

دانشگاه یزد
دانشکده فیزیک

پایان نامه
برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
فیزیک حالت جامد

بررسی وابستگی دمایی قابلیت هدایت نوری حالت پایا در نیم رسانای
سیلیکان هیدروژنه آمورف

استاد راهنما:
دکتر سید محمد علی صالحی

استاد مشاور:
دکتر حسین مختاری

پژوهش و نگارش:
نجمه ترابی میرزایی

تقدیم به

پدر و مادر فداکارم


به پاس تعبیر عظیم و انسانی شان از کلمه ایثار و از خودگذشتگی

تشکر و قدردانی

در آغاز بر خود لازم می‌دانم که از زحمات بی‌دریغ، تلاش‌های بی‌وقفه و راهنمایی‌های ارزشمند استادان گرامی جناب آقای دکتر صالحی و دکتر مختاری در راستای انجام این پروژه تشکر و قدردانی نمایم. همچنین از زحمات پدر و مادر گرامی ام و کلیه کسانی که در دوران تحصیل همواره مشوق و پشتیبان اینجانب بوده اند کمال تشکر را دارم.

از زحمات و راهنمایی‌های بی‌دریغ آقای وحید فلاحی که در بسیاری از مراحل انجام این پایان نامه مرا یاری نموده اند، صمیمانه سپاسگزارم.

بسمه تعالی

شناسه: پ/ک/۳	صور تجلسه دفاعیه پایان نامه دانشجوی دوره کارشناسی ارشد	 مدیریت تحصیلات تکمیلی
--------------	---	--

جلسه دفاعیه پایان نامه تحصیلی آقای/ خانم: نجمه ترابی دانشجوی کارشناسی ارشد
رشته/گرایش: فیزیک حالت جامد

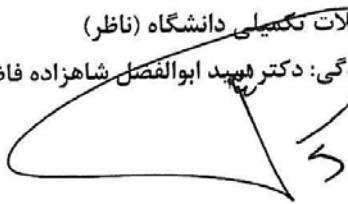
تحت عنوان:

بررسی وابستگی دمایی قابلیت هدایت نوری حالت پایا در نیم رسانای سیلیکان هیدروژنه آمورف

و تعداد واحد: ۶ در تاریخ ۸۸/۷/۱۳ باحضور اعضای هیأت داوران (به شرح ذیل) تشکیل گردید.
پس از ارزیابی توسط هیأت داوران، پایان نامه با نمره: به عدد ۱۷/۴۰ به حروف: هفده وچهل صدم
و درجه بسیار خوب مورد تصویب قرار گرفت.

عنوان	نام و نام خانوادگی	امضاء
استاد/ استادان راهنما:	دکتر سید محمدعلی صالحی	
استاد/ استادان مشاور:	دکتر حسین مختاری	
متخصص و صاحب نظر داخلی:	دکتر محسن حاتمی	
متخصص و صاحب نظر خارجی:	دکتر سید محمد حسن فیض	

نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه (ناظر)
نام و نام خانوادگی: دکتر سید ابوالفضل شاهزاده فاضلی
امضاء:



فهرست مطالب

چکیده

فهرست

۱	فصل اول؛ مقدمه و تاریخچه
۲	۱-۱ تاریخچه
۱۲	فصل دوم؛ معرفی ساختار و مبانی فیزیکی
۱۳	۱-۲ معرفی ساختار پیوندی نرمال
۱۴	۲-۲ ساختار نواری
۱۷	۳-۲ کشیدگی‌های نوارهای رسانش و ظرفیت
۱۷	۴-۲ نقایص موجود در سیلیکان هیدروژنه آمورف خالص
۱۷	۱-۴-۲ ایجاد حالت‌های جایگزیده پیوندهای معلق
۱۹	۵-۲ ساختار و چگالی حالت‌ها در سیلیکان هیدروژنه آمورف
۱۹	۱-۵-۲ معرفی
۲۰	۲-۵-۲ نقش هیدروژن در ساختار سیلیکان هیدروژنه آمورف
۲۱	۶-۲ آرایش اتمی
۲۱	۱-۶-۲ آرایش بانظم و بی‌نظم
۲۴	۷-۲ چگالی حالت‌ها و خواص الکتریکی
۲۴	۱-۷-۲ ساختار حالت‌های جایگزیده
۲۸	۲-۷-۲ مدل استاندارد چگالی حالت‌ها در a-Si-H

