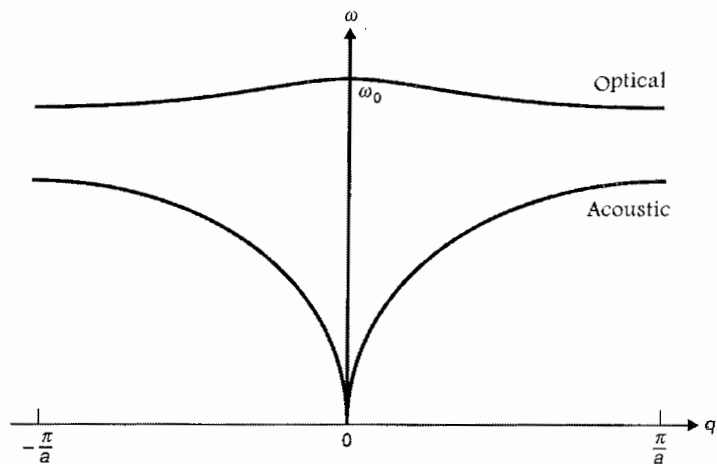
در یک بلور خطی با ثابت شبکه a و دو اتم در هر سلول واحد مدهای نوسانی به دو نوع آکوستیکی^۱ و اپتیکی^۲ تقسیم می شوند. در مد آکوستیکی دو اتم همسایه در یک جهت نوسان می کنند، فقط اندازه جابجایی از اتمی به اتم دیگر تغییر می کند. در حالیکه در مد اپتیکی نوسان اتم های همسایه در فاز مقابل است (شکل ۱-۲).



شکل ۱-۲: (a) مدهای آکوستیکی (b) مدهای اپتیکی در یک زنجیره خطی از اتم ها. سلول واحد شامل دو یون متفاوت است. در هر دو مورد حرکت سلول واحد یکسان است، ولی در مد آکوستیکی یون های یک سلول در یک جهت حرکت می کنند. در حالیکه در مد اپتیکی دو اتم 180° اختلاف فاز دارند [۷].

شکل ۲-۲ رابطه فرکانس زاویه ای برحسب بردار موج مد نوسانی را نمایش می دهد (رابطه پاشندگی^۳). در شاخه پائینی منحنی، برای بردارهای موج واقع در همسایگی مرکز منطقه اول بریلوئن یعنی برای مقادیر کوچک k رابطه فرکانس زاویه ای برحسب بردار موج خطی است [۷]. چون در k های کوچک رابطه پاشندگی این شاخه به شکل $\omega = ck$ است که مشخصه امواج صوتی می باشد، مد آکوستیکی نامیده می شود. در یک بلور سه بعدی مد آکوستیکی خود دارای سه شاخه است. یک مد آکوستیکی طولی^۴ (LA) و دو مد آکوستیکی عرضی^۵ (TA). در امواج طولی اتم ها در جهت انتشار نوسان می کنند، در حالیکه در امواج عرضی اتم ها در راستای عمود بر جهت انتشار موج نوسان می کنند.

^۱ - Acoustic mode
^۲ - Optical mode
^۳ - Dispersion relation
^۴ - Longitudinal acoustic mode
^۵ - Transverse acoustic mode

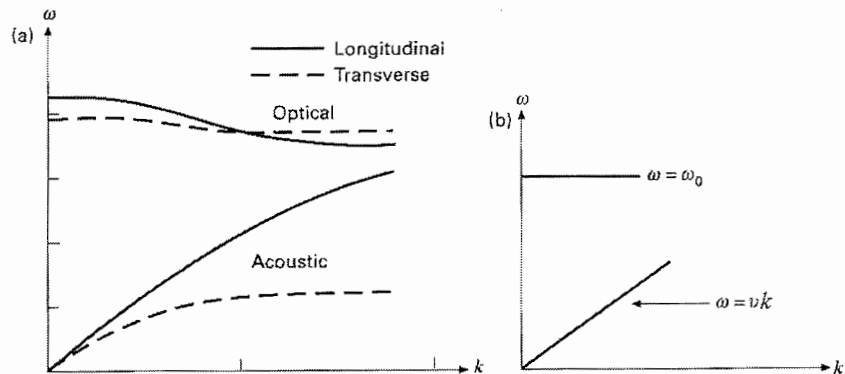


شکل ۲-۲: رابطه پاشندگی برای یک بلور با دو اتم در سلول واحد. شامل شاخه آکوستیکی (شاخه پایینی) و اپتیکی (شاخه بالایی) [۸].

رابطه پاشندگی برای مدهای اپتیکی نزدیک مرکز منطقه بریلوئن با بستگی بسیار کم به بزرگی بردار موج کاملاً هموار است. با نزدیک شدن به مرز منطقه فرکانس زاویه ای کاهش می یابد. از آنجاییکه این نوسانات به شدت با نور برهمکنش می کنند به آنها مد اپتیکی می گویند. در یک بلور سه بعدی مد اپتیکی هم دارای سه شاخه است. یک مد اپتیکی طولی^۱ (LO) و دو مد اپتیکی عرضی^۲ (TO).

وقتی الکترون ها توسط فونون های اپتیکی پراکنده می شوند و در همان دره باقی می مانند، فقط بردار موج های کوچک در فرایند پراکندگی شرکت داشته اند. رابطه پاشندگی در این مورد را بطور تقریبی می توان بصورت $\omega(k) = \omega_0$ نوشت، که یک مقدار ثابت است. شکل ۲-۳ رابطه پاشندگی ساده شده برای مدهای آکوستیکی و اپتیکی که اغلب برای محاسبات پراکندگی استفاده می شود را نشان می دهد [۹].

^۱ - Longitudinal optical mode
^۲ - Transverse optical mode



شکل ۳-۲: (a) - رابطه پاشندگی برای مدهای اکوستیکی و اپتیکی طولی و عرضی در نیمرساناهای مکعبی (b) رابطه پاشندگی ساده شده هنگامی که فقط نوسانات طولی شبکه نزدیک مرز منطقه اول بریلوئن در نظر گرفته شود [۹].

۳-۲ روش اختلال وابسته به زمان

جهت بررسی اثر پراکندگی ها بر حرکت الکترون از روش اختلال وابسته به زمان استفاده می شود. در این روش اثر ناکاملی های بلور به صورت پتانسیل های مختل کننده پتانسیل دوره ای اتم های بلور در نظر گرفته می شود. برهمکنش الکترون با این پتانسیل ها موجب تغییر حالت الکترون می شود. توسط روش اختلال وابسته به زمان نشان داده می شود که تعداد گذارهای مرتبه اول الکترون از حالت اولیه k به حالت نهایی k' در واحد زمان، از قاعده پلائی فرمی^۱ بدست می آید، بطوریکه خواهیم داشت:

$$s(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |M(k, k')|^2 \delta(E(k) - E(k') \pm \hbar\omega_p) \quad (5-2)$$

در رابطه فوق تابع دلتای دیراک مبین اصل بقای انرژی است. $M(k, k')$ عنصر ماتریس گذار^۲ بوده و از رابطه زیر بدست می آید [۱۰]:

$$M(k, k') = \langle \Psi_{k'} | \Delta U | \Psi_k \rangle = \frac{1}{N} \int \Psi_{k'}^* \Delta U \Psi_k d^3r \quad (6-2)$$

^۱ - Fermi golden role

^۲ - Transition matrix element

که در آن ΔU پتانسیل اختلال است و انتگرال روی حجم سلول واحد گرفته می شود. Ψ_k و $\Psi_{k'}$ به ترتیب توابع موج بلوخ حالت های اولیه و نهایی هستند. بعلاوه عنصر ماتریسی باید در بردارنده شرایط پایستگی تکانه نیز باشد، یعنی داشته باشیم:

$$k - k' \pm q = G \quad (7-2)$$

که در آن G یک بردار شبکه وارون و q بردار موج فونون است. علامت مثبت برای وقتی است که تکانه حالت نهایی بزرگتر از تکانه حالت اولیه باشد که این متناظر با جذب فونون^۱ توسط الکترون است. علامت منفی برای وقتی است که تکانه حالت نهایی کوچکتر از تکانه حالت اولیه باشد و این متناظر با گسیل فونون^۲ توسط الکترون است [۱۰].

بسط فوریه^۳ پتانسیل اختلال بوجود آمده به دلیل ناکاملی های بلور را می توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$\Delta U = \sum_g A_g \exp(ig \cdot r) \quad (8-2)$$

که در آن A_g ها ضرایب بسط فوریه هستند. با جایگذاری رابطه (۸-۲) در (۶-۲) و محاسبه انتگرال، عنصر ماتریس گذار از رابطه زیر بدست می آید:

$$M(k, k') = \frac{A_g}{N} \int_V \varphi_{k'\beta'}^* \varphi_{k\beta} d^3r \quad (9-2)$$

مجذور عنصر ماتریس گذار را می توان بصورت زیر نوشت:

$$|M(k, k')|^2 = A G(k, k') \quad (10-2)$$

که در آن A به نوع فرایند پراکندگی بستگی دارد [۱۱]. $G(k, k')$ انتگرال همپوشانی^۴ بین قسمت های تناوبی توابع موج بلوخ حالت های اولیه و نهایی است و از رابطه زیر بدست می آید:

$$G(k, k') = \frac{1}{2} \sum_{\beta\beta'} \left| \int \varphi_{k'\beta'}^* \varphi_{k\beta} dr \right|^2 \quad (11-2)$$

انتگرال روی یک سلول واحد گرفته می شود. β و β' مشخص کننده حالت های اسپینی هستند و جمع بندی روی این حالت های اسپینی انجام می شود. $\varphi_{k\beta}$ به حجم سلول بهنجار^۵ شده است.

^۱ - Phonon absorption

^۲ - Phonon emission

^۳ - Fourier expansion

^۴ - Overlap integral

^۵ - Normalized

انتگرال همپوشانی برای امواج تخت و توابع موج نوع s خالص یعنی نوارهای انرژی سهموی با توجه به بهنجار بودن توابع موج برابر ۱ است. وقتی غیرسهموی بودن نوار انرژی در نظر گرفته شود $G(k, k')$ همواره کمتر از ۱ و به صورت تابعی از ضریب غیر سهموی بودن نوار انرژی، α ، خواهد بود. طبق نظریه کین می توان آنرا بصورت زیر نوشت [۱۲]:

$$G(k, k') = (a_k a_{k'} + c_k c_{k'} \cos \theta)^2 \quad (12-2)$$

که θ زاویه بین k و k' است. کمیت های a_k و c_k بصورت زیر تعریف می شوند:

$$a_k = \left[\frac{1 + \alpha E(k)}{1 + 2\alpha E(k)} \right]^{1/2} \quad (13-2)$$

$$c_k = \left[\frac{\alpha E(k)}{1 + 2\alpha E(k)} \right]^{1/2} \quad (14-2)$$

در مورد نوارهای انرژی غیرسهموی حاصل انتگرال همپوشانی به زاویه بین بردارهای موج الکترون قبل و بعد از پراکندگی بستگی دارد.

۲-۴ استتار^۱ توسط حامل های الکتریکی

برای یک ناخالصی یونیزه فرایند پراکندگی به برهمکنش الکتریکی بین بار یون و بار حامل های آزاد غلبه می کند. برای یک یون با بار Zq اختلال در پتانسیل بلور کامل بطور ساده انرژی کولنی

$$\Delta U = \frac{\pm Zq^2}{4\pi\epsilon(0)r} \quad (15-2)$$

است. که r فاصله بین یون و حامل بار است. علامت مثبت برای وقتی است که یون و حامل بار قطبش یکسان داشته باشند و علامت منفی برای وقتی است که بارهای آنها قطبش یکسان نداشته باشند. در رابطه بالا استتار پتانسیل کولنی حاصل از قطبش اتمی و یونی اتم های سازنده بلور با استفاده از گذردهی ایستایی^۲ $\epsilon(0)$ توصیف می شود. بخاطر طبیعت بلند- برد پتانسیل کولنی ضروری است که استتار بوسیله حامل های آزاد دیگر و ناخالصی های یونیزه را نیز در نظر بگیریم.

^۱ - Screening

^۲ - Static permittivity

استتار ناشی از حضور الکترون های آزاد دیگر است، که یک ابر الکترونی در اطراف یون ایجاد می کنند، آنچنان که اثر پتانسیل کوتاه - برد می شود.

در استخراج پتانسیل های پراکندگی ما فرض می کنیم که هیچ بار فضایی وجود ندارد. در واقع فرض می کنیم حامل های بار توزیع یکنواختی داشته باشند، بطوریکه داشته باشیم:

$$-\rho = q(n - p + N_a^+ - N_d^-) = 0 \quad (16-2)$$

در اطراف یک پتانسیل اختلال بلوری به سبب ناخالصی ها و یا فونون ها، حامل های بار می توانند بوسیله پتانسیل پراکندگی انباشته شوند یا کاهش یابند. این بارهای فضایی یک پتانسیل اضافی تولید می کنند که با رابطه پواسن بصورت زیر مطرح می شود:

$$\nabla^2 \psi(r) = -\frac{\rho(r)}{\epsilon(0)} \quad (17-2)$$

که در آن چگالی بار فضایی عبارتست از:

$$-\rho(r) = q(n(r) - p(r) + N_a^+(r) - N_d^-(r)) \quad (18-2)$$

اثر پتانسیل پراکندگی را استتار می کند. در رابطه بالا $n(r)$ تراکم الکترون ها، $p(r)$ تراکم حفره ها، $N_a^+(r)$ تراکم پذیرنده های یونیزه و $N_d^-(r)$ تراکم دهنده های یونیزه به صورت تابعی از r است، که فاصله تا مرکز پتانسیل اختلال می باشد. با جایگذاری چگالی بار فضایی از رابطه (18-2) در معادله پواسن و سپس حل آن خواهیم داشت:

$$\psi(r) = \frac{C}{r} \exp\left(\frac{-r}{\lambda}\right) \quad (19-2)$$

که در آن C یک ثابت بوده و برابر $\frac{Zq^2}{4\pi\epsilon}$ است. λ نیز طول مؤثر دبی^۱ نامیده شده، بصورت زیر تعریف می شود:

$$\lambda^2 = \frac{e^2}{\epsilon_0 k_B T} \int_0^\infty \frac{(k/\pi)^2 \exp[(E - E_f)/k_B T]}{(\exp[(E - E_f)/k_B T] + 1)^2} dk \quad (20-2)$$

بدست می آید. که در آن انرژی فرمی، E_f انرژی الکترون و k_B ثابت بولتزمن است.

از رابطه (19-2) دیده می شود که انباشتگی یا کاهش حامل های بار، یک کاهش نمایی با طول مشخصه λ در پتانسیل پراکندگی ایجاد می کند [۱۳].

^۱ - Debye effective length

۲-۵ انواع فرایندهای پراکندگی

گذارهای الکترون به دلیل برهمکنش الکترون - فونون در نیمرساناهایی که نوار رسانش آنها شامل چند کمینه (دره) است، به دو نوع درون دره ای^۱ و بین دره ای^۲ تقسیم می شود. هنگامی که الکترون قبل و بعد از پراکندگی در یک کمینه نوار انرژی بماند گذارها درون دره ای هستند. در گذار بین دره ای الکترون قبل و بعد از پراکندگی در دره های مختلف انرژی قرار دارد.

۲-۵-۱ پراکندگی ناشی از فونون های آکوستیکی

فونون های آکوستیکی در یک بلور می توانند حامل ها را بوسیله دو فرایند کاملاً مستقل پراکنده کنند. پراکندگی پتانسیل تغییر شکل^۳ شبکه و پراکندگی پیزوالکتریک^۴. محدوده انرژی فونون های آکوستیکی بین صفر و $2\hbar vk$ است. که در آن v سرعت صوت در ماده نیمرسانا و k بردار موج فونون است (زیرا قانون بقای اندازه حرکت بلوری بردار موج فونون را بین صفر و $2k$ محدود می کند). به طور معمول، مقدار متوسط k حدود 10 cm^{-1} و سرعت صوت در نیمرساناها از مرتبه 10^5 cm/s است. پس مقدار $2\hbar vk$ تقریباً برابر 1 meV می باشد که در مقایسه با انرژی گرمایی الکترون ها در دمای اتاق اندک است. پس پراکندگی از فونون های آکوستیکی یک پراکندگی کشسان است [۱۴].

۲-۵-۲ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه

در شکل ۲-۴ جابجایی یک زنجیره از اتم ها از مکان های شبکه برآوه برای مؤلفه های طولی و عرضی فونون های آکوستیکی در مرکز و لبه منطقه بریلوئن نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود فاصله بین اتم های مجاور در سلول واحد به شدت تحت تأثیر فونون های آکوستیکی طولی قرار می گیرد، ولی تأثیر فونون های آکوستیکی عرضی کمتر است. تغییر ثابت

^۱ - Intravalley

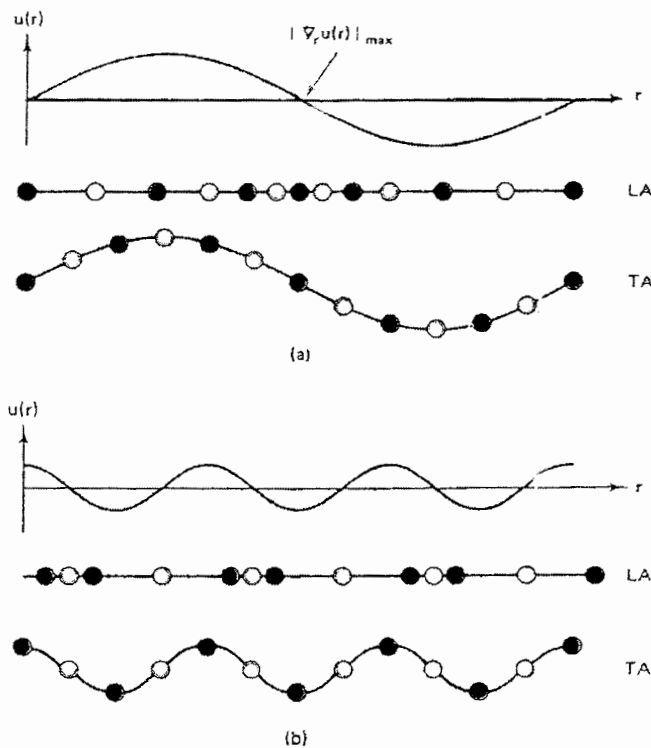
^۲ - Intervalley

^۳ - Deformation potential scattering

^۴ - Piezoelectric scattering

شبکه باعث تغییر گاف نواری می شود، پس فونون های آکوستیکی طولی لبه نواری رسانش و لبه نواری ظرفیت را اصلاح کرده، پتانسیل تناوبی بلور را مختل می کند، این پتانسیل که پتانسیل تغییر شکل شبکه نام دارد باعث پراکندگی حامل ها می شود.

بیشترین انبساط و انقباض سلول واحد وقتی توسط فونون های آکوستیکی طولی رخ می دهد که دیورژانس بردار جابجایی یا کرنش^۱ بیشترین مقدار را داشته باشد. پس پتانسیل پراکندگی برای پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه باید متناسب با کرنش باشد.



شکل ۲-۴: جابجایی یک زنجیره از اتم ها برای فونون های LA و TA در a (مرکز منطقه و b) مرز منطقه بریلوئن. اتم های سبکتر بوسیله دایره های تو خالی مشخص شده است. در مرز منطقه فقط اتم های سنگینتر جابجا می شوند [۱۵].

جابجایی حاصل از یک فونون آکوستیکی با فرکانس ω_s و بردار موج \vec{Q}_s را در نظر می گیریم:

$$\vec{u}(r,t) = \vec{a} u(r,t) \quad (2-21)$$

که در آن داریم:

^۱ - Strain

$$u(r,t) = u \exp[i(\vec{q}_s \cdot \vec{r} - \omega_s t)] \quad (22-2)$$

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

$$\nabla \cdot \vec{u}(r,t) = \vec{a} \cdot \nabla u(r,t) \quad (23-2)$$

$$\nabla \cdot \vec{u}(r,t) = i\vec{q}_s \cdot \vec{a} u(r,t) \quad (24-2)$$

معادله (24-2) نشان می دهد برای مؤلفه عرضی فونون ها ، که جابجایی و بردار موج متعامد هستند، یعنی : $\vec{q}_s \cdot \vec{a} = 0$ ، هیچ کرنشی ایجاد نمی شود . پتانسیل پراکندگی برای مؤلفه طولی بصورت زیر تعریف می شود:

$$\Delta U = \varepsilon_A \nabla \cdot \vec{u}(r,t) \quad (25-2)$$

که پتانسیل تغییر شکل ، ε_A ، بر حسب انرژی به عنوان ثابت تناسب بین پتانسیل پراکندگی و کرنش تعریف می شود [۱۵].

آهنگ پراکندگی دیفرانسیلی برای این پتانسیل اختلالی بصورت زیر است:

$$s_{ac} = \frac{2\pi}{\hbar} B_a(k, k') N_a \delta[E(k') - E(k)] \quad (26-2)$$

که در آن:

$$B_a(k, k') = 2 \frac{\hbar \varepsilon_A^2}{2\rho v V} |k - k'| G(k, k') \quad (27-2)$$

$$N_a = \left[\exp\left(\frac{\hbar v(k - k')}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \approx \frac{k_B T}{\hbar v |k - k'|} \quad (28-2)$$

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

برای محاسبه آهنگ پراکندگی کل در فرایندهای پراکندگی کشسان باید از رابطه (26-2) روی تمام حالت های مجاز انتگرال گرفت. بطوریکه خواهیم داشت:

$$\nu_{el} = \frac{1}{\tau} = \int (1 - X) s_{el} d^3 K \quad (29-2)$$

ν_{el} آهنگ پراکندگی کل مربوط به یک فرایند پراکندگی خاص و X کسینوس زاویه بین k و k' است.

