دانشکده علوم پایه

پایان‌نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

فیزیک حالت جامد

مطالعه نظری خواص الکترونیکی و اپتیکی $Ga_{1-x}Al_xAs$

اساتید راهنما

دکتر احمد کمپانی
دکتر سید محمد حسینی

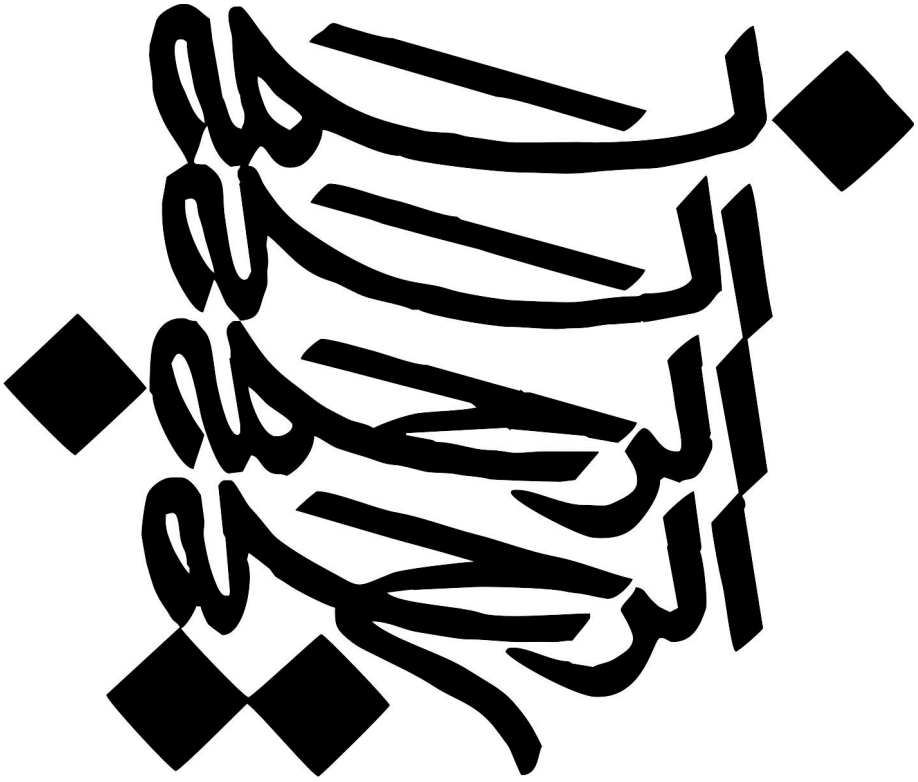
استاد مشاور

دکتر طیبه مولاروی

نگارش

ایمان عوض زاده

شهریور ۱۳۹۰



تقدیم به:

همه آنانی که

هنوز تکه‌ای از آسمان در چشمانشان

جرعه‌ای از دریا در دستانشان

و تجسمی زیبا از خاطره ایثار گل‌های سرخ

در معبد ارغوانی دل‌هایشان

به یادگار مانده است.

چکیده

در این پژوهش خواص الکترونیکی و اپتیکی ترکیب $Ga_{1-x}Al_xAs$ به ازای $x = ۰, ۰/۲۵, ۰/۷۵, ۱$ با استفاده از اصول اولیه و روش نظریه تابعی چگالی مطالعه شده است. این بررسی‌ها با استفاده از محاسبه انرژی کل و از طریق روش امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) که بر پایه نظریه تابعی چگالی DFT هوهنبرگ-کوهن شم استوار است، به کمک کد WIEN۲k صورت گرفته است. در ارتباط با برهمکنش‌های پتانسیل همبستگی تبادلی از تقریب چگالی موضعی LDA و تقریب گرادیان تعمیم یافته GGA بهره جسته‌ایم.