۳۲	فصل سوم، معادلات حاکم بر گذارها
۳۳	۱-۳ معرفی
۳۳	۲-۳ مدل گذار و انتقال
۳۵	۳-۳ معادلات گذار در نیم رسانا ها
۳۵	۱-۳-۳ مورد کلی
۳۵	۱-۳-۳-الف معادلات ماکسول
۳۶	۱-۳-۳-ب معادلات پواسون
۳۶	۱-۳-۳-ج معادلات چگالی جریان
۳۷	۱-۳-۳-د معادلات پیوستگی
۳۸	۲-۳-۳ میدان الکتریکی یکنواخت و پایین (کوچک)
۳۹	۴-۳ مدل بندی و معادلات در a-Si-H
۳۹	۱-۴-۳ سرعت خالص گیراندازی الکترون ها و حفره ها
۴۰	۲-۴-۳ کشیدگی های نواری
۴۴	۳-۴-۳ حالت های پیوندی معلق
۴۷	۴-۴-۳ معادلات سینتیک چگالی بارها روی حالت های جایگزیده
۴۸	۵-۴-۳ معادلات خنثایی
۴۹	۵-۳ تعادل ترمودینامیکی
۴۹	۱-۵-۳ رسانایی در تاریکی
۵۳	۲-۵-۳ ضرایب تابش

۵۴	۶-۳ رژیم پایدار
۵۶	۱-۶-۳ باز ترکیب در کشیدگی های نواری
۵۸	۲-۶-۳ باز ترکیب در پیوندهای معلق
۶۰	۳-۶-۳ روش محاسبه تابش پایدار
۶۲	فصل چهارم؛ تحلیل و نتیجه گیری
۶۳	۱-۴ مقدمه
۶۵	۲-۴ روش تکنیک TSC
۶۸	۳-۴ نتایج و توضیحات
۶۸	۱-۳-۴ نتایج
۷۰	۲-۳-۴ فرایندهای باز ترکیب: خواص کلی
۷۲	۱-۲-۳-۴ توضیح کیفی
۷۶	مراجع

چکیده

در این پایان نامه با استفاده از معادلات حاکم بر گذار بین حالت‌های جایگزیده موجود در گاف انرژی و حالت‌های گسترش یافته نوارهای رسانش و ظرفیت در نیم‌رسانای سیلیکان هیدروژنه آمورف، قابلیت هدایت نوری حالت پایا محاسبه شده است. حالت‌های جایگزیده به صورت توزیع نمایی مربوط به کشیدگی نوار رسانش و ظرفیت و نیز حالت‌های پیوندی معلق در نظر گرفته شده است. وابستگی قابلیت هدایت نوری به دما و شدت نور تابشی مورد مطالعه قرار گرفته و کاهش در قابلیت هدایت نوری با افزایش دما نیز بررسی شده است. رفتار دمایی قابلیت هدایت نوری با استفاده از تغییرات چگالی بارها در حالت‌های جایگزیده طی پنج مرحله به طور کیفی مورد تحلیل قرار گرفته است.

تغییرات چگالی الکترون‌ها در نوار رسانش و حفره‌ها در نوار ظرفیت بر حسب عکس دما بررسی و نمودار آن‌ها رسم شده است.

فصل اول

تاریخچه و مقدمه

۱-۱ تاریخچه

اندازه گیری رسانایی تحریکی گرمایی (TSC^1) روشی است که به طور گسترده برای تعیین ترازهای انرژی در گاف انرژی نیم رساناهای کریستالی به کار رفته است [۳۱ و ۳۲].