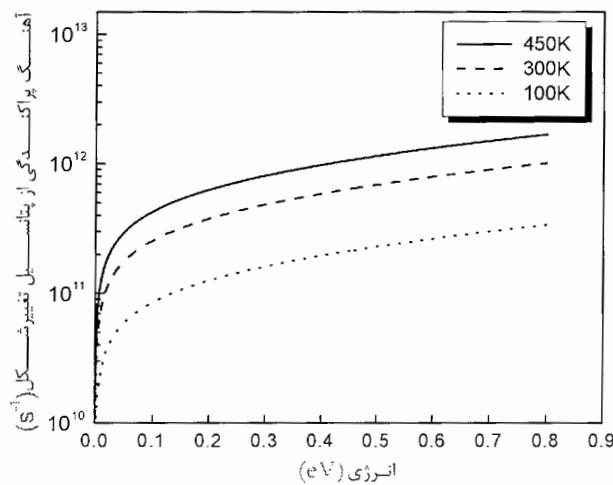
با جایگذاری رابطه (۲۶-۲) در (۲۹-۲) و محاسبه انتگرال بدست می آوریم [۱۶]:

$$\nu_{ac} = \frac{(2m^*)^{3/2} k_B T \varepsilon_A^2}{2\pi\rho v^2 \hbar^4} \gamma^{1/2}(E)(1+2\alpha E) F_{ac}(E) \quad (۳۰-۲)$$

که در آن F_{ac} تابع انرژی الکترون بوده و بصورت زیر تعریف می شود:

$$F_{ac}(E) = \frac{(1+\alpha E)^2 + \frac{1}{3}(\alpha E)^2}{(1+2\alpha E)^2} \quad (۳۱-۲)$$

در روابط بالا α ضریب غیرسه‌موی بودن نوار انرژی است و $\gamma(E)$ طبق رابطه (۱۹-۱) تعریف می شود. برای بررسی دقیق تر این آهنگ پراکندگی یک زیر برنامه کامپیوتری برای رابطه (۳۱-۲) نوشته شده و برای نیمرسانای *GaAs* اجرا شده است. شکل ۲-۵ تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون از فونون های آکوستیکی تغییر شکل شبکه را برحسب انرژی در دماهای مختلف در نیمرسانای *GaAs* نشان می دهد. همانطور که ملاحظه می شود با افزایش انرژی آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه افزایش می یابد. همچنین در دماهای بالاتر آهنگ پراکندگی الکترون ها هم بیشتر می شود. زیرا با افزایش دما دامنه نوسانات اتم ها افزایش می یابد.



شکل ۲-۵: تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون از پتانسیل تغییر شکل شبکه برحسب انرژی در دماهای مختلف در نیمرسانای *GaAs*

۳-۵-۲ پراکندگی پیزوالکتریک

در نیمرساناهای با دو اتم متفاوت در هر یاخته واحد مانند ترکیبات نیمرسانای دوتایی II-IV و III-V که بلور فاقد تقارن انعکاسی است، نوسان شبکه موجب قطبش یون ها و بوجود آمدن میدان های الکتریکی درون نیمرسانا می شود. این پدیده را پیزوالکتریک می گویند. این میدان های الکتریکی باعث مختل شدن پتانسیل دوره ای بلور می شوند. پراکندگی حامل ها از این میدان های الکتریکی پیزوالکتریک نامیده می شود. پتانسیل اختلال ایجاد شده برای الکترون ها بصورت زیر است:

$$\Delta U(r,t) = -e\Psi(r,t) \quad (۳۲-۲)$$

که ΔU پتانسیل الکترواستاتیکی ایجاد شده به علت میدان های داخلی و $\Psi(r,t)$ بصورت زیر است:

$$\Psi(r,t) = -\int \vec{E}(r,t) \cdot d\vec{r} \quad (۳۳-۲)$$

برای استخراج رابطه (۳۳-۲) لازم است میدان ایجاد شده به علت برهمکنش پیزوالکتریک را محاسبه کنیم. در یک فرکانس مشخص ω رابطه بین چگالی شار الکتریکی D ، میدان الکتریکی E و قطبش P بصورت زیر است:

$$D(\omega) = \varepsilon(\omega)E = \varepsilon_0 E + P(\omega) \quad (۳۴-۲)$$

که در آن ε_0 گذردهی الکتریکی خلاء است. در حد فرکانس های پایین رابطه (۳۴-۲) بصورت زیر نوشته می شود:

$$D(0) = \varepsilon(0)E = \varepsilon_0 E + P(0) \quad (۳۵-۲)$$

$\varepsilon(0)$ گذردهی استاتیکی است. منشاء $D(0)$ بارهای واقعی است در حالیکه منشاء $P(0)$ بارهای قطبشی می باشد که معمولاً هسته های اتمی و دو قطبی های یونی هستند. از آنجاییکه در اندازه گیری ثابت دی الکتریک استاتیک قطبش پیزوالکتریکی وارد نشده است، لازم است یک جمله به رابطه (۳۵-۲) اضافه شود تا اثر آن هم در محاسبات در نظر گرفته شود. این قطبش باید متناسب با کرنش ایجاد شده بوسیله فونون ها باشد. بنابراین می توان نوشت:

$$D(0) = \varepsilon(0)E(r,t) + e_{rzz}\nabla u(r,t) \quad (۳۶-۲)$$

که در آن e_{pz} ثابت پیزوالکتریک است و واحد آن کولن بر متر مربع می باشد. بدون وجود بارهای حقیقی، میدان الکتریکی منشاء پیزوالکتریک، قطبش یونی و اتمی دارد، بطوریکه داریم:

$$E(r,t) = -\frac{e_{pz}}{\epsilon(0)} \nabla u(r,t) \quad (37-2)$$

با استفاده از معادلات (32-2)، (33-2) و (37-2) پتانسیل پراکندگی برحسب جابجایی بصورت زیر است:

$$\Delta U(r,t) = -\frac{e_{pz}}{\epsilon(0)} \nabla u(r,t) \quad (38-2)$$

که e بار الکترون است. با توجه به روابط (22-2) و (23-2) و (38-2) پتانسیل پراکندگی پیزوالکتریک برحسب کرنش بصورت زیر است:

$$\Delta U(r,t) = -\frac{ie_{pz}}{\epsilon(0)q_s} \nabla \cdot \ddot{u}(r,t) \quad (39-2)$$

با مقایسه روابط (25-2) و (39-2) دیده می شود که پتانسیل های پراکندگی برای برهمکنش پیزوالکتریک و پتانسیل تغییر شکل شبکه 90 درجه با یکدیگر اختلاف فاز دارند. بنابراین فرایندهای پراکندگی فونون های آکوستیکی بطور مستقل عمل می کنند [15].

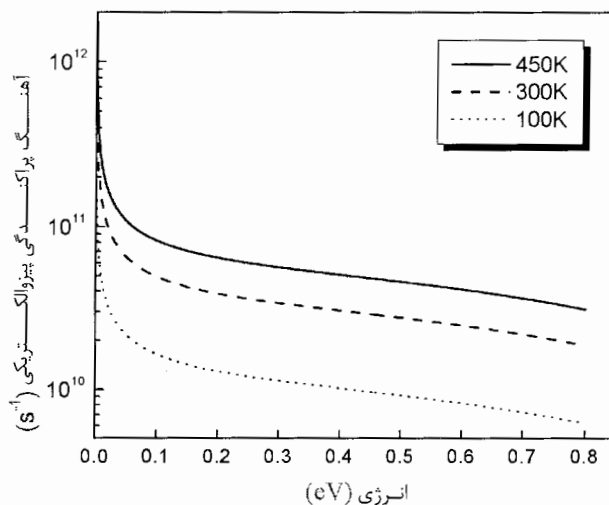
آهنگ پراکندگی دیفرانسیلی برای این پتانسیل اختلالی بصورت زیر است:

$$s_{pz} = \frac{e^2 K_B T P^2}{4\pi^2 \hbar \epsilon(0)} \frac{G(k, k')}{|k - k'|^2} \delta(E(k) - E(k')) \quad (40-2)$$

که در آن \mathcal{P} ضریب پیزوالکتریک بدون بعد است که بستگی به ساختار بلور دارد. با توجه به روابط (29-2) و (40-2) آهنگ پراکندگی کل برای پراکندگی پیزوالکتریک عبارت است از [17]:

$$v_{pz} = \frac{e^2 k_B T P^2 m^{*1/2}}{2\sqrt{2}\pi \hbar^2 \epsilon(0)} \frac{1}{\gamma^{1/2} (1 + 2\alpha E)} \left[(1 + \alpha E)^2 + \frac{1}{3} (\alpha E)^2 \right] \quad (41-2)$$

شکل 2-6 با نوشتن یک زیر برنامه کامپیوتری برای رابطه (41-2) و اجرا برای نیمرسانای *GaAs* بدست آمده، که تغییرات آهنگ پراکندگی پیزوالکتریک را برحسب انرژی در دماهای مختلف برای این نیمرسانا نشان می دهد. همانطور که ملاحظه می شود با افزایش انرژی آهنگ پراکندگی کاهش می یابد. یعنی این فرایند پراکندگی فقط در انرژی های پایین دارای اهمیت است و با افزایش انرژی الکترون از اهمیت آن کاسته می شود.

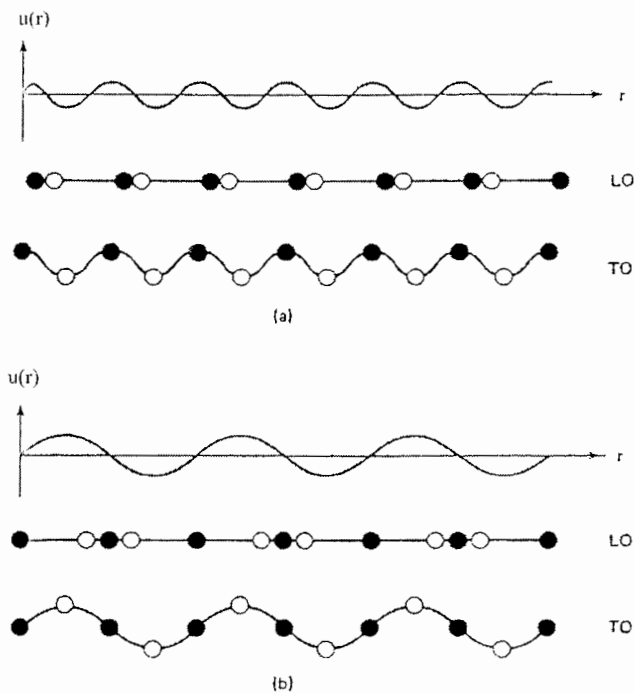


شکل ۲-۶: تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون از اثر پیزوالکتریک برحسب انرژی در دماهای مختلف برای نیمرسانای GaAs

۲-۵-۴ پراکندگی الکترون ناشی از فونون های اپتیکی

فونون های اپتیکی مانند فونون های آکوستیکی به دو طریق متفاوت موجب پراکنده شدن الکترون ها می شوند. پراکندگی الکترون ها به دلیل پتانسیل تغییر شکل بوجود آمده در اثر فونون های اپتیکی را پراکندگی غیر قطبی و پراکندگی الکترون ها به دلیل فرآیند پیزوالکتریک را پراکندگی مد قطبی می گویند. فونون های اپتیکی نسبت به فونون های آکوستیکی پر انرژی تر هستند، انرژی آنها در حدود ۳۰ تا ۵۰ میلی الکترون - ولت است. پس حامل ها تحت تأثیر این فونون ها می توانند پراکندگی ناکشسان داشته باشند. چون این حامل ها در هنگام پراکندگی انرژی قابل ملاحظه ای بدست می آورند یا از دست می دهند. فونون های اپتیکی می توانند سبب پراکندگی بین دره ای یا بین نواری شوند، برای مثال پراکندگی از نوار حفره سبک به نوار حفره سنگین در نوار ظرفیت، یا یک پراکندگی از دره Γ به دره X در نوار رسانش. اما در حد میدان های الکتریکی ضعیف فرض بر این است که پراکندگی بین دره ای یا بین نواری رخ نمی دهد [۱۸].

در شکل ۷-۲ جابجایی یک زنجیره از اتم ها از مکان های شبکه براوه برای فونون های اپتیکی طولی و عرضی نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود همانند فونون های آکوستیکی بیشترین انبساط و انقباض یاخته واحد توسط فونون های اپتیکی طولی ایجاد می شود. با این تفاوت که اتم ها در یاخته واحد بر خلاف یکدیگر ارتعاش می کنند.



شکل ۷-۲ جابجایی یک زنجیره از اتم ها برای فونون های LO و TO در (a) مرکز منطقه و (b) مرز منطقه بریلوئن. اتمهای سبکتر بوسیله دایره های تو خالی مشخص شده است. در مرز منطقه فقط اتم های سبکتر جابجا می شوند [۱۹].

به همین علت برای پراکندگی پتانسیل تغییر شکل (پراکندگی اپتیکی غیرقطبی) لازم است جابجایی نسبی بین اتم ها در سلول واحد در نظر گرفته شود. بطوریکه می توان نوشت:

$$\delta \vec{u}(r, t) = \vec{u}_1(r, t) - \vec{u}_2(r, t) \quad (42-2)$$

که در آن \vec{u}_1 و \vec{u}_2 به شکل معادلات (۲۱-۲) و (۲۲-۲) هستند.

پتانسیل پراکندگی ناشی از تغییر در لبه نوارهای رسانش و ظرفیت باید متناسب با این جابجایی نسبی باشد بطوریکه داریم:

$$\Delta U(r, t) = D \delta \vec{u}(r, t) \quad (43-2)$$

که در آن :

$$\delta \bar{u}(r, t) = \bar{a} \delta u(r, t) \quad (44-2)$$

در رابطه (43-2) پارامتر D ثابت پتانسیل تغییر شکل اپتیکی شبکه است و یکای آن انرژی بر واحد طول می باشد. از آنجاییکه پراکندگی الکترون از فونون های اپتیکی غیرقطبی بسیار ضعیف است و اثر این پراکندگی معمولاً در محاسبات تحرک پذیری در نظر گرفته نمی شود. در این کار تحقیقی ما هم از آن صرف نظر می کنیم.

پراکندگی حامل ها از فونون های اپتیکی قطبی از میدان الکتریکی حاصل از قطبش یون ها در سلول واحد ناشی می شود. این قطبش اساساً توسط مؤلفه طولی فونون های اپتیکی ایجاد می گردد.

پتانسیل پراکندگی از روابط (32-2) و (33-2) بدست می آید و میدان الکتریکی داخلی از رابطه (34-2) در حد فرکانس های بالا و پایین قابل استخراج است. بطوریکه داریم:

$$D(0) = \varepsilon(0)E = \varepsilon_0 E + P(0) \quad (45-2)$$

و

$$D(\infty) = \varepsilon(\infty)E = \varepsilon_0 E + P(\infty) \quad (46-2)$$

توجه کنید که در رابطه اول قطبش فرکانس پایین کل، ناشی از قطبش یونی و اتمی است:

$$P(0) = P(\infty) + P_i \quad (47-2)$$

با جایگذاری رابطه (47-2) در معادله (45-2) و تفاضل آن از (46-2) خواهیم داشت:

$$\varepsilon(0)E = \varepsilon(\infty)E + P_i \quad (48-2)$$

یا :

$$D = \varepsilon(\infty)E + P_i \quad (49-2)$$

قطبش در یک سلول واحد به کمک جابجایی نسبی یون ها δu و بار یونی مؤثر e^* تخمین زده می شود. بطوریکه می توان نوشت:

$$P_i(r, t) = \frac{e^*}{\Omega} \delta \bar{u}(r, t) \quad (50-2)$$

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

$$e^* = \Omega \omega_{LO} \epsilon(\infty) \rho^{1/2} \left[\frac{1}{\epsilon(\infty)} - \frac{1}{\epsilon(0)} \right]^{1/2} \quad (51-2)$$

که در آن ρ چگالی بلور نیمرسانا است. با جایگذاری رابطه (۲-۴۹) در (۲-۵۰) و با فرض اینکه هیچ بار فضایی یا سطحی وجود نداشته باشد، میدان الکتریکی داخلی بدست می آید:

$$\vec{E}(r, t) = - \frac{e^*}{\Omega \epsilon(\infty)} \delta \vec{u}(r, t) \quad (51-2)$$

با توجه به روابط (۲-۳۲)، (۲-۳۳) و (۲-۵۱) پتانسیل پراکندگی برای مد اپتیکی قطبی بصورت زیر خواهد بود [۱۹]:

$$\Delta U(r, t) = - \frac{ie^* e}{\Omega \epsilon(\infty) q_s} \delta u(r, t) \quad (52-2)$$

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

$$s_{PO} = \frac{e^2 \omega_{PO}}{8\pi^2} \left(\frac{1}{\epsilon_x} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{G(k, k')}{|k - k'|^2} \times \begin{cases} \delta(E(k) - E(k') + \hbar\omega_{PO})(N_{PO} + 1) & \text{گسیل} \\ \delta(E(k) - E(k') - \hbar\omega_{PO})N_{PO} & \text{جذب} \end{cases} \quad (53-2)$$

که آن ϵ_x و ϵ_0 به ترتیب گذردهی فرکانس بالا^۱ و گذردهی فرکانس پایین^۲ شبکه بلور هستند. $\hbar\omega_{PO}$ انرژی فونون های اپتیکی طولی می باشد که فرض کرده ایم ثابت باشد و N_{PO} عدد اشغال فونونی^۳ است. یعنی تعداد متوسط فونون های هر مد نوسانی و فرض می شود از توزیع بوز - انیشتین^۴ تبعیت کند:

$$N_{PO} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{PO}}{k_B T}\right) - 1} \quad (54-2)$$

N_{PO} متناظر با پراکندگی بوسیله جذب فونون و $N_{PO} + 1$ متناظر با پراکندگی بوسیله گسیل فونون است [۲۰]. بنابراین با محاسبه می توان نشان داد آهنگ پراکندگی کل الکترون ها در اثر فونون های اپتیکی قطبی شبکه در حالت جذب و گسیل فونون عبارتست از:

^۱ - High frequency permittivity

^۲ - Low frequency permittivity

^۳ - Phonon occupation number

^۴ - Bose-Einstein distribution

$$v_{po} = \frac{em^* \omega_{po}}{\sqrt{2} \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{(1+2\alpha E')}{\gamma^{1/2}(E)} F(E, E') \times \begin{cases} (N_{po} + 1) & \text{گسیل} \\ N_{po} & \text{جذب} \end{cases} \quad (55-2)$$

که در آن داریم :

$$E' = \begin{cases} E - \hbar\omega_{po} \\ E + \hbar\omega_{po} \end{cases} \quad (56-2)$$

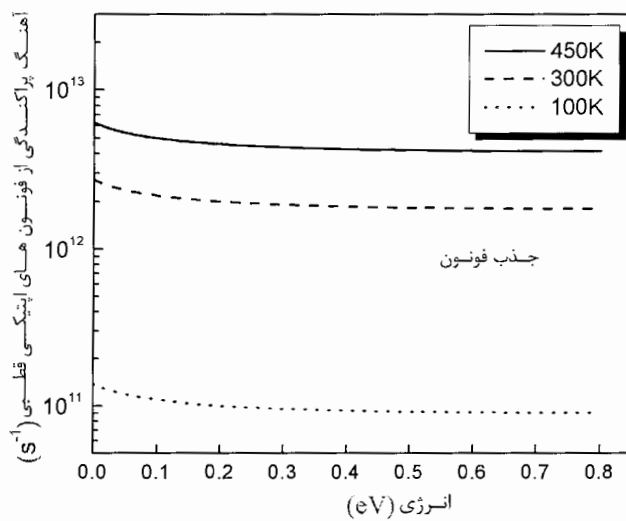
$$F_{po}(E, E') = C^{-1} \left(A \ln \left| \frac{\gamma^{1/2}(E) + \gamma^{1/2}(E')}{\gamma^{1/2}(E) - \gamma^{1/2}(E')} \right| + B \right) \quad (57-2)$$

$$A = [2(1 + \alpha E)(1 + \alpha E') + \alpha\{\gamma(E) + \gamma(E')\}]^2 \quad (58-2)$$

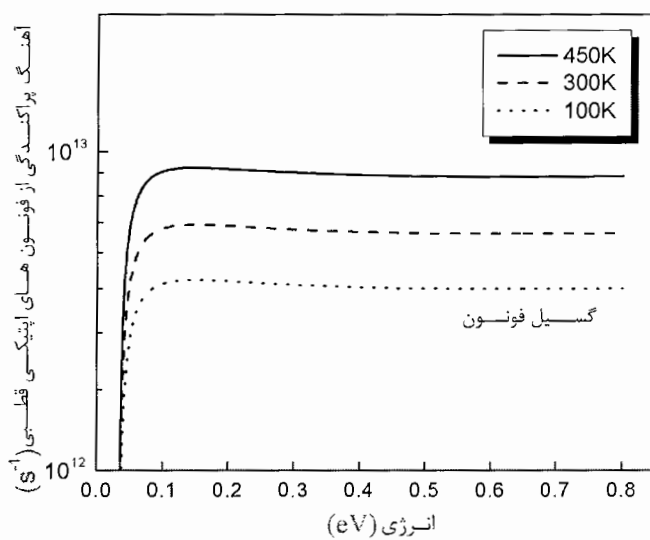
$$B = -2\alpha\gamma^{1/2}(E)\gamma^{1/2}(E')[4(1 + \alpha E)(1 + \alpha E') + \alpha\{\gamma(E) + \gamma(E')\}] \quad (59-2)$$

$$C = 4(1 + \alpha E)(1 + \alpha E')(1 + 2\alpha E)(1 + 2\alpha E') \quad (60-2)$$

برای بررسی دقیق تر این آهنگ پراکندگی یک زیر برنامه کامپیوتری برای رابطه (55-2) نوشته شده و برای نیمرسانای *GaAs* اجرا شده است. شکل های 2-8 و 2-9 تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون از فونون های اپتیکی قطبی شبکه را برحسب تابعی از انرژی در دماهای مختلف در نیمرسانای *GaAs* برای دو حالت جذب و گسیل فونون نشان می دهد. همانطور که از شکل 2-8 مشخص است جذب فونون در هر سطح انرژی الکترونی رخ می دهد. با افزایش انرژی الکترون، آهنگ پراکندگی تغییرات چندانی ندارد و تقریباً ثابت است. ولی در دماهای بالاتر آهنگ پراکندگی بیشتر می شود. در حالت گسیل فونون، تا قبل از رسیدن انرژی الکترون ها به انرژی فونون های اپتیکی آهنگ پراکندگی صفر است. با رسیدن انرژی الکترون ها به انرژی فونون های اپتیکی، آهنگ پراکندگی بطور ناگهانی بالا می رود. سپس با افزایش انرژی، آهنگ پراکندگی به کندی افزایش می یابد. در این حالت هم در دماهای بالاتر آهنگ پراکندگی بیشتر است.



