



دانشگاه تبریز

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان:

بررسی خواص ترابرد الکترون در نیم رساناهای $4H-SiC$ و $6H-SiC$

تحت تاثیر میدان الکتریکی شدید

استاد راهنما:

دکتر هادی عربشاهی

استاد مشاور:

دکتر احمد فرزانه کرد

پژوهشگر:

معصومه نامنی

بهمن ماه ۱۳۸۷



دانشگاه تبریز

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد فیزیک

گرایش حالت جامد

عنوان:

بررسی خواص ترابرد الکترون در نیم رساناهای $4H-SiC$ و $6H-SiC$

تحت تاثیر میدان الکتریکی شدید

استاد راهنما:

دکتر هادی عربشاهی

استاد مشاور:

دکتر احمد فرزانه کرد

پژوهشگر:

معصومه نامنی

بهمن ماه ۱۳۸۷

تقدیم به

مادر دلسوز و

پدر بزرگوارم

که وجود گرانقدرشان،

روشنم می دارد،

جراتم می بخشد،

ره می اندازد.

تقدیر و تشکر

همتم بدرقه راه کن، ای طاهر قدس

که درازاست ره مقصد و من نویسم

سپاس بیکران آفریدگار مهربانی را که به من قدرت آموختن عطا کرد و از در بخشندگی و بنده نوازی افتخار کسب علم و دانش را در محضر اساتیدی بزرگوار و توانا به این حقیر عطا نمود.

بر خود لازم می دانم که از استاد عالی مقام جناب آقای دکتر عربشاهی که در زمینه انتخاب موضوع و دیگر مراحل قبول زحمت نموده و بار راهنمایی های حکیمانه خویش اینجانب را در مسیر صحیح تهیه و تدوین این پژوهش قرار دادند و به این حقیر کمک شایانی نمودند، صمیمانه سپاسگذاری نمایم. و نیز از استاد بزرگوار جناب آقای دکتر فرزانه کرد، که مشاوره این کار را بر عهده گرفتند و با کمال بزرگواری و وسعه صدر اینجانب را ارشاد و راهنمایی نمودند و نیز داوران محترم جناب آقایان دکتر رضایی و دکتر قربانی که بزرگواری نمودند و زحمت داوری این پایان نامه را پذیرفته اند، بی نهایت سپاسگذارم.

از تمامی اساتید ارجمند و پرتوان خود جناب آقایان دکتر مولوی و دکتر قربانی و دکتر علوی که در طول دوره تحصیل توفیق کسب علم و معرفت را در محضر آنها داشتم، سپاسگذارم و همواره مدیون زحمات بی شائبه این بزرگواران هستم. همچنین از سرکار محترم خانم افضلی فر، کارشناس محترم گروه فیزیک، کمال تشکر را دارم. برای تمامی این عزیزان آرزوی سعادت، بهروزی و شادکامی در تمامی مراحل زندگی را دارم.

نام و نام خانوادگی دانشجو معصومه نامنی

چکیده:

هدف این پایان نامه، بررسی خواص ترابری الکترون در نیم رساناهای $4H - SiC$ و $6H - SiC$ در حد میدان های الکتریکی شدید با استفاده از روش مونت کارلو می باشد.

در میدان های الکتریکی ضعیف، تنها الکترون های واقع در دره مرکزی Γ در ترابرد الکترون هاسهیم اند و گذارهای بین دره ای و بین نواری وجود ندارند. در حالیکه در میدان های الکتریکی قوی، الکترون های واقع در دره های مجاور نیز در ترابرد الکترون ها نقش دارند و گذارهای بین دره ای و بین نواری نیز صورت می گیرد، زیرا در میدان های الکتریکی قوی، الکترون های واقع در دره مرکزی Γ می توانند انرژی لازم برای رفتن به دره های دیگر را کسب نمایند. در بررسی ساختار نواری و تاثیر آن بر خواص ترابرد الکترون ها از نظریه کین، استفاده شده است. این موضوع باعث غیر سه موی شدن نوار رسانش می شود. و نیز در این پایان نامه از مدل سه دره ای در ساختار نواری با سطوح انرژی بیضی گون استفاده شده است.

در این پایان نامه پراکندگی های ناشی از فونون های آکوستیکی و فونون های اپتیکی قطبی، پتانسیل تغییر شکل شبکه، اثر پیزوالکتریک، ناخالصی های یونیزه در نظر گرفته شده است. در هر کدام از این موارد، از نظریه اختلال وابسته به زمان برای محاسبه آهنگ پراکندگی استفاده شده است.

