





دانشگاه شهید بهشتی

دانشکده علوم

گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد با عنوان

بررسی اثر اسپین-گان در نیمه رساناهای فرومغناطیس

استاد راهنما

دکتر فرشاد ابراهیمی

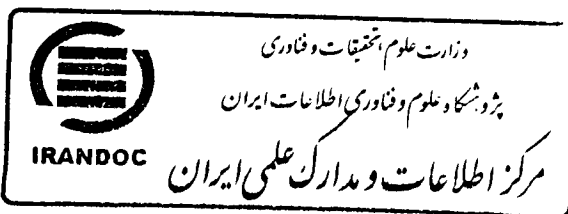
دانشجو

الهه مستعانی

استاد مشاور

دکتر ماهیار نوشیروانی

شهریور ۸۹



۱۴۹۲۹۰

۳۸۹/۱۰/۱۹

تقدیم به پدر و مادر عزیزم به پاس زحمات و محبت‌های بی‌دریغشان؛

تقدیم به خواهران و برادرم که یار و همراهم هستند؛

و

تقدیم به همه کسانی که در راه ارتقای علم، صادقانه گام برمی‌دارند.

:

## قدردانی

خداوند را سپاس که نعمت فراگیری قسمتی هرچند بسیار کوچک از علم بیکران خویش را بر بنده خود ارزانی داشته و بنده را در این مسیر هدایت نموده است. بدین وسیله مراتب سپاس و قدردانی خود را نسبت به استاد ارجمندم، جناب آقای دکتر فرشاد ابراهیمی که راهنمایی اینجانب را در طی دوره کارشناسی ارشد به عهده داشته‌اند، ابراز می‌دارم. بی‌شک توجهات و راهنمایی‌های ارزنده ایشان عامل بسیار مهمی در به ثمر نشستن این پایان‌نامه بوده است. در ضمن، از استاد گرامی، جناب آقای دکتر ماهیار نوشیروانی به خاطر قبول زحمت مشاوره این پایان‌نامه تشکر می‌کنم. همچنین از پدر و مادر عزیزم که بزرگترین درس‌های زندگی را در محضر ایشان آموختم و از اعضای خانواده‌ام که همواره همراه من هستند، کمال تشکر و امتنان را دارم. در پایان نیز از تمام دانشجویان دوره دکترای فیزیک دانشگاه شهید بهشتی که سعادت یادگیری در کنار آنان نصیب اینجانب شد و همچنین از کلیه اساتید و معلمان بزرگواری که افتخار شاگردی در محضر ایشان را داشته‌ام، سپاسگزاری می‌کنم.

## چکیده

در این پایان‌نامه برای مطالعه اثر اسپین-گان در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس با گاف انرژی مستقیم، معادله بولتزمن با در نظر گرفتن اثر اسپین به‌طور نیمه‌کلاسیکی حل شده و توابع توزیع غیرتعادلی، چگالی الکترون‌های غیرتعادلی و معادلات ترابرد در این نوع نیمه‌رساناها برای دو اسپین بالا و پایین به‌دست آمده است. برای انجام محاسبات عددی، نسبت چگالی الکترون‌های تعادلی با اسپین‌های بالا و پایین در کمینه مرکزی مورد نیاز بود که مقدار آن با محاسبه چگالی حالت الکترون‌های نوار رسانش به‌دست آمد. چگالی حالت الکترون رسانش در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس نیز با استفاده از تقریب پتانسیل همدوس، برای مقادیر مختلف قدرت برهم‌کنش و دما محاسبه گردید. به این ترتیب با استفاده از چگالی حالت‌های به‌دست آمده، چگالی الکترون‌های نوار رسانش با اسپین بالا و پایین به‌دست آمد. در نهایت با استفاده از این کمیت، اثر اسپین-گان در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس مانند *GaNAs* مشاهده و نتایج حاصل از آن ارایه گردید.

واژه‌های کلیدی: نیمه‌رساناهای فرومغناطیس، برهم‌کنش  $s-f$ ، برهم‌کنش هایزنبرگ، چگالی حالات، معادله بولتزمن، توابع توزیع، تقریب زمان واهلش، اثر اسپین-گان، ترابرد، امواج میکرومتر.

## فهرست مطالب

۱	مقدمه
۵	۲ نیمه‌رساناها
۵	۱-۲- پیشگفتار
۶	۲-۲- ساختار بلوری
۸	۲-۳- نوارهای انرژی
۹	۲-۴- ترابرد الکتریکی
۹	۲-۴-۱- ترابرد حامل‌ها در میدان الکتریکی کوچک
۱۰	۲-۴-۲- ترابرد حامل‌ها در میدان الکتریکی بزرگ
۱۳	۲-۴-۳- رویکرد نیمه کلاسیکی
۱۵	۲-۵- اثر مقاومت دیفرانسیلی منفی
۱۹	۲-۶- اثر انتقال الکترون
۲۲	۲-۷- اثر گان
۲۳	۳ نیمه‌رساناهای فرومغناطیس
۲۳	۳-۱- برهم‌کنش‌های اساسی در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس
۲۴	۳-۱-۱- برهم‌کنش یون‌های جایگزیده
۲۴	۳-۱-۲- برهم‌کنش s-f
۲۵	۳-۱-۳- برهم‌کنش تبدیلی غیرمستقیم
۲۶	۳-۲- نیمه‌رساناهای مغناطیسی رقیق (DMS)
۲۹	۳-۳- ساختار نواری در DMS
۳۱	۳-۴- پدیده فرومغناطیس در DMS
۳۲	۳-۵- مدل‌های نظری در DMS
۳۴	۳-۵-۱- تقریب اصول اولیه
۳۳	۳-۵-۲- تقریب میکروسکوپی بستگی قوی (TB)

۳۴	۳-۵-۳- نظریه هامیلتونین مؤثر .....
۳۵	۳-۵-۴- مدل‌های شبکه‌ای نوار ناخالص و مدل‌های پلارونی.....
۳۵	۳-۶- تقریب پتانسیل همدوس (CPA) .....
۴۰	۳-۷- نظریه CPA برای نیمه‌رساناهای فرومغناطیس .....
۴۴	۳-۷-۱- نظریه میدان میانگین .....
۴۶	۴ اثر اسپین-گان .....
۴۶	۴-۱- پیشگفتار .....
۴۷	۴-۲- معادله بولتزمن در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس .....
۴۷	۴-۲-۱- محاسبه چگالی الکترون‌ها در نوار رسانش نیمه‌رساناهای فرومغناطیس .....
۵۲	۴-۲-۲- محاسبه سرعت سوق در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس .....
۵۴	۴-۲-۳- محاسبه رسانندگی در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس .....
۵۵	۵ نتایج و توضیحات .....
۵۵	۵-۱- چگالی حالت الکترون‌های اسپین بالا و پایین .....
۵۷	۵-۲- بررسی اثر اسپین-گان .....
۶۶	نتیجه‌گیری .....
۶۸	پیوست A متغیرهای مربوط به چگالی و سرعت الکترون‌ها .....
۶۹	کتابنامه .....