شکل ۸-۲: آهنگ پراکندگی الکترون از فونون های اپتیکی قطبی برحسب انرژی در دماهای مختلف در حالت جذب فونون در نیمرسانای GaAs



شکل ۹-۲: آهنگ پراکندگی الکترون از فونون های اپتیکی قطبی برحسب انرژی در دماهای مختلف در حالت گسیل فونون در نیمرسانای GaAs

۲-۵-۵ پراکندگی الکترون ناشی از ناخالصی های یونیزه

تفاوت تابع پتانسیل یون های ناخالصی با تابع پتانسیل اتم های شبکه موجب مختل شدن پتانسیل دوره ای شبکه بلور می شود. پراکندگی از ناخالصی های یونیزه یک پراکندگی کشسان است. تابع پتانسیل اختلال در آن حالت عبارت است از [۲۱]:

$$\Delta U = \frac{q^2}{\epsilon_0 V (|k - k'|^2 - 1/\lambda^2)} \quad (۶۱-۲)$$

بدست می آید. که در آن q بار یون های ناخالصی، ϵ_0 ضریب گذردهی نیمرسانا، V حجم بلور و λ طول مؤثر دبابی است. آهنگ پراکندگی دیفرانسیلی برای این پتانسیل اختلالی بصورت زیر خواهد بود:

$$s_i = \frac{e^4 N}{4\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar} \frac{G(k, k')}{(1/\lambda^2 + |k - k'|^2)^2} \delta(E(k) - E(k')) \quad (۶۲-۲)$$

که N تراکم مراکز پراکندگی یونیزه ثابت است:

$$N = N^+ + N^- \quad (۶۳-۲)$$

N^+ و N^- به ترتیب تراکم ناخالصی های دهنده و پذیرنده یونیزه است. برای آهنگ پراکندگی کل از مراکز ناخالصی یونیزه داریم:

$$v_i = \int (1 - \mathcal{X}) s_i d^3 K \quad (۶۴-۲)$$

که \mathcal{X} کسینوس زاویه بین k و k' است. با جایگذاری رابطه (۶۲-۲) در (۶۴-۲) خواهیم داشت: [۲۱]:

$$v_i = \frac{e^4 N m d}{8\pi \epsilon_0^2 \hbar^3 k^3} \left[D \ln \left(1 + \frac{4k^2}{1/\lambda^2} \right) - B \right] \quad (۶۵-۲)$$

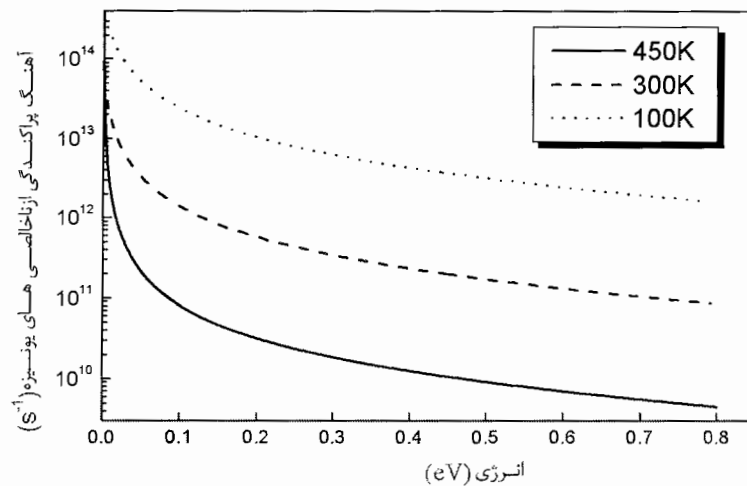
پارامتر d و ضرایب B و D هم بصورت زیر هستند:

$$\frac{1}{d} = 1 + \left[\frac{(m/m^* - 1)}{\alpha} \right] \quad (۶۶-۲)$$

$$D = 1 + 2 \frac{1}{\lambda^2} \frac{c^2}{k^2} + 3 \frac{1}{\lambda^4} \frac{c^4}{4k^4} \quad (۶۷-۲)$$

$$B = \left[4k^2 + 8\left(\frac{1}{\lambda^2} + 2k^2\right)c^2 + \left(3\frac{1}{\lambda^4} + 6\frac{k^2}{\lambda^2} - 8k^4\right)c^4/k^2 \right] / \left(\frac{1}{\lambda^2} + 4k^2 \right) \quad (۶۸-۲)$$

که پارامتر c همان c_k در رابطه (۱۴-۲) است. شکل ۹-۲ با نوشتن یک زیر برنامه کامپیوتری برای رابطه (۶۵-۲) و اجرا برای نیمرسانای $GaAs$ بدست آمده، که تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون از مراکز ناخالصی یونیزه برحسب تابعی از انرژی را در این نیمرسانا نشان می دهد.



شکل ۹-۲ آهنگ پراکندگی الکترون از ناخالصی های یونیزه برحسب انرژی در نیمرسانای $GaAs$

همانطور که ملاحظه می شود با افزایش انرژی، آهنگ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه کم می شود، زیرا با افزایش انرژی الکترون سرعت حرکت آن افزایش پیدا کرده و الکترون مدت زمان کمتری اثر پتانسیل اختلالی اتم های ناخالصی را احساس می کند.

- [1] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p ۱۷۵ -۱۷۶
- [2] N. W. Ashcroft, N.D. Mermin "Solid State Physics" Philadelphia: W. B. Saunders (1976) p618-622
- [3] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p 78-81
- [4] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey 1989 p 102
- [5] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p 107-108
- [6] Mark Lundstrom "Fundamental of Carrier Transport" Second Edition Cambridge University press (2000) p 48
- [7] N. W. Ashcroft, N.D. Mermin "Solid State Physics" Philadelphia: W. B. Saunders (1976) p 233-235
- [8] David K. Ferry "Semiconductors" MacMillan Publishing Company, New York, (1991) p 73
- [9] Mark Lundstrom "Fundamental of Carrier Transport" Second Edition Cambridge University Press (2000) p 46-48
- [10] David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991) p 210-211
- [11] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p 192-193
- [12] W. Fawcett, A.D. Boardman and S. Swain J. Phys. Chem.Solid "Monte Carlo Determination of Electron Transport Properties in GaAs" (1970), Vol 31 ,p1963-1990
- [13] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p 176,183-184
- [14] Subhabrata Dhare and Subhasis Ghosh J.Appl.Phys."Low Field Electron Transport in GaN" (1999) Vol.86, N.5 , p 2668-2676
- [15] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p 177-180
- [16] W. Fawcett, A.D. Boardman and S. Swain J. Phys.Chem.Solid "Monte Carlo Determination of Electron Transport Properties in GaAs " (1970) Vol 31 ,p1963-1990
- [17] D.L. Rode "Semiconductor and Semimetal" Academic Press (1970) p 35-37
- [18] David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991) p 216

- [19] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p 180-182
- [20] W. Fawcett, A.D. Boardman and S. Swain J. Phys.Chem.Solid "Monte Carlo Determination of Electron Transport Properties in GaAs" (1970) , Vol 31 ,p1963-(1990)
- [21] D.L. Rode, S.Knight "Electron Transport in GaAs" Phys. Rev. B (1971), Vol3, N.8 , p 2534-2540

فصل سوم

معادله ترابری بولتزمن

۳-۱ مقدمه

یکی از روش های بررسی پدیده های فیزیکی روش شبیه سازی کامپیوتری است. به گونه ای که تقسیم بندی فیزیک به دو شاخه نظری و تجربی در حال حاضر یک تقسیم بندی کامل نیست و روش شبیه سازی کامپیوتری به عنوان یک شاخه سوم و مکمل دو روش به حساب می آید. ویژگی مهم روش شبیه سازی کامپیوتری بدست آوردن جواب دقیق بر اساس مدلی است که جهت مطالعه فرایند فیزیکی در نظر گرفته شده است.

در بررسی پدیده های فیزیکی به روش نظری و حل تحلیلی معادلات بر مبنای مدل انتخاب شده همواره تقریب هایی جهت ساده کردن معادلات به کار برده می شود. یکی از موارد استفاده روش شبیه سازی کامپیوتری بررسی دقت تقریب های به کار برده شده جهت حل تحلیلی معادلات است.

از مقایسه نتایج تجربی با نتایج بدست آمده از روش شبیه سازی می توان صحت مدل استفاده شده را بررسی نمود. یکی از الگوریتم هایی که در روش شبیه سازی کامپیوتری استفاده می شود الگوریتم تکرار^۱ یا روش برگشت پذیری است.

کمیت های ترابری ماکروسکوپیکی از طریق رفتار میکروسکوپیکی الکترون های موجود در بلور نیمرسانا تعیین می گردد. از آنجایی که حل معادلات حرکت الکترون ها و تعیین رفتار آنها میسر نیست. برای تعیین ضرایب ترابری، رفتار آماری الکترون ها مورد مطالعه قرار می گیرد. بدین منظور باید معادله ترابری بولتزمن را حل کرد.

حل این معادله یک کار نظری دشوار است. علی رغم مطالعات و کار زیاد انجام شده، حل تحلیلی این معادله و تعیین شکل تابع توزیع برای نیمرساناها فقط در حالت های خاص انجام شده است.

^۱ - Iteration

امروزه حل عددی معادله ترابری بولتزمن و تعیین تابع توزیع الکترون با استفاده از کامپیوترهای سریع میسر است. در این روش ها با توجه به معادلاتی که دینامیک حرکت الکترون ها را در بلور مشخص می کند، حرکت الکترون ها در فضای فاز شبیه سازی می شود. با در دست داشتن بردار موج الکترون ها در هر لحظه می توان تابع توزیع الکترون ها را مشخص کرد. بدین ترتیب جواب معادله بولتزمن بدست می آید.

۲-۳ معادله ترابری بولتزمن

میانگین اشغال نقاط در فضای فاز، تابع توزیع $f(k, x)$ نامیده می شود. این تابع توزیع در اثر پراکندگی تغییر می کند. شار الکترون ها در فضای حقیقی با سرعت آنها، V ، و در فضای فاز توسط مشتق زمانی بردار موج الکترون، \dot{k} ، تخمین زده می شود. تغییرات تابع توزیع بوسیله یک معادله حرکت بیان می شود. در حالت تعادل، بعلت تقارن تابع توزیع در فضای فاز، هیچ ترابری رخ نمی دهد، یعنی احتمال اینکه یک حامل بردار موج k یا $-k$ داشته باشد، یکسان است. از آنجائیکه تعداد مساوی از حامل ها با اندازه حرکت های مخالف در بلور وجود دارد جریان خالص صفر است. پس برای داشتن ترابری الکتریکی یا گرمایی تابع توزیع باید بوسیله میدان های اعمال شده تغییر کند تا یک عدم تقارن در تابع توزیع ایجاد شود. این میدان ها باعث پراکندگی شدن حامل ها و در نهایت تغییر در تابع توزیع می شوند [۱]. یعنی داریم:

$$\frac{df(k, r, t)}{dt} = \left. \frac{df}{dt} \right|_{sc} \quad (1-3)$$

که در آن $\left. \frac{df}{dt} \right|_{sc}$ معرف تغییر در تابع توزیع الکترون ها تحت تاثیر عوامل مختلف پراکندگی است.

با توجه به قاعده مشتق زنجیری در سمت چپ معادله خواهیم داشت :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V \cdot \nabla_r f + \dot{k} \cdot \nabla_k f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{sc} \quad (2-3)$$

این رابطه معادله ترابری بولتزمن نامیده می شود [۲]. این معادله تغییرات تابع توزیع با زمان (جمله اول سمت چپ) را به کمک شار الکترون ها در فضای حقیقی (جمله دوم سمت چپ)، شار

الکترون ها در فضای فاز (جمله سوم سمت چپ) و برخوردها (جمله سمت راست) مشخص می کند .

با اعمال یک میدان الکتریکی یکنواخت و مستقل از زمان در حالت پایا معادله ترابری بولتزمن به صورت ساده شده زیر در می آید:

$$V \cdot \nabla_r f + \frac{eE}{\hbar} \cdot \nabla_k f = \left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{SC} \quad (3-3)$$

که در آن e بار الکترون و E میدان الکتریکی اعمال شده است. جمله سمت راست معادله مشخص کننده برخوردها است و مجموع احتمال های گذار الکترون را می دهد:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{SC} = \int [S' f'(1-f) - S f(1-f')] d^3k' \quad (4-3)$$

که در آن $f' = f(k')$ تابع توزیع الکترون های با بردار موج k' و $S' = S(k', k)$ آهنگ گذار الکترون از حالت با بردار موج k' به حالت با بردار موج k است. انتگرال روی حجم منطقه اول بریلوئن گرفته می شود [۳].

f احتمال پر بودن حالت با بردار موج k و $(1-f')$ احتمال خالی بودن حالت با بردار موج k' است، پس آهنگ پراکندگی برون سو^۱ از حالت با بردار موج k به حالت با بردار موج k' به صورت زیر است :

$$S f(1-f') \quad (5-3)$$

به همین ترتیب آهنگ پراکندگی درون سو^۲ به حالت با بردار موج k از حالت با بردار موج k' از رابطه:

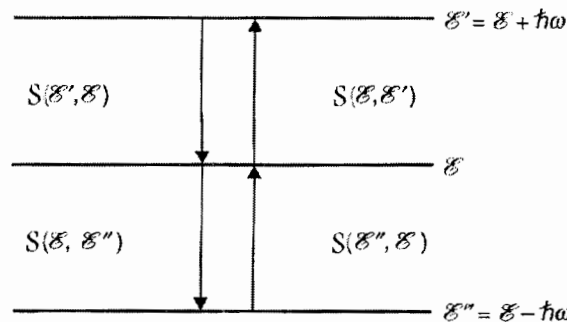
$$S' f'(1-f) \quad (6-3)$$

بدست می آید. در محاسبه تغییرات تابع توزیع الکترون ها به علت عوامل مختلف پراکندگی باید هر دو فرایند جذب و گسیل فونونی در نظر گرفته شود. همانطور که در شکل زیر مشاهده می شود الکترون می تواند با جذب یک فونون (رفتن به حالت ε') یا گسیل یک فونون (رفتن به

^۱ - Scattering - out

^۲ - Scattering - in

حالت ε'' پراکندگی برون سو داشته باشد و با جذب یک فونون (رفتن از حالت ε'' یا گسیل یک فونون (رفتن از حالت ε') پراکندگی درون سو داشته باشد [۴].



شکل ۳-۱: نمای شماتیک نوارهای انرژی. گذارهای ممکن الکترون که می تواند با جذب یا گسیل فونون همراه باشد با فلش نشان داده شده است [۴].

از آنجائیکه عوامل مختلفی باعث پراکندگی الکترون ها می شوند، جمله سمت راست در معادله (۴-۳) باید به صورت مجموع آهنگ های پراکندگی هر یک از فرایندهای پراکندگی نوشته شود. یعنی:

$$S = S_{el} + S_{inel} \quad (7-3)$$

که S_{el} مبین مجموع آهنگ های پراکندگی کشسان و S_{inel} مشخص کننده مجموع آهنگ های پراکندگی ناکشسان است. در فرایندهای پراکندگی کشسان چون $k = k'$ است. می توان نوشت:

$$S_{el} = S'_{el} \quad (8-3)$$

که در آن صورت معادله (۴-۳) بصورت زیر ساده می شود:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{SC} = \int S(f - f') dV_k \quad (9-3)$$

برای پراکندگی های کشسان می توان از تقریب زمان واهلش^۱ برای حل معادله ترابری بولتزمن در میدان های الکتریکی ضعیف استفاده کرد [۱۵]. طبق این تقریب تابع توزیع را می توان بصورت:

$$f = f_0 + f_1 \quad (10-3)$$

^۱ - Relaxation time approximation

نوشت. که f_0 تابع توزیع فرمی - دیراک و f_1 یک تصحیح کوچک بخاطر اعمال میدان الکتریکی است. جمله سمت راست در معادله ترابری بولتزمن را می توان بصورت زیر نوشت:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{sc} = -\frac{f_1}{\tau} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (11-3)$$

که τ زمان واهلش اندازه حرکت است و با استفاده از آهنگ های پراکندگی فصل قبل محاسبه می شود. با فرض کوچک بودن تغییرات تابع توزیع می توان از بسط تیلور، جهت محاسبه تابع توزیع اختلالی استفاده کرد [۶].

۳-۳ حل معادله ترابری بولتزمن به روش تکرار

با در نظر گرفتن پراکندگی های ناکشسان در معادله ترابری بولتزمن نمی توان از تقریب زمان واهلش برای محاسبه تحرک پذیری الکترون ها استفاده کرد. در این حالت می توان از بسط توابع لژاندر^۱ به عنوان یک ابزار مناسب برای حل عددی معادله ترابری بولتزمن بهره برد و تابع توزیع الکترون ها را با دقت زیادی بدست آورد. سپس به کمک آن ضرایب ترابری را محاسبه کرد. در این تکنیک، تابع توزیع الکترون ها بر حسب چند جمله ای های لژاندر بسط داده می شود. در حد میدان های الکتریکی ضعیف کافی است فقط دو جمله اول این بسط در نظر گرفته شود. بطوریکه داریم [۷]:

$$f_T = f(k) + \cos\theta g(k) \quad (12-3)$$

که در آن $f(k)$ تابع توزیع فرمی- دیراک، $g(k)$ تغییر در تابع توزیع الکترون ها در اثر عوامل مختلف پراکندگی یا توزیع اختلالی و θ زاویه بین بردار موج k و میدان الکتریکی E است. $g(k)$ با استفاده از روش تکرار از حل معادله ترابری بولتزمن بدست می آید [۸].

با جایگذاری (۱۲-۳) در (۲-۳) و انتگرال گیری روی $\cos\theta$ ، با فرض اینکه میدان الکتریکی اعمال شده در جهت z باشد خواهیم داشت:

^۱ - Legendre expansion

$$\frac{eE}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} + \nu \frac{\partial f}{\partial z} = -g \int [S(1-f') + S'f'] d^3 k' \quad (13-3)$$

$$+ \frac{3}{2} \int_{-1}^1 x \int x' g' [S'(1-f) = Sf] d^3 k' dx$$

که $x = \cos \theta$ و $x' = \cos \theta'$ و θ' زاویه بین میدان الکتریکی E و بردار موج k' است. از آنجائیکه در نوار رسانش همسانگرد آهنگ پراکندگی فقط به k ، k' و زاویه بین آنها بستگی دارد، رابطه ریاضی زیر یعنی:

$$\int x' A(X) d^3 k = x \int X A(X) d^3 k \quad (14-3)$$

را می توان در معادله (13-3) بکار برد. که در آن $A(X)$ یک تابع دلخواه از X است، که کسینوس زاویه بین k و k' می باشد. که در آن صورت به معادله زیر خواهیم رسید:

$$\frac{eE}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} + \nu \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right) = \int X g' [S'(1-f) + Sf] d^3 k' - g \int [S(1-f') + S'f'] d^3 k' \quad (15-3)$$

با توجه به (7-3) و (8-3) معادله (15-3) را می توان نوشت:

$$g \left\{ \int [S_{inel}'(1-f') + S_{inel}' f'] d^3 k' + \int (1-X) S_{el} d^3 k' \right\} =$$

$$\int X g' [S_{inel}'(1-f) + S_{inel}' f] d^3 k' - \frac{eE}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial k} - \nu \left(\frac{\partial f}{\partial z} \right) \quad (16-3)$$

در نهایت تابع توزیع اختلالی از رابطه زیر به دست می آید:

$$g = \frac{S_i(g') - \nu(\partial f / \partial z) - (eE/\hbar)(\partial f / \partial k)}{S_o + \nu_{el}} \quad (17-3)$$

که در آن :

$$S_o = \int [S_{inel}'(1-f') + S_{inel}' f'] d^3 k' \quad (18-3)$$

$$S_i(g') = \int X g' [S_{inel}'(1-f) + S_{inel}' f] d^3 k' \quad (19-3)$$

$$\nu_{el} = \int (1-X) S_{el} d^3 k' \quad (20-3)$$

در روابط فوق مجموع آهنگ های پراکندگی الکترون در اثر کلیه فرایندهای پراکندگی کشسان است. حل معادله (۳-۱۷) به ما این امکان را خواهد داد که ضرایب ترابری الکترون را محاسبه کنیم.