با استفاده از شبیه سازی مونت کارلو، سرعت سوق الکترون ها و نیز درصد اشغال دره ها توسط الکترون ها برای نیم رساناهای $4H - SiC$ و $6H - SiC$ در حد میدان های الکتریکی قوی بررسی شده است و نیز برخی عوامل مؤثر بر سرعت سوق، بررسی شده است. همچنین بستگی تحرک پذیری به دما و تراکم الکترون ها هم بررسی شده است.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱.....	مقدمه.....
۳.....	فصل اول: خواص عمومی نیم رساناها.....
۴.....	۱-۱ بررسی حالت الکترونی بلور.....
۵.....	۲-۱ توصیف مدل نیمه کلاسیکی.....
۷.....	۳-۱ محدودیت های مدل نیمه کلاسیکی.....
۷.....	۴-۱ تابع توزیع الکترون.....
۹.....	۵-۱ ساختار بلوری.....
۱۴.....	۶-۱ ساختار نوار انرژی.....
۱۹.....	۷-۱ روش شبه پتانسیل.....
۲۳.....	فصل دوم: فرایندهای پراکندگی الکترون.....
۲۴.....	مقدمه.....
۲۵.....	۱-۲ منابع پراکندگی الکترون.....
۲۵.....	۱-۱-۲ نواقص بلوری.....
۲۵.....	۲-۱-۲ ناخالصی ها.....
۲۷.....	۳-۱-۲ ارتعاشات گرمایی یون ها.....
۳۰.....	۲-۲ روش اختلال وابسته به زمان.....
۳۳.....	۳-۲ استتار توسط حامل های الکتریکی.....
۳۴.....	۴-۲ انواع فرایندهای پراکندگی.....
۳۵.....	۵-۲ پراکندگی ناشی از فونون ها.....
۳۶.....	۱-۵-۲ پراکندگی ناشی از فونونهای آکوستیکی.....
۳۶.....	الف) پراکندگی ناشی از پتانسیل تغییر شکل شبکه.....
۴۱.....	ب) پراکندگی پیزوالکتریک.....
۴۵.....	۲-۵-۲ پراکندگی الکترون ناشی از فونونهای اپتیکی.....

۵۳.....	۶-۲ پراکندگی الکترون ناشی از ناخالصی های یونیزه
۵۶.....	۷-۲ مجموع آهنگ پراکندگی ها
۶۰.....	فصل سوم: شبیه سازی مونت کارلو
۶۱.....	مقدمه
۶۲.....	۱-۳ روش مونت کارلو در بررسی تراپدالکترونی در نیم رساناها
۶۳.....	۱-۱-۳ زمان فرار آزاد
۶۵.....	۲-۱-۳ حالت نهایی بعد از پراکندگی
۶۶.....	۳-۱-۳ شبیه سازی آنسامبلی مونت کارلو
۶۷.....	۲-۳ فهرست برنامه مونت کارلوی حجمی برای <i>GaN</i>
۷۰.....	فصل چهارم: نتایج و کارهای انجام شده
۷۱.....	مقدمه
۷۱.....	۱-۴ محاسبه آهنگ های پراکندگی
۷۶.....	۲-۴ درصد اشغال دره ها توسط الکترون
۷۸.....	۳-۴ انرژی جنبشی میانگین
۷۹.....	۴-۴ سرعت سوق حالت پایدار در نیم رساناهای $4H-SiC$ و $6H-SiC$
۸۱.....	۱-۴-۴ اثر دما بر سرعت سوق
۸۳.....	۲-۴-۴ اثر چگالی اتم های ناخالصی بر سرعت سوق
۸۵.....	۳-۴-۴ اثر جرم موثر بر سرعت سوق
۸۸.....	۴-۴-۴ اثر ثابت های دی الکتریک بر سرعت سوق
۹۰.....	۵-۴-۴ اثر انرژی جداسازی بین دره ای بر سرعت سوق
۹۱.....	۶-۴-۴ اثر انرژی فونون اپتیکی قطبی بر سرعت سوق
۹۳.....	۵-۴ محاسبه تحرک پذیری در حدمیدان های الکتریکی ضعیف
۱۰۲.....	۶-۴ نتیجه گیری
۱۰۴.....	۷-۴ کارهای آینده
۱۰۵.....	منابع

مقدمه

نیم رسانای SiC در سال ۱۸۲۴ بوسیله دانشمندی سوئدی به نام جونز ژاکوب برزلیوس^۱، کشف شد و شکل طبیعی آن در سنگ های شهابی پیدا شده است. SiC یک ترکیب سخت و مقاومی می باشد. بطوریکه حتی در دماهای بالای $1000^{\circ}C$ ، خواص مکانیکی خود را حفظ می کند. منظور از سختی عبارت است از مقاومت بلور در مقابل خراش، سایش و ضربه. برای تشخیص سختی کانی های مختلف، جدول و مقیاس خاصی توسط یک دانشمند فرانسوی در قرن نوزدهم به نام موز، بوجود آمده است. در این جدول که به جدول موز^۲ معروف است، نمونه هایی از کانی های مختلف وجود دارد که هر یک دارای درجه سختی^۳ معینی می باشند. در این جدول، سختی SiC با عدد ۹ مشخص شده، در حالی که سختی الماس با عدد ۱۰ و سختی سنگ سمباده با عدد ۸ مشخص شده است. این ماده از واکنش های الکتروشیمیایی ماسه و کربن در دماهای بالا (بالاتر از $2550^{\circ}C$)، حاصل می شود. و به خاطر خواص الکتریکی و فیزیکی عالی آن، توجه بسیاری به آن می شود. کاربرد SiC بیشتر در بریدن، ساییدن و صیقل دادن می باشد و آن را به عنوان یک ماده ساینده می شناسند [۱]. SiC در ساختار های بلوری مختلف زیادی ظاهر می شود و هر ساختار بلوری دارای خواص اپتیکی و الکتریکی بی نظیری می باشد. در حال حاضر حدود ۲۰۰ نوع مختلف SiC شناخته شده است. SiC یک نیم رسانا با گاف نواری عریض می باشد و مقدار آن برای انواع مختلف SiC ، بین $2/3 eV$ برای $3C-SiC$ ، و $3/3 eV$ برای $2H-SiC$ می باشد. و نیز SiC یک رسانای گرمایی عالی به حساب می آید. بطوری که در دمای اتاق، نسبت به هر فلز دیگری از رسانندگی گرمایی بالاتری برخوردار است. و نیز قطعات SiC می توانند در فرکانس های بالا (امواج رادیویی و میکروموج ها) کاربرد شده شوند. به علت سرعت الکترونی فوق العاده بالای آن در میدان های الکتریکی بالا و حساس نبودن پارامترهای الکتریکی و فیزیکی آن به دما و داشتن گاف نواری عریض از آن در ساخت مدارهای مجتمع برای تقویت و معکوس نمودن جریان و در طراحی و ساخت قطعات الکترونیکی توان بالا و همچنین در ساخت ترانزیستورهای دو قطبی بادیواره عایق استفاده فراوان می شود. همین طور به علت تحرک پذیری بالای آن، استفاده از آن در ساخت ترانزیستورهای اثر میدان فرکانس بالا پیشنهاد می شود [۲].