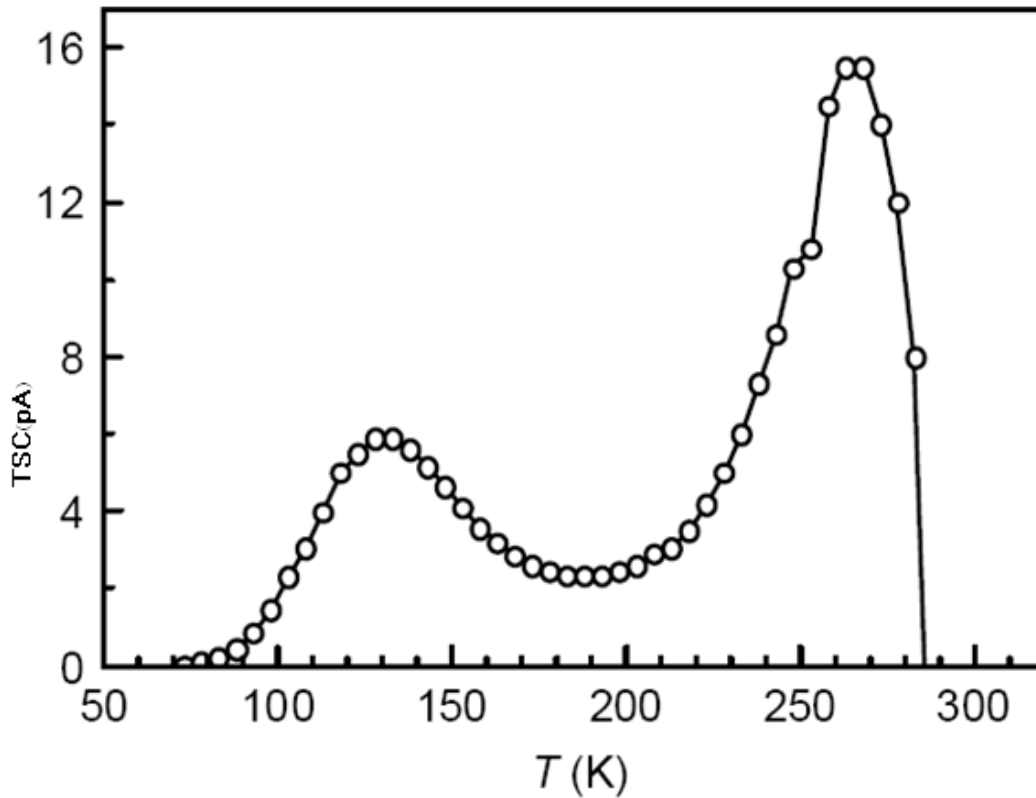
این روش بر اساس پر شدن ترازهای انرژی به وسیله تابش و در دمای پایین، قطع تابش و قرار دادن ماده در تاریکی در یک مدت زمان معین، و نهایتاً گرمادهی با یک آهنگ ثابت، استوار است. به علت سادگی انجام این روش بر روی نیم رساناهایی مثل سیلیکان آمورف هیدروژنه^۲ (a-Si-H) مطالعات زیادی در این زمینه انجام شده است.

از سال ۱۹۸۰ اندازه گیریهای TSC روی a-Si-H انجام شده و نتایج تئوری مختلفی ارائه شده است. تعداد زیادی از طیفهای TSC وجود دو پیک را نشان میدهد [۱۰-۴].

شکل (۱-۱) نمودار TSC به دست آمده بر روی یک نمونه a-Si-H را نشان میدهد. اولین پیک در دمای پایین در حدود ۱۳۰ درجه کلوین و دومین پیک در حدود ۲۶۵ درجه کلوین اتفاق افتاده است.

¹Thermally stimulated conductivity(current)