با داشتن آهنگ پراکندگی هر یک از فرایندهای پراکندگی که در فصل قبل به آنها اشاره کردیم معادله (۳-۱۷) بطور عددی با یک روش تکرار حل می شود. معادله بازگشتی زیر تابع توزیع الکترون ها در مرتبه $i+1$ را برحسب جمله i ام می دهد:

$$g_{i+1} = \frac{S_i(g'_i) - v(\partial f / \partial z) - (eE/\hbar)(\partial f / \partial k)}{S_0 + v_{el}} \quad (۳-۲۱)$$

اگر بلور یکنواخت و همسانگرد فرض شود ، گرادیان فضائی در معادله (۳-۲) صفر شده و خواهیم داشت:

$$g_{i+1} = \frac{S_i(g'_i) - (eE/\hbar)(\partial f / \partial k)}{S_0 + v_{el}} \quad (۳-۲۲)$$

با داشتن تابع توزیع، تحرک پذیری الکترون از رابطه زیر بدست می آید:

$$\mu = \frac{\int \vec{V} \cdot \vec{E} f_T(k) d^3K}{E^2 \int f_T(k) d^3K} \quad (۳-۲۳)$$

با جایگذاری f_T و انتگرال گیری کروی در فضای فاز خواهیم داشت:

$$\mu = \frac{1}{3} \frac{\int v k^2 (g/E) dk}{\int k^2 f dk} \quad (۳-۲۴)$$

در نوارهای غیرسه‌موی سرعت گروه الکترون به جرم مؤثر آن وابسته بوده و از رابطه زیر بدست می آید:

$$V(k) = \frac{\hbar k}{m^*} \left(\frac{1}{2\alpha E} \right) \quad (۳-۲۵)$$

پس برای تحرک پذیری الکترون ها خواهیم داشت:

$$\mu = \frac{\hbar}{3m^*} \frac{\int k^3 (g/Ed) dk}{\int k^2 f dk} \quad (۳-۲۶)$$

که در آن :

$$\frac{1}{d} = 1 + \frac{(m/m^* - 1)}{\alpha} \quad (27-3)$$

با استفاده از رابطه فوق می توان تحرک پذیری الکترون ها را برحسب پارامترهای ماده نیمرسانا از جمله جرم مؤثر، ضریب غیرسهامی و میدان الکتریکی اعمالی بدست آورد.

مرجع ها:

- [1] Charles M. Wolfe; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey (1989) p139
- [2] David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991) p242-245
- [3] Michael Shur, "Physics of Semiconductor Devices", Prentice- Hall (1990) p103
- [4] David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991) p246
- [5] David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991) p247-248
- [6] Michael Shur, "Physics of Semiconductor Devices"(1990) Prentice- Hall p108
- [7] David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991) p273
- [8] D.L. Rode "Semiconductor and Semimetal" Academic Press (1970) p 18-21

فصل چهارم

نتایج و کارهای انجام شده

۱-۴ مقدمه

خواص ترابری الکترون ها در نیمرساناهایی که تحت تاثیر میدان الکتریکی خارجی قرار گرفته اند به مشخصه های ساختار بلوری مانند نوع شبکه بلور، ثابت های شبکه و مشخصه های ساختار نواری مانند گاف نواری، جرم مؤثر الکترون در دره های مختلف انرژی، فاصله بین دره های مختلف انرژی و فرایندهای پراکندگی الکترون بستگی دارد.

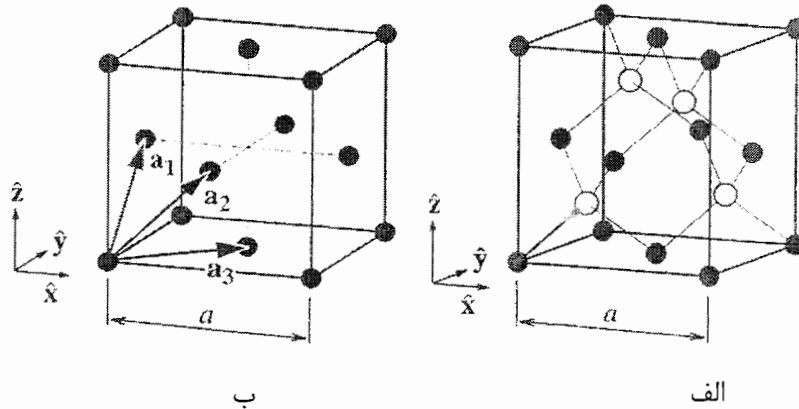
هدف این کار پژوهشی محاسبه تحرک پذیری الکترون ها در نیمرسانای *InAs* در میدان های الکتریکی ضعیف در دره مرکزی Γ و مطالعه بستگی تحرک پذیری آن به دما و چگالی ناخالصی ها است. همچنین برای مطالعه بیشتر یک مقایسه بین تحرک پذیری *InAs* و *GaAs* انجام شده است.

در حد میدان های الکتریکی ضعیف الکترون ها در دره مرکزی Γ باقی می ماند و گذار بین نواری و بین دره ای وجود نخواهد داشت. در این تحقیق میدان الکتریکی $10^4 V/m$ در نظر گرفته شده است. از آنجاییکه برای محاسبه تحرک پذیری *InAs* باید اطلاعات دقیق و کاملی درباره ساختار بلوری، ساختار نواری و آهنگ پراکندگی های مختلف آن داشت، در این فصل ابتدا به مطالعه این موارد می پردازیم، سپس معادله ترابری بولتزن را برای محاسبه تابع توزیع و در نهایت تحرک پذیری الکترون ها در نیمرسانای *InAs* به کار خواهیم برد.

۲-۴ ساختار بلوری

نیمرسانای *InAs* از جمله ترکیبات گروه های III-IV جدول تناوبی بوده و دارای ساختار مکعبی از نوع زینک-بلند می باشد، که در شکل ۱-۴ نشان داده شده است. همانطور که مشاهده می شود این ساختار متشکل از دو شبکه *fcc* است، که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در یکدیگر

فرو رفته اند. اتم های *In* روی یک شبکه *fcc* و اتمهای *As* روی شبکه *fcc* دیگر قرار دارد. یاخته قراردادی یک مکعب است. در هر یاخته قراردادی چهار مولکول *InAs* وجود دارد.



شکل ۴-۱: الف) ساختار بلوری زینک - بلند. متشکل از دو شبکه *fcc* است که به اندازه یک چهارم قطر اصلی در یکدیگر فرو رفته اند. ب) شبکه بلوری *fcc* که بردارهای پایه در آن مشخص شده است [۱].

بردارهای شبکه در این ساختار بلوری همانطور که از شکل ۴-۱ ب مشاهده می شود عبارتند از:

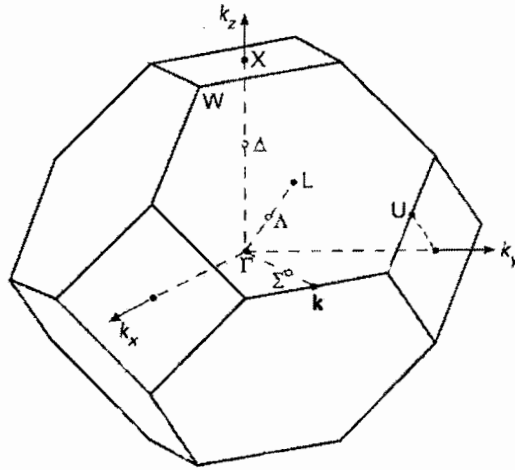
$$a_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z}) \quad (۱-۴)$$

$$a_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z}) \quad (۲-۴)$$

$$a_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \quad (۳-۴)$$

که در آن a ثابت شبکه بلور بوده و برای *InAs* برابر با $۶/۰۴ \text{ \AA}$ است [۱].

در شکل ۴-۲ اولین منطقه بریلوئن برای ساختار زینک- بلند نشان داده شده، که یک چهارده وجهی است شامل شش مربع عمود بر جهت بلوری $[۱۰۰]$ و هشت شش وجهی که بر جهت $[۱۱۱]$ عمود می باشند. در این شکل نقاط با تقارن بالای Γ و X و L نیز مشخص شده اند. مرکز منطقه بریلوئن است که در نیمرساناهای با گاف نواری مستقیم مشخص کننده پائین ترین دره نوار رسانش می باشد. X و L هم به ترتیب مراکز مربع ها و شش وجهی های منطقه اول بریلوئن و مشخص کننده دره های دیگر نوار رسانش هستند.



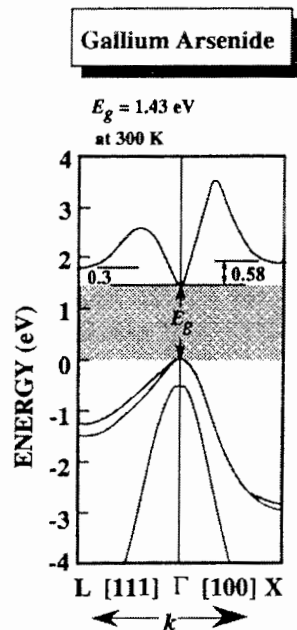
شکل ۴-۲: منطقه اول بریلوئن مربوط به ساختار بلوری زینک-بلند به همراه نقاط با تقارن بالای Γ و X و L [۲]

۳-۴ ساختار نوار انرژی

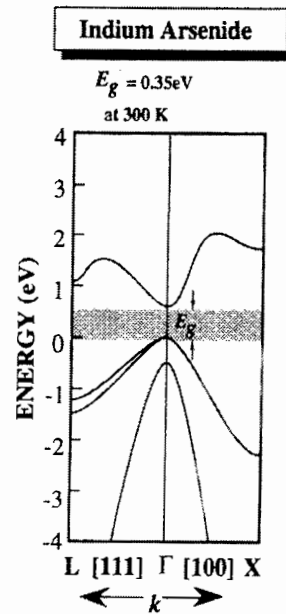
شکل ۴-۳ ساختار نوار انرژی را برای دو نیمرسانای $InAs$ و $GaAs$ نشان می دهد. همانطور که مشخص است هر دو ماده دارای گاف نواری مستقیم هستند. نیمرسانای $InAs$ بعد از $InSb$ دارای کوچکترین گاف نواری بین نیمرساناهای ترکیبی گروه های III-IV است. $InAs$ دارای گاف نواری $0.46eV$ در صفر کلوین و $0.35eV$ در $300K$ است. گاف نواری $GaAs$ در صفر کلوین حدود $1.52eV$ و در $300K$ مقدار $1.43eV$ است [۳].

وقتی میدان الکتریکی ضعیف باشد الکترون ها تنها در دره Γ قرار خواهند داشت، ولی در صورت قوی بودن میدان الکتریکی الکترون ها می توانند انرژی لازم برای رفتن به دره های دیگر را نیز کسب کنند.

از آنجاییکه هدف این تحقیق بررسی تحرک پذیری الکترون ها در حد میدانهای الکتریکی ضعیف می باشد ($E < 10^4 V/m$)، فرض بر این است که الکترون ها در دره مرکزی Γ باقی می مانند و گذار بین دره های Γ ، X و L وجود ندارد. پس فقط کافی است شکل نوار انرژی و جرم مؤثر الکترون را در این دره محاسبه کنیم.



شکل ۳-۴ الف) ساختار نواری نیمرسانای *InAs*



شکل ۳-۴ ب) ساختار نواری نیمرسانای *GaAs*

در جدول ۱-۴ پارامترهای مربوط به ساختار نواری دو نیمرسانای *GaAs* و *InAs* برای مقایسه نشان داده شده است:

جدول ۱-۴ پارامترهای ساختار نوار انرژی برای دو نیمرسانای *GaAs* و *InAs* در دره مرکزی Γ در دمای اتاق [۵].

نوع ماده	گاف انرژی E_g (eV)	جرم موثر الکترون (m^*/m)	ضریب غیرسهامی بودن نوار انرژی α (eV ⁻¹)
<i>InAs</i>	۰/۳۵	۰/۰۲۳	۲/۷۳
<i>GaAs</i>	۱/۴۳	۰/۰۶۷	۰/۶۴

همانطور که ملاحظه می شود به علت تفاوت انحنای نوارهای انرژی در دو نیمرسانا، جرم مؤثر آنها با یکدیگر اختلاف زیادی دارد، چنین عاملی باعث می شود خواص ترابری آنها نیز با یکدیگر اختلاف زیادی داشته باشد.

۴-۵ محاسبه آهنگ های پراکندگی در *GaAs* و *InAs*

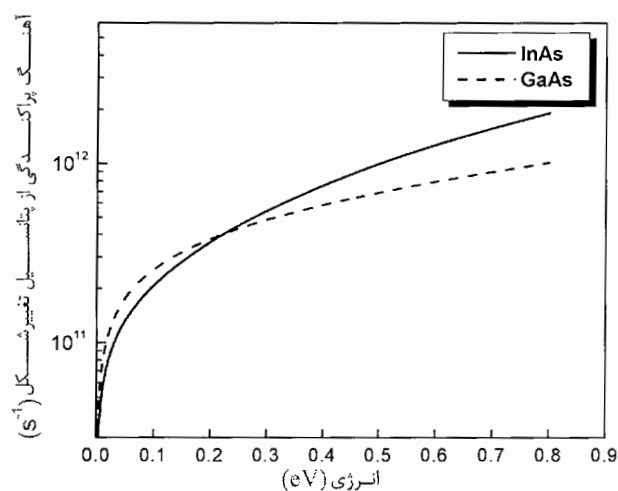
از آنجایی که پراکندگی ها عامل محدود کننده تحرک پذیری الکترون ها هستند ، محاسبه آهنگ پراکندگی الکترون ها از این عوامل مختلف از اهمیت خاصی برخوردار است. لذا در این بخش آهنگ های پراکندگی را برای دو نیمرسانای *GaAs* و *InAs* محاسبه و با یکدیگر مقایسه می کنیم. پارامترهای مورد نیاز در این محاسبات در جدول ۴-۲ آمده است.

جدول ۴-۲ پارامترهای فیزیکی *GaAs* و *InAs* که در محاسبات آهنگ پراکندگی مورد نیاز است [۶،۷].

پارامترهای فیزیکی	<i>InAs</i>	<i>GaAs</i>
ثابت دی الکترونیک فرکانس پایین ϵ_0	۱۱/۷۶	۱۰/۹۲
ثابت دی الکترونیک فرکانس بالا ϵ_∞	۱۴/۵۵	۱۲/۹۰
انرژی فونون های اپتیکی (eV)	۰/۰۳۰	۰/۰۳۵
ثابت پیزوالکترونیک (C/m^2)	۰/۰۴۵	۰/۱۶
ثابت پتانسیل تغییر شکل (eV)	۴/۹	۷
سرعت صوت (Km/s)	۴/۲۸	۵/۲۴
چگالی ماده نیمرسانا (gr/cm^3)	۵/۶۶۷	۵/۳۱۷۶

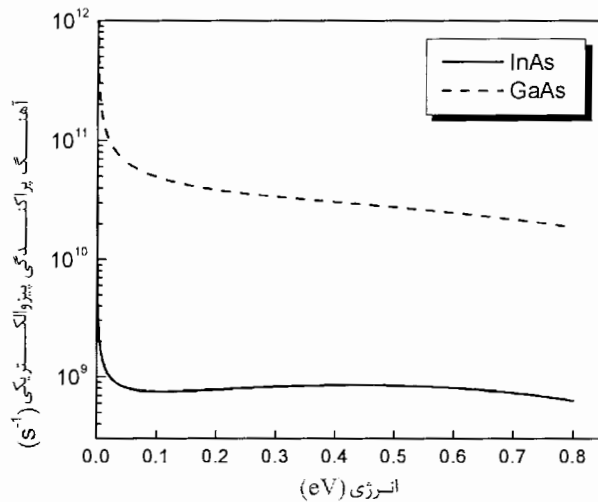
فرایندهای پراکندگی که در این تحقیق در نظر گرفته شده عبارتند از پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه، پراکندگی پیزوالکترونیک، پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی و پراکندگی از ناخالصی های یونیزه. شکل ۴-۴ آهنگ پراکندگی از فونون های آکوستیکی پتانسیل تغییر شکل شبکه را برحسب تابعی از انرژی الکترون برای دو نیمرسانای *GaAs* و *InAs* در دمای اتاق نشان

می دهد. همانطور که مشاهده می شود در هر دو مورد با افزایش انرژی الکترون آهنگ پراکندگی افزایش می یابد. این افزایش آهنگ پراکندگی در هر دو نیمرسانا تقریباً یکسان است و در حدود انرژی 1eV آهنگ پراکندگی به حدود $1 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ می رسد. بررسی آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه در دماهای مختلف نشان می دهد در دماهای بالا اثر این پراکندگی از اهمیت بیشتری برخوردار است. چنانکه در فصل ۲ و شکل ۲-۵ نشان داده شده است.



شکل ۴-۴: آهنگ پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییر شکل شبکه برحسب تابعی از انرژی برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* در دمای اتاق.

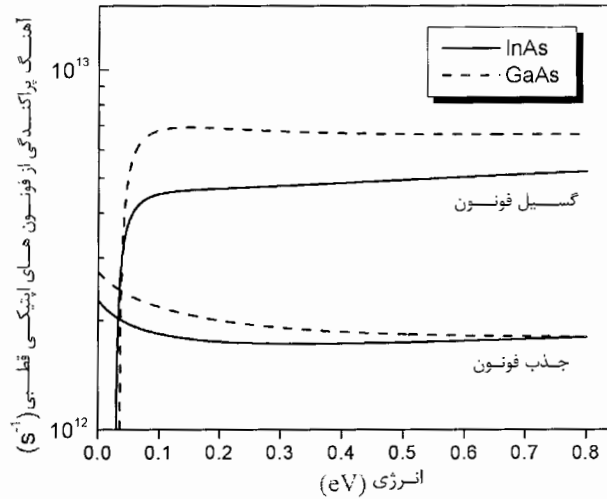
شکل ۴-۵ آهنگ پراکندگی از فونون های آکوستیکی پیزوالکتریکی را حسب تابعی از انرژی الکترون برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* در دمای اتاق نشان می دهد. همانطور که ملاحظه می شود این پراکندگی در *GaAs* بسیار قوی تر از *InAs* است. که دلیل آن جرم مؤثر الکترونی و ثابت پیزوالکتریک بزرگتر در این نیمرسانا نسبت به *InAs* است. زیرا آهنگ پراکندگی پیزوالکتریک با جرم مؤثر و ثابت پیزوالکتریک رابطه مستقیم دارد. با افزایش انرژی الکترون ، آهنگ پراکندگی در هر دو نیمرسانا کاهش می یابد، در *InAs* از انرژی حدود 0.1 eV آهنگ پراکندگی تقریباً ثابت می شود ولی در *GaAs* این کاهش در آهنگ پراکندگی پیزوالکتریکی به کندی ادامه پیدا می کند. با توجه به این مسئله می توان گفت پراکندگی پیزوالکتریکی فقط در حد میدان های الکتریکی ضعیف که انرژی الکترون ها پایین است، دارای اهمیت می باشد و در میدان های الکتریکی قوی اثر قابل توجهی در تحرک پذیری ندارد.



شکل ۴-۶ : آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های آکوستیکی پیزوالکتریکی برحسب تابعی از انرژی برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* در دمای اتاق .

پراکندگی پیزوالکتریک در ساختارهای زینک-بلند به علت تقارن مکعبی بلور فرایند مهمی نیست و خواهیم دید که تأثیر چندانی در کاهش تحرک پذیری الکترونی ندارد.

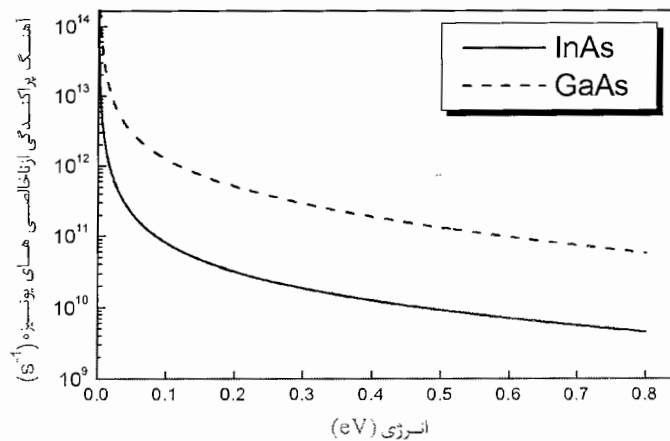
شکل ۴-۷ آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی برای هر دو حالت جذب و گسیل فونون برحسب تابعی از انرژی الکترون را برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* در دمای اتاق نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود جذب فونون در هر انرژی رخ می دهد. در این حالت با افزایش انرژی آهنگ پراکندگی الکترونی تقریباً ثابت و حدود $2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ می باشد. در حالت گسیل فونون پراکندگی زمانی رخ می دهد که انرژی الکترون ها در ماده نیمرسانا از انرژی فونون های اپتیکی بیشتر باشد. انرژی فونون های اپتیکی در *InAs* حدود 0.030 eV و در *GaAs* حدود 0.035 eV می باشد. در این حالت همانطور که دیده می شود آهنگ پراکندگی الکترون های *InAs* در انرژی 0.030 eV از صفر به حدود $4 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ می رسد و بعد از آن به کندی افزایش پیدا می کند. در *GaAs* از انرژی حدود 0.035 eV آهنگ پراکندگی الکترون ها از صفر به حدود $6 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ می رسد و بعد از آن تقریباً ثابت است. آهنگ این پراکندگی در *GaAs* به دلیل بالاتر بودن انرژی فونون های اپتیکی و بزرگ تر بودن جرم مؤثر الکترونی آن کمی بیشتر از *InAs* است.