محاسبات نشان داد که با افزایش مقدار آلومینیوم (x) در ترکیب، اندازه گاف بزرگتر می‌شود و به ازای مقادیر $x > ۰/۴۲$ گاف انرژی از حالت مستقیم در راستای $\Gamma - \Gamma$ به غیر مستقیم در امتداد $X - \Gamma$ تبدیل می‌شود. نتایج بدست آمده برای GaAs یک گاف نواری مستقیم در امتداد $\Gamma - \Gamma$ به بزرگی $۱/۱eV$ و برای AlAs یک گاف نواری غیر مستقیم در امتداد $X - \Gamma$ به مقدار $۲/۱eV$ را نشان می‌دهد. بررسی خواص اپتیکی نشان می‌دهد که ضریب شکست با افزایش مقدار آلومینیوم (x) در ترکیب کاهش پیدا می‌کند، به‌طوری که مقدار آن برای GaAs ۳/۲۲ و برای AlAs ۲/۸ بدست آمد. با استفاده از طیف اتلاف انرژی الکترون، انرژی پلاسمون برای ترکیب $Ga_{1-x}Al_xAs$ را در حدود $۱۵/۴eV$ بدست آوردیم.

فهرست مطالب

لیست تصاویر

لیست جداول

فصل ۱

مروری بر ویژگی‌های ساختاری گالیم آرسناید

مقدمه

نیمرساناهای مرکب III-V پایه خوبی برای کاربرد درفناوری‌های زیادی از جمله در قطعات الکترونیکی و اپتو الکترونیکی همانند دیودهای نور گسیل، آشکارسازهای تصویری، لیزرها، تعدیل کننده‌ها، مدارهای مجتمع و فیلترها فراهم آورده‌اند. ترکیب‌های آرسناید گروه III ، متعلق به خانواده‌ای از نیمرساناهای ترکیبی III-V اند و بعد از نیترات‌های این گروه، دارای وسیع‌ترین طیف گاف انرژی هستند[؟]. در شرایط عادی، این ترکیب‌ها در ساختار زینک بلند متبلور می‌شوند[؟]. گالیم آرسناید (GaAs) و آلومینیوم آرسناید (AlAs) برای گستره‌ی وسیعی از سیستم‌های پیوندی نامتجانس[۱] که شامل ابر-شبکه‌های[۲] با دامنه کوتاه $(GaAs)_m/(AlAs)_n$ [؟]، آلیاژهای حجیم[۳] مانند $Al_xGa_{۱-x}As$ [؟] و نقاط کوانتومی $Al_xGa_{۱-x}As/GaAs$ [؟] ترکیباتی اساسی هستند. مشخصه‌های عملیاتی این قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی نه تنها به بررسی فنی ماده در یک سطح عملی بستگی دارد بلکه به درک روشنی از خواص مواد و علم پایه‌ای مربوط به این خواص نیز، نیاز دارند و با توجه به اهمیت فناوری آنها، دانستن خواص مختلف این ترکیبات نیمرسانا ضروری است.

ترکیبات آرسنایدهای گروه III از لحاظ نظری با به کار گیری رویکردهای متفاوتی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند: از روش‌های پدیده شناسی مانند نظریه $k.p$ یا روش‌های تجربی شبه پتانسیل [؟] تا روش‌های محاسبات اصول اولیه[۴]، مانند روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل

[۱] Heterojunction Systems

[۲] Super-Lattice

[۳] Bulk

[۴] First Principle Calculations

(FP-LAPW)[۱] در تقریب چگالی موضعی (LDA)[۲] و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA)[۳] و روش‌های شبه پتانسیل[۴] [؟].

آلیاژهای نیمرسانای III-V بدلیل ویژگی گاف انرژی آنها حوزه وسیعی از فناوری‌ها را پوشش می‌دهند و کاندیدهای نوید دهنده‌ای برای بسیاری از قطعات کاربردی مانند قطعات الکترونیک سرعت بالا و اپتیکی طول موج بالا هستند[؟، ؟]. در بین این مواد، ترکیب‌های سه تایی آلیاژهای $(Al,Ga)(As,Sb)$ طول موجی بین ناحیه مرئی و فروسرخ را پوشش می‌دهند. $Ga_{۱-x}Al_xAs$ مهمترین آلیاژ نیمرسانای III-V است که نقش اساسی در ساخت قطعات گوناگون ترانزیستور و اپتو الکترونیک بازی می‌کند.

در این پروژه محاسبات خواص الکترونی و اپتیکی مانند ساختار نواری، چگالی حالت‌های کلی و جزئی، تابع دی‌الکتریک و هدایت اپتیکی به صورت نظری مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی هوهنبرگ، کوهن و شم با تقریب شیب تعمیم یافته با کدهای WIEN۲k انجام شده است.