برای بررسی قطعات نیم رسانا داشتن اطلاعات کافی درباره خواص ترابری الکترونی در نیم رسانا لازم است. از طرفی برای بررسی خواص ترابری الکترونی در نیم رساناها، باید اطلاعاتی در مورد ساختار بلوری، ساختار نواری و نیز برهمکنش الکترون باشبکه بلور بدست آورد. برای تعیین خواص الکتریکی، عموماً از روش نظری و شبیه سازی

۱ - Jöns Jacob Berzelius

۲ - Mohs Scale

۳ - hardness

استفاده می‌شود. روش مونت کارلو روش بسیار توانمند در حل این گونه مسائل است. از این روش می‌توان برای مدل‌سازی نظری مسائل پیچیده که امکان حل تحلیلی آن‌ها وجود ندارد، استفاده نمود. هدف نظریه ترابری الکترون در بلورهای نیم رسانا، تعیین پارامترهای ترابری میکروسکوپی به کمک کمیت‌های فیزیکی قابل اندازه‌گیری بلورنیم رسانا می‌باشد. به عنوان مثال تعدادی از این کمیت‌ها عبارتند از: ثابت شبکه بلور، چگالی بلور، ضریب دی‌الکتریک فرکانس بالا، ضریب دی‌الکتریک فرکانس پایین و جرم مؤثر الکترون.

این نظریه، همچنین نحوه تغییرات خواص ترابری به علت تغییرات میدان‌های الکتریکی، مغناطیسی، دما، ترکیب ماده نیم رسانا و میزان ناخالصی موجود در ماده نیم رسانا را بررسی می‌کند.

در این پایان‌نامه، به بررسی خواص الکتریکی دو ترکیب $6H - SiC$, $4H - SiC$ ، در میدان‌های الکتریکی شدید با استفاده از روش مونت کارلو می‌پردازیم و هر جا لازم باشد، مقایسه‌ای بین خصوصیات ترابری این ترکیبات با ترکیب GaN صورت گرفته است. و نیز در این مطالعه، سرعت سوق الکترون و عوامل مؤثر بر آن، درصد اشغال دره‌ها توسط الکترون در حدمیدان‌های الکتریکی قوی و نیز تحرک پذیری الکترون‌ها تحت تاثیر میدان الکتریکی ضعیف بررسی شده است. این پایان‌نامه شامل چهار فصل می‌باشد. در فصل اول مطالبی درباره خواص عمومی نیم رساناها مانند، ساختار نوار انرژی و ساختار بلوری آنها بیان شده است.

در فصل دوم عوامل مختلف پراکندگی حامل‌ها بررسی شده و با در نظر گرفتن پتانسیل پراکندگی‌ها به عنوان یک پتانسیل اختلال، آهنگ پراکندگی برای هر کدام مورد مطالعه قرار گرفته است.

در فصل سوم در باره شبیه‌سازی مونت کارلو بحث شده تا بتوان به کمک این روش رفتار الکترون را در فضای فاز شبیه‌سازی کرد و خواص ترابری الکترون در نیم‌رساناها را بررسی کرد.

در فصل چهارم خواص ترابری الکترونی در میدان‌های الکتریکی قوی در نیم رساناها با $6H - SiC$, $4H - SiC$ استفاده از روش مونت کارلو شبیه‌سازی شده است. سپس تحرک پذیری الکترونی در حدمیدان‌های الکتریکی ضعیف محاسبه شده و وابستگی آن به دما و تراکم الکترونی مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین در این فصل سرعت سوق الکترون‌ها و برخی عوامل مؤثر بر آن و نیز درصد اشغال دره‌ها توسط الکترون‌ها برای مواد فوق محاسبه و اثر هر یک از فرآیندهای پراکندگی در ترابری الکترون‌ها به طور مجزا بررسی شده است.

فصل اول:

خواص عمومی نیم رساناها

۱-۱ بررسی حالت الکترونی بلور

داشتن اطلاعاتی در مورد ساختار نواری و ساختار بلوری و نیز فرایندهای پراکندگی^۱ الکترون در بلور جهت مطالعه دقیق خواص ترابری الکترون در نیم رساناها لازم است. به همین دلیل در این پایان نامه، به بررسی این عوامل می پردازیم. ساختار نواری انرژی یک جامد بلوری از حل معادله شرودینگر بدست می آید:

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

در رابطه بالا $V(\vec{r})$ ، تابع انرژی پتانسیل است، بطوریکه این پتانسیل تناوبی بوده و دارای تقارن انتقالی بلور می باشد، زیرا آن را اتمهای تشکیل دهنده بلور به وجود می آورند و اتمهای بلور نیز دارای تناوب شبکه برآوه^۲ هستند. و در نتیجه داریم:

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

که در آن \vec{R} بردار شبکه مستقیم بوده و رابطه بالا به ازای تمام \vec{r} ها برقرار می باشد. بنابر قضیه بلوخ^۳ به دلیل دوره ای بودن تابع انرژی پتانسیل، تابع موج را می توان بصورت زیر بیان کرد، که به آن تابع بلوخ نیز گفته می شود:

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

این تابع به شکل یک موج تخت رونده است. که در این رابطه ضریب $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ نشان می دهد که الکترونها متحرکند. و $u_k(\vec{r})$ تابعی با تناوب شبکه در فضای واقعی است، و برطبق آن الکترون به صورت بسته موجی در نظر گرفته می شود که می تواند در داخل شبکه تناوبی بلور آزادانه حرکت کند. به طوری که داریم:

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

که در آن k بردار موج الکترونی است که متعلق به منطقه اول بریلوئن^۴ می باشد [۳].