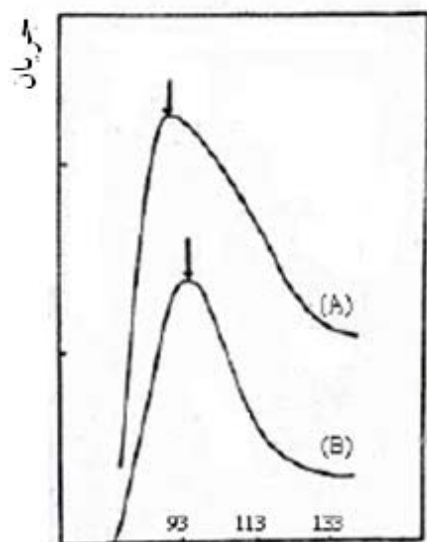
² Hydrogenated amorphous silicon



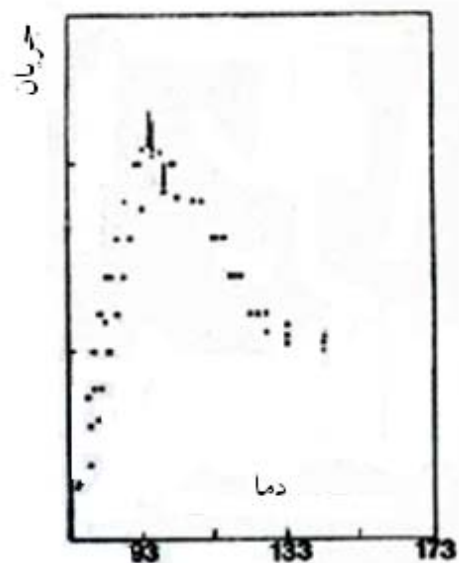
شکل ۱-۱: نمودار TSC به دست آمده برای سیلیکان هیدروژنه آمورف [۱۰].

تعداد، خصوصیات و دمای پیکها به پارامترهای آزمایشگاهی TSC و شرایط تهیه نمونه مورد نظر بستگی دارد. به عبارت دیگر شرایط مختلف باعث به وجود آمدن تغییرات گوناگونی بر روی منحنیهای TSC میشوند. به طور خاص پیکی که در دمای پایینتر وجود دارد در تابش طولانی مدت [۸ و ۶ و ۵] به علت اثری که به اثر استابلر-رانسکی^۳ معروف است، حذف میشود [۱۱]. در بعضی موارد در طیفهای TSC فقط یک پیک مشاهده شده است که مکان این پیک به شرایط تهیه نمونه بستگی دارد [۱۲ و ۱۳ و ۱۴].

¹Staebler-Wronski



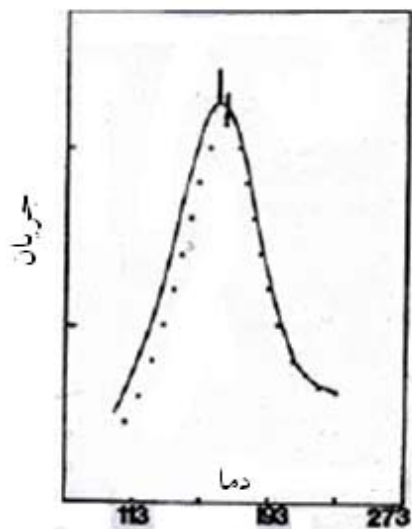
(a)



(c)



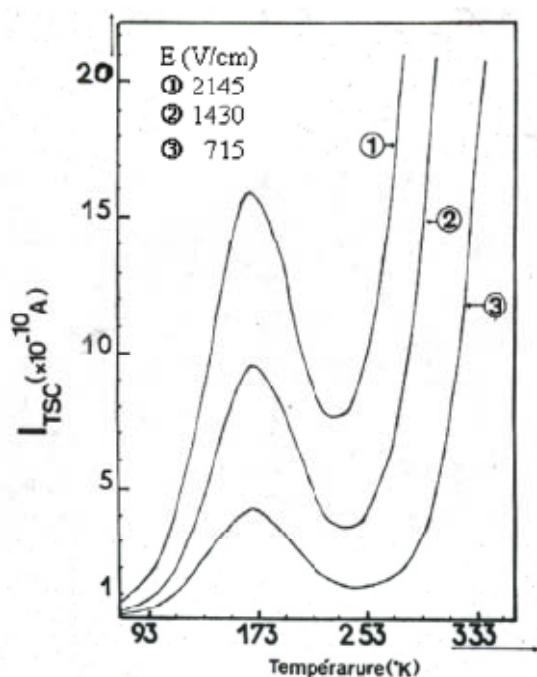
(b)