[۱] Full Potential-Linearized Augmented Plane Wave

[۲] Local Density Approximation

[۳] Generalized Gradient Approximation

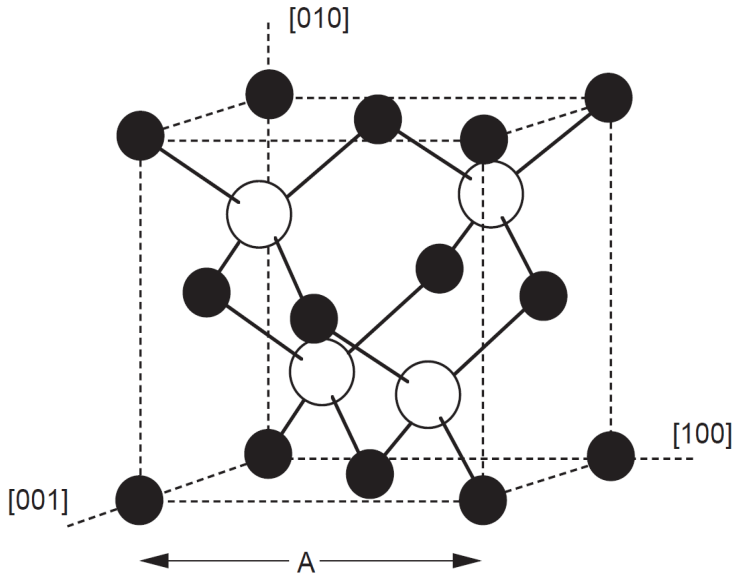
[۴] Pseudopotential

۱.۱ ویژگی‌های ساختاری گالیم آرسناید

گالیم آرسناید یک نیمرسانای مرکب III-V است که از عنصر گالیم (Ga) از ستون سوم و آرسنیک (As) از ستون پنجم جدول تناوبی عناصر تشکیل شده است. گالیم آرسناید برای اولین بار توسط گلدشمیت[؟] تهیه و در سال ۱۹۲۹ گزارش گردید، اما اولین گزارش از خواص الکترونیکی ترکیبات III-V به عنوان نیمرسانا در سال ۱۹۵۲ منتشر شد [؟]. شبکه بلوری GaAs یک ساختار زینک بلند است. این ساختار شبیه شبکه الماس با اتم‌های گالیم جایگزین شده در مکان اتم‌های یک ساختار fcc و آرسنیک در مکان ساختار fcc دیگر آن می‌باشد که در شکل ؟؟ نشان داده شده است. جدول ؟؟ لیستی از بعضی مشخصه‌ها و ویژگی‌های عمومی گالیم آرسناید را فراهم می‌آورد. استفاده از نیمرسانای GaAs در الکترونیک و صنایع وابسته از جمله دیودهای نور گسیل و لیزرهای نیمرسانا هر روز در حال گسترش است.

جدول ۱.۱: خواص GaAs در دمای اتاق

پارامتر	ویژگی
زینک بلند	ساختار بلوری
۵٫۶۵ Å	ثابت بلوری
۵٫۳۲ g/cm^3	چگالی
۴٫۵ × ۱۰^{۲۲} $atoms/cm^3$	چگالی اتمی
۱۴۴٫۶۴	وزن مولکولی
۰٫۳۲۷ J/g-K	گرمای ویژه
۱٫۴۲ eV	گاف نواری
۱۲۳۸°C	نقطه ذوب