با توجه به قضیه بلوخ می توان تمام الکترونها را در منطقه اول بریلوئن بررسی کرد، زیرا می توان تمام نقاط را به وسیله بردار شبکه وارون، \vec{G} ، به منطقه اول بریلوئن منتقل کرد. بدین ترتیب می توان از بردارهای موج الکترون واقع در منطقه اول بریلوئن برای مشخص کردن حالت های الکترونی بلور استفاده کرد. با استفاده از قضیه

۱ - Scattering Process

۲ - Bravais Lattice

۳ - Bloch's Theorem

۴ - First Brillouin zone

بلوخ و نیز با اعمال کردن شرایط مرزی دوره‌ای بر روی تابع موج الکترون می‌توان به این نتیجه رسید که تعداد حالت‌های مجاز در منطقه اول بریلوئن با تعداد یاخته‌های بنیادی بلور برابر است. بنابراین با وجود حجم کم منطقه بریلوئن، تعداد حالت‌های مجاز بردار \vec{k} در این منطقه بسیار زیاد است. به همین دلیل می‌توان در محاسبات بردار موج الکترون رابه عنوان یک متغیر پیوسته در نظر گرفت [۳].

۱-۲ توصیف مدل نیمه کلاسیکی^۱

مدل نیمه کلاسیکی پاسخ الکترونها رابه میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی خارجی، در بسته موج‌هایی که به آرامی تغییر می‌کنند، توصیف می‌کند. در این مدل چنین میدان‌هایی باعث ایجاد نیروهای کلاسیکی مربوط به معادله حرکتی می‌شود که نمو مکان و بردار موج یک بسته را توصیف می‌کند. ظرافت این مدل که باعث پیچیدگی آن نسبت به حد کلاسیکی معمولی الکترون‌های آزاد می‌شود، در آن است که پتانسیل دوره‌ای شبکه در ابعادی تغییر می‌کند که در مقایسه با پهنای بسته موج کوچک است، و نمی‌توان با آن به طور کلاسیکی رفتار کرد. به همین دلیل مدل نیمه کلاسیکی، یک حد کلاسیکی جزئی است، و در آن با میدان‌های اعمال شده خارجی بصورت کلاسیکی رفتار می‌شود. در صورتی که در مورد میدان دوره‌ای یون‌ها چنین نیست.

هدف این مدل، ایجاد ارتباط بین ساختار نواری و ویژگی‌های ترابری، یعنی پاسخ الکترون‌ها به میدان‌های اعمالی یا گرادیان‌های دما می‌باشد و می‌توان با استفاده از آن ویژگی‌های ترابری یک نوار مشخص و نیز جنبه‌های ساختار نواری مربوط به ویژگی‌های ترابری را نتیجه گرفت. در مدل نیمه کلاسیکی، با در نظر داشتن اصول مکانیکی کوانتومی، از روابط مکانیک کلاسیک استفاده می‌شود. در این مدل، الکترون واقع در بلور به صورت یک ذره آزاد با جرم جدید منظور می‌گردد. این جرم را جرم موثر^۲ الکترون می‌گویند، که با دانستن ساختار نوار انرژی بلور از رابطه زیر، بدست می‌آید:

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \mathcal{E}(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} \quad (۵-۱)$$

این رابطه بیان می‌کند که جرم موثر الکترون در بیشینه نوارهای انرژی منفی و در کمینه نوارهای انرژی مثبت است [۳].

^۱ - Semiclassical Model

^۲ - Effective Mass

سرعت گروه^۱ بسته موج وابسته به الکترون رامی توان از رابطه زیر بدست آورد:

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k \mathcal{E}(\vec{k}) \quad (۶-۱)$$

که در آن $\mathcal{E}(\vec{k})$ انرژی الکترون است. از اثر عملگر اندازه حرکت بر روی تابع موج الکترون آزاد می توان نوشت:

$$\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \psi(\vec{r}) = \hbar \vec{k} \psi(\vec{r}) \quad (۷-۱)$$

که در این رابطه $\hbar \vec{k}$ ، اندازه حرکت بلوری الکترون می باشد. در تقریب نیمه کلاسیک این اندازه حرکت برابر اندازه حرکت الکترون فرض می شود [۳].

اگر توابع $\mathcal{E}_n(\vec{k})$ معلوم باشند، مدل نیمه کلاسیکی به هر الکترون یک موقعیت مکانی \vec{r} ، یک بردار موج \vec{k} و یک شاخص نواری n نسبت می دهد. در حوزه زمانی و در حضور میدان های الکتریکی و مغناطیسی خارجی $\vec{H}(\vec{r})$ و $\vec{E}(\vec{r})$ فرض بر این است که موقعیت مکانی، بردار موج و شاخص نواری طبق قوانین زیر تغییر می کنند:

الف) شاخص نواری n ، یک ثابت حرکت است، یعنی مدل نیمه کلاسیکی امکان گذارهای بین نواری توسط الکترون را نادیده می گیرد.