## مقدمه

زمینه مغناطیس که شاید قدیمی‌ترین شاخه علم فیزیک باشد، امروزه دومین صنعت بزرگ جهان را تغذیه می‌کند. ادعا می‌شود که بکارگیری مواد مغناطیسی در صنعت نیمه‌رسانا بازار آتی را به خود اختصاص می‌دهد. مطابق پیش‌بینی صورت گرفته، میزان تقاضای مواد مغناطیسی به سرعت افزایش می‌یابد و مغناطیس نقش اصلی را در علم و فناوری ایفا می‌نماید [۱]. اخیراً به‌دنبال این جریان، برخی پدیده‌های مغناطیسی و مواد جدیدی کشف شده‌اند که نقش حیاتی در گشودن قفل فناوری‌های جدید ایفا نموده و یا اثرات جدیدی را به‌دنبال می‌آورند. از آنجایی که حضور مواد مغناطیسی در موادی همچون نیمه‌رساناها سبب تغییر برخی ویژگی‌های آنها می‌گردد، بنابراین لازم است که این ویژگی‌ها در حضور مواد مغناطیسی بررسی گردند. به‌دلیل اهمیت این موضوع، در این پایان‌نامه یکی از اثرات مهم در برخی نیمه‌رساناها به نام اثر گان، در مواد نیمه‌رسانای مغناطیسی مورد بررسی و مطالعه قرار می‌گیرد. پیش از پرداختن به این موضوع، لازم است که در ابتدا اثر گان، نحوه پیدایش آن و ویژگی نیمه‌رساناهای دارای این اثر بررسی شود و سپس به ویژگی‌های نیمه‌رساناهای فرومغناطیس اشاره گردد و در انتها نیز اثر گان در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس مورد بررسی و تحلیل قرار گیرد.

برخی نیمه‌رساناهای ترکیبی دارای گاف انرژی مستقیم مانند *GaAs* با اعمال میدان الکتریکی و تحت شرایطی، امواج میکرومتر تولید می‌کنند که به اثر گان معروف است. با اعمال میدان خارجی به این نوع نیمه‌رساناها و افزایش شدت آن، الکترون‌های نوار رسانش گرم<sup>۱</sup> شده و میانگین انرژی آنها بیش از حالت تعادل دمایی می‌گردد. برای بررسی نظری اثرات الکترون گرم، باید مسئله تابع توزیع الکترون حل شود که در حضور میدان بالا از حالت تعادل دمایی ماکسول-بولتزمن یا فرمی-دیراک منحرف می‌شود. اثرات الکترون گرم با حل معادله بولتزمن به‌طور تحلیلی قابل بررسی است [۲].

در واقع، معادلات نیمه‌کلاسیکی بولتزمن اثر پراکندگی ناشی از افزایش انرژی الکترون‌ها در حضور میدان الکتریکی را به‌حساب می‌آورد. از آنجایی که میزان پراکندگی به انرژی الکترون‌ها وابسته است، بنابراین موقعیت دینامیکی آنها اساساً غیرخطی و ناپایدار است. این معادلات بر اساس بقای تکانه و انرژی الکترون نوشته می‌شوند. در نیمه‌رساناهای مذکور اساساً، ترکیب اثرات پراکندگی و ترابرد بین نواری در میدان‌های بالا، سبب ایجاد مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR)<sup>۲</sup> می‌گردد که اساس اثر گان به‌شمار می‌رود. در واقع، با اعمال میدان الکتریکی بیش از میدان آستانه به موادی همچون *GaAs*,

<sup>۱</sup> Hot

<sup>۲</sup> Negative differential resistance



الکترون‌های نوار رسانش به یک یا بیش از یک کمینه انتقال می‌یابند. در نتیجه، تحرک‌پذیری الکترون‌ها کاهش یافته و NDR تولید می‌گردد.

کارهای نظری در زمینه اثر گان در نیمه‌رساناها به دو دسته مجزای استاتیکی و دینامیکی تقسیم می‌شود. نظریه‌های استاتیکی مربوط به آنالیز فرایندهای برخورد، محاسبه احتمالات پراکندگی، تعیین توابع توزیع و تعیین مشخصه سرعت سوق بر حسب میدان الکتریکی است. در این نظریه، اغلب از توابع توزیع ماکسول جابجا شده<sup>۳</sup> استفاده می‌شود. ویژگی عمومی نظریه‌های استاتیکی این است که میدان‌های الکتریکی به صورت استاتیک و یکنواخت به مواد همسانگرد اعمال می‌گردد. نظریه‌های دینامیکی مربوط به بررسی ویژگی‌های تراپردی در شرایط دینامیکی است. در این شرایط، میدان الکتریکی با توجه به زمان و فضا تغییر و مسئله پیچیده‌ای را ایجاد می‌کند. در شرایط دینامیکی، بررسی تراپرد براساس معادله بولتزمن و با استفاده از انتگرال‌های برخورد به راحتی امکان‌پذیر نیست. بنابراین، اغلب به وسیله معادلات بقای ماکروسکوپی و به صورت مدل‌سازی توصیف می‌گردد. برای این منظور، یکسری از پارامترهای تجربی مانند تحرک‌پذیری، ثابت پخش و زمان‌های واهلش مختلف مورد نیاز است که با استفاده از نظریه‌های استاتیک یا آزمایش‌های تجربی به دست می‌آیند [۳]. در این پایان‌نامه، برای بررسی اثر تراپرد در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس، معادلات بولتزمن به صورت دینامیکی حل خواهند شد.