(d)

شکل ۱-۲: طیف TSC برای شدت‌های مختلف تابش [۱۷]

در شکل‌های (۲-۱) و (۳-۱) بعضی نتایج به دست آمده روی نمونه‌های a-Si-H با شکل‌های هندسی متفاوت که به کمک روش‌های مختلف آماده سازی شده اند، نشان داده شده اند [۱۳ و ۱۴]. از میان این نتایج مشاهده میشود که نتایج به دست آمده روی نمونه‌های (۲-۱-b و ۲-۱-d) و نیز نمودار (۳-۱) یک پیک که موقعیت آن نزدیک به ۲۰۰ درجه کلوین است، نشان میدهد. در مقابل برای نمونه‌های (۲-۱-a و ۲-۱-c) یک پیک در دمای پایین کمتر از ۱۰۰ درجه کلوین ظاهر میشود.



شکل ۳-۱: طیف آزمایشگاهی TSC برای مقادیر مختلف میدان [۱۳]

باید توجه کرد که وقتی که میدان الکتریکی افزایش می‌یابد ارتفاع پیکها هم افزایش می‌یابد. در کارهای اخیر که روی TSC روی نمونه a-Si-H انجام شده است بسیاری از محققان تلاش کرده‌اند تا پیکهای مشاهده شده را در یک ساختار مناسب چگالی حالتها (و با استفاده از یک تئوری فرمول بندی شده) به حالتی از نیم رساناهای کریستالی نسبت دهند [۴ و ۱۵].

یکی از اولین مطالعات توسط سیمونز^۴ و همکارانش بر روی نیم رساناهایی با یک توزیع پیوسته ای از حالت‌های انرژی گاف گزارش شده است [۱۶]. در نظریه آنها که با فرض میدان الکتریکی قوی انجام شده است، دام اندازی و بازترکیب حامل‌های آزاد در نظر گرفته نشده است. آنها از یک دسته معادلات سینتیک تحلیلی ساده کمک گرفتند و راه‌حلهایی را به دست آوردند که به طیف TSC منجر شد. دیژون^۵ با استفاده از این تئوری انرژی مشخصه^۶ مربوط به کشیدگی نوار رسانش^۷ (CBT) را در a-Si-H تعیین کرد [۷]. اندازه‌گیری‌های طیف TSC در ساختار شاتکی که یک میدان الکتریکی قوی را تولید می‌کند انجام شد. اما این میدان در ناحیه بار فضایی یکنواخت نبود. برای رفع این مشکل روشی ارائه شد که یک میدان الکتریکی یکنواخت در نمونه‌های مورد مطالعه با استفاده از رژیم پلاریزه پالسی به دست آمد [۱۷]. در این کار با استفاده از تئوری حاصل از تحقیقات سیمونز و همکارانش نتایج خوبی روی آلیاژ a-SiGe-H که در توافق با آزمایشات مشابه دیگر بود به دست آمد [۱۶]. متأسفانه این روش نیاز به آماده‌سازی ماده به شکل شاتکی و در نتیجه عملیات آزمایشگاهی پیچیده تری داشت.

فريتس^۸ و ایباراکی^۹ نظریه سیمونز را که شامل بازترکیب حاملها بود در نیم رساناهای آمورف به کار بردند [۹]. آنها در نظریه خود از دام اندازی حاملها صرف نظر کردند و برای ساده‌سازی معادلات فرض کردند که سیستم در حالت شبه تعادلی قرار دارد. آنها روشی را برای تعیین چگالی حالت‌ها در a-Si-H با استفاده از اندازه‌گیری قابلیت هدایت نوری^{۱۰} (PC) و TSC به دست آوردند [۱۸].