شکل ۴-۷: آهنگ پراکندگی الکترون ها از فونون های اپتیکی قطبی بر حسب تابعی از انرژی برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* در دمای اتاق .

آهنگ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه بر حسب تابعی از انرژی الکترون برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* در دمای اتاق در شکل ۴-۸ نشان داده شده است.

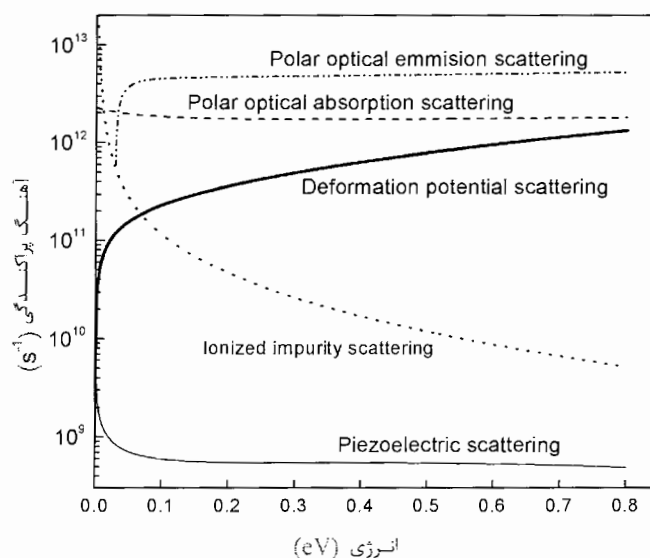
همانطور که مشاهده می شود در هر دو نیمرسانا با افزایش انرژی الکترون، آهنگ پراکندگی کاهش می یابد. در *InAs* از مقدار حدود $2 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$ در انرژی های بسیار پایین به حدود $6 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ در انرژی 0.18 eV می رسد. این کاهش در *GaAs* کندتر است و از حدود $1 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$ در انرژی های پایین به حدود $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ در انرژی 0.18 eV می رسد.



شکل ۴-۸: آهنگ پراکندگی الکترون ها از اتم های ناخالصی یونیزه بر حسب تابعی از انرژی برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* در دمای اتاق .

با توجه به شکل می توان گفت پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیزه تنها در انرژی های پایین، فرایند مهم و تأثیرگذاری در تحرک پذیری الکترونی است و با افزایش انرژی الکترون اثر آن به سرعت کاهش پیدا می کند. کاهش آهنگ پراکندگی از اتم های ناخالصی یونیزه در نیمرسانای *InAs* نسبت به *GaAs* در تمامی مقادیر انرژی الکترونی بعلاوه جرم مؤثر کمتر الکترون در *InAs* نسبت به *GaAs* است. این عامل باعث افزایش انرژی جنبشی الکترون در بلور می شود، در نتیجه الکترون مدت زمان کمتری تحت تأثیر پتانسیل کولنی حاصل از اتم های ناخالصی قرار می گیرد، به همین علت آهنگ پراکندگی از مراکز ناخالصی یونیزه کم می شود.

در شکل ۴-۹ آهنگ پراکندگی الکترون ناشی از فرایندهای مختلف پراکندگی در دمای اتاق، برای مقایسه بر روی یک نمودار آمده است. همانطور که ملاحظه می شود آهنگ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی فرایند پراکندگی غالب در این دما است. پراکندگی پیزوالکتریک هم در این دما بسیار ضعیف است. در انرژی های بالا آهنگ پراکندگی از مراکز ناخالصی یونیزه هم بسیار ضعیف است ولی در انرژی های پایین تر با فرایندهای پراکندگی فونونی قابل مقایسه است.



شکل ۴-۹: آهنگ پراکندگی الکترون ناشی از فرایندهای مختلف پراکندگی برحسب تابعی از انرژی برای نیمرسانای *InAs* در دمای اتاق.

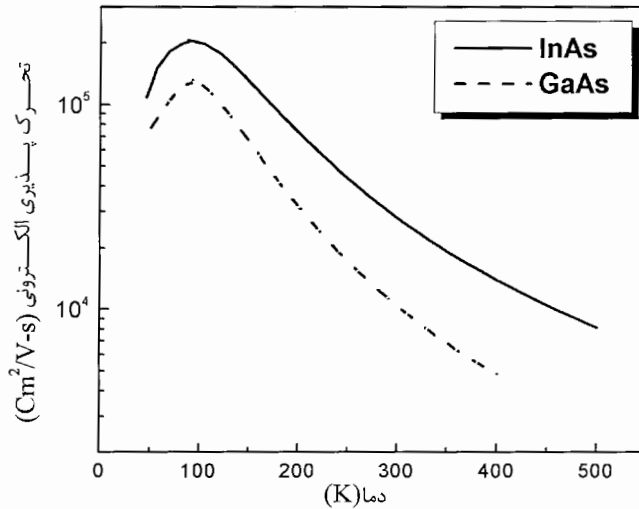
۴-۶ محاسبه تحرک پذیری در حد میدان های الکتریکی ضعیف

با داشتن اطلاعات کافی در مورد ساختار بلوری، ساختار نواری و آهنگ پراکندگی های مختلف در نیمرسانای *InAs* و *GaAs* می توانیم تحرک پذیری الکترون ها را با حل عددی معادله ترابری بولتزمن به روش تکرار بدست آوریم. بعد از محاسبه یک رابطه بازگشتی برای تابع توزیع اختلالی $g(k)$ که در فصل سوم درباره آن بطور مفصل بحث شد، با نوشتن یک برنامه کامپیوتری می توان معادله ترابری بولتزمن را برای دماهای مختلف و به ازای تراکم ناخالصی گوناگون در *InAs* حل کرد و با رسم منحنی تحرک پذیری بر حسب دما و چگالی ناخالصی ها تغییرات آن را بررسی نمود و با تحرک پذیری *GaAs* مقایسه کرد.

اولین گام در این راه انتخاب یک مقدار اولیه برای تابع توزیع اختلالی $g(k)$ است. اولین انتخاب برای g می تواند $g_0 = 0$ باشد که مربوط به حالت مختل نشده است. با قرار دادن این مقدار در رابطه بازگشتی جمله g بدست خواهد آمد، که برابر با جواب روش زمان واهلش است. این جمله مجدداً در رابطه بازگشتی قرار می گیرد تا جمله بعدی بدست آید. این کار ادامه پیدا می کند تا جائیکه همگرایی لازم در $g(k)$ حاصل شود. با معلوم بودن این تابع توزیع اختلالی می توان از رابطه (۳-۲۶) تحرک پذیری الکترون را محاسبه کرد.

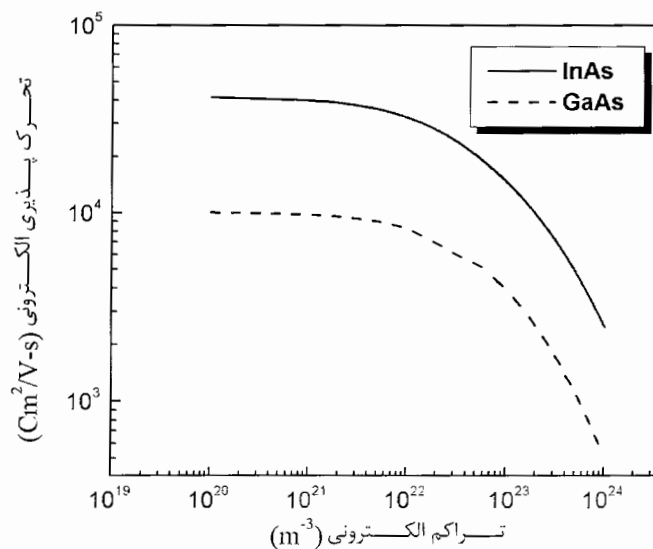
شکل ۴-۱۰ منحنی تغییرات تحرک پذیری بر حسب دما را برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* نشان می دهد. هر دو نیمرسانا بصورت ذاتی و کاملاً خالص در نظر گرفته شده اند. تحرک پذیری الکترون ها در *InAs* در دمای 300 K حدود $3 \times 10^4\text{ cm}^2/\text{V-s}$ و برای *GaAs* در همین دما حدود $9500\text{ cm}^2/\text{V-s}$ بدست آمده است. همانطور که مشاهده می شود تحرک پذیری الکترون ها در *InAs* در تمامی دماها بیشتر از تحرک پذیری الکترون های *GaAs* است.

همانطور که ملاحظه می شود با افزایش دما تحرک پذیری الکترونی افزایش می یابد بطور مثال در *InAs* در دمای حدود 80 K به یک بیشینه می رسد، سپس کاهش پیدا می کند. در *GaAs* این بیشینه تحرک پذیری در دمای حدود 100 K مشاهده می شود. در قسمت های بعد درباره دلایل این کاهش بحث خواهیم کرد.



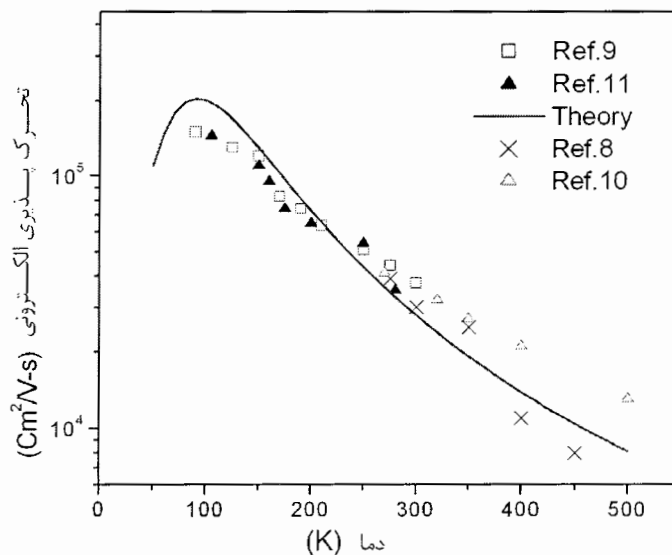
شکل ۴-۱: منحنی تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از دما برای دو نیمرسانای *GaAs* و *InAs*

شکل ۴-۱۱ نمودار تغییرات تحرک پذیری الکترون ها برحسب تراکم الکترونی در دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* نوع n را در دمای ۳۰۰K نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود تحرک پذیری هر دو نیمرسانا با افزایش تراکم الکترون ها کاهش می یابد. زیرا افزایش الکترون ها معادل با افزایش مراکز ناخالصی های یونیزه در بلور است که باعث می شوند الکترون دفعات بیشتری تحت تأثیر پتانسیل کولنی این مراکز ناخالصی قرار گرفته و آهنگ پراکندگی الکترون افزایش یابد.

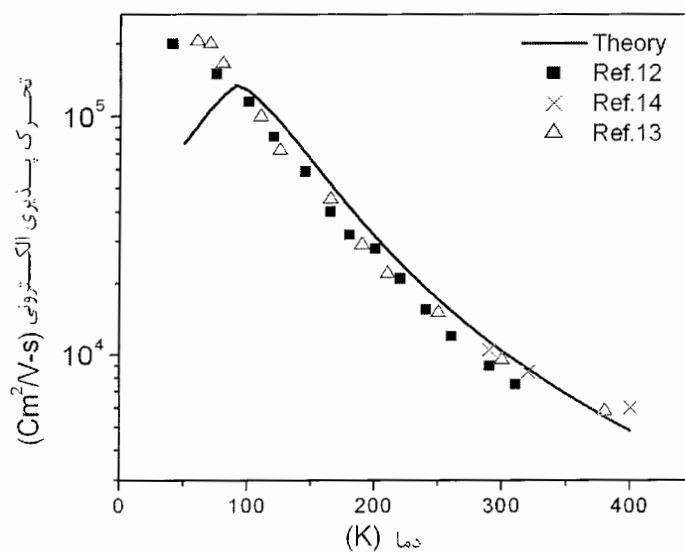


شکل ۴-۱۱: منحنی تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از تراکم الکترون ها برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* نوع n

به منظور بررسی دقت محاسبات انجام شده ، مقایسه ای با داده های تجربی موجود در مقالات صورت گرفته است . در شکل های ۴-۱۱ و ۴-۱۲ نمودار تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب دما برای دو نیمرسانای *InAs* و *GaAs* در مقایسه با داده های تجربی نشان داده شده است



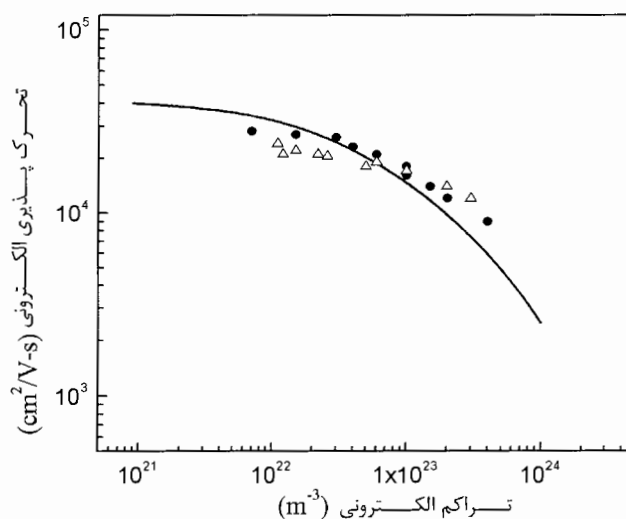
شکل ۴-۱۲: تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از دما برای نیمرسانای *InAs* ذاتی . در بازه دمای ۱۰۰ تا ۴۰۰ K نمودار توافق خوبی با داده های تجربی دارد.



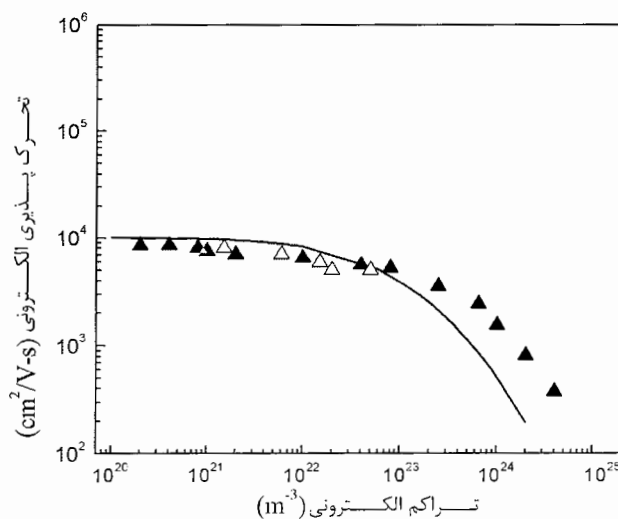
شکل ۴-۱۳: تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از دما برای نیمرسانای *GaAs* ذاتی . در بازه دمای ۱۰۰ تا ۴۰۰ K نمودار توافق خوبی با داده های تجربی دارد.

همانطور که مشاهده می شود در هر دو مورد در دمای بین ۱۰۰ تا ۴۰۰ K توافق نسبتاً خوبی بین مقادیر محاسبه شده و مقادیر تجربی وجود دارد.

شکل های ۱۴-۴ و ۱۵-۴ نمودار تغییرات تحرک پذیری الکترونی برحسب تراکم الکترون ها برای این دو نیمرسانا در مقایسه با داده های تجربی را نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود به ازای تراکم 1×10^{20} تا $3 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$ محاسبات ما توافق خوبی با نتایج تجربی دارد.



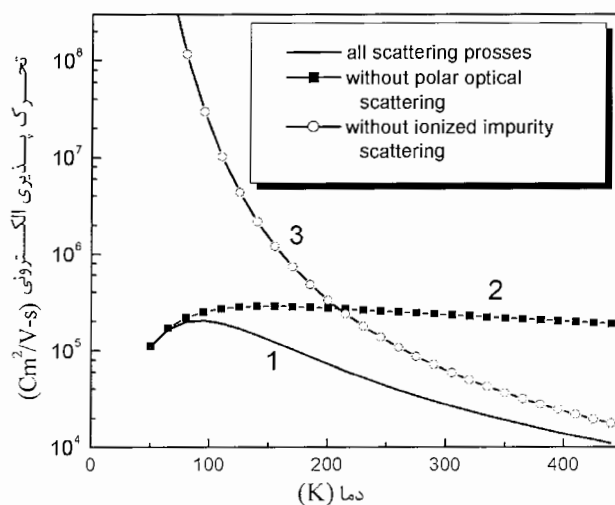
شکل ۱۴-۴: تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از تراکم الکترون ها برای نیمرسانای *InAs* در دمای ۳۰۰K که با داده های تجربی مقایسه شده است Δ [۱۷] و \bullet [۱۸].



شکل ۱۵-۴: تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از تراکم الکترون ها برای نیمرسانای *GaAs* در دمای ۳۰۰K که با داده های تجربی مقایسه شده است Δ [۱۶] و \blacktriangle [۱۵].

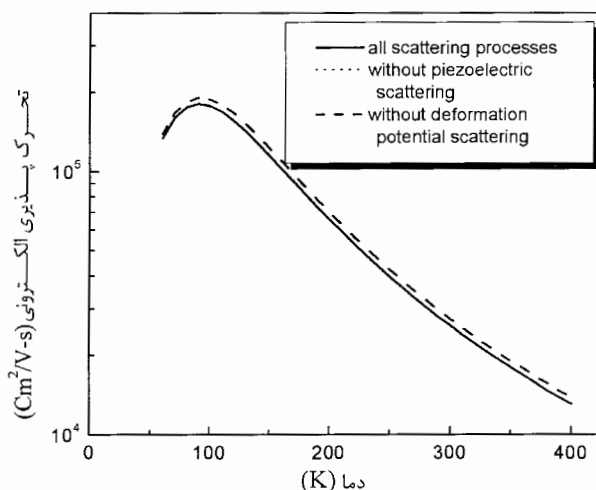
از آنجاییکه در برنامه کامپیوتری نوشته شده آهنگ پراکندگی مربوط به هر یک از فرایندهای پراکندگی بصورت زیر برنامه های مجزا از هم محاسبه می شود، این امکان وجود دارد که با حذف یکی از فرایندها اثر آن را روی تحرک پذیری کل بررسی کرد.

در منحنی ۱ شکل ۴-۱۶ تمام فرایندهای پراکندگی ذکر شده در فصل ۲ در محاسبه تحرک پذیری وارد شده است. در منحنی ۲ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی در نظر گرفته نشده است. همانطور که ملاحظه می شود در دماهای پایین (زیر ۱۰۰ K) این دو منحنی بر یکدیگر منطبق هستند. ولی با افزایش دما اختلاف این دو منحنی زیاد می شود. منحنی ۲ همواره تحرک پذیری بزرگتری را نشان می دهد. این مسئله نشان می دهد مهمترین عامل کاهش تحرک پذیری الکترون در دماهای بالا پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی است. در منحنی ۳ تحرک پذیری الکترون ها در غیاب پراکندگی از ناخالصی های یونیزه محاسبه شده است. همانطور که مشخص است در تمامی دماها منحنی ۳ تحرک پذیری بالاتری را نسبت به منحنی ۱ نشان می دهد. ولی در دماهای پایین تر اختلاف بسیار بیشتر می شود. یعنی پراکندگی از ناخالصی های یونیزه در این دماها از اهمیت بیشتری برخوردار است و مهمترین عامل محدود کننده تحرک پذیری در دماهای پایین محسوب می شود.



شکل ۴-۱۶: تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از دما برای نیمرسانای *InAs* در منحنی ۱ تمام فرایندهای پراکندگی ذکر شده در نظر گرفته شده است. در منحنی ۲ پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی حذف شده و در منحنی ۳ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه در نظر گرفته نشده است.

در شکل ۴-۱۷ منحنی خط چین ، اثر حذف پراکندگی الکترون ها از پتانسیل تغییر شکل شبکه را در تحرک پذیری نشان می دهد.