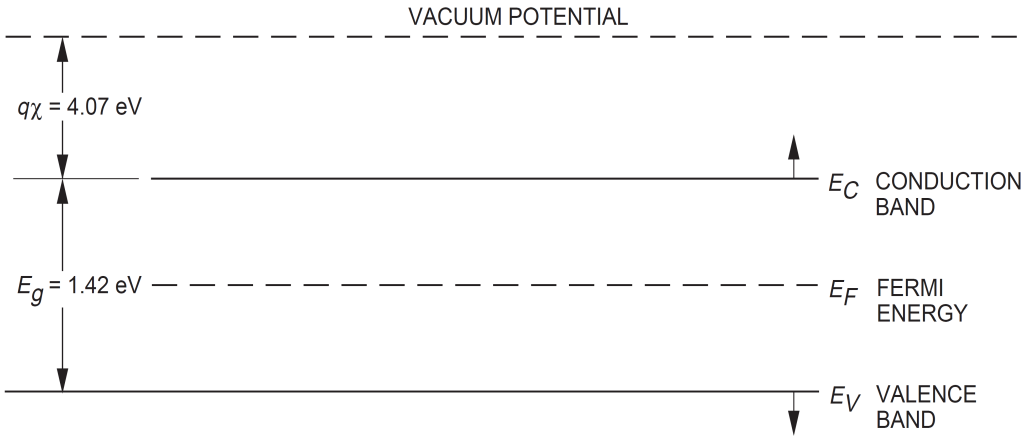


شکل ۱.۱: ساختار بلوری GaAs

۲.۱ ساختار نوارهای انرژی گالیم آرسناید

به عنوان نتیجه‌ای از قوانین مکانیک کوانتومی، الکترون‌ها در اتم‌های مجزا فقط می‌توانند مقادیر انرژی گسسته‌ی مشخصی داشته باشند. وقتی این اتم‌های مجزا برای تشکیل بلور به کنار هم آورده می‌شوند، الکترون‌ها بجای محدود شدن در تک نوارهای انرژی در گستره‌ای از انرژی‌های مجاز، یا نوارهایی به نام ظرفیت و رسانش (شکل ؟؟) محدود می‌شوند. این دو نوار بوسیله یک گاف نواری از هم جدا شده‌اند، که مشخصه بسیار مهمی از مواد نیمرسانا است. در دمای صفر کلوین، همه الکترون‌ها در نوار ظرفیت محدود شده‌اند و ماده یک عایق کامل است. در دماهای بالاتر از صفر کلوین، بعضی از الکترون‌ها دارای انرژی گرمایی کافی برای گذار به نوار رسانش هستند. احتمال اینکه یک الکترون انرژی کافی برای گذار را داشته باشد توسط تابع توزیع فرمی داده می‌شود. تراز فرمی که در شکل ؟؟ نشان داده شده، ترازی از انرژی است که در آن تابع احتمال برابر ۱/۲ است. برای نیمرساناهای خالص تراز فرمی تقریباً در وسط گاف نواری است. اگرچه، باید توجه داشت که در واقع هیچ الکترونی انرژی برابر E_f ندارد، چون آنها مجاز به حضور در گاف نواری نیستند. انرژی

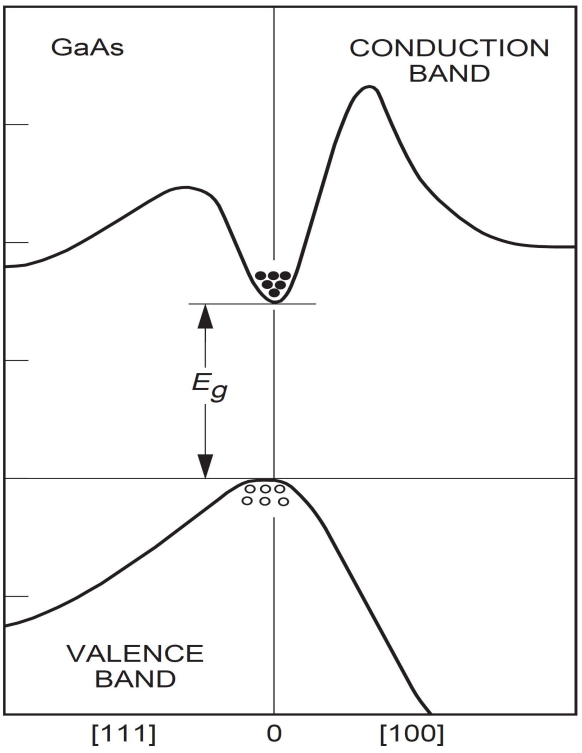
لازم برای انتقال یک الکترون از نوار ظرفیت به نوار رسانش (گاف انرژی نواری) وابسته به دما، ماده نیمرسانا، خلوص ماده و جانشانی‌ها است. برای GaAs خالص، انرژی گاف نواری در دمای اتاق $۱/۴۲eV$ است. الکترون خواهی[۱]، $q\chi$، انرژی لازم برای انتقال الکترون از ته نوار رسانش به پتانسیل خلأ است که برای GaAs این مقدار در حدود $۴/۰۷eV$ می‌باشد.