یکی از راه‌های ساخت نیمه‌رساناهای فرومغناطیس، افزودن یون‌های مغناطیسی مانند Cr، Mn، Co و Fe به نیمه‌رسانای غیرمغناطیسی است. فقط مقدار کمی از یون‌های مغناطیسی با موفقیت در نیمه‌رساناها آلاینده می‌شود. از این رو به این نوع نیمه‌رساناها، نیمه‌رساناهای مغناطیسی رقیق (DMS)<sup>۴</sup> گویند. میل ترکیبی شیمیایی یون‌های مغناطیسی، حامل‌های بار را در نیمه‌رسانا القا می‌کند که جفت‌شدگی مؤثر فرومغناطیسی بین این یون‌ها، نظم فرومغناطیسی را در دمای کمتر از دمای کوری ایجاد می‌کند. این مواد، آرایه بزرگی از پدیده‌های جمعی را از خود نشان می‌دهند که سبب جلب توجه بسیاری از محققان گردیده است. بخشی از این توجهات در نیمه‌رساناهای مغناطیسی رقیق مربوط به امکان یکپارچه‌سازی مواد مغناطیسی و نیمه‌رساناها به منظور ساخت ابزارهای جدیدی است که قابلیت‌های پردازش و ذخیره‌سازی را در یک محیط کاملاً نیمه‌رسانا در هم می‌آمیزد [۱] و سبب پرکاربرد شدن آنها می‌گردد.

در سه دهه گذشته، در حوزه الکترونیک حالت جامد شامل مجتمع‌سازی اجزای مداری در یک تراشه نیمه‌رسانا مانند ابزارهای دارای مدارهای مجتمع، پیشرفت‌های چشمگیری رخ داده‌است. نیمه‌رساناها و مواد مغناطیسی دو جزء بسیار اساسی صنایع الکترونیک هستند. ابزارهای نیمه‌رسانا برای انتقال اطلاعات استفاده می‌شوند که توسط اعمال میدان خارجی قابل کنترل هستند و ابزارهای مغناطیسی به منظور ذخیره‌سازی اطلاعات به کار می‌روند. تحقق ساخت ابزاری که ترکیبی از ویژگی‌های مواد نیمه‌رسانا و مغناطیسی را با هم داشته باشد، رویایی در فیزیک مواد بوده است. ایده بکارگیری اسپین‌ها در ابزارهای الکترونی جدید اساس توسعه سریع زمینه اسپینترونیک است که نمای کلی کاربردهای آن در زمینه‌های مختلف در شکل (۱-۱) آرایه گردیده است. یکی از ویژگی‌های قابل توجه این مواد این است که می‌توان درجه آزادی اسپین آنها را به وسیله اعمال میدان الکتریکی خارجی کنترل نمود.

<sup>3</sup> Displaced Maxwellian distribution

<sup>4</sup> Diluted magnetic semiconductors



فرومغناطیس را در دمای بحرانی  $7/5 K$  با  $1/3$  درصد ناخالصی  $Mn$  گزارش کردند. تاکنون نیز بیشترین دمای بحرانی ( $T_c$ ) در  $(Ga, Mn)As$  در حدود  $170 K$  به دست آمده است [۸]. علی‌رغم اینکه این دما کمتر از دمای اتاق است، اما بالاتر از دمای نیتروژن مایع است، بنابراین کاربردهای فراوانی دارد.

دو رویکرد برای درک ویژگی‌های مغناطیسی نیمه‌رساناهای رقیق بیان شده است. اولین رویکرد بر مبنای نظریه میدان میانگین است که در اصل از مدل زنر<sup>۷</sup> ناشی می‌شود. بر طبق این نظریه، فرض می‌شود که  $DMS$  یک آلیاژ بی‌نظم مانند  $(Ga, Mn)N$  است که در آن  $Mn$  جایگزین یکی از اجزای شبکه می‌شود. این نظریه، دمای بحرانی موادی مانند  $(Ga, Mn)As$  و  $(In, Mn)As$  را به خوبی پیش‌بینی می‌کند، اما بر سر اینکه حامل‌های آزاد چه‌طور با هم برهم‌کنش می‌کنند، اختلاف‌هایی وجود دارد. مطابق دومین رویکرد، اتم‌های مغناطیسی خوشه‌هایی کوچک از تعداد کمی اتم تشکیل می‌دهند که پدیده فرومغناطیس را ایجاد می‌کند. محاسبات انجام شده در این پایان‌نامه بر مبنای رویکرد اول است.

ترتیب کلی پایان‌نامه به صورت زیر است: در فصل ۲، برخی ویژگی‌های مواد نیمه‌رسانا مانند ساختار بلوری، نوارهای انرژی و ترابرد الکتریکی بیان می‌شود. سپس به رویکرد نیمه‌کلاسیکی معادله بولتزمن که برای بررسی اثر مقاومت دیفرانسیلی منفی مورد نیاز است، اشاره می‌گردد. در انتها نیز اثر گان معرفی می‌شود. در فصل ۳، نیز نیمه‌رساناهای فرومغناطیس و رقیق تعریف شده و به برخی ویژگی‌های آنها مانند ساختار نوار انرژی و پدیده فرومغناطیس اشاره می‌گردد. سپس یکسری مدل‌های نظری که برای بررسی رفتار جمعی الکترون‌های برهم‌کنشی موجود است مانند مدل اصول اولیه، میکروسکوپی بستگی قوی (TB)، هامیلتونی مؤثر و شبکه‌ای، تشریح می‌شود و در نهایت با استفاده از روش میدان میانگین که جزء مدل اصول اولیه به‌شمار می‌رود و تقریب پتانسیل همدوس (CPA)<sup>۸</sup>، برخی پارامترهای فیزیکی مانند چگالی حالات الکترون‌های نوار رسانش در نیمه‌رساناهای فرومغناطیس به دست می‌آید. در فصل ۴، با استفاده از اطلاعات به دست آمده در فصل ۳ و با در نظر گرفتن اثر اسپین، چگالی تعادلی اولیه الکترون‌ها برای دو کمینه نوار رسانش محاسبه می‌گردد. در مرحله بعدی، با در نظر گرفتن میدان الکتریکی اعمالی و ایجاد شرایط غیرتعادلی، معادله بولتزمن با در نظر گرفتن اثر اسپین برای هر یک از کمینه‌ها به صورت دینامیک حل و معادلات سرعت و رسانش به دست می‌آیند. در فصل ۵ نیز نتایج به دست آمده تحلیل می‌گردد. دو پیوست A و B نیز به معرفی پارامترهای مورد استفاده در فصل ۴ اختصاص دارند.