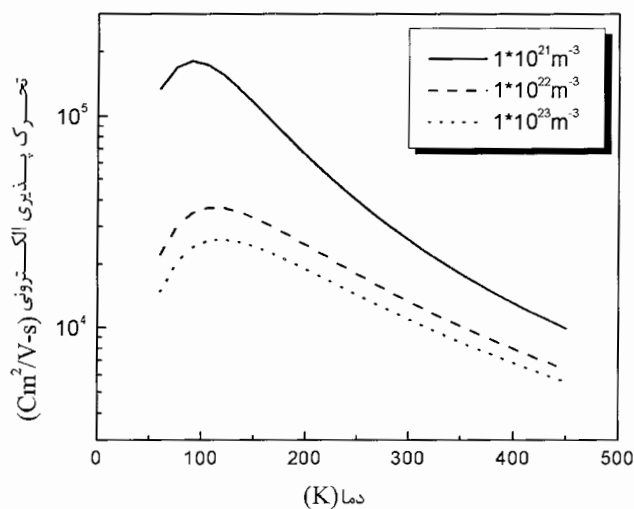
شکل ۴-۱۷: تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از دما برای نیمرسانای *InAs* . در منحنی خط چین از پراکندگی پتانسیل تغییر شکل شبکه صرف نظر شده و در منحنی نقطه چین پراکندگی پیزوالکتریک در نظر گرفته نشده است . این منحنی بر منحنی توپر که همه فرایندهای پراکندگی در آن لحاظ شده منطبق است .

همانطور که ملاحظه می شود، از دمای حدود $80K$ با منحنی توپر که در آن تمام فرایندهای پراکندگی در نظر گرفته شده اختلاف اندکی پیدا می کند، ولی در دماهای پایین تر دو منحنی بر یکدیگر منطبقند. منحنی خط چین تحرک پذیری بالاتری را نشان می دهد . یعنی در نیمرسانای *InAs* پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل در دماهای بالای $80K$ اندکی باعث کاهش تحرک پذیری الکترونی می شود و در دماهای بالاتر اثر قابل توجهی در تحرک پذیری ندارد.

در منحنی نقطه چین اثر پراکندگی پیزوالکتریک حذف شده است . همانطور که ملاحظه می شود بر منحنی توپر منطبق است . یعنی در نیمرسانای *InAs* پراکندگی پیزوالکتریک تأثیر قابل ملاحظه ای در کاهش تحرک پذیری الکترونی ندارد که دلیل آن تقارن مکعبی بلور و کوچک بودن ثابت پیزوالکتریک می باشد.

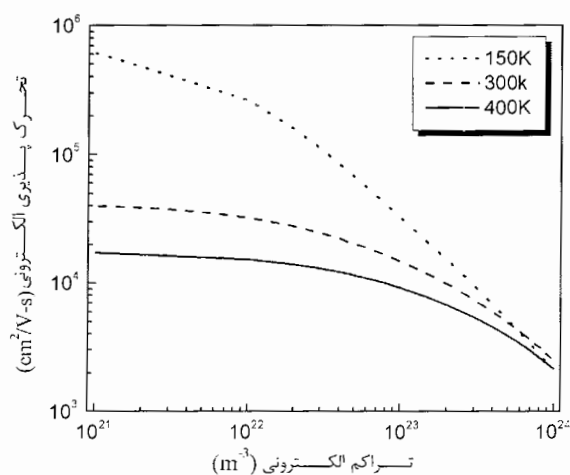
شکل ۴-۱۸ تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب دما برای نیمرسانای *InAs* را به ازای تراکم های الکترونی مختلف نشان می دهد. همانطور که ملاحظه می شود نمونه با تراکم الکترونی کمتر در تمام دماها دارای تحرک پذیری بیشتری است و با کاهش دما این تحرک پذیری بطور

قابل ملاحظه ای کم می شود. در یک دمای معین نمونه با تراکم الکترونی بیشتر دارای تحرک پذیری کوچکتری است. زیرا در این نمونه تعداد مراکز ناخالصی یونیزه بیشتر است و الکترون دفعات بیشتری تحت تأثیر پتانسیل کولنی قرار می گیرد، در نتیجه آهنگ پراکندگی از ناخالصی های یونیزه در این نمونه بالاتر است.



شکل ۴-۱۸: تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب دما برای نیمرسانای *InAs* را به ازای تراکم های الکترونی مختلف

شکل ۴-۱۹ تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب تراکم الکترون ها را در دماهای مختلف نشان می دهد.



شکل ۴-۱۹: تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب تراکم الکترون ها در دماهای مختلف برای نیمرسانای *InAs*

در یک تراکم الکترونی معین ، نمونه با دمای بیشتر دارای تحرک پذیری کوچکتری می باشد. که دلیل آن افزایش ارتعاشات شبکه و برهمکنش الکترون ها با فونون ها می باشد. همانطور که ملاحظه می شود تحرک پذیری دمای پایین، با افزایش تراکم الکترون ها بطور قابل توجهی کم می شود. با توجه به نمودارهای ۴-۱۸ و ۴-۱۹ و ۴-۱۶ می توان نتیجه گرفت پراکندگی از ناخالصی های یونیزه در نیمرسانای *InAs* تقزیباً در تمامی دماها عامل مهمی در کاهش تحرک پذیری است.

۷-۴ نتیجه گیری

با توجه به محاسبات و تحقیقات انجام شده بر روی نیمرسانای *InAs* می توان مطالب ذیل را در مورد تحرک پذیری این نیمرسانا بیان کرد:

- ۱- نیمرسانای *InAs* دارای تحرک پذیری بالا در مقایسه با دیگر ترکیبات گروه های III-IV می باشد که دلیل آن جرم مؤثر الکترونی بسیار کوچک این نیمرسانا است.
- ۲- با افزایش دما تحرک پذیری ابتدا اندکی افزایش پیدا می کند سپس کاهش می یابد. زیرا با افزایش دما انرژی جنبشی الکترون افزایش یافته و سرعت حرکت آن زیاد می شود در نتیجه الکترون مدت زمان کمتری تحت تأثیر پتانسیل کولنی یونهای ناخالصی قرار می گیرد و آهنگ پراکندگی از مراکز ناخالصی یونیزه کاهش پیدا می کند.
- ۳- با افزایش تراکم الکترون ها تحرک پذیری کاهش پیدا می کند، زیرا تعداد مراکز ناخالصی یونیزه نیز افزایش می یابد و تعداد دفعاتی که الکترون پتانسیل کولنی را احساس می کند بیشتر می شود.
- ۴- در دماهای پایین فرایند پراکندگی غالب پراکندگی از ناخالصی های یونیزه است. در نیمرسانای *InAs* با توجه به کوچک بودن گاف نواری این فرایند پراکندگی عامل تأثیر گذار در کاهش تحرک پذیری در تمام دماها است.
- ۵- با افزایش دما ارتعاشات گرمایی شبکه بلور هم افزایش می یابد. مهم ترین عامل محدود کننده تحرک پذیری الکترون ها در دماهای بالا (حدود دمای اتاق) پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی است. ولی با کاهش دما از اثر آن کاسته می شود بطوریکه در *InAs* در دماهای زیر $100K$ می توان از اثر آن چشمپوشی کرد.
- ۶- در نیمرسانای *InAs* پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه از دمای $80K$ اندکی باعث کاهش تحرک پذیری الکترونی می شود و در دماهای پایین تر تأثیری چندانی در کاهش تحرک پذیری ندارد.

۷- محاسبات ما نشان می دهد پراکندگی پیزوالکتریک اثر قابل ملاحظه ای در تحرک پذیری الکترونی نیمرسانای *InAs* ندارد، که دلیل آن تقارن مکعبی بلور و کوچک بودن ثابت پیزوالکتریک و جرم مؤثر این ماده است.

۴-۸ کارهای آینده

با نوشتن یک برنامه کامپیوتری که قادر به حل معادله ترابری بولتزمن باشد می توان خواص ترابری حامل ها را در یک ماده نیمرسانا که دارای گاف نواری مستقیم می باشد، محاسبه کرد. این نیمرسانا هم می تواند یک عنصر نیمرسانا مثل *Si* یا *Ge* باشد، هم می تواند از نیمرساناهای ترکیبی گروه های III-V یا II-IV باشد. بعلاوه با وارد کردن آهنگ پراکندگی آلیاژی می توان تحرک پذیری یک نیمرسانای آلیاژی مثل *InGaAs* را نیز محاسبه کرد.

همچنین با داشتن اطلاعات کافی در مورد نوارهای انرژی و شکل نوار رسانش در دره های دیگر انرژی مانند X و L می توان خواص ترابری را علاوه بر دره مرکزی Γ در این دره ها هم بدست آورد، سپس بستگی آن را به کمیت های مختلف از جمله دما و تراکم حامل ها بررسی نمود. بعلاوه با وارد کردن فرایندهای پراکندگی بین نواری و بین دره ای می توان ترابری حامل ها را در حد میدان های الکتریکی قوی نیز محاسبه کرد.

با محاسبه آهنگ های پراکندگی و حل معادله ترابری بولتزمن در فصل مشترک دو نیمرسانا می توان خواص ترابری را در لایه های نازک نیز بررسی کرد، که کاربرد زیادی در ساخت قطعات الکترونیکی دارد.

مرجع ها :

آشنایی با فیزیک حالت جامد، چارلز کیتل، ترجمه اعظم پور قاضی، مهدی صفا و جمشید عمیقیان، مرکز نشر [۱]
دانشگاهی (۱۳۶۷) صفحات ۳۶-۳۷

[2]Mark Lundstrom "Fundamental of Carrier Transport" second edition Cambridge University Press (2000) p13

[3]Jasprit Singh "Semiconductor Optoelectronic" (1995) McGraw-HILL, Appendix8,11

[4]Jasprit Singh "Semiconductor Optoelectronic" (1995) McGraw-HILL, p78,79

[5]Mark Lundstrom "Fundamental of Carrier Transport" second edition Cambridge University press (2000) p14

[6]D.L.Rode, Phys. Rev. B "Electron Transport In InSb. InAs. InP " Vol.3, N.8 (1971) p 3287-3299

[7]D.L.Rode, Phys. Rev. B "Electron Mobility In Direct-gap Polar Semiconductors", Vol.2, N.4 (1970) p 1012-1023

[8]J.P.McCarthy "Solid State Electron" (1967) Vol.10, p649

[9]N.Godinho, Brunnschweiler "Solid State Electron" (1970) Vol.13, p47

[10]G.R. Cronin. S.R.Borello, J. electrochem. Soc (1967) Vol. 114, p 1078

[11]D.L. Rode "Semiconductors and Semimetals" edited by R.K. Willardson and A.C.Beer (Academic, New York, (1975) Vol.10, Chapter1

[12]H.G.B.Hicks, D.F.Manley, "Solid State Commum." (1969) Vol.7, p1463

[13]G.D.Pitt, J. Lees, "Solid State Commum." (1970)Vol.8, p 491

[14]W.Fawcett, C.HilsumH.D.Rees, "Solid State Commun." (1969) Vol.7, p1257

[15]David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991) p 274

[16]D.L. Rode, S.Knight "Electron Transport In GaAs" Phys. Rev. B (1971) Vol.3, N.8, p 2534-2540

[17]G. Husch, E.Steigmeier, Helv."Phys. Acta." (1961)Vol.34, p2

[18]J.P.McCarthy, "Solid State Electron." (1967) Vol.10, p649

ضمیمه

برنامه ای که به کمک آن آهنگ پراکندگی الکترون از هر یک از فرایندهای مختلف پراکندگی محاسبه می شود در زیر آمده است. این برنامه همچنین تحرک پذیری الکترون را در دماهای مختلف محاسبه می کند که نمودارهای رسم شده با استفاده از نتایج برنامه در متن پایان نامه آمده است.

```

PROGRAM LOWFIL
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
COMMON/EMPR/TEMPR
COMMON/OBLTY/MOBLTY
DO TEMPR=100, 500, 10
    در این خط بازه دمایی برای محاسبه تحرک پذیری مشخص می شود:
    فراخوانی زیر برنامه ثوابت مورد استفاده در محاسبات مثل جرم و بار الکترون
    فراخوانی زیر برنامه مربوط به پارامترهای ماده نیمرسانا که در اینجا InAs است
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه سطح انرژی فرمی
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه تابع توزیع فرمی - دیراک
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی پیزوالکتریک
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی (گسیل - برون سو)
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی (جذب - برون سو)
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی (گسیل - درون سو)
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی (جذب - درون سو)
    فراخوانی زیر برنامه محاسبه تابع توزیع اختلالی  $g(k)$  به روش برگشت پذیر و تحرک پذیری الکترونی
    OPEN (UNIT=21, FILE='21')
    WRITE (21,*) TEMPR, MOBLTY
    END DO
    STOP
    END
    SUBROUTINE INIT
    در این خط بازه دمایی برای محاسبه تحرک پذیری مشخص می شود:
    فراخوانی زیر برنامه ثوابت مورد استفاده در محاسبات مثل جرم و بار الکترون
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
    IMPLICIT INTEGER (I-N)
    PI=4*DATAN (ID0)
    CHARGE=1.602D-19
    EMASS=9.1095D-31
    HBAR=1.0546D-34
    AONPOB=2.73
    BOLTZ=1.38D-23*SCALEQ
    EPSLON=8.8542D-12*SCALEQ/SCALEX
    ELEC=1D4/SCALEX
    RETURN
    END
    SUBROUTINE PARAMS
    در این خط بازه دمایی برای محاسبه تحرک پذیری مشخص می شود:
    فراخوانی زیر برنامه مربوط به پارامترهای ماده نیمرسانا
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)

```

```

IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION AOWDI,GKT,GMKT
DEFAC=11.5
DOSMAS=0.023
  AOWDI=15.15
  HIGHDI=12.3
  OPPE=0.030
  GKT=BOLTZ*TEMPR
  GMKT=DOSMAS*GKT
  PIZO=0.017*SCALEQ/DOUBLE
  VSOUND=4300*SCALEX/SCALET
  RHO=5710*SCALEM/TRIPLE
  PFACT=1.3D21
  RETURN
  END

```

زیر برنامه محاسبه سطح انرژی فرمی

```

SUBROUTINE FERMIL
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION GKT
FDI=PFACT/TRIPLE
FCI=2*DSQRT((DOSMAS*GKT/2*PI)**3)
ENFD=-GKT*DLOG(FCI/FDI)
RETURN
END

```

زیر برنامه محاسبه تابع توزیع فرمی - دیراک

```

SUBROUTINE FDIRAC
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION DFBYDK(0:10000)
DOUBLE PRECISION FD(0:10000)
DOUBLE PRECISION BULK,SSTEP,AONPOB,TMAX,GKT,GMKT
MKSTEP=1000
EMAX=0.8
TMAX=DSQRT(2*DOSMAS*EMAX)*DSQRT(1+AONPOB*EMAX)
SSTEP=TMAX/MKSTE
ROUND=1D-8
DO K=0,MKSTEP
  BULK=K*SSTE
  ADDI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
  ASSD=DSQRT(ADDI)
  ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
  FACTOR=(ENERGY-ENFD)/GKT
  POWER=DEXP(FACTOR)
  DFBYDK(K)=0
  FD(K)=1/(1+POWER)
  IF(FD(K).LT.ROUND) FD(K)=0
  IF(FD(K).GT.ROUND)DFBYDK(K)=-BULK*FD(K)*FD(K)*POWER/(ASSD*GMKT)
END DO
RETURN
END

```

زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی پیزوالکتریک

```

SUBROUTINE APEZO
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION RAPEZE(0:10000)
DOUBLE PRECISION FD(0:10000)

```

```

DOUBLE PRECISION GKT,SSSTEP,BULK,RHO,V SOUND,AONPOB
ZFDI=PFACT/TRIPLE
SAC=GKT*DSQRT(DOSMAS)
SOC=30*PI*EPSLON
AVEL=SAC/SOC
DO K=0,MKSTEP
BULK=K*SSSTEP
RAPEZE(K)=0
AHHI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
ASSD=DSQRT(AHHI)
ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
VOVL1=(1+2*AONPOB*ENERGY)
VOVL2=ENERGY*(1+AONPOB*ENERGY)
VOVL3=AONPOB*ENERGY
VQZERO=ZFDI/(10*EPSLON*GKT)
VKAV=0.096*PIZO*PIZO/(EPSLON*V SOUND*V SOUND*RHO)
FFACT1=DLOG((1+8*DOSMAS*VOVL2)/VQZERO*VQZERO)
IF(VOVL2.GT.0) FFACT2=1+VQZERO*VQZERO/8*DOSMAS*VOVL2
IF(VOVL1.GT.0) FFACT3=2*(VOVL3/VOVL1)**2
IF(VOVL2.GT.0) FFACT4=-AVEL*VKAV*VOVL1*VOVL1/DSQRT(VOVL2)
IF(VOVL2.GT.0) RAPEZE(K)=FFACT4*(FFACT1+FFACT3-1/FFACT2)
OPEN(UNIT=22,FILE='22')
WRITE(22,*)ENERGY,RAPEZE(K)*SCALET
END DO
RETURN
END

```

SUBROUTINE ADEFO زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه

```

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION RADEFO(0:10000)
DOUBLE PRECISION FD(0:10000)
DOUBLE PRECISION GKT,SSSTEP,BULK,ENERGY,DOSMAS,AONPOB
ZAR=DSQRT(2*(DOSMAS)**3)*GKT*DEFAC*DEFAC
ZOR=RHO*V SOUND*V SOUND*PI
DO K=0,MKSTEP
RADEFO(K)=0
BULK=K*SSSTEP
ADDI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
ASSD=DSQRT(ADDI)
ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
ZOMM=DSQRT(ENERGY)*DSQRT(1+AONPOB*ENERGY)
WAM=1+AONPOB*ENERGY
EAD=1+2*AONPOB*ENERGY
YAR=(WAM)**2
QAP=(AONPOB*ENERGY)**2
RADEFO(K)=ZAR*ZOMM*(YAR+QAP/3)/(EAD*ZOR)
OPEN(UNIT=23,FILE='23')
WRITE(23,*)ENERGY,RADEFO(K)*SCALET
END DO
RETURN
END

```

SUBROUTINE AIONIZ زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از ناخالصی های یونیزه

```

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION RAION(0:10000)

```

```

DOUBLE PRECISION AONPOB,ENERGY,SSTEP,BULK,GKT
ZFDI=PFACT/TRIPLE
ZAR=-ZFDI/(16*186.345*PI*EPSLON*EPSLON*DSQRT(2*DOSMAS))
DO K=0,MKSTEP
  RAION(K)=0
  BULK=K*SSTEP
  ADDI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
  ASSD=DSQRT(ADDI)
  ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
  VOVL1=(1+2*AONPOB*ENERGY)
  VOVL2=ENERGY*(1+AONPOB*ENERGY)
  CI=AONPOB*ENERGY/VOVL1
  FACT=2*DOSMAS*VOVL2
  FACT1=(VOVL2)**1.5D0
  VQZERO=ZFDI/(13*EPSLON*GKT)
  VQRT=VQZERO*VQZERO*VQZERO*VQZERO
  FFACT1=DLOG(1+8*DOSMAS*VOVL2/VQZERO*VQZERO)
  IF(ENERGY.NE.0) FACT2=1+2*VQZERO*VQZERO*CI/FACT
  IF(ENERGY.NE.0) FACT3=3*VQRT*CI*CI/4*FACT**2
  FACTD=FACT2+FACT3
  FACT4=4*FACT+8*(VQZERO*VQZERO+2*FACT)*CI
  FACT5=3*VQRT-8*FACT*FACT+6*FACT*DSQRT(VQRT)
  IF(ENERGY.NE.0) FACT6=FACT5*CI*CI/FACT
  IF(ENERGY.NE.0) FACTB=(FACT4+FACT6)/(VQZERO*VQZERO+4*FACT)
  FFACT=FACTD*FFACT1-FACTB
  IF(ENERGY.NE.0) RAION(K)=ZAR*VOVL1*FFACT/FACT1
    OPEN(UNIT=24,FILE='24')
  WRITE(24,*)ENERGY,RAION(K)*SCALET
END DO
RETURN
END

```

زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی (گسیل - برون سو) SUBROUTINE POUTE

```

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION FD(0:10000)
DOUBLE PRECISION POUTEM(0:10000)
DOUBLE PRECISION POLO(0:10000)
DOUBLE PRECISION OPPE,NPHON,BULK,AOWDI,SSTEP,AONPOB,OPON,
*   GKT,ENERGY
ROUND=1D-8
AVEL=DSQRT(2*DOSMAS)*OPPE*(1/HIGHDI-1/AOWDI)
CHAROM=DEXP(OPPE/GKT)
OPON=1/(CHAROM-1)
CEVOM=8*PI*EPSLON
DO K=0,MKSTEP
  POLO(K)=0
  BULK=K*SSTEP
  AHHI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
  ASSD=DSQRT(AHHI)
  ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
  DAVO=(1+AONPOB*ENERGY)
  E=ENERGY-OPPE
  VOVOM=(1+2*AONPOB*E)
  WQW=(1+2*AONPOB*ENERGY)
  VAVO=(1+AONPOB*E)

```



```

IF (E.GT.0) THEN
HOS=ENERGY*DAVO
HOOS=E*VAVO
THOS=DSQRT(HOS)
THOOS=DSQRT(HOOS)
PSDF=THOS+THOOS
PSAE=THOS-THOOS
IF(PSAE.GT.0) ALI=DABS(DLOG(PSDF/PSAE))
ESM=(2*DAVO*VAVO+AONPOB*(HOS+HOOS))*2
RWS=2*AONPOB*THOS*THOOS*(4*DAVO*VAVO+AONPOB*(HOS+HOOS))
TAG=4*DAVO*VAVO*WQW*THOS*CEVOM
POLO(K)=AVEL*(ESM*ALI-RWS)/TAG
ENDIF
CONST=0
E=ENERGY-OPPE
NPHON=1+OPON
FACTOR=(E-ENFD)/GKT
VACANT=1/(1+DEXP(FACTOR))
POUTEM(K)=POLO(K)*(NPHON-VACANT)
OPEN(UNIT=25,FILE='25')
WRITE(25,*)ENERGY,POLO(K)*NPHON*SCALET
END DO
RETURN
END