شکل ۲.۱: نمودار باند انرژی برای GaAs

گالیم آرسناید نیمرسانایی با گاف مستقیم است، به این معنی که کمینه نوار رسانش مستقیماً بالای بیشینه نوار ظرفیت است (شکل ؟؟). گذار بین نوار ظرفیت و نوار رسانش تنها به انرژی نیاز دارد و لزومی به تغییر اندازه حرکت نیست. وقتی الکترونی سطح انرژی خود را از نوار رسانش به نوار ظرفیت تغییر می‌دهد با ساطع شدن فوتونی همراه است که این خاصیت، گالیم آرسناید را ماده سودمندی برای ساخت دیودهای نور گسیل و لیزرهای نیمرسانا می‌کند. از طرف دیگر یک فوتون فرودی می‌تواند یک الکترون را از نوار ظرفیت به نوار رسانش برانگیخته کند که این خاصیت به GaAs این اجازه را می‌دهد تا در ساخت آشکارسازهای تصویر به‌کار گرفته شود.

[۱] Electron Affinity



شکل ۳.۱: ساختار نوارهای انرژی GaAs

۳.۱ کاربردهای گالیم آرسناید

استفاده از نیمرسانای GaAs در الکترونیک و صنایع وابسته هر روز در حال گسترش است. محدوده وسیع کاربردهای این نیمرسانا به عنوان ماده اولیه در ترانزیستورهای اثر میدانی تا افزاره‌های پیشرفته نوری و گسترش روبه رشد این محدوده، بررسی کاربردهای GaAs را ضروری کرده است که در اینجا تعدادی از مهمترین قطعات GaAs را برمی‌شماریم.

۱.۳.۱ ترانزیستور اثر میدانی یا FET[۱]

FET را می‌توان یکی از مهمترین ادوات الکترونیکی در فناوری نوین حالت جامد دانست. کارآیی بالای FET به همراه بازده بالا و قابلیت اطمینان زیاد، باعث جایگاه ویژه این ترانزیستور اثر میدانی شده است و از مزایای آن به شمار می‌آید. ترانزیستورهای اثر میدان در بدو ساخت به دلیل کیفیت پایین فصل مشترک $Si-SiO_2$ قابلیت رقابت با ترانزیستورهای دو قطبی را نداشتند، با بهبود کیفیت این فصل مشترک بسیاری از وظایف ترانزیستورهای دو قطبی به ترانزیستورهای اثر میدان فلز-اکسید-نیمرسانا یا MOSFET[۲] محول شد. ادوات دیگر از جمله BJT [۳] با FET همواره در حال رقابت هستند که هر یک معایب و مزایای خاص خود را دارند که از مزایای BJT نسبت به FET می‌توان به هدایت انتقالی بالا، کنترل خواص خازنی با مقدار جریان و مستقل بودن میزان ولتاژ نسبت به ابعاد افزاره اشاره کرد و از معابت آن نسبت به FET می‌توان بار اضافی تولیدی در حالت اشباع که باعث کاهش سرعت می‌شود، فرآیند ساخت پیچیده‌تر، صفر نبودن جریان ورودی حتی در حالت DC و وابستگی نمایی جراین به گرما را بر شمرد. FET جریان عبور کننده از کانال را از طریق باز و بسته کردن مسیر کانال کنترل می‌کند. این کار توسط اعمال بایاس به پایه کنترل این قطعه، به نام دروازه، انجام میشود. FET قطعه‌ای تک قطبی است بنابراین می‌تواند در سرعت‌های زیاد کار کند زیرا ترکیب الکترون-حفره برای آن محدودیتی ایجاد نمی‌کند. عملکرد ادوات دو قطبی تنها به الکترون‌ها یا حفره‌ها بستگی دارد. امروزه با استفاده از مواد سریع‌تر سرعت قطعه بسیار زیادتر شده است شاخص‌ترین این مواد GaAs و ترکیبات آن می‌باشد. استفاده از GaAs در این نوع ترانزیستور باعث کاربرد آن در بسیاری از کاربردهای دیجیتال و زیر موج شده است. همان طور که در شکل نشان داده شده، اساس عملکرد FET بسیار ساده است که در شکل ؟؟ نمایش یافته است.