¹ Simmons

² Dijon

³ Characteristic energy

⁴ Conduction band tail

⁵ Fritsch

⁶ Ibaraki

⁷ Photoconductivity

این نظریه توسط لندویر^{۱۱} با مربوط کردن اندازه گیریهای همزمان TSC و قابلیت هدایت نوری که به وسیله پالسهای نوری با شدت کم ایجاد میشود گسترش یافت [۲۰ و ۱۹]. لی^{۱۲} این نظریه را برای تجزیه و تحلیل اثر تابش طولانی مدت روی طیف TSC در a-Si-H به کار برد [۲۱]. همچنین کاروتسوس^{۱۳} از این روش برای محاسبه چگالی حالتها در نیمه بالایی گاف استفاده کرد [۲۲]. جو^{۱۴} و همکارانش نظریه TSC در نیم رساناهای آمورف که در آن تابش گرمایی، دام اندازی و بازترکیب الکترونها در نظر گرفته میشود ارائه کردند [۲۳]. در این نظریه TSC به طور عددی از معادلات سینتیک که چگالی الکترونها را کنترل می کرد محاسبه شد. آنها از آمار فرمی-دیراک استفاده کردند و حفرهها نیز در معادلات در نظر گرفته نشدند. ژو^{۱۵} و الیوت^{۱۶} به طور آزمایشگاهی اثر دما روی پیک دمایی پایین را بررسی کردند [۲۴]. آنها نتوانستند نتایج به دست آمده را با استفاده از مدلهایی که تا آن زمان ارائه شده بود توضیح دهند. آنها نشان دادند که شکل TSC شدیداً به قابلیت هدایت نوری بر حسب زمان وابسته است و نتیجه گیری کردند که TSC به وسیله بازترکیب حاملها کنترل میشود نه توسط تابش الکترونها آزاد. بنابراین این چنین اظهار داشتند که TSC نمیتواند مدل مناسبی برای تعیین چگالی حالتها در a-Si-H باشد.

علاوه بر این برانوسکی^{۱۷} و همکارانش نتایج TSC در دمایی پایین را با در نظر گرفتن گذار الکترونها به وسیله پرش در بین حالتها جایگزیده مربوط به کشیدگی نوار رسانش توضیح دادند [۲۵].

اولین شبیه سازی عددی TSC در a-Si-H که تمام گذارهای الکترونها و حفرهها را در معادلات سینتیک به حساب آورده است توسط اسمایل^{۱۸} و همکارانش ارائه شد [۲۶]. در ادامه نتایج به

¹Landweer

²Lee

³Karoutsos

⁴Gu

⁵Zhou

⁶Elliott

⁷Baranovskii

⁸Smail

دست آمده از قبل، آنها نشان دادند که ارتباط دادن چگالی حالتها در a-Si-H و نیم رساناها به چگالی حالت‌های مشابه آن چه که از TSC نتیجه میشود به سادگی امکان پذیر نیست. آنها اهمیت نقش هر دو نوع از حاملها و پدیده بازترکیب را توضیح دادند.

اخیرا اشمیت و همکارانش^{۱۹} یک شبیه سازی عددی از TSC ارائه کردند [۲۷]. آنها مدل چگالی حالتها را به صورت مراکز تک ظرفیتی مربوط به دو کشیدگی نواری با توزیع نمایی و پیوندهای معلق DB^{۲۰} که توزیع گاوسی دارند در نظر گرفتند و محاسبات تحلیلی و تقریب‌هایی برای تعیین چگالی حالتها در نیمه بالایی گاف انرژی در a-Si-H انجام دادند. آنها از رهیافت ارائه شده توسط ژو^{۲۱} و همکارانش برای ترکیب TSC و قابلیت هدایت نوری استفاده کردند [۱۸].

جدیدا سوفی و همکارانش^{۲۲} اندازه گیریهای TSC روی سیلیکان هیدروژنه میکرو کریستالی^{۲۳} (μc-Si-H) که ساختار نوار ممنوعه آن شبیه به a-Si-H است انجام دادند [۲۸]. آنها از رهیافت اشمیت برای تعیین چگالی حالتها در نیمه بالایی گاف استفاده کردند [۲۷].