```

زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی (جذب - برون سو) SUBROUTINE POUTA

```

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION FD(0:10000)
DOUBLE PRECISION POUTAB(0:10000)
DOUBLE PRECISION SPOLO(0:10000)
DOUBLE PRECISION OPPE,NPHON,BULK,AOWDI,SSTEP,AONPOB,OPON,
* GKT,ENERGY
ROUND=1D-8
AVEL=DSQRT(2*DOSMAS)*OPPE*(1/HIGHDI-1/AOWDI)
CHAROM=DEXP(OPPE/GKT)
OPON=1/(CHAROM-1)
CEVOM=8*PI*EPSLON
DO K=0,MKSTEP
SPOLO(K)=0
BULK=K*SSTEP
AHHI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
ASSD=DSQRT(AHHI)
ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
DAVO=(1+AONPOB*ENERGY)
E=ENERGY+OPPE
VOVOM=(1+2*AONPOB*E)
WQW=(1+2*AONPOB*ENERGY)
VAVO=(1+AONPOB*E)
IF (E.GT.0) THEN
HOS=ENERGY*DAVO
HOOS=E*VAVO
THOS=DSQRT(HOS)
THOOS=DSQRT(HOOS)
PSDF=THOS+THOOS
PSAE=THOOS-THOS

```

```

IF(PSAE.GT.0) ALI=DABS(DLOG(PSDF/PSAE))
ESM=(2*DAVO*VAVO+AONPOB*(HOS+HOOS))*2
RWS=2*AONPOB*THOS*THOOS*(4*DAVO*VAVO+AONPOB*(HOS+HOOS))
TAG=4*DAVO*VAVO*WQW*THOS*CEVOM
IF(TAG.NE.0) SPOLO(K)=AVEL*(ESM*ALI-RWS)/TAG
ENDIF
CONST=0
NPHON=OPON
E=ENERGY+OPPE
FACTOR=(E-ENFD)/GKT
VACANT=1/(1+DEXP(FACTOR))
POUTAB(K)=SPOLO(K)*(NPHON+VACANT)
OPEN(UNIT=26,FILE='26')
WRITE(26,*)ENERGY,SPOLO(K)*NPHON*SCALET
END DO
RETURN
END

```

زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی (گسیل - درون سو) SUBROUTINE PINE

```

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)

```

```

DOUBLE PRECISION FD(0:10000)
DOUBLE PRECISION PINEM (0:10000)
DOUBLE PRECISION BULK,ENERGY,OPPE,NPHON,SSTEP,AOWDI,
* AONPOB,HIGHDI
DOUBLE PRECISION SELEC(0:10000)

```

```

ROUND=1D-8
CHAROM=DEXP(OPPE/GKT)
IF(CHAROM.NE.1) OPON=1/(CHAROM-1)
AVEL=DSQRT(2*DOSMAS)*OPPE*(1/HIGHDI-1/AOWDI)
CEVOM=8*PI*EPSLON

```

```

DO K=0,MKSTEP
SELEC(K)=0
BULK=K*SSTEP
ADDI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
ASSD=DSQRT(ADDI)
ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
EI=ENERGY-OPPE
SMT1=1+AONPOB*ENERGY
SMT2=1+AONPOB*EI
GAMA=ENERGY*SMT1
GAMAP=EI*SMT2
ZIT1=1+2*AONPOB*ENERGY
ZIT2=1+2*AONPOB*EI
IF(GAMAP.GT.0) YAG=DSQRT(GAMA)+DSQRT(GAMAP)
IF(GAMAP.GT.0) YOG=DSQRT(GAMA)-DSQRT(GAMAP)
IF(YOG.GT.0) ORT=DLOG(YAG/YOG)
IF(EI.GT.0) TIO1=DSQRT(SMT1*SMT2/ZIT1*ZIT2)
IF(EI.GT.0) TIO2=DSQRT(AONPOB*AONPOB*ENERGY*EI/ZIT1*ZIT2)
IF(EI.GT.0) TIO3=DSQRT(ENERGY*EI*SMT1*SMT2)
IF(TIO3.NE.0) TIO4=(GAMA+GAMAP)/2*TIO3
FACT1=TIO1+TIO4*TIO2
FFACT=FACT1*FACT1

```

```

FACT2=((ORT*TIO4)-1)*FFACT
FACT3=-AONPOB*AONPOB*ENERGY*EI/3*ZIT1*ZIT2
FACT4=FACT2+FACT3
IF(GAMA.NE.0) FACT5=ZIT2/DSQRT(GAMA)
IF(ENERGY.NE.0) SELEC(K)=AVEL*FACT4*FACT5/CEVOM
NPHON=OPON
PINEM(K)=SELEC(K)*(NPHON+FD(K))
OPEN(UNIT=27,FILE='27')
WRITE(27,*)ENERGY,SELEC(K)*NPHON*SCALET
END DO
RETURN
END

```

زیر برنامه محاسبه آهنگ پراکندگی ناشی از فونون های اپتیکی قطبی (جذب - درون سو) SUBROUTINE PINA

```

IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
DOUBLE PRECISION FD(0:10000)
DOUBLE PRECISION PINAB (0:10000)
DOUBLE PRECISION BULK,ENERGY,OPPE,NPHON,SSTEP,AOWDI,
* AONPOB,HIGHDI
DOUBLE PRECISION WELEC(0:10000)
ROUND=1D-8
CHAROM=DEXP(OPPE/GKT)
IF(CHAROM.NE.1) OPON=1/(CHAROM-1)
AVEL=DSQRT(2*DOSMAS)*OPPE*(1/HIGHDI-1/AOWDI)
CEVOM=8*PI*EPSLON
DO K=0,MKSTEP
WELEC(K)=0
BULK=K*SSTEP
ATTI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
ASSD=DSQRT(ATTI)
ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
EI=ENERGY+OPPE
SMT1=1+AONPOB*ENERGY
SMT2=1+AONPOB*EI
GAMA=ENERGY*SMT1
GAMAP=EI*SMT2
ZIT1=1+2*AONPOB*ENERGY
ZIT2=1+2*AONPOB*EI
IF(GAMAP.GT.0) YAG=DSQRT(GAMA)+DSQRT(GAMAP)
IF(GAMAP.GT.0) YOG=DSQRT(GAMAP)-DSQRT(GAMA)
IF(YOG.GT.0) ORT=DLOG(YAG/YOG)
IF(EI.GT.0) TIO1=DSQRT(SMT1*SMT2/ZIT1*ZIT2)
IF(EI.GT.0) TIO2=DSQRT(AONPOB*AONPOB*ENERGY*EI/ZIT1*ZIT2)
IF(EI.GT.0) TIO3=DSQRT(ENERGY*EI*SMT1*SMT2)
IF(TIO3.NE.0) TIO4=(GAMA+GAMAP)/2*TIO3
FACT1=TIO1+TIO4*TIO2
FFACT=FACT1*FACT1
FACT2=((ORT*TIO4)-1)*FFACT
FACT3=-AONPOB*AONPOB*ENERGY*EI/3*ZIT1*ZIT2
FACT4=FACT2+FACT3
IF(GAMA.NE.0) FACT5=ZIT2/DSQRT(GAMA)
IF(ENERGY.NE.0) WELEC(K)=AVEL*FACT4*FACT5/CEVOM
NPHON=1+OPON
PINAB(K)=WELEC(K)*(NPHON-FD(K))
OPEN(UNIT=28,FILE='28')

```

```

WRITE(28,*)ENERGY,WELEC(K)*NPHON*SCALET
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE PERTUB پذیر پذیر برگشت به روش پذیر الکترونی و تحرک پذیر توزیع اختلالی و تحرک پذیر محاسبه تابع توزیع اختلالی و تحرک پذیر
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IMPLICIT INTEGER (I-N)
LOGICAL LIMIT
COMMON/GGKT/GKT
COMMON/PPE/OPPE
COMMON/OBLTY/MOBLTY
ROUND=1D-8
BLTY=-SSTEP*DSQRT(2D0)/(3*ELEC*DSQRT(DOSMAS))
SUM1=0
SUM2=0
TOP1=0
TOP2=0
LOOP=0
DIFF=1D-8
LIMIT=.TRUE.
LOOP=LOOP+1
DO K=0,MKSTEP
BULK=K*SSTEP
ATTI=1+(4*AONPOB*BULK*BULK)/(2*DOSMAS)
ASSD=DSQRT(ATTI)
ENERGY=(ASSD-1)/(2*AONPOB)
EI=ENERGY+OPPE
SDR1=1+2*AONPOB*ENERGY
SDR2=1+2*AONPOB*EI
SDRT1=DSQRT(ENERGY*(1+AONPOB*ENERGY))
SDRT2=DSQRT(EI*(1+AONPOB*EI))
EDFH(K)=-ELEC*DFBYDK(K)
IF(ENERGY.LE.OPPE) THEN
SABET(K)=RADEFO(K)+RAPEZE(K)+RAION(K)+POUTAB(K)
IF(SABET(K).EQ.0) THEN
OOD(K)=0
UUD(K)=0
ELSE
OOD(K)=EDFH(K)/SABET(K)
UUD(K)=(PINAB(K))/SABET(K)*6D4
END IF
RFYEK(K)=OOD(K)+OOD(K)*UUD(K)
IF(DABS(OOD(K)-RFYEK(K)).GT.DIFF.AND.LIMIT) LIMIT=.FALSE.
IF(.NOT.LIMIT) ZXZ1(K)=RFYEK(K)
SUM1=SUM1+SDR1*SDRT1*FD(K)
G1(K)=0
IF(DABS(ZXZ1(K)).GT.ROUND) THEN
G1(K)=ZXZ1(K)
TOP1=TOP1+(SDRT1*SDRT1*G1(K))
ENDIF
ELSE
SABET(K)=RADEFO(K)+RAPEZE(K)+RAION(K)+POUTAB(K)+POUTEM(K)
IF(SABET(K).EQ.0) THEN
OOD(K)=0
UUD(K)=0

```

```

ELSE
  OOD(K)=EDFH(K)/SABET(K)
  UUD(K)=(PINAB(K)+PINEM(K))/SABET(K)*6D4
END IF
RFYEK(K)=OOD(K)+OOD(K)*UUD(K)
IF(DABS(OOD(K)-RFYEK(K)).GT.DIFF.AND.LIMIT) LIMIT=.FALSE.
IF(.NOT.LIMIT) ZXZ2(K)=RFYEK(K)
SUM2=SUM2+SDR2*SDRT2*FD(K)
G2(K)=0
IF(DABS(ZXZ2(K)).GT.ROUND) THEN
  G2(K)=ZXZ2(K)
  TOP2=TOP2+(SDRT2*SDRT2*G2(K))
ENDIF
ENDIF
END DO
IF(LOOP.GT.20) LIMIT=.TRUE.
IF(.NOT.LIMIT) GO TO 33

IF((SUM1.NE.0).AND.(SUM2.NE.0))
*   MOBLT=BLTY*(TOP1+TOP2)/(SUM1+SUM2)
  SCALE=5D3*SCALET/DOUBLE
MOBLTY=SCALE*MOBLT
RETURN
END

```

مقاله اول

Comparison of Electron Mobility in Zincblende and Wurtzite GaInN

A. Samaee, M. Sadeghi, H. Arabshahi, M. Ghazi

The Canadian Association of Physicists Congress (CAP 2004)

2004 CONGRESS POSTER SESSION ABSTRACTS

RÉSUMÉS DES SESSIONS D'AFFICHES - CONGRÈS 2004

The poster session abstracts presented here will be on display in this order in the Winnipeg Convention Centre in Winnipeg, Manitoba from 19h00 - 22h00 on Monday, June 14th. *Les résumés présentés en affiches publiés ci-après seront en montre de 19h00 à 22h00, le lundi, 14 juin dans le Centre de congrès à Winnipeg, Manitoba.*

[MO-POS] CASCA

Monday
Lundi**MO-POS-1**

The Impact of Canadian Astronomy as Measured by Citations, Dennis R. Crabtree NRC-HIA — The impact of scientific research is often measured by citation counts. Citations do not measure the quality of the scientific research but are more a measure of the relevance of the research to other researchers. Citation counts are frequently used as one piece of information in tenure decisions and also used to measure the strength of a whole research community (as in the Astronomy Long Range Plan). In this poster I will compare the publication and citation record of Canadian astronomy groups from 1990 onward.

MO-POS-2

"Lets Talk Science Partnership Program" Promotes Science in Canadian Schools, Vesna Milosevic-Zdjelar, University of Winnipeg — Canadian universities participate in initiative developed to promote science in schools and community. At seventeen universities, graduate students (as well as undergraduate students at the University of Winnipeg), volunteer to share their knowledge, expertise and enthusiasm with elementary and high school students, teachers and wide community. Through partnerships with schools, science and children museums and scout organizations, our program successfully reaches 25 000 children every year. We will describe here our program at the University of Winnipeg and its place in the national picture

MO-POS-3

Doing Science with the Spitzer Space Telescope, P. Barmby, S. Laine, M. Lacy, Spitzer/IRAC Team, Harvard-Smithsonian Center for Astrophysics, Spitzer Science Center — The Spitzer Space Telescope, launch in August 2003, is well into normal science operations. Here we give an overview of the capabilities of the three science instruments, science operations, and the long-term schedule. Science projects from the Early Release Observations, First Look Survey, and IRAC instrument team's Guaranteed Time will be used to illustrate the power of Spitzer observations for the study of Galactic and extragalactic star formation, high-redshift galaxies, and stellar populations.

MO-POS-4

HIFI: The High Resolution Spectrometer for Herschel*, Michel Fich, University of Waterloo (on behalf of the HIFI Team) — The Herschel Space Observatory will be a facility-class space observatory operating at wavelengths between 60 and 670 microns. It will be launched, with the Planck satellite, in 2007 to the second Lagrangian point with a minimum lifetime of three years. The Herschel telescope will be 3.5 m in diameter and passively cooled to 80K. HIFI (the Heterodyne Instrument for the Far-Infrared) is a high resolution spectrometer and one of three focal plane science instruments for Herschel. One of the primary purposes of Herschel is to study astrochemistry and HIFI is the main instrument for studying atomic and molecular spectral lines. Together with the Canadian Space Agency, a consortium of approximately 25 Canadian astronomers are contributing a central part of the HIFI instrument (the Local Oscillator Source Unit, or LSU) and, in return, are full partners in the HIFI Science Team. This poster outlines the current status of the instrument development and presents an overview of the science to be carried out with HIFI. It will also describe how interested Canadian scientists can join the Canadian Herschel/HIFI Consortium and become involved in the mission.

* This work is being supported by CSA.

MO-POS-5

Recent Results from the Odin Satellite*, Michel Fich¹ and K.A. Woodley², ¹University of Waterloo and ²McMaster University — Odin is a mm and submm heterodyne 1.1m radiotelescope mounted on a spacecraft launched on 20 February 2001. It has been developed in a partnership between Sweden, Canada, Finland and France. In this poster we report on recent results from Odin, including a sensitive search for molecular oxygen in interstellar clouds, a survey of the Galactic Plane, and a detailed study of molecular processes in several star forming regions.

* This work is being supported by NSERC and CSA.

MO-POS-6

SPIRE: Herschel's Submillimetre Camera and Spectrometer*, David Naylor¹, P. Davis¹, J. DiFrancesco², M. Halpern³, P. Martin⁴, D. Scott³ and C. Wilson⁵, ¹University of Lethbridge, ²HIA, ³University of British Columbia, ⁴University of Toronto and ⁵McMaster University — The Herschel Space Observatory is an ESA cornerstone mission due for launch in 2007, which will conduct astronomical observations across the far-infrared and submillimetre waveband. It will carry a passively cooled, low-emissivity, 3.5-m telescope and will operate at the Sun-Earth L2 point for three years, providing a large amount of observing time at wavelengths unrestricted by the terrestrial atmosphere. The instrument payload will be cooled with an on-board supply of liquid helium, which determines the lifetime of the mission. Canada is involved in both the SPIRE and HIFI instruments on Herschel. The main scientific goals of SPIRE are deep extragalactic and galactic imaging surveys and spectroscopy of star-forming regions in our own and nearby galaxies. The SPIRE instrument comprises a 3 and imaging photometer at spectral channels at 250, 350, and 500 μm , and an imaging Fourier transform spectrometer (FTS) covering the range 200-670 μm . The FTS employs a dual-beam configuration with broad-band intensity beam dividers. The SPIRE detectors are feedhorn-coupled neutron transmutation doped (NTD) Germanium spider-web bolometers. The Canadian contributions to the SPIRE instrument are (a) a mid-resolution ($R \approx 1000$) broadband FTS to test and qualify instrument models, (b) software packages to deglitch the signal stream, correct for the spectral response of the instrument, and process the spectrometer data, and (c) staff effort for the Instrument Test Team and Control Centre. Five Canadian researchers participate in the SPIRE Specialist Astronomy Groups as Associate Scientists. The Canadian involvement in the SPIRE project will be described.

* This work is being supported by CSA, NSERC.

MO-POS-7

Protoplanetary Dust Disk Dynamics*, Robin Humble¹, S.T. Maddison² and J.R. Murray², ¹Canadian Institute for Theoretical Astrophysics and ²Swinburne Centre for Astro and Supercomputing — With a view to investigating planet formation processes we have developed a code for simulating astrophysical dusty-gas flows in protoplanetary disks. Our parallel three dimensional code incorporates gas hydrodynamics, self-gravity and several gas drag prescriptions to follow the dynamical evolution of a two-phase dusty-gas medium. We present results of some calculations with submillimetre, centimetre and metre sized dust. Dust disk lifetimes and possible gas giant and terrestrial planet formation scenarios are discussed.

MO-POS-8

Neptune's Migration into a Dynamically Hot Kuiper Belt*, Joseph Hahn¹ and R. Malhotra², ¹Saint Mary's University and ²University of Arizona — The effects of Neptune's orbital expansion into a dynamically hot Kuiper Belt is examined numerically. In the model, a torque is applied to Neptune's orbit causing it to expand 9 AU outwards and into a stirred up Kuiper Belt composed of 10^4 massless particles having initial eccentricities $e \sim 0.1$. This system is integrated over the age of the Solar System, and our results confirm Chiang *et al.*'s (2003) finding that migration into hot Kuiper Belt allows particles to get trapped at weak mean motion resonances like the 5:2. Indeed, our higher-resolution study of this scenario shows particles getting trapped at many of Neptune's weak resonances, including the 13:6, 9:4, 7:3, 12:5, 8:3, 11:4, 3:1, 7:2, 4:1, all of which reside in the 50- $<$ 80 AU zone. Many of these trapped particles have such high eccentricities that they also inhabit the domain usually identified as the Scattered Disk. Of course, gravitational scattering by Neptune also produces a Scattered Disk of particles, but most of these particles are removed over the age of the Solar System during subsequent encounters with the planets. Indeed, inspection of all particles with semimajor axes 50- $<$ 80 AU and $e > 0.25$ shows that about 90% were trapped at Neptune's migrating resonances, with only 10% actually being scattered by Neptune. These results may also provide an explanation for the 'extended' scattered disk of Gladman *et al.* (2002), namely, that some of these KBOs were trapped at an exotic resonance with Neptune rather than scattered.

* This work is being supported by CFI.

POSTER SESSION ABSTRACTS - MONDAY, JUNE 14

These observations suggest that increasing levels of chain unsaturation may reduce the sensitivity of bilayer order to variations in pressure.

* Supported by NSERC (MRM) and CIHR (KMWK).

MO-POS-82

Characterization Of Anisotropy In Foams: An Ultrasonic Approach*, Hussein Elmehdi, J.H. Page AND M.G. Scanlon, *University of Manitoba* — We use low frequency ultrasonic waves (50 kHz) to investigate the mechanical properties of anisotropic freeze-dried bread foams that were prepared by applying uniaxial stress to fresh breadcrumb. Longitudinal ultrasonic velocity and amplitude measurements were taken in directions parallel and perpendicular to the compression direction. The velocity was found to decrease as the amount of compression is increased, with the decrease being greater in the parallel direction. The velocity data were interpreted using two theoretical models, one based on the static compression of a simplified strut model of foams and the other including the effects of tortuosity on wave propagation through anisotropic media. Both models allowed the velocity anisotropy to be directly related to the anisotropy of the foam structure, and give predictions in good overall agreement with the data. The results also allowed us to conclude that there must be a weakening of the cell walls caused by the uniaxial compression in addition to the effects resulting from the anisotropy alone.

* This work is being supported by NSERC.

MO-POS-83

Structure of a Homologue Series of Banana Mesogens Studied By C13 NMR Spectrum*, J. Xu and R.Y. Dong, *University of Manitoba* — C13 NMR spectroscopy was used to obtain the geometrical information in three members of a homologue series of banana molecules, 9CIPBBC, 8DCIPBBC and 9DCIPBBC. The orientational order parameter S, bending angles and tilt angles between the biphenyl rings were determined from the temperature dependent chemical shifts in the nematic phases. Although the temperature dependence of S was found to be different for these molecules, the S values at Tc were almost identical. It was also found that tilt angles depend linearly on temperature, and the bending angle in the mono-substituted molecule is about 14 degree smaller than the di-substituted molecular. A SUPER (Separation of Undistorted Chemical-Shift Anisotropy Powder Patterns) technique was used to determine the chemical shift tensors of carbons of model compounds (e.g. 4-Chlororesorcinol). These tensorial components are required for fitting the temperature dependent chemical shifts in aligned samples.