<sup>7</sup> Zener

<sup>8</sup> Coherent potential approximation

## نیمه‌رساناها

### ۲-۱- پیش‌گفتار

نیمه‌رساناها دسته‌ای از مواد هستند که میزان رسانایی آنها در دمای اتاق بیشتر از عایق‌ها و کمتر از فلزات است. به عبارتی دیگر، یک نیمه‌رسانا جامدی با پهنای نواری بزرگ و گاف انرژی کوچک است [۹] (تا حدود ۳ یا ۴ الکترون‌ولت) است [۱۰]. فلزات، گاف انرژی ندارند، در صورتی که عایق‌ها دارای گاف انرژی بیش از چند الکترون‌ولت هستند. برخی از نیمه‌رساناهای مهم عبارتند از Si، Ge و GaAs. ژرمانیوم و سیلیسیوم به‌طور وسیعی مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. گالیوم آرسناید نیز در سال‌های اخیر به‌شدت مورد توجه قرار گرفته است. زیرا، ویژگی‌های متفاوتی نسبت به نیمه‌رساناهای گروه III و V دارد. امروزه، نیمه‌رساناهای ترکیبی گروه III-V علاوه بر اینکه جزء دسته‌بندی بسیار پیشرفته‌ای از ابزارهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی به‌شمار می‌روند، اساس ساخت مواد مورد استفاده در فناوری‌های تجاری موفق نیز هستند. به‌طور مثال، ترانزیستورهای دوقطبی نامتجانس و ترانزیستورهای با تحرک‌پذیری بالای الکترونی، دیودهای لیزری، دیودهای نورگسیل، آشکارسازهای نوری و مدولاتورهای الکترواپتیکی از جمله این نوع ابزارها هستند [۱۱]. برخی ویژگی‌های مهم این نوع نیمه‌رساناها عبارت است از گاف انرژی مستقیم که تراورد بین نواری حامل‌ها و کاربردهای فوتونی را امکان‌پذیر می‌سازد و تحرک‌پذیری<sup>۹</sup> بالا که برای تولید میکروموج‌ها به‌کار می‌رود [۱۲]. مهم‌ترین ابزارهای میکروموج شامل ابزارهای انتقال الکترون (TED)<sup>۱۰</sup>، دیودهای تونلی و دیودهای IMPATT<sup>۱۱</sup> هستند که ابزارهای انتقال الکترون در این پایان‌نامه، مد نظر قرار می‌گیرند.

TED، به‌عنوان یکی از مهم‌ترین ابزارهای تولید میکروموج که به‌طور وسیعی در نوسانگرهای موضعی<sup>۱۲</sup> و تقویت‌کننده‌های برق<sup>۱۳</sup> استفاده می‌شود، فرکانس میکروموج در محدوده ۱ تا ۱۰۰ GHz را تولید می‌کند. این ابزارها به‌عنوان منابع میکروموج در رادارها، دزدگیرها و ابزارهای سنجش میکروموج نیز مورد استفاده قرار می‌گیرند.

در سال ۱۹۶۳، گان<sup>۱۴</sup> دریافت که اگر به نمونه کوچکی از نیمه‌رساناهای نوع n گالیوم آرسناید یا ایندیوم فسفاید، میدان

<sup>۹</sup> Mobility

<sup>۱۰</sup> Transferred-electron device

<sup>۱۱</sup> Impact-Ionization avalanche transit time

<sup>۱۲</sup> Local oscillators

<sup>۱۳</sup> Power amplifiers

<sup>۱۴</sup> Gunn

الکتريکی مستقيم اعمال شود، به طوری که اندازه آن بزرگتر از اندازه آستانه بحرانی<sup>۱۵</sup> یعنی در حدود چند هزار ولت بر سانتی متر باشد، میکروموج همدوسی توسط نیمه‌رسانا تولید می‌شود که فرکانس نوسان آن تقریباً برابر با عکس زمان گذار حامل در طول نمونه است. پس از آن، لاتر<sup>۱۶</sup> و کرومر<sup>۱۷</sup> [۱۳] بیان داشتند که ویژگی‌های میکروموج تولید شده به نظریه مقاومت دیفرانسیلی منفی (NDR) در نیمه‌رساناها مرتبط است که به‌طور مستقل توسط ریدلی<sup>۱۸</sup> و واتکینز<sup>۱۹</sup> [۱۴ و ۱۵] و هیلسام<sup>۲۰</sup> بررسی شد [۱۶ و ۱۷]. انتقال الکترون‌های نوار رسانش از کمینه با انرژی کم و تحرک‌پذیری بالا به کمینه‌های با انرژی بالا و تحرک‌پذیری کم، منشأ پیدایش مقاومت دیفرانسیلی منفی است. آزمایش‌های هاتسون<sup>۲۱</sup> با اعمال فشار بر گالیوم آرسناید [۱۸] و آزمایش‌های آلن<sup>۲۲</sup> بر روی آلیاژ  $GaAs_{1-x}P_x$  [۱۹] نشان داد که میدان الکتريکی آستانه با کاهش فاصله انرژی بین لبه کمینه‌های نوار مرزی، کاهش می‌یابد یعنی اثر انتقال الکترون سبب ایجاد نوسان گان می‌گردد.

## ۲-۲- ساختار بلوری

جامدهای ایده‌آل، از یک آرایه نامتناهی سه‌بعدی از نقاط گسسته با یک نظم ساختاری و جهت‌گیری یکسان برای هر نقطه تشکیل شده‌اند. بلورهای واقعی متناهی هستند، اما با شرط دوره‌ای بودن ساختار بلور، می‌توان شرط نامتناهی بودن آرایه را حفظ نمود. تمام نقاط فضا با بردارهای مکان  $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$  مشخص می‌شوند.  $n_1$  و  $n_2$  و  $n_3$  اعداد درست هستند. اگر سه بردار  $\vec{a}_1$ ،  $\vec{a}_2$  و  $\vec{a}_3$  تمام نقاط شبکه را تعریف نموده و تحت انتقال ناوردا بمانند، بردارهای بسیط بنیادی نامیده می‌شوند. شبکه براوه را می‌توان با بردار  $\vec{R}$  تعریف نمود که انتهای آن، نقاط شبکه را نشان می‌دهد. مهم‌ترین شبکه‌های براوه سه‌بعدی، شبکه‌های مکعبی ساده، مکعبی مرکزحجمی و مکعبی مرکزسطحی هستند [۲۰]. دسته بزرگی از نیمه‌رساناهای مهم، ساختار الماسی یا Zincblende دارند که جزء شبکه براوه به‌شمار نمی‌روند.

نیمه‌رساناهای III-V مانند  $GaAs$  در ساختار Zincblende متبلور می‌شوند [۲۰] که در شکل (۲-۱) نشان داده شده است. این ساختار شامل دو شبکه براوه مکعبی مرکز وجهی است که در هم ادغام شده‌اند، به طوری که هر شبکه نسبت به دیگری در امتداد قطر فضایی و با فاصله برابر یک‌چهارم طول قطر، قرار می‌گیرد. ساختار اتمی  $Ga$  به‌صورت  $[Ar]3d^{10}4s^24p^1$  و  $As$  به‌صورت  $[Ar]3d^{10}4s^24p^3$  است. در نیمه‌رسانای  $GaAs$  بین اتم‌های  $Ga$  و  $As$  پیوند کووالانسی برقرار است و هر دو، الکترون‌های تراز  $4s$  و  $4p$  را به اشتراک می‌گذارند.