با توجه به تاریخچه TSC در مورد a-Si-H و مواد مربوط به آن باید دقت کرد که محاسبه TSC فقط در صورت در نظر گرفتن فرضها امکان پذیر است. به خصوص این که هنگام تعیین چگالی حالتها نقش حفره‌ها در گذارهای مختلف و بازترکیب در همه حالت‌های جایگزیده حذف میشود. بسیاری از این فرضیات بر پایه نتایج کارهای سیمونز، ایباراکی و فریتس استوار است. لازم به یادآوری است که بسیاری از آزمایشهای مناسب TSC در میدان الکتریکی پایین انجام میشود که نمیتوان از پدیده‌های بازترکیب و دام اندازی صرف نظر کرد.

روش اندازه گیری قابلیت هدایت نوری که از قطع ناگهانی تابش نتیجه میشود برای مشخص کردن ساختار نیم رسانا به کار رفته است. از این روش برای اولین بار در محاسبه عمر حامل‌های اقلیت در سیلیسکان وژرمانیوم استفاده شده است [۲۹].

¹ Schmidt

²Dangling Bond

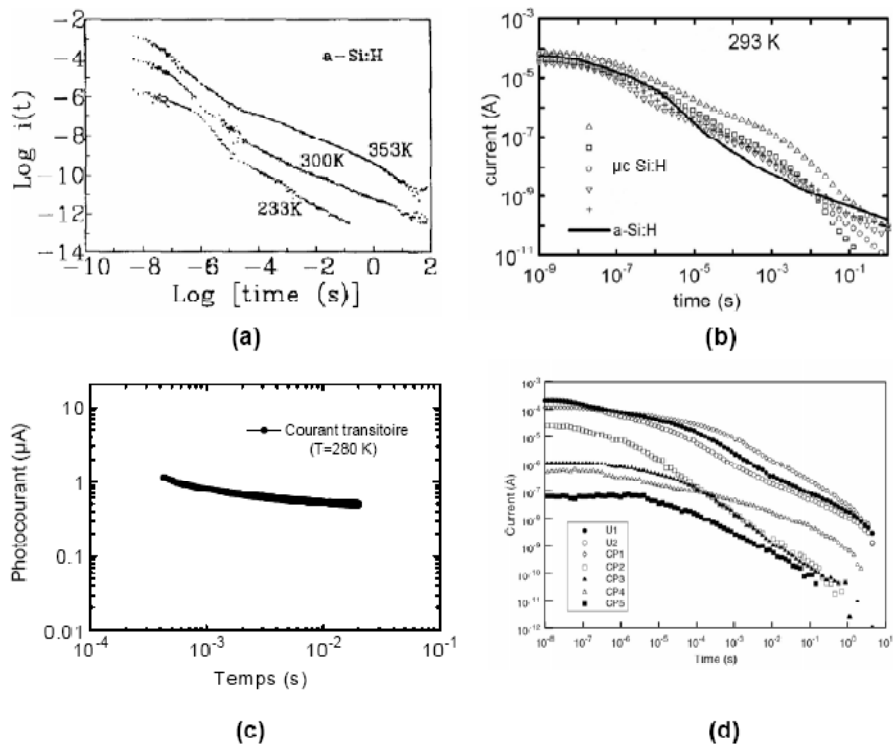
³Zhu

⁴ Souffi

⁵ Hydrogenated microcrystalline silicon

از قابلیت هدایت نوری غالباً برای تعیین نقایص موجود در گاف (موقعیت، چگالی و سطح مقطع آنها) نیم رساناهای کریستالی استفاده شده است [۳۰]. بنابراین باید عبارتهای تحلیلی که بیانگر قابلیت هدایت نوری هستند را به دست آورد. این عبارتها میتوانند از حل معادلات سینتیکی که بر چگالی حاملهای آزاد در حالتی گسترش یافته حاکمند به دست آیند. در نیم رساناهای ایده‌آل، کریستالی یا غیر از آن، چندین نقص در گاف ممنوعه وجود دارد که یافتن راه حل تحلیلی را مشکل میکند. برای جلوگیری از این مشکل کارهایی انجام شده است. به عنوان مثال اندازه‌گیری در میدان الکتریکی قوی به منظور صرف نظر از دام اندازی حاملها که اثر آن حذف عبارتهای مربوط به گیراندازی بارها به وسیله مراکز دام در معادلات است [۳۰].