ب) تحول زمانی موقعیت مکانی و بردار موج یک الکترون با شاخص نواری n توسط معادلات زیر مشخص می شود:

$$\dot{\vec{r}} = \vec{v}_n(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k \mathcal{E}(\vec{k}) \quad (۸-۱)$$

$$\hbar \dot{\vec{k}} = -e \left[E(\vec{r}, t) + \frac{1}{c} V_n(\vec{k}) \times \vec{H}(\vec{r}, t) \right] \quad (۹-۱)$$

ج) بردار موج الکترون تنها منحصر به مقادیری می باشد که در منطقه اول بریلوئن قرار دارند. باین شرط در واقع نتایج نظریه بلوخ و شرط مرزی دوره ای جهت بررسی رفتار الکترون در نظر گرفته می شود [۳].

۳-۱ محدودیت های مدل 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:

$$\begin{aligned} \hbar\omega_c &\ll \frac{\mathcal{E}_g}{\mathcal{E}_f} \\ eEa &\ll \frac{\mathcal{E}_g^2}{\mathcal{E}_f} \\ \omega_c &= \frac{eH}{mc} \end{aligned} \quad (10-1)$$

که در آن a ثابت شبکه، \mathcal{E}_g گاف نواری^۱ و \mathcal{E}_f انرژی فرمی^۲ می باشد. 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 ویژه الکتریکی با بزرگی $100 \mu\Omega cm$ ، شدت میدان الکتریکی موجود در فلزات از مرتبه $10^{-2} V/cm$ می باشد. بنابراین eEa از مرتبه $10^{-10} eV$ خواهد بود. چون \mathcal{E}_f از مرتبه $1 eV$ ، یا بیشتر است. رابطه دوم به شرطی نقص می شود که $\mathcal{E}_g < 10^{-5} eV$ باشد. در فلزات گاف انرژی از این مرتبه وجود ندارد. در عمل این شرط فقط برای نارساناها و نیم رساناها همگن، در نزدیکی نوارهای تبهگن معنی دارد. در مورد نیم رساناها غیر تبهگن و یا دردی الکتریک ها رابطه اول می تواند نقص شود، زیرا امکان بوجود آمدن میدان های الکتریکی با شدت زیاد در این موارد وجود دارد. میدان الکتریکی قوی می تواند باعث گذار الکترون به یک نوار دیگر شود [۳].

۴-۱ تابع توزیع^۳ الکترون

هنگامی که الکترون ها در حالت تعادل گرمایی باشکده هستند، نحوه توزیع الکترون ها در N تراز انرژی موجود (N تعداد یاخته های بنیادی) بوسیله تابع توزیع فرمی - دیراک^۴ مشخص می شود. بر اساس این تابع توزیع، احتمال اشغال تراز انرژی \mathcal{E} از رابطه زیر بدست می آید:

$$f(\mathcal{E}, k) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_f}{K_B T}\right)} \quad (11-1)$$

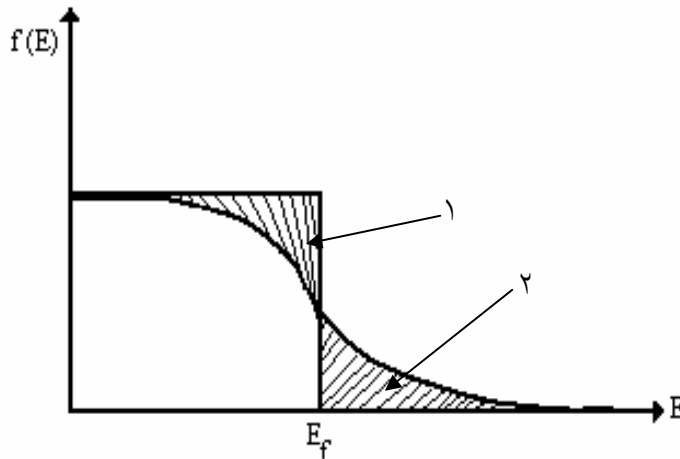
۱ - Band gap

۲ - Fermi Energy

۳ - Distribution Function

۴ - Fermi-Dirac Distribution Function

در این رابطه T دمای حالت تعادل، \mathcal{E}_f انرژی فرمی و K_B ثابت بولتزمن^۱ است. در صفر مطلق تمام حالت‌های با انرژی پایین‌تر از \mathcal{E}_f اشغال شده‌اند، در حالیکه تمام حالت‌های با انرژی بالاتر از \mathcal{E}_f خالی هستند. پس این تابع برای انرژی‌های زیر \mathcal{E}_f برابر با یک و برای انرژی‌های بالاتر از \mathcal{E}_f صفر است. به ازای یک دمای معین در انرژی \mathcal{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 می‌یابد. الکترون‌ها از ناحیه ۱ به ناحیه ۲ برانگیخته می‌شوند. تراز فرمی باید به گونه‌ای باشد که تعداد الکترون‌هایی که ناحیه ۱ را ترک می‌کنند، برابر با تعداد الکترون‌هایی باشد که به ناحیه ۲ برانگیخته شده‌اند. به همین علت در نیم‌رساناهای ذاتی تراز فرمی در وسط گاف نواری قرار دارد [۴].



شکل ۱-۱: تابع توزیع فرمی-دیراک بصورت تابعی از انرژی برای دماهای بزرگتر از صفر کلونین [۵].