بسیاری از خواص شبکه‌های بلوری مانند چگونگی برهم‌کنش بلور با امواج الکترومغناطیسی و ایجاد پراش، به‌دلیل خواص موجی الکترون ایجاد می‌شود. از آنجایی که فواصل بین نقاط شبکه براوه (اتم‌های واقع در ساختارهای بلوری) بسیار کوچک است، خواص موجی الکترون مهم می‌گردد. برای توجیه ساده این خواص، از فضای مجازی (فضای فوریه، فضای وارون یا فضای موج) استفاده می‌شود. برای این منظور، موج تخت  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$  تعریف می‌شود.  $\vec{k}$  بردار موج است و به مجموعه‌ای

<sup>15</sup> Critical threshold

<sup>16</sup> Later

<sup>17</sup> Kroemer

<sup>18</sup> Rideley

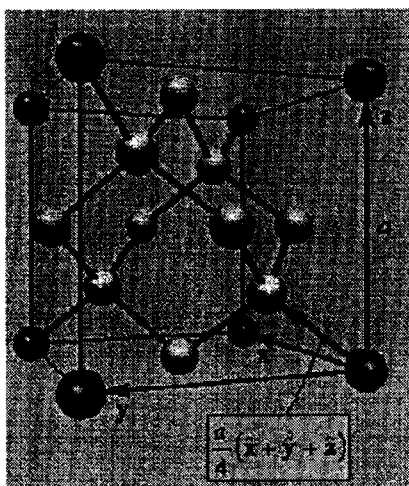
<sup>19</sup> Watkins

<sup>20</sup> Hilsum

<sup>21</sup> Hutson

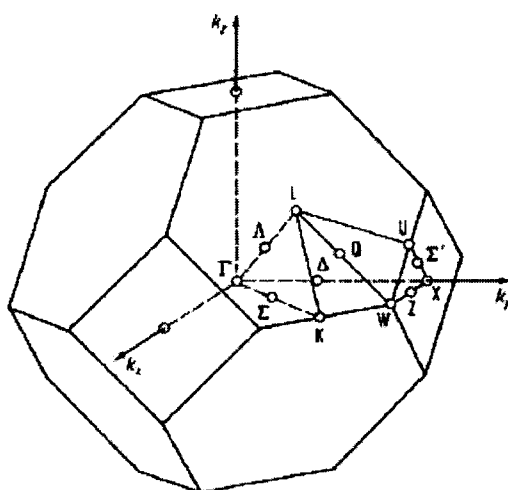
<sup>22</sup> Allen

وارون یا فضای موج) استفاده می‌شود. برای این منظور، موج تخت  $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}$  تعریف می‌شود.  $\vec{k}$  بردار موج است و به مجموعه‌ای از  $\vec{k}$ ها که امواج تخت را بسازند و تناوب آنها، همان تناوب شبکه برآوه باشد، شبکه وارون گویند. این شبکه گسسته است و هر نقطه آن، بازتابی از کل شبکه مستقیم است. سلول ویگنر-سایت<sup>۲۳</sup> در شبکه وارون بسیار مهم است که به آن منطقه اول بریلوئن گویند و به وسیله آن می‌توان تمام خواص تناوبی شبکه را بررسی نمود [۲۰].



شکل ۲-۱- ساختار شبکه نیمه‌رسانای نوع Zincblende

منطقه بریلوئن برای ساختار zincblende مشابه منطقه بریلوئن شبکه مکعبی مرکزوجهی است که در شکل (۲-۲) نشان داده شده‌است. نمادهای  $\Gamma$ ،  $X$ ،  $L$  و ... راستاها را در منطقه بریلوئن نشان می‌دهد. نقطه  $\Gamma$  مربوط به  $k=0$  یعنی مرکز منطقه بریلوئن است.



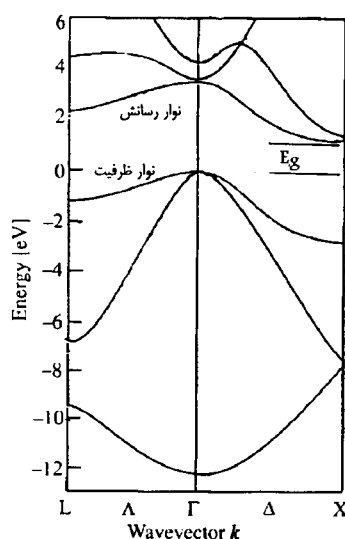
شکل ۲-۲- منطقه اول بریلوئن در شبکه مکعبی مرکز وجهی. نقاط قرینه و راستاهای مهم در شکل مشخص گردیده‌است.

<sup>23</sup> Wigner-Seits

## ۳-۲- نوارهای انرژی

ساختار نواری یک جامد بلوری، رابطه انرژی- تکانه ( $E-k$ )، با حل معادله شرودینگر در تقریب مسئله تکالکترونی به- دست می‌آید و اثرات ترکیبی آنها در آلیاژسازی بسیار مهم است. نظریه بلاخ، یکی از نظریه‌های مهم و اساسی در ساختار نواری است. نوارهای انرژی جامدات، با استفاده از روش‌های عددی مختلفی مطالعه می‌گردد که سه روش رایج عبارتند از روش‌های بستگی قوی (TB)<sup>۲۴</sup> یا ترکیب خطی از اوربیتال‌های اتمی، شبه‌پتانسیل<sup>۲۵</sup> و K.P [۲۱ تا ۲۳].

در روش بستگی قوی فرض می‌شود که الکترون‌ها به شدت به هسته خود مقید هستند، یعنی پتانسیل دوره‌ای بسیار قوی و در حد پتانسیل اتمی بوده که به مقدار جزئی مختل شده است. از آنجایی که فاصله بین اتم‌ها قابل مقایسه با ثابت شبکه است، بنابراین توابع موج آنها با هم همپوشانی دارد و به صورت ترکیب خطی از توابع موج اتمی می‌گردد. از این روش برای محاسبه ساختار نواری عایق‌ها و عناصر واسطه که اوربیتال s و d آنها همزمان در حال پر شدن است، استفاده می‌شود. در روش شبه‌پتانسیل، فرض می‌شود که الکترون‌ها تقریباً آزاد بوده و توابع موج آنها به صورت امواج تخت است. این روش برای مطالعات ساختاری جامدات؛ ساختارهای الکترونیکی سطحی و بین سطحی؛ تنش‌ها و نیروها؛ پاسخ‌های خطی و نظریه‌های دی‌الکتریک؛ نقص‌های نقطه‌ای و خودانرژی‌های دینامیکی به کار می‌رود [۲۴]. شکل (۲-۳)، ساختار نواری نیمه- رسانای سیلیسیوم را نشان می‌دهد که به روش شبه‌پتانسیل محاسبه گردیده است. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، گاف انرژی در این نیمه‌رسانا غیرمستقیم است.