* Research is supported by NSERC and Brandon University

MO-POS-84

On the Physical Mechanism of Vortex Stirring in MHD-Driven Two-Fluid Molten Metal Flows, David Munger and A. Vincent, *Université de Montréal* — Magnetohydrodynamic (MHD) instabilities such as those observed in aluminum reduction cells have been thoroughly studied, for instance by means of linear analysis by Sneyd (1992) and numerical simulation by Potocnik (1989) using industrial codes, as well as by Gerbeau (2001) using finite elements. Though its understanding is critical for efficient aluminium production, the physical mechanism is still unknown. We focus on the stability of vortex stirring that naturally occurs in MHD-driven systems of two fluids with a large electrical conductivity ratio, traversed by an intense vertical electric current and under a strong background magnetic field. We perform three-dimensional nonstationary numerical simulations of the conservative equations, using a levelset technique to track the position of the interface between the two fluids. Periodic transport of large eddies occurs, in which we observe an oscillation of vortex energy arising from a balance between the dissipation forces and the supply from the imposed electric current. The corresponding frequencies are orders of magnitude smaller than those observed in typical metal pad roll, so that long-lasting simulations are necessary to track slowly growing instabilities. We are able to find a stability threshold in terms of the electrical conductivity of the fluids, and we are currently trying to correlate it with the cell's dimensions. We conjecture that an increase of the latter will compensate a decrease of conductivity in the triggering of instabilities. Simulations are underway and results will be presented at the conference.

MO-POS-85

Spin Wave Dispersion of the 2D Hubbard Model at Intermediate Coupling*, Walter Stephan, *Bishop's University* — The spin wave dispersion relation for the 2D square lattice Hubbard model at half-filling is calculated using an "exact" linked cluster expansion method. The approach used is most reliable at strong coupling, but still converges reasonably well when the Coulomb repulsion is of the same order of magnitude as the band width. Results are compared to those of other approximate calculations as well as neutron scattering measurements of undoped cuprates.

* This work is being supported by NSERC.

MO-POS-86

The Giant Magnetocaloric Effect (GMCE) in Ni-Mn-Ga, Wei Li, Xuezi Zhou, H P Kunkel and Gwyn Williams, *University of Manitoba* — Several previous investigations have demonstrated that a giant magnetocaloric effect (GMCE) – a large isothermal entropy / adiabatic temperature change associated with the application of an external magnetic field to a system – is most often linked to the substantial entropy change accompanying a first-order phase change. However, it appeared plausible that in systems exhibiting sequential magnetic transitions – specifically a continuous paramagnetic to ferromagnetic transition followed by a first-order / discontinuous (order-order) transition - this effect might be enhanced if these two transitions could be brought into close proximity, or better still, merged. The veracity of this suggestion has been demonstrated in the Ni-Mn-Ga system where such a coincidence can be achieved through careful compositional tuning, thus for Ni_{55.2}Mn_{18.6}Ga_{26.2} an entropy change of $\Delta S_M = -20.4 J kg^{-1} K^{-1}$ is observed at 317K in a field of 5T, one of the larger values measured at or above room temperature.

MO-POS-87

Comparison of Electron Mobility in Zincblende and wurtzite GaInN, A. Somae², M. Sadeghi², H. Arabshahi¹, M. Ghazi², ¹Tarbiat Moallem University and ²Shahrod University, Shahrod, Iran — GaN has received much attention in recent years because of its potential for a wide range of applications in high power and optoelectronic devices. The demands of device designs have encouraged numerical studies of electron transport in the material. In this research a numerical iteration method has been developed and used to model electron transport in zincblende and wurtzite GaInN at low electric fields. Our results show that the electron drift mobility of wurtzite GaInN is lower than that for the zincblende structure at all temperatures. This is largely due to the higher G valley effective mass and a higher electron scattering rate in the wurtzite phase.

MO-POS-88

Low-Field Electron Transport Calculations in Bulk Wurtzite GaN Using Iterative Technique, Hadi Arabshahi, *Tarbiat Moallem University* — Temperature and electric field-dependent electron transport in bulk wurtzite GaN structure have been calculated using an iterative technique. The following scattering mechanisms, i.e. impurity, polar optical phonon, acoustic phonon, piezoelectric and electron plasmon are included in the calculation. Ionized impurity scattering has been treated beyond the Born approximation using the phase-shift analysis. The low electron drift mobility is calculated for temperatures in the range of 300-600K and for ionized impurity concentrations between 10^{15} and $10^{18} cm^{-3}$. The low temperature value of electron mobility increases significantly with increasing doping concentration. The iterative results are in fair agreement with other recent calculations obtained using the relaxation-time approximation and experimental methods. Compensation effects on the mobility are also examined. Due to the freezeout of deep donor levels the role of ionized impurity scattering in bulk wurtzite GaN is suppressed and the role of phonon scattering is enhanced, compared to zincblende structure. Electron transport properties have been modelled with an electric field applied both parallel and perpendicular to the (0001)c-axis. The extracted model parameters can be used for electron transport simulations in GaN-based transistors.

MO-POS-89

Design and Modelling of Inductively Heated Substrate Holders for Advanced Plasma Materials Processing Applications*, Ajay K. Singh and Michael P. Bradley, *University of Saskatchewan* — Plasma processing of materials will be one of the key enablers for advances in electronics and photonics technology in the 21st century. Effective plasma materials processing requires careful control of process parameters, including the temperature of the target material. For example, a minimum target temperature ~ 800 Celsius is required for plasma deposition of diamond films. Unfortunately, in high pressure (~ 10 Torr) microwave plasma systems (such as the diamond film growth system at the University of Saskatchewan) the ultimate target temperature may be limited to ~ 500 Celsius because ion-neutral collisions limit the amount of heat delivered to the target, and because of relatively high convective cooling rates. Thus it is necessary to directly heat the target to achieve the high temperatures required. Direct heating via heating wire may be difficult to implement because in most cases the substrate must be biased with respect to the grounded chamber walls to achieve good film growth. Inductive eddy current heating provides a solution. Heating energy is efficiently coupled into the substrate via induced eddy currents, providing rapid and potentially highly uniform heating. The purely inductive coupling means that the substrate can be biased to arbitrary voltages as required. This presentation will discuss our design efforts on heated substrate holders. We will present results of thermal modelling calculations (i.e. heating curves, mean temperature, temperature uniformity) and will discuss their implications for advanced target holder design.

* This work is being supported by NSERC.

MO-POS-90

Elastic Fields from Reconstructed Terraces of a Semi-Infinite Solid*, R. Arief Budiman, *University of Calgary* — Two-dimensional problem of a semi-infinite solid with surface reconstruction boundary condition is considered. Surface reconstruction produces sinusoidal displacement fields on a terrace and attractive interaction due to the reconstruction is

مقاله دوم

بررسی ترابری الکترونها در نیم رسانای InAs در میدان های الکتریکی
ضعیف

صادقی، امیرمسعود؛ قاضی، محمدابراهیم؛ عربشاهی، هادی

پذیرفته شده در کنفرانس فیزیک ایران، دانشگاه لرستان، خرم آباد، ۷ تا ۱۰ شهریور ۱۳۸۴

بررسی ترابری الکترونها در نیمرسانای *InAs* در میدانهای الکتریکی ضعیف

صادقی، امیر مسعود^۱؛ قاضی، محمد ابراهیم^۱؛ عریشاهی، هادی^۲

^۱ دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

^۲ گروه فیزیک دانشگاه تربیت معلم سبزوار، سبزوار

چکیده

در این مقاله تحرک پذیری الکترونها در نیمرسانای *InAs* با حل مستقیم معادله ترابری بولتزمن به روش تکرار محاسبه و بستگی تحرک پذیری به دما و اتمهای یونیده مطالعه و با نیمرسانای *GaAs* مقایسه شده است. در محاسبه تحرک پذیری پراکندگی از فونونهای اکوستیکی پتانسیل تغییر شکل، پیژوالکتریک، اتمهای یونیده و فونونهای اپتیکی قطبی برای یک نوار رساتش غیرسهموی با توابع موج ترکیبی در نظر گرفته شده است. محاسبات ما نشان می دهد که تحرک پذیری الکترونها در دماهای بالاتر از 50 K به دلیل افزایش آهنگ پراکندگی از فونونها به شدت کاهش می یابد و در دماهای پایین اثر غالب در کاهش تحرک پذیری ناشی از پراکندگی از مراکز ناخالصی است. نتایج محاسبات با داده های تجربی و محاسبه با تقریب زمان واهلس که در مقالات منتشر شده مقایسه شده است و توافق خوبی بین نظریه و تجربه را نشان می دهد.

Low field electron transport in *InAs*

Sadeghi, Amir Masoud¹; Ghazi, Mohammad E. ¹; Arabshahi, Hadi²

¹ Physics Department, Shahrood University of technology. Shahrood

² Physics Department, Tarbiat moallem, sabzevar University. sabzevar

Abstract

*In this paper we report temperature and doping dependence of electron mobility in both *InAs* and *GaAs* compounds which have been calculated using an iterative technique. The following scattering mechanisms, i.e, impurity, polar optical phonon, acoustic phonon, piezoelectric are included in the calculation. It is found that the electron mobility decreases monotonically as the temperature increases from 50K to 500K. The low temperature value of electron mobility decreases significantly with increasing doping concentration. The iterative results are in fair agreement with other recent calculations obtained using the relaxation-time approximation and experimental method.*

PACS No. 72

مقاله، تحرک پذیری الکترونها با حل معادله مستقیم ترابری بولتزمن به روش تکرار محاسبه شده است سپس بستگی تحرک پذیری الکترونها به دما و چگالی اتمهای ناخالصی در نیمرسانای *InAs* مورد مطالعه قرار گرفته و با تحرک پذیری الکترونها در *GaAs* مقایسه شده.

روش کار پژوهشی

برای محاسبه تحرک پذیری باید معادله ترابری بولتزمن:

مقدمه

نیمرسانای *InAs* دارای یک گاف نواری مستقیم بسیار کوچک است. بطوریکه در بلورهای خالص برانگیختگی حاملهای ذاتی حتی در دماهای بسیار پائین مشاهده می شود. این نیمرسانا کاربرد گسترده ای در قطعات الکترونیک نوری، از جمله لیزرها و آشکارسازهایی که در محدوده طیف مادون قرمز کار می کنند دارد. همچنین به علت تحرک پذیری بالا استفاده از آن در ساخت ترانزیستورهای اثر میدان فرکانس بالا پیشنهاد می شود [۱]. در این

$$\mu_d = \frac{\hbar \int_0^{\infty} k^3 \frac{g(k)}{Ed} dk}{3m^* \int_0^{\infty} k^2 f_k(k) dk} \quad (5)$$

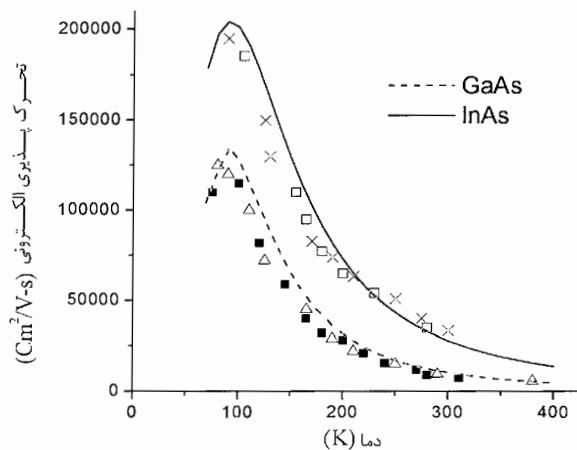
که در آن m^* جرم موثر الکترونها در دره مرکزی Γ و E میدان الکتریکی است. پارامتر d به صورت زیر تعریف می شود [۳]:

$$1/d = 1 + [(m/m^* - 1)/\alpha] \quad (6)$$

که در آن α عامل غیرسهموی بودن نوار رسانش و m جرم الکترون است. برای حل عددی معادله ترابری بولتزمن یک برنامه کامپیوتری نوشته شد. این برنامه ابتدا آهنگ پراکندگی هر یک از مکانیزمهای پراکندگی را محاسبه می کند، سپس با استفاده از روش تکرار تابع توزیع اختلالی را بدست می آورد. با داشتن $g(k)$ ما توانستیم تحرک پذیری را به کمک رابطه ۵ محاسبه کنیم.

نتایج و بحث

شکل ۱ تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از دما در میدان الکتریکی به شدت 10^4 Vm^{-1} را نشان می دهد.



شکل ۱: مقایسه تحرک پذیری الکترونی برحسب تابعی از دما برای دو نیمرسانای $InAs$ و $GaAs$. [۸] □، [۵] ■، [۶] Δ، [۷] ×، [۸] .

در دمای اتاق تحرک پذیری $InAs$ حدود $31500 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ و برای $GaAs$ حدود $7500 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ بدست آمد، که با داده های تجربی گزارش شده در سایر مقالات در توافق خوبی

$$\left(\frac{e}{\hbar}\right) E \cdot \nabla_k f = \oint [s' f'(1-f) - s f(1-f')] dk \quad (1)$$

را حل کرد. که در آن f و f' به ترتیب تابع توزیع الکترونها با بردار موج k و k' ، E شدت میدان الکتریکی اعمالی و s و s' به ترتیب آهنگ پراکندگی الکترونها به سمت خارج و داخل المان حجم dk است [۲]. مکانیزمهای پراکندگی در نظر گرفته شده در این پژوهش پراکندگی کشسان از فونونهای اکوستیکی پتانسیل تغییر شکل، پراکندگی پیزوالکتریک، پراکندگی از اتمهای یونیده و پراکندگی ناکشسان از فونونهای اپتیکی قطبی است. آهنگ پراکندگی کل به صورت:

$$S = S_{el} + S_{inel} \quad (2)$$

است که S_{el} مجموع آهنگ پراکندگی های کشسان و S_{inel} مجموع پراکندگی های ناکشسان است [۳]. در حد میدانهای الکتریکی ضعیف تابع توزیع الکترون را می توان به صورت:

$$f = f_k(k) + \cos\theta g(k) \quad (3)$$

نوشت که $f_k(k)$ تابع توزیع فرمی-دیراک، $g(k)$ تغییر در تابع توزیع الکترونها در اثر عوامل مختلف پراکندگی، یا توزیع اختلالی است و θ زاویه بین بردار موج k و میدان الکتریکی E می باشد. با جایگذاری رابطه ۳ در معادله ترابری بولتزمن و جل آن به روش تکرار (برگشت پذیر) تابع توزیع اختلالی $g(k)$ در مرتبه $i+1$ برحسب جمله i ام بصورت زیر نوشته می شود [۳]:

$$g_{i+1} = \frac{S_i(g_i) - (eE/\hbar)(\partial f/\partial k)}{S_0 + v_{el}} \quad (4)$$

که در آن S_i آهنگ پراکندگی درون سو، S_0 آهنگ پراکندگی برون سو و v_{el} کل آهنگ پراکندگی کشسان یا سطح مقطع پراکندگی است.

ساختار نواری $InAs$ با استفاده از مدل $(kane)$ برای شکافتگی اسپین-مدار صفر در نوار ظرفیت و توابع موج ترکیبی حالتی پایه نوع S و نوع p و نوار رسانش غیرسهموی محاسبه شده است [۴]. با محاسبه تابع توزیع اختلالی $g(k)$ به روش تکرار (رابطه ۴)، تحرک پذیری الکترونی از رابطه زیر به دست می آید [۳]:

پایین تر از 80K می شود. پراکندگی پیزوالکتریک و دررفتگیها در ساختارهای زینک-بلند به علت تقارن مکعبی بلور سهم ناچیزی در تحرک پذیری الکترونی دارند.

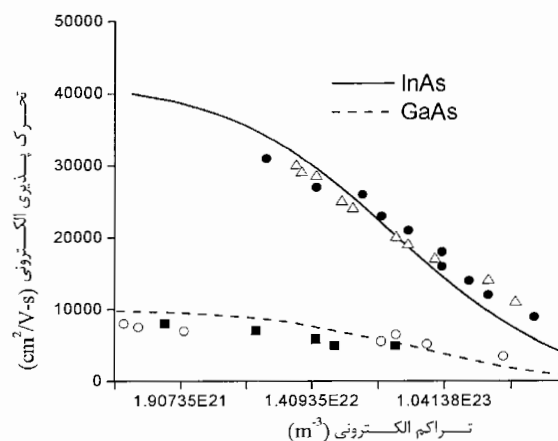
نتیجه گیری

محاسبات انجام شده نشان می دهد به علت گاف نواری کوچکتر و جرم موثر الکترونی کمتر در دره مرکزی Γ ، $InAs$ تحرک پذیری بیشتری نسبت به $GaAs$ دارد. با افزایش دما در $InAs$ از دمای حدود 80K و در $GaAs$ از دمای حدود 100K تحرک پذیری به سرعت کاهش می یابد. دلیل آن افزایش آهنگ پراکندگی از فونونهای قطبی اپتیکی است. درحالیکه در دماهای پائین تر از مقادیر فوق کاهش تحرک پذیری ناشی از پراکندگی ناخالصی های یونیده است. پیزوالکتریک در ساختارهای زینک-بلند سهم ناچیزی در تحرک پذیری الکترونی دارد. مقایسه نتایج بدست آمده با نمونه های تجربی توانایی روش عددی بکار رفته در محاسبه خواص ترابری الکترونها در نیمرسانای $InAs$ را نشان می دهد.

مرجع ها

- [1] A.G.Milnes and A.Y.Polyakov; *Materials Science and Engineering*, B18, 259-237(1993)
- [2] D.L. Rode, *Semiconductors and Semimetals*, eds. R.K. Willardson and A.C. Beer, Academic Press, New York, (1975), Vol.10, Chap.1
- [3] D.L.Rode; *Phys. Rev. B* **3**, 3287 (1971)
- [4] Subhabrata Dhare and Subhasis Ghosh; *J.appl.phys.* **86**, 2668(1999)
- [5] Vincent W.L.Chine, R.J.Egan, and Tansley; *J. appl. phys* **69** 3571 (1991)
- [6] D.L.Rode and S.Knight; *Phys rev. B* **3**, 2534 (1971)
- [7] C. M. Wolfe, G.E. Stillman, W.T.Lindley; *J. Appl. Phys.* **41**, 3088(1970)
- [8] D.L.Rode; *Phys rev. B* **3**, 3287 (1971)
- [9] C. K. Willtams and M.A.Littlejohn; *Superlattices Microstruct.* **2**, 201 (1986)
- [10] G. Weimann. *Phys. State. Sol. a* **53** K173 (1979)

است [5 و 6]. بزرگی تحرک پذیری در $InAs$ به علت جرم مؤثر الکترونی بسیار کوچک این نیمرسانا در مقایسه با $GaAs$ است. با کاهش دما تحرک پذیری افزایش می یابد و در دمای حدود 80K به یک بیشینه می رسد و سپس کاهش پیدا می کند. در $GaAs$ این بیشینه در دمای حدود 100K دیده می شود. شکل 2 تغییرات تحرک پذیری الکترون را برحسب تابعی از چگالی اتمهای ناخالصی در میدان الکتریکی به شدت 10^4Vm^{-1} و دمای 300K نشان می دهد. همانطور که ملاحظه می شود با افزایش چگالی ناخالصی ها تحرک پذیری در هر دو نیمرسانا کاهش پیدا می کند. که دلیل آن افزایش پراکندگی از مراکز ناخالصی یونیده است.



شکل 2: مقایسه تحرک پذیری الکترونی بر حسب تابعی از چگالی اتمهای ناخالصی برای دو نیمرسانای $InAs$ و $GaAs$ [8]●، [9]▲، [5]■، [9]□، [10]○

محاسبات ما نشان می دهد که با افزایش دما آهنگ پراکندگی از فونونها به سرعت افزایش پیدا می کند. بطوریکه پراکندگی ناکشسان از فونونهای قطبی اپتیکی شبکه در دماهای بالا (حدود دمای اتاق) مکانیزم پراکندگی غالب است. پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل از دمای حدود 80K اهمیت پیدا می کند. همچنین مشخص می شود مهمترین عامل محدود کننده تحرک پذیری الکترونی در دماهای پایین پراکندگی از ناخالصی های یونیده است، که باعث کاهش سریع تحرک پذیری $InAs$ در دماهای

Abstract

Temperature and doping dependence of the electron mobility in InAs structure has been calculated using an iterative technique. The following scattering mechanisms, i.e. impurity, polar optical phonon, acoustic phonon and piezoelectric are included in the calculation. Ionized impurity scattering has been treated beyond the Born approximation using the time-dependence perturbation theory.

In this project we have used Kane's theory (k.p method) for band structure calculation and its effect on the electron transport. This assumption leads to nonparabolic conduction band.

Electron wave function has been considered as admixture of s-type and p-type basis wave functions.

It is found that the electron mobility decreases monotonically as the temperature increases from 100 K to 500K. The low temperature value of electron mobility increases significantly with increasing doping concentration. The iterative results are in fair agreement with other recent calculations obtained using the relaxation-time approximation and experimental data.



SHAHROOD UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

PHYSICS DEPARTMENT

**Calculation of Low Field Electron
Mobility in Direct-gap Semiconductor
*InAs***

**By:
Amir Massoud Sadeghi**

**Supervisors:
Dr. H.Arabshahi
Dr. M.E.Ghazi**

July 2005