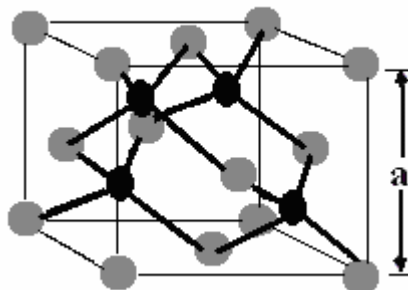
چون تابع توزیع فرمی-دیراک به انرژی الکترون بستگی دارد، در نتیجه احتمال اشغال یک تراز انرژی به طول و راستای بردار موج الکترون بستگی دارد. پس تابع توزیع فرمی-دیراک نسبت به مبداء مختصات در فضای فاز متقارن بوده و احتمال اشغال یک حالت با بردار موج \vec{k} برابر با احتمال اشغال یک حالت با بردار موج $-\vec{k}$ است. پس در حالت تعادل گرمایی برابری حرکت بارهای الکتریکی صفر است. مسئله بررسی خواص ترابری الکترون هنگامی مطرح است که عواملی موجب از بین رفتن تعادل گرمایی بین الکترون و اتم‌های شبکه شود [۵].

^۱ - Boltzmann Constant

۱-۵ ساختار بلوری^۱

در تشکیل بلورها گفته می‌شود که اتم‌ها در فواصل منظم از یکدیگر در شرایطی که نیروهای جاذبه و دافعه بین آنها برابری دارند، نسبت به هم قرار دارند. واحدی که بدین ترتیب ساخته می‌شود و شکل هندسی دارد را واحد شبکه می‌نامند. این شکل به تعداد و نوع اتم‌های سازنده بستگی دارد، زیرا نیروهای جاذبه و دافعه بین اتم‌های مختلف فرق دارد. ابعاد این اشکال هندسی حدوداً 10^{-8} cm است. که با کنار هم قرار گرفتن این واحدهای شبکه، کریستال‌های قابل رؤیت ساخته می‌شود. به طور کلی یک بلور فیزیکی رامی‌توان با معلوم کردن شبکه برآه سازنده اش، همراه با توصیفی از نحوه چینش اتم‌ها، مولکول‌ها، یون‌ها و غیره در یک یاخته بسیط ویژه توصیف کرد [۱]. بیشترین ساختارهای بلوری معمول در میان نیم‌رساناها ساختار بلوری مکعبی زینک - بلند^۲ یا شش‌گوشی وورتسایت^۳ می‌باشند. ساختار بلوری وورتسایت که به تقلید از ماده معدنی سولفیدروی به این اسم نامیده می‌شود، یک ساختار بلوری برای اکثر ترکیبات مختلف دوتایی می‌باشد. این ساختار نمونه‌ای از یک سیستم بلوری هگزاگونال (شش‌گوشی) می‌باشد. از جمله ترکیباتی که دارای این ساختار می‌باشند، می‌توان به نیم‌رساناهایی همچون $\alpha - SiC, GaN, AlN, ZnO, AgI$ اشاره کرد [۲].

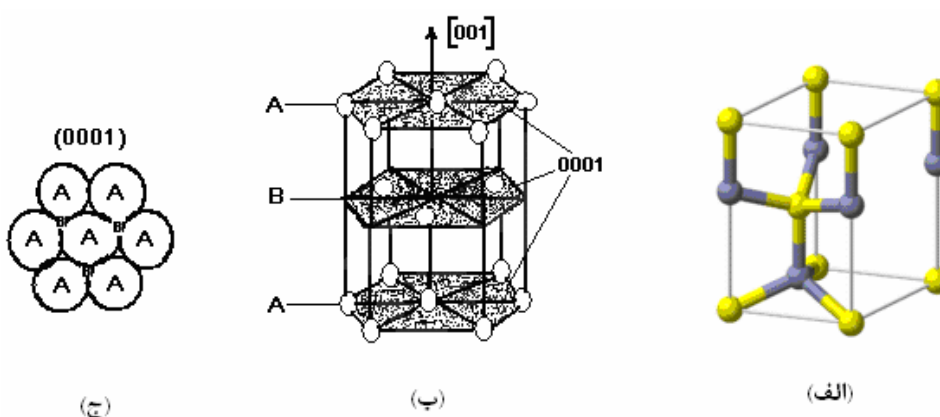
در آرایش بلوری زینک - بلند اتم سه ظرفیتی (پنج ظرفیتی) در مرکز یک هرم قرار گرفته و توسط چهار اتم پنج ظرفیتی (سه ظرفیتی) که در رئوس هرم قرار گرفته، احاطه شده است. این آرایش بلوری دارای شبکه برآه fcc ^۴ با دو اتم در هر پایه است. این اتم‌ها در امتداد قطر اصلی و به فاصله یک چهارم قطر اصلی از یکدیگر قرار دارند. (شکل ۱-۲) [۶].



شکل ۱-۲: ساختار بلوری زینک - بلند. متشکل از دو ساختار fcc که به اندازه یک چهارم قطر اصلی از یکدیگر فرورفته اند [۶].

