٤٩٠١٤

۱۳۸۲ /۵/ ۳۰

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
تهیه مدارک

دانشگاه الزهرا
دانشکده علوم پایه
گروه فیزیک

پایان نامه

جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

رشته فیزیک حالت جامد

عنوان

شبیه‌سازی سطح سیلیکان متخلخل به روش DLA

استاد راهنما

دکتر رضا ثابت داریانی

استاد مشاور

دکتر فرشاد ابراهیمی

۴۹۰۱۴

دانشجو

سکینه مینائی فرد

اردیبهشت ۸۲

فصل دوم ***مکانیک آماری و پدیده های تصادفی*** ۴۱

۲-۱ مکانیک آماری ۴۲
۲-۲ شرایط تعادل،عدم تعادل و نزدیک به تعادل ۴۳
۲-۳ مبانی نظریه جنبشی در فرآیندهای انتقالی ۴۳
۲-۴ احتمال و توابع توزیع احتمال ۴۷
۲-۵ ولگشت یا گام های تصادفی ۵۸
۲-۶ پدیده پخش ۵۹
۲-۷ یکی از روشهای پیدا کردن ضریب پخش **D** ۶۲
۲-۸ فرآیند پخش در نیمه رساناها ۶۳
۲-۹ پدیده های احتمالی و استوک استیکی ۶۷

فصل سوم ***ساختارهای فراکتالی و مدل های رشد آماری*** ۷۱

بخش اول: ساختارهای فراکتالی ۷۲
مقدمه ۷۳
۳-۱-۱ فراکتال چیست؟ ۷۵
۳-۱-۲ بررسی جنبه های معمول اشیاء فراکتالی ۸۲
۳-۱-۳ روشهایی در محاسبه بعد فراکتالی ۸۸
۳-۱-۴ فرآیند های انبوهشی و مدلهای رشد ۹۵
بخش دوم: بررسی مدل رشد DLA ۱۱۲

فصل چهارم ***شبیه سازی ساختار سیلیکان متخلخل با استفاده از روش DLA*** ۱۲۱

بخش اول: الگوریتم رشد در مدل DLA ۱۲۴
بخش دوم: رشد ساختار سیلیکان متخلخل به کمک مدل DLA ۱۴۰

بخش سوم: نتیجه گیری و پیشنهاد ۱۵۴

پیوست ۱: ۱۵۸
پیوست ۲: ۱۶۵
پیوست ۳: ۱۶۷
پیوست ۴: ۱۶۹
پیوست ۵: ۱۷۱
پیوست ۶: ۱۷۴
پیوست ۷: ۱۷۶

فهرست مراجع فارسی ۱۷۹
فهرست مراجع انگلیسی ۱۸۰

فهرست مطالب:

عنوان	صفحه
چکیده	IV
فصل اول ***ساختار شناسی سیلیکان و سیلیکان متخلخل***	۱
بخش اول: بررسی ساختار سیلیکان	۲
مقدمه	۳
۱-۱ ساختار سیلیکان	۱۳
۱-۱-۱ پیوند سیلیکان	۱۳
۱-۱-۲ نوارهای انرژی سیلیکان	۱۴
۱-۱-۳ گاف انرژی در سیلیکان	۱۶
۱-۱-۴ گذار غیر مستقیم در سیلیکان	۱۸
۱-۱-۵ آلایش در سیلیکان	۲۰
بخش دوم: بررسی ساختار سیلیکان متخلخل	۲۲
مقدمه	۲۳
۱-۲ سیلیکان متخلخل چیست؟	۲۴
۱-۲-۱ ریخت شناسی خلل	۲۵
۱-۲-۳ منحنی های جریان ولتاژ	۲۵
۱-۲-۴ اثر پتانسیل آندیزاسیون	۲۸
۱-۲-۵ اثر غلظت آلایش	۲۹
۱-۲-۶ اثر جهت های بلور شناسی	۳۰
۱-۲-۷ اثر پیوندهای سطحی	۳۱
۱-۲-۸ شکل گیری سیلیکان متخلخل	۳۲
۱-۲-۹ مدل های شکل گیری سیلیکان متخلخل	۳۳
۱-۲-۱۰ انواع ساختار متخلخل	۳۸