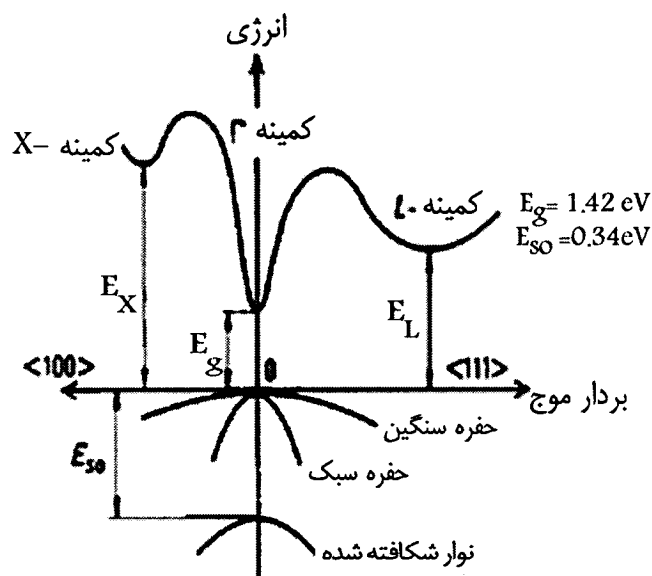
شکل ۳-۲- نمایی از ساختار نواری سیلیسیوم محاسبه شده به روش شبه‌پتانسیل [۲۱]

در روش  $k.p$ ، ساختار نواری در کل منطقه بریلوئن با توجه به گاف انرژی در مرکز منطقه و عناصر ماتریس اپتیکی، برون‌یابی می‌گردد. بنابراین این روش برای بیان طیف اپتیکی مناسب است و با حل معادله شرودینگر تک‌ذره‌ای و استفاده از نظریه بلاخ، توزیع نواری و جرم موثر در اطراف نقاط با تقارن بالا به‌طور تحلیلی به دست می‌آید [۲۱].

<sup>24</sup> Tight-Binding

<sup>25</sup> Pseudo-potential

ساختار نواری  $GaAs$  که در شکل (۲-۴) نشان داده شده، ساختار نواری با گاف انرژی مستقیم است. همان طور که ملاحظه می‌گردد، یک نوار رسانش وجود دارد که اوربیتال  $s$  (یگانه) نامیده می‌شود و یک نوار ظرفیت با مشخصه  $p$  نیز وجود دارد که ترکیبی از سه اوربیتال است. حالت  $3p$  در بالای نوار ظرفیت (نقطه  $\Gamma$  در  $k=0$ ) باید تبهگن باشد، اما برهمکنش اسپین-مدار تبهگنی را از بین می‌برد [۲۶]. در نتیجه نوار ظرفیت، ترکیبی از نوارهای حفره- سنگین و حفره- سبک تبهگن در نقطه  $\Gamma$  می‌گردد و نوار شکافته شده<sup>۲۶</sup> نیز به اندازه  $\Delta_{SO}$  (یا  $E_{SO}$ ) پایین‌تر از نقطه  $\Gamma$  در  $k=0$  قرار می‌گیرد.



شکل ۲-۴- ساختار نواری گالیوم آرسناید

## ۲-۴- ترابرد الکتریکی

الکترون‌ها و حفره‌ها در اطراف نقص‌های شبکه، حامل‌های مقید نامیده می‌شوند، زیرا متحرک نیستند. اما، الکترون‌ها در نوار رسانش و حفره‌ها در نوار ظرفیت نیمه‌رسانا حامل‌های آزاد هستند و جریان الکتریکی را منتقل می‌کنند. زمانی که یک میدان الکتریکی خارجی به نیمه‌رسانا اعمال شود، حامل‌های آزاد تحت تأثیر قرار می‌گیرند و بسته به شدت میدان اعمالی به آن پاسخ می‌دهند. اگر میدان الکتریکی ضعیف باشد، رفتار حامل‌ها با توجه به قانون اهم قابل توصیف است. اما در میدان‌های قوی، انرژی جنبشی حامل‌ها بیش از انرژی شبکه می‌شود. این الکترون‌های پرانرژی، الکترون‌های گرم<sup>۲۷</sup> نامیده می‌شوند که محاسبه ویژگی‌های آنها به صورت تحلیلی مشکل است.

### ۲-۴-۱- ترابرد حامل‌ها در میدان الکتریکی کوچک

در میدان الکتریکی کوچک، سرعت سوق ( $v_d$ )، متناسب با شدت میدان الکتریکی ( $E$ ) است و ثابت تناسب به‌عنوان تحرک پذیری  $\mu$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

<sup>26</sup> Split-off

<sup>27</sup> Hot electron



$$v_d = \mu E. \quad (۱-۲)$$

که مستقل از میدان الکتریکی است. در نیمه‌رساناهای غیرقطبی مانند Si و Ge، حضور فونون‌های اکوستیک و ناخالصی‌های یونیزه شده منجر به پراکندگی حامل‌ها می‌گردد که بر تحرک‌پذیری حامل‌ها تاثیر می‌گذارد. تحرک‌پذیری ناشی از برهم-کنش با فونون اکوستیکی،  $\mu_i$ ، عبارت است از [۲۶]:

$$\mu_i \sim (m^*)^{-5/2} T^{-3/2}, \quad (۲-۲)$$

که در آن  $m^*$  جرم مؤثر الکترون رسانش است. مطابق رابطه (۲-۲)، با افزایش دما و جرم مؤثر، تحرک‌پذیری کاهش می‌یابد.