۱ - Crystal Structure
 ۲ - Zinc-blende
 ۳ - Wurtzite
 ۴ - Face Center Cubic

در آرایش بلوری وورتسایت، سلول واحد به شکل هگزاگونال^۱ می‌باشد. یک هگزاگونال ساده عبارتست از یک منشور باقاعده های شش ضلعی منظم و یا شش منشور باقاعده های مثلث متساوی الاضلاع. اگر سه اتم در مرکز سه منشور از شش منشور مثلث القاعده، بطوریکه در میان قرار گیرند، این نوع بخصوص هگزاگونال ساخته می‌شود، شکل (۱-۳الف). حال اگر این ساختار متراکم گشته تا حجم هگزاگونال به مینیمم برسد، هگزاگونال متراکم (hcp)^۲ نتیجه می‌شود. به سادگی ملاحظه می‌گردد که متراکم ترین شرایط برای قاعده ها تماس تمام هفت اتم (یک اتم در مرکز و شش اتم در محیط آن) به یکدیگر می‌باشند. فشرده ترین حالت در امتداد ارتفاع برای منشور (محور c)، قرار گرفتن سه اتم موجود در داخل هگزاگونال بین دو سطح قاعده، می‌باشد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در ساختار شش گوشه تنک پکیده قاعده شش ضلعی منشور از هفت اتم مماس بر هم که هر یک شش مثلث متوازی الاضلاع می‌باشند، ساخته شده است. در بین این دو قاعده سه اتم قرار دارد که با هم مماس بوده و مثلثی متساوی الاضلاع می‌سازند که اضلاع آن دقیقاً برابر یکی از شش مثلث قاعده هاست. اگر سه اتم داخل هگزاگونال در سطح خود بسط پیدا کنند و با اتم های مجاور مماس شوند، ملاحظه می‌شود که این سطح مشابه قاعده ها بوده، با این تفاوت که اتم ها درست بر روی اتم های سطح قاعده قرار نگرفته اند و در حقیقت این سه اتم میانی در حفره های خالی موجود در بین دو قاعده قرار می‌گیرند. پس اگر صفحاتی مانند شکل (۱-۳ب) را بطور یک در میان روی هم قرار دهیم (ABAB...)، اشکال هگزاگونال فشرده (hcp) نتیجه می‌شوند [۱].



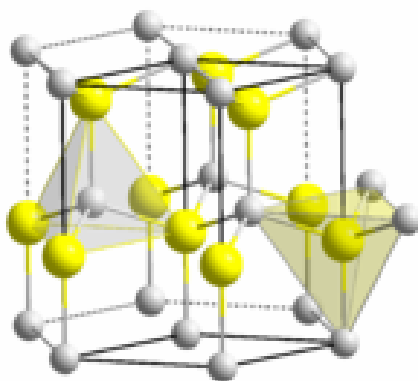
شکل ۱-۳: الف) سلول واحد هگزاگونال [۷]، ب) ترتیب قرار گرفتن صفحات فشرده در هگزاگونال متراکم (ج) شکل قرار گرفتن اتم ها در یک صفحه فشرده (۰۰۰۱) [۱].

۱ - Hexagonal

۲ - Hexagonal Close-packed

در نتیجه ساختار بلوری هگزاگونال، همانطور که در شکل (۱-۴)، نشان داده شده است، می‌تواند به صورت دو شش گوش ساده فرورفته در هم دیده شود، که به فاصله uc ، و در امتداد محور مشترک c جابه جاشده و همچنین دارای یک جابه جایی افقی به گونه ای باشند که نقاط یکی مستقیماً در بالای مراکز مثلث تشکیل شده توسط نقاط دیگر قرار گیرد. u یک پارامتر داخلی می‌باشد. اگر فاصله بین اتم‌ها در راستای افقی را با ثابت a نشان دهیم، در ساختار بلوری وورتسایت داریم [۸]:

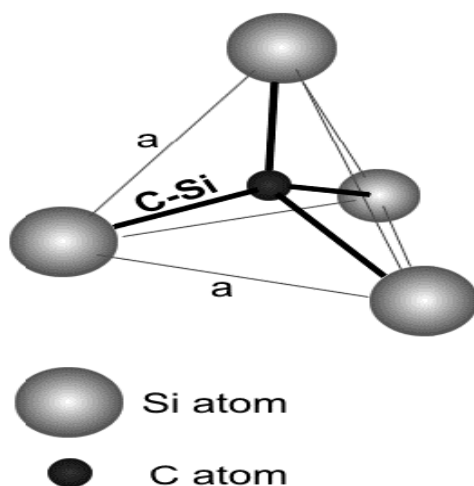
$$\begin{aligned} c &= \sqrt{8/3}a = 1/633a \\ u &= 3/8 = 0/375 \end{aligned} \quad (12-1)$$



شکل ۱-۴: ساختار بلوری وورتسایت، متشکل از دو ساختار hcp که به اندازه سه هشتم محور c در یکدیگر فرورفته اند [۷].

SiC یک نیم رسانای ترکیبی گروه $IV - IV$ می‌باشد. که در ساختار آن نقاط شبکه ای توسط اتم‌هایی اشغال شده اند که باشبکه ای از پیوندهای کووالانسی که فقط حدود ۱۲٪ آنها یونی می‌باشد، به یکدیگر متصل می‌شوند. به همین دلیل این ماده، نقطه ذوب و جوش بالا و فراریت پایین دارد و فوق العاده سخت می‌باشد. که این هم به علت تعدد پیوند کووالانسی می‌باشد که برای فروریختن ساختمان بلوری بایستی گسسته شوند. از این رو این ماده رسانای الکتریسیته نمی‌باشد. بیش از ۲۰۰ نوع مختلف از SiC شناخته شده است. در انواع مختلف SiC ، همه ساختارها از نوع تنگ پکیده می‌باشند و بسته به چینش اتم‌ها انواع مختلف نتیجه می‌شوند، بطوری که هر نوع برای خود، خواص الکتریکی و اپتیکی خاصی دارد. حدود ۹۵٪ نشریات منتشره، به سه نوع اصلی $SiC - 3C$ ، $SiC - 4H$ ، $SiC - 6H$ اشاره دارد، که بسته به تعداد جایگشت‌های این ضرایب قرار می‌گیرند.