انجام تکنیکهای اندازه‌گیری قابلیت هدایت نوری نسبتاً ساده هستند. بنابراین در یک مدت زمان طولانی به عنوان روشهای مناسبی برای مشخص کردن حالتی جایگزیده در نیم رسانای آمورف مثل $a\text{-Si-H}$ محسوب میشوند. در این نوع نیم رساناها کاهش در قابلیت هدایت نوری به صورت نمایی نیست بلکه تغییر منحنیها بر حسب زمان به دو مرحله تقسیم میشوند: یک مرحله ابتدایی خیلی سریع و مرحله دوم که خیلی آهسته‌تر است [۳۱-۳۴]. بعضی نتایج آزمایشگاهی در شکل ۱-۴ نشان داده شده است.



شکل ۱-۴: نمودار تجربی تغییرات قابلیت هدایت نوری [۳۴-۳۱]

کار نظری انجام شده برای محاسبه قابلیت هدایت نوری توسط اشمدیلین^{۲۴} (براساس مدل چند ترازوی)^{۲۵} (MT) انجام شده است [۳۵]. صورت ساده شده این نظریه توسط رز^{۲۶} و همکارانش ارائه شده است [۳۶]. کاهش در قابلیت هدایت نوری در نتیجه تغییر الکترونهای رسانش است که جمعیت آنها به وسیله ترازهای واقع در نیمه بالای گاف کنترل میشود. یک رابطه ساده بین طیف قابلیت هدایت نوری و انرژی مشخصه مربوط به چگالی حالتها که به طور نمایی در مجاورت کمینه نوار رسانش توزیع شده اند ابداع شده است [۳۷].

ماین^{۲۷} و همکارانش روشی را برای تعیین توزیع حالتهای جایگزیده در نیمه بالای گاف با استفاده از اندازه گیری قابلیت هدایت نوری ارائه کردند [۳۸]. آنها یک رابطه تحلیلی بین توزیع انرژی

¹ Shmidlin
² Multiple trapping
³ Rose
¹ Main

حالت‌های جایگزیده و قابلیت هدایت نوری با استفاده از تبدیل فوریه به دست آوردند. به روشی مشابه، از تبدیل لاپلاس برای تعیین توزیع چگالی حالت‌ها استفاده شده است.

از طرف دیگر ماین، یک شبیه‌سازی عددی را برای محاسبه قابلیت هدایت نوری در نیم رساناهای آمورف انجام داده است [۳۹]. این روش عددی بر اساس حل عددی معادلات سینتیک استوار است که تمام گذارهای بین حالت‌های جایگزیده و حالت‌های گسترش یافته را به حساب می‌آورد. چگالی حالت‌های جایگزیده به صورت تعدادی تراز تک ظرفیتی گسسته در گاف بدون تمایز بین کشیدگی مربوط نوار رسانش و نوار ظرفیت^{۲۸} (VBT) توزیع شده بود و حالت‌های پیوندی معلق DB نیز به صورت گسسته در نظر گرفته شده بود. این شبیه‌سازی عددی معمولاً برای اثبات چگالی حالت‌های محاسبه شده از روش تبدیل فوریه که قبلاً به آن اشاره شد مورد استفاده قرار گرفته است.

اخیراً یک شبیه‌سازی عددی کامل که دو نوع حامل بار و تمام گذارهای بین حالت‌های جایگزیده و حالت‌های گسترش یافته را به حساب می‌آورد انجام شده است [۴۰]. نتایج به دست آمده تطابق خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارند. فرایندهایی که در هر مرحله از زمان مهمتر هستند نیز مورد بحث قرار گرفته‌اند.

در این پایان‌نامه وابستگی قابلیت هدایت نوری به دما در حالت پایا محاسبه شده است. تغییر شدت نور بر قابلیت هدایت نوری در نمونه سیلیکان هیدروژنه آمورف مورد بررسی قرار گرفته است. چگالی الکترون‌ها و حفره‌ها در حالت‌های گسترش یافته نوار رسانش و ظرفیت و نیز رسانایی در تاریکی^{۲۹} برای نمونه مذکور محاسبه شده است.

²Valence band tail
¹Dark conductivity