[۱] Field Effect Transistor

[۲] Metal-Oxide Semiconductor Field Effect Transistor

[۳] Bipolar Junction Transistor

قطعه شامل یک کانال رسانا با دو اتصال اهمی است، یک اتصال به صورت چشمه و دیگری به صورت دررو عمل می‌کند. وقتی به دررو نسبت به چشمه ولتاژ مثبت اعمال می‌شود، الکترون‌ها از چشمه به دررو جاری می‌شوند. از این رو، چشمه به صورت مبدا حامل‌ها و دررو به صورت چاهک عمل می‌کند. الکترود سوم، دروازه، با کانال پیوندگاه یکسو کننده‌ای تشکیل می‌دهد. پهنای کانال توسط پتانسیل اعمال شده به دروازه تنظیم می‌شود. بدین ترتیب، تنظیم پهنای کانال، موجب تنظیم جریانی می‌شود که از کانال عبور می‌کند. نکته مهمی که باید مورد توجه قرار گیرد، این است که دروازه در FET باید در مقابل جریانی که از کانال عبور می‌کند، کاملاً عایق باشد. اگر دروازه به خوبی از کانال عایق نشده باشد جریان زیادی می‌کشد مو موجب کاهش بهره قطعه می‌شود. عایق سازی دروازه با روش‌های مختلفی میسر است که به قطعه‌های مختلفی منجر می‌شود. درMOSFET، دروازه از طریق لایه‌ای از اکسید، از کانال جدا می‌شود. در MESFET[۱]یا FET نیمرسانا-فلز، دروازه با نیمرسانا تشکیل سد شاتکی می‌دهد و جریان دروازه در محدوده مفید ولتاژ دروازه، کوچک است. در MODFET[۲] یا FET با آلایش مدوله شده نیز، دروازه تشکیل سد شاتکی می‌دهد و می‌توان از مفاهیم ساختارهای نامتجانس برای کاهش پراکندگی ناخالصی‌های یونیزه استفاده کرد. در FET با عایق فلز یا MISFET[۳]، عایق کانال را از دروازه جدا می‌سازد. به‌طور کلی برای مقاصد مختلف، هاFET را می‌توان به دو دسته اصلی تقسیم کرد:

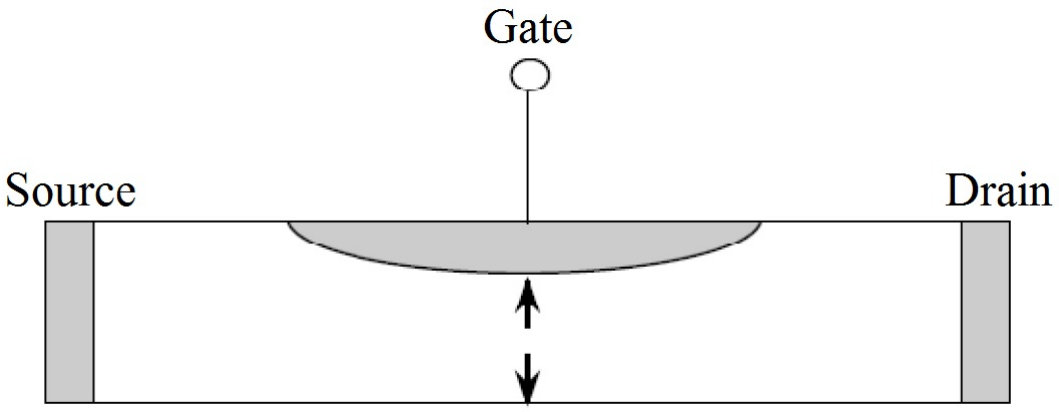
۱-قطعاتی که عایق‌سازی دروازه در آنها با استفاده از یک عایق بین دروازه و کانال فعالی که جریان از آن عبور می‌کند، انجام می‌شود. اگر شکاف انرژی عایق بزرگ باشد، به کمک انحنای شدید نوارهای انرژی می‌توان الکترون‌ها را درون کانال بدون آلایش القا کرد.

---

[۱] Metal Semiconductor Field Effect Transistor

[۲] Modulation Doped Field Effect Transistor

[۳] Metal-Insulator-Semiconductor Field Effect Transistor



شکل ۴.۱: ساختار یک ترانزیستور اثر میدانی

اخیراً علاقه فزاینده‌ای نسبت به ترانزیستورهای اثر میدانی با دروازه عایق شده در ساختار نامتجانس یا HIGFET[۱] به وجود آمده است. در این گونه ترانزیستورها، می‌توان از نیمرساناهای ترکیبی مثلاً (GaAs/AlAs) برای القای بار در کانال بدون آلایش استفاده کرد.