تحرک‌پذیری ناشی از ناخالصی‌های یونیزه شده،  $\mu_i$ ، به صورت زیر است [۲۷]:

$$\mu_i \sim (m^*)^{-1/2} N_i^{-1} T^{3/2}, \quad (۳-۲)$$

که در آن،  $N_i$  چگالی ناخالصی یونیزه شده است. انتظار می‌رود که تحرک‌پذیری با افزایش جرم مؤثر، کاهش و با افزایش دما، افزایش یابد. تحرک‌پذیری مرکب که شامل دو سازوکار فوق است، به صورت زیر است:

$$\mu = \left( \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_i} \right)^{-1}. \quad (۴-۲)$$

در نیمه‌رساناهای قطبی مانند *GaAs*، پراکندگی ناشی از فونون اپتیکی نیز مهم است. تحرک‌پذیری مرکب در این نوع نیمه‌رساناها، مطابق رابطه

$$\mu \sim (m^*)^{-3/2} T^{1/2}, \quad (۵-۲)$$

تعریف می‌شود [۲۸]. علاوه بر عامل پراکندگی فوق، سایر عوامل مانند پراکندگی درون‌نواری و بین‌نواری نیز بر تحرک-پذیری واقعی تأثیر می‌گذارند. در پراکندگی درون‌نواری، یک الکترون درون یک نوار انرژی بیضی‌وار پراکنده می‌شود و فقط شامل فونون‌های با طول‌موج بلند است. در پراکندگی بین‌نواری، یک الکترون از یک کمینه انرژی به کمینه انرژی دیگر پراکنده می‌شود و شامل فونون‌های پراثری است.

## ۲-۴-۲- ترابرد حامل‌ها در میدان الکتریکی بزرگ

زمانی که میدان الکتریکی اعمالی به اندازه کافی بزرگ، یعنی بیش از  $10^4$  V/cm باشد [۲۲]، قانون اهم نقض و تحرک-پذیری غیرخطی شده و در برخی موارد اشباع سرعت سوق<sup>۲۸</sup> مشاهده می‌شود. در حالت اشباع، سرعت حامل‌ها به بیشترین میزان خود در نیمه‌رسانا می‌رسد. به محض اینکه میدان الکتریکی از این میزان بیشتر شود، سرعت حامل‌ها به دلیل از

<sup>28</sup> Drift velocity saturation

دست دادن انرژی از طریق گسیل فونون‌ها و حتی فوتون‌ها کاهش می‌یابد. در میدان‌های بسیار بزرگ نیز یونیزاسیون برخورد<sup>۲۹</sup> رخ می‌دهد. در این حالت، الکترون‌های دارای انرژی جنبشی کافی به الکترون‌های پیوندی ضربه زده و زوج‌های الکترون-حفره تولید می‌کنند.

در تعادل دمایی، حامل‌ها فونون‌ها را هم جذب و هم گسیل می‌کنند. به طوری که میزان تبادل خالص انرژی، صفر می‌شود.

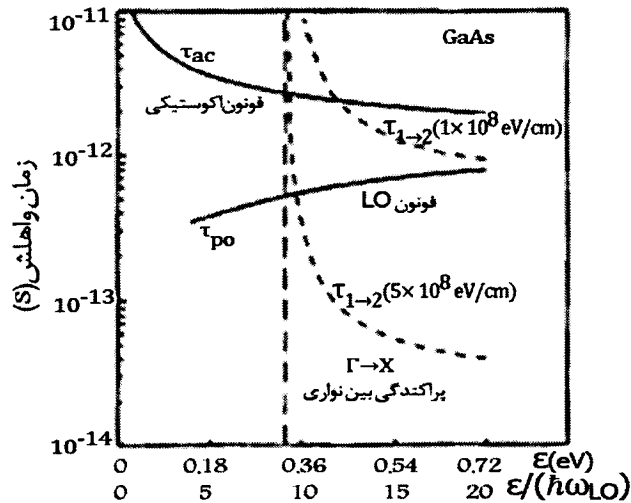
توزیع انرژی نیز در تعادل دمایی، با توزیع ماکسول توصیف می‌گردد. اما در حضور میدان الکتریکی، حامل‌ها انرژی کسب نموده و سپس آن را بیشتر از طریق گسیل فونون‌ها از دست می‌دهند. در میدان‌های بزرگ، گسیل فونون‌های اپتیکی، پراکندگی غالب است. با افزایش میدان، میانگین انرژی حامل‌ها نیز افزایش می‌یابد و به دمای مؤثری ( $T_e$ ) بزرگتر از دمای شبکه ( $T$ ) می‌رسد [۱۳].

حال ممکن است این سؤال ایجاد شود که چه شرایطی نوع تعادلی یا غیر تعادلی توزیع حامل‌ها را تعیین می‌کند؟ پاسخ به این سؤال، به زمان برهم‌کنش بین حامل‌ها و برهم‌کنش حامل‌ها- شبکه در مقایسه با طول عمر حامل، بستگی دارد. بدین منظور، پارامتر زمان حرارتی شدن<sup>۳۰</sup> تعریف می‌شود که در واقع زمانی است که طول می‌کشد تا توزیع غیرتعادلی حامل به حالت تعادلی برسد. طول عمر حامل نیز، مقدار زمانی است که حامل حرارتی می‌شود. فرایندهایی که در حرارتی شدن مؤثر هستند عبارتند از: برهم‌کنش‌های حامل- حامل و برهم‌کنش‌های فونون- حامل. همان‌طور که در شکل (۲-۵) نشان داده شده است، زمان‌های برهم‌کنش حامل- فونون از ۰/۱ پیکوثانیه (برای فونون‌های اپتیکی قطبی و برای فونون‌ها در پراکندگی بین نواری) تا ده‌ها پیکوثانیه (برای فونون‌های اکوستیکی) متغیر است.

زمان‌های برهم‌کنش حامل- حامل به شدت به چگالی حامل وابسته است. در چگالی‌های بیشتر از  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ، حرارتی شدن حامل در محدوده فمتوثانیه است. بنابراین، برهم‌کنش حامل- حامل در چگالی‌های بالا و برهم‌کنش حامل- فونون در چگالی‌های کم، زمان حرارتی شدن را تعیین می‌کند. اغلب حامل‌ها، طول عمر محدود دارند زیرا به وسیله نقص‌های شبکه به دام می‌افتند. اگر هر دوی الکترون‌ها و حفره‌ها حضور داشته باشند، طول عمر حامل‌ها به واسطه پدیده بازترکیب محدود می‌گردد. در نمونه‌های با چگالی نقص‌های بزرگ (مانند نیمه‌رساناهای آمورف)، طول عمر حامل‌ها از مرتبه پیکوثانیه یا کمتر است. اگر طول عمر حامل کمتر از زمان حرارتی شدن باشد، توزیع حامل از نوع غیرتعادلی خواهد بود. علاوه بر این، اگر توزیع حامل به وسیله یک آشفستگی در زمانی کمتر از زمان حرارتی شدن مختل گردد، یک توزیع غیرتعادلی گذرا رخ می‌دهد.