بطور کلی ساختار اصلی برای انواع مختلف SiC ، یک چهاروجهی^۱ شامل یک اتم کربن متصل به ۴ اتم سیلیکون می باشد و یا برعکس (شکل ۱-۵). فاصله بین دو اتم سیلیکون همسایه یا اتم های کربن، تقریباً $3/08 \text{ \AA}$ می باشد. درحالیکه به علت پیوند خیلی قوی حاصل از اوربیتال هیبریدی SP^3 ، فاصله بین اتم های کربن و سیلیکون حدود $\sqrt{3/8}$ یا تقریباً $1/89 \text{ \AA}$ می باشد. سه اتم سیلیکون در پایین ساختار تتراگونال، در فاصله ای نزدیکتر از اتم سیلیکون بالایی به کربن مرکزی، در امتداد محور (۰۰۱) قرار دارند. بنابراین برش SiC به طور عمودی در این جهت منجر به گسیختگی این پیوند می شود. بلور SiC به دو سطح متفاوت تقسیم می شود، یکی سطح Si و دیگری سطح C [۷].



شکل ۱-۵: قالب اصلی چهاروجهی SiC ، شامل یک اتم کربن متصل به ۴ اتم سیلیکون [۷].

این ساختار یک ساختار تنگ پکیده می باشد. انواع مختلف آن بوسیله قرار گرفتن متفاوت لایه های $Si-C$ روی هم حاصل می شود. طوریکه ارتفاع محور C ، بین انواع ترکیبات SiC ، متفاوت است. اغلب انواع متداول آن دارای ساختارهای بلوری هگزاگونال (ششگوشی) (H) و مکعبی (C)^۲ و رمبوهدرال^۳ (راست گوشه) (R) می باشند. که در این جا ترکیبات $SiC-4H$ و $SiC-6H$ دارای ساختار بلوری هگزاگونال می باشند [۹].

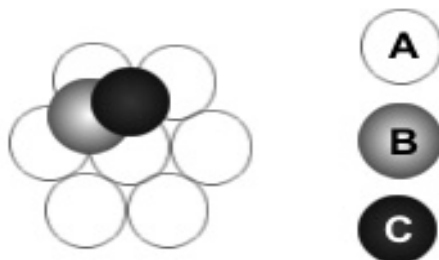
مطابق شکل (۱-۶) اگر اولین لایه از اتم ها را با موقعیت A نشان دهیم، در نتیجه لایه بعدی مطابق ساختار تنگ پکیده می تواند در موقعیت B قرار بگیرد. و برای قرار گرفتن اتم ها بر روی لایه سوم دو انتخاب ممکن وجود دارد. این

۱ - Tetrahedron

۲ - Cubic

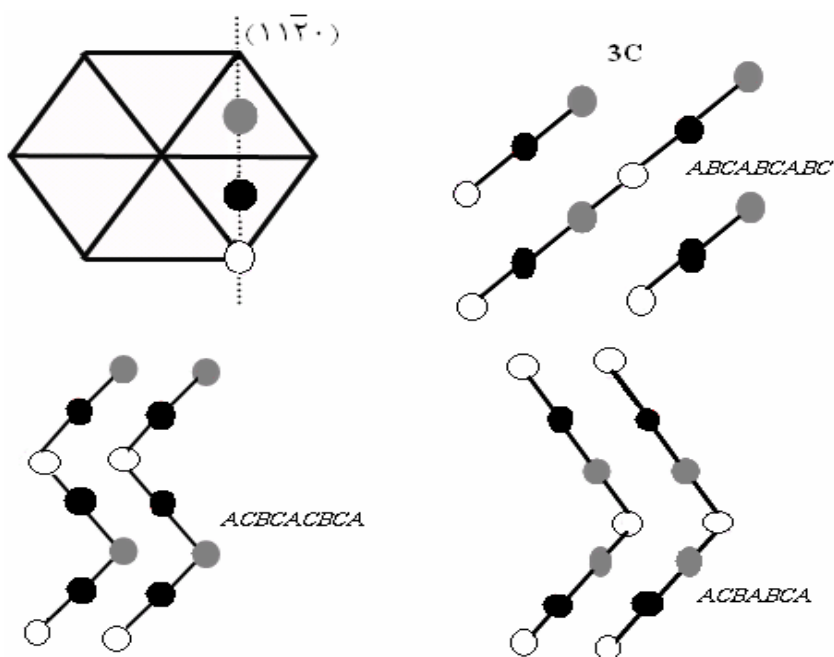
۳ - Rhombohedral

لایه ممکن است بوسیله قرار گرفتن اتم‌ها در موقعیت جدید C حاصل شود و یا از قرار گرفتن آن‌ها بر روی موقعیت A ایجاد شود.



شکل ۱-۶: نحوه چینش لایه‌ها در ساختار تنگ‌بندی پکیده [۷].

انواع مختلف بوسیله تکرار جایگشت‌های سه موقعیت شکل می‌گیرند. برای نمونه، تنها نوع مکعبی SiC شناخته شده دارای یک ترتیب چینش $ABCABCABC$ و یا $ACBACBACB$ می‌باشد. که بسته به تکرار جایگشتها به نام $3C-SiC$ شناخته شده است. در طول رشد سعی می‌شود که با قرار دادن اتم‌ها در موقعیت‌های مناسب، انواع ویژه‌ای حاصل شود. اگر بلوراز پهلوی مشاهده شود، همانطور که در شکل (۱-۷) نشان داده شده است، یک سری نقوش زیگزاگی معلوم می‌شود [۲].



شکل ۱-۷: ترتیب چینش SiC - $6H$ و $4H$ - $3C$ در صفحه $(11\bar{2}0)$ [۷].