۲-قطعاتی که در آنها از سد شاتکی برای عایق‌سازی دروازه استفاده می‌شود. در اینجا، از آلاینده‌ها برای ایجاد حامل‌های آزاد استفاده می‌کنند و به کمک دروازه، هدایت کانال را از طریق تغییر عرض ناحیه تخلیه، تغییر می‌دهند. در تمامی این اشکال، فناوری عایق سازی دروازه، یکی از اساسی‌ترین مؤلفه‌های FET محسوب می‌گردد. های‌FET مبتنی بر Si، از مفاهیم MOSFET تبعیت می‌کنند. این در حالی است که بیشتر نیمرساناهای ترکیبی III-V، مبتنی بر مفاهیم MESFET و MOD-FET هستند.

۲.۳.۱ سلول‌های خورشیدی

کاربرد مهم دیگر گالیم آرسناید در ساخت سلول‌های خورشیدی با بازده بالا می‌باشد. در ۱۹۷۰ اولین سلول خورشیدی گالیم آرسناید با ساختار نامتجانس بوسیله تیمی که توسط زورس آلفرو رهبری میشد

[۱] Hetrostructure Isulated Gate Field Transistor

در USSR ساخته شد[؟]. یکی از کاربردهای مهم دیود p-n، تبدیل انرژی نوری به انرژی الکتریکی که در سلول خورشیدی نیز رخ می‌دهد. سلول خورشیدی بدون منبع تغذیه خارجی عمل می‌کند و به کمک توان نوری، جریان و ولتاژ تولید می‌کند. در بازده تبدیل سلول خورشیدی باید توجه کرد که فوتون‌ها با انرژی $\hbar\omega$ کوچکتر از شکاف انرژی نیمرسانا، هیچ زوج الکترون-حفره‌ای تولید نمی‌کنند. همچنین فوتون‌هایی که انرژی بزرگتر از شکاف انرژی دارند، صرف‌نظر از اینکه مقدار $(\hbar\omega - E_g)$ چقدر بزرگ باشد، الکترون‌ها و حفره‌هایی با همان انرژی E_g تولید می‌کنند. انرژی اضافی $(\hbar\omega - E_g)$ به صورت گرما تلف می‌شود و بنابراین بازده سلول خورشیدی، بستگی شدیدی به تطبیق انرژی شکاف نیمرسانا با طیف انرژی خورشیدی دارد. سلول‌های خورشیدی GaAs تطبیق بهتری با طیف انرژی خورشیدی دارند و بازده بیشتری را نتیجه می‌دهند. لیکن فناوری آن در مقایسه با فناوری سیلیسیم پر هزینه‌تر است. بنابراین سلول‌های خورشیدی GaAs برای کاربردهای فضایی به کار می‌روند، در حالی که سلول‌های خورشیدی سیلیسیمی در کاربردهایی استفاده می‌شوند که هزینه عامل مهمی است.

۳.۳.۱ دیودهای نور گسیل LED[۱]

دیود نور گسیل (LED) یکی از ساده‌ترین قطعات الکترونیک نوری است که در مخابرات نوری کاربردهای مهمی، هم به هنوان نمایش‌گر و هم به عنوان مبدل سیگنال نوری پیدا کرده است. از آنجا که LED به هیچ کاواک نوری خاصی برای عملکردش نیاز ندارد، ساخت آن در مقایسه با دیود لیزر ساده‌تر است. این مزیت به قیمت خروجی نوری ضعیف، طیف گسترده و غیر همدوس و پاسخ کند قطعه تمام می‌شود. LED اساساً یک پیوند p-n است که بایاس مستقیم می‌شود تا الکترون‌ها و حفره‌ها را به ترتیب به داخل نواحی p و n تزریق کند. بارهای اقلیت تزریق شده، با بار

[۱] Light Emitted Diode

اکثریت در ناحیه تخلیه یا در ناحیه خنثی بازترکیب می‌شوند. در نیمرساناهای با گاف مستقیم، این بازترکیب موجب گسیل نور می‌شود، زیرا در مواد دارای کیفیت خوب، باز ترکیب تشعشعی غالب است. در مواد دارای گاف انرژی غیر مستقیم، بازده گسیل نور بسیار ضعیف است و بیشتر مسیرهای بازترکیب، غیر تشعشعی هستند که به جای نور، گرما تولید می‌کنند.

فصل ۲

روش‌های حل مسئله بس ذره‌ای و نظریه تابعی چگالی