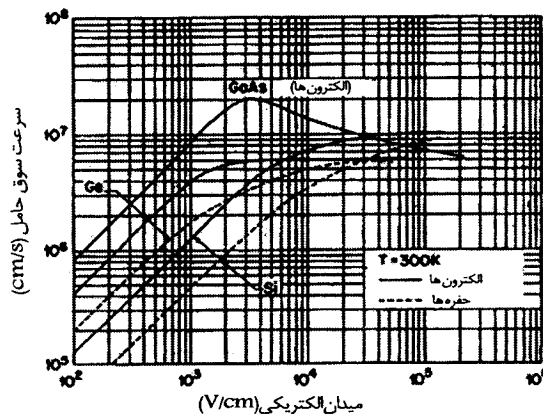
<sup>29</sup> Impact ionization

<sup>30</sup> Thermalization time



شکل ۲-۵- زمان‌های واهلش تکانه<sup>۳۱</sup> یک الکترون رسانش در کمینه  $\Gamma$  از GaAs به‌عنوان تابعی از انرژی الکترون  $\tau_{ac}$  مربوط به زمان پراکندگی ناشی از فونون‌های اکوستیکی طولی،  $\tau_{po}$  مربوط به فونون‌های اپتیکی و  $\tau_{1 \rightarrow 2}$  مربوط به پراکندگی از کمینه  $\Gamma$  به  $X$  [۲۱].

حامل‌های گرم ویژگی‌های متفاوتی نسبت به حامل‌های تعادلی دارند. وابستگی سرعت سوق به میدان الکتریکی، نمونه‌ای از این اختلاف است. شکل (۲-۶)، سرعت سوق در Si و GaAs را به‌صورت تابعی از میدان الکتریکی نشان می‌دهد. در میدان‌های کمتر از  $10^3$  V/cm، حامل‌ها از قانون اهم تبعیت می‌کنند، یعنی سرعت سوق به‌طور خطی با میدان الکتریکی افزایش می‌یابد. در میدان‌های بیشتر، سرعت حامل به‌طور غیرخطی با افزایش میدان افزایش می‌یابد و در سرعت حدود  $10^7$  cm/s به حد اشباع یعنی، به اوج سرعت سوق حامل در میدان‌های بزرگ می‌رسد. نوع n، رفتار پیچیده‌تری را نشان می‌دهد. زیرا حداکثر سرعت آن، بیش از سرعت اشباع است. این پدیده، سرعت فرارفت<sup>۳۲</sup> نام دارد و در تعداد کمی از نیمه‌رساناهای نوع n مانند GaAs، InP و InGaAs مشاهده می‌گردد.



شکل ۲-۶- وابستگی سرعت سوق به میدان الکتریکی برای الکترون‌ها و حفره‌ها در Si و GaAs [۱۲].

<sup>۳۱</sup> Momentum relaxation times

<sup>۳۲</sup> Overshoot

سرعت الکترون‌ها در *GaAs* با افزایش میدان الکتریکی بین  $3 \times 10^2$  و  $2 \times 10^5$  V/cm کاهش می‌یابد. این پدیده مقاومت دیفرانسیلی منفی نامیده می‌شود. برای محاسبه سرعت سوق از روش نیمه کلاسیکی استفاده می‌شود که در بخش بعدی شرح داده خواهد شد. همچنین، مقاومت دیفرانسیلی منفی و سازوکار انتقال الکترون با جزئیات بیشتر نیز در ادامه بیان خواهند شد.

### ۲-۴-۳- رویکرد نیمه کلاسیکی

برای بررسی پدیده ترابرد نیمه‌رساناها در حضور میدان الکتریکی بزرگ، لازم است که تابع توزیع مناسب آن تعریف شود. در ابتدا، فرض می‌شود که نیمه‌رسانای مورد نظر فقط دارای الکترون آزاد (یعنی نوع  $n$ ) است. برای سهولت، فرض می‌شود که تمرکز الکترون‌های آزاد کم است به طوری که می‌توان از برهم‌کنش آنها با یکدیگر مانند برخورد و اثرات استتار، صرف‌نظر نمود. همچنین، از اثرات میدان‌های موضعی به واسطه حضور بارهای یونی صرف‌نظر می‌شود. به عبارتی دیگر، فرض می‌شود که الکترون‌ها همان میدان خارجی اعمالی را تجربه می‌کنند. از آنجا که همه حامل‌ها زمان پراکندگی مشابه ندارند، فرض می‌شود که حامل‌ها در یک نوار به صورت بولتزمانی توزیع شده‌اند و زمان پراکندگی به انرژی حامل بستگی دارد [۲۱]. به دلیل اینکه سیستم تحت میدان خارجی قرار دارد، پس در حال تعادل دمایی نیست و تابع توزیع باید به صورت غیرتعادلی تعریف شود که در صورت حذف میدان اعمالی، به تابع توزیع فرمی-دیراک تبدیل می‌شود.

برای توصیف پراکندگی در سیستم از تقریب زمان واهلش (RTA) <sup>۳۳</sup> استفاده می‌شود. در این تقریب فرض می‌شود که تابع توزیع الکترون‌ها پس از برخورد مستقل از تابع توزیع غیرتعادلی قبل از برخورد است، به سمت تعادل موضعی پیش می‌رود و شکل آن پس از برخورد نیز تغییر نمی‌کند. برای تعیین آهنگ برخورد باید سازوکار برخورد نیز مشخص باشد. آنچه در سیستم سبب پراکندگی می‌گردد، نوسانات گرمایی، یون‌های ناخالصی و یا نقص‌های شبکه است. البته اگر در بخشی از بلور، ثابت شبکه به دلیل اعمال میدان خارجی تغییر کند، عامل دیگری نیز برای پراکندگی محسوب می‌گردد. با در نظر گرفتن تمام مطالب فوق، آهنگ تغییر تابع توزیع در این تقریب به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\left. \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_c = -\frac{f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^0}{\tau}, \quad (6-2)$$

که  $\tau$ ، فاصله زمانی میانگین بین دو برخورد بوده و به انرژی، مکان و بردار موج وابسته است.  $f_{\mathbf{k}}^0$  نیز تابع توزیع تعادلی است. برای بررسی آهنگ تغییر، باید از معادله بولتزمان استفاده شود که عبارت است از:

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} + \vec{v}(k) \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \vec{r}} + \vec{k} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \vec{k}} = \left. \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial t} \right|_c, \quad (7-2)$$

در رابطه فوق،  $\vec{k}$  متعلق به منطقه بریلوئن و  $\vec{v}(k)$  سرعت الکترون‌ها در بلور است. در حالت تعادل دمایی،  $f_{\mathbf{k}}$  به  $f_{\mathbf{k}}^0$  یعنی تابع توزیع ماکسول-بولتزمان که در دمای شبکه به چگالی الکترون‌ها بهنجار شده:

<sup>33</sup> Relaxation Time Approximation