چکیده:

سیلیکان(Si) از جمله نیمه رساناهایی است که کاربرد وسیعی در صنعت الکترونیک دارد. اما همین عنصر به علت داشتن گاف غیر مستقیم، دارای خواص ضعیف اپتیکی بوده و جایگاهی در کاربردهای اپتیکی ندارد. یکی از راههایی که می توان بدان طریق در سیلیکان خواص اپتیکی بوجود آورد، کوچک کردن ساختار Si است، به حدی که اثرات کوانتومی در ساختار نواری آن بکار آید. به این ساختار، سیلیکان متخلخل (PS) گفته می شود. لایه های سیلیکان متخلخل معمولاً بوسیلهٔ آندیزاسیون الکتروشیمیایی سطح یک ویفر سیلیکان تهیه می شود.

در طی فرآیند آندیزاسیون ویفر سیلیکان، خللی در حجم سیلیکان ایجاد می شود که قطر آنها بنا به شرایط آندیزاسون در حد نانومتر یا میکرومتر است. این خلل در سطح یکی ازصفحات بلورشناسی(<100>) دارای ساختاری درختی و شاخه شاخه می باشند.

هدف این پایان نامه، شبیه سازی کامپیوتری این ساختار درختی که طی فرآیند متخلخل سازی (آندیزاسیون) در سیلیکان متخلخل ایجاد می شود ، توسط مدل رشد آماری Diffusion-limited aggregation (DLA) می باشد. مدل DLA یکی از مدلهای احتمالی و استوک- استیکی است که از پدیدهٔ پخش بر گرفته شده است. در این مدل با استفاده از ولگشت (Random-walk) ساختار های فراکتالی از جمله کلاسترهای غیر متراکم ساخته می شود.

بعد از شبیه سازی ساختار درختی سیلیکان متخلخل، با تغییراتی که در برنامهٔ کامپیوتری خواهیم داد، سعی می کنیم تغییراتی که در شکل ساختار سیلیکان متخلخل در اثر تغییربعضی ازشرایط آندیزاسون (نوع ویفر سیلیکان زیرلایه و شدت جریان) بوجود می آید را شبیه سازی کنیم.

لازم به ذکراست که برای نوشتن برنامهٔکامپیوتری خوداززبان برنامه نویسی Fortran 90 استفاده کرده ایم.

لغات کلیدی:

سیلیکان متخلخل – فراکتال – مدل رشد DLA – انبوهش پخش محدود – گام های تصادفی

مرکز اطلاعات و مدارک علمی ایران
تهیه مدارک

فصل اول

ساختارشناسی سیلیکان و سیلیکان متخلخل

بخش اول :

بررسی ساختار سیلیکان

مقدمه :

همانطور که می‌دانیم جامدات از نظر آرایش بلوری به سه دسته تقسیم می‌شوند. دستهٔ اول جامدات بلوری[1]، دستهٔ دوم جامدات چند بلوری یا نیمه بلوری[2] و جامدات بی شکل[3] می‌باشند.

یک جامد بلوری دارای این ویژگی است که اتم‌های تشکیل دهندهٔ آن در شکلی تناوبی قرار گرفته‌اند که آرایش متناوب اتمی در یک بلور "شبکه" نامیده می‌شود [۱] در بین ۱۴ شبکهٔ براوه (در فضای ۳ بعدی) ۳ شبکهٔ مکعبی وجود دارد:

a) شبکهٔ مکعبی ساده[4] که چگالی اتم‌های پایه درآن ۱ می‌باشد. (SC) (شکل ۱-۱- الف)

b) شبکهٔ مکعبی بدنه مرکزدار[5] که چگالی اتم‌های پایه در آن معادل ۲ اتم می‌باشد. (bcc) (شکل ۱-۱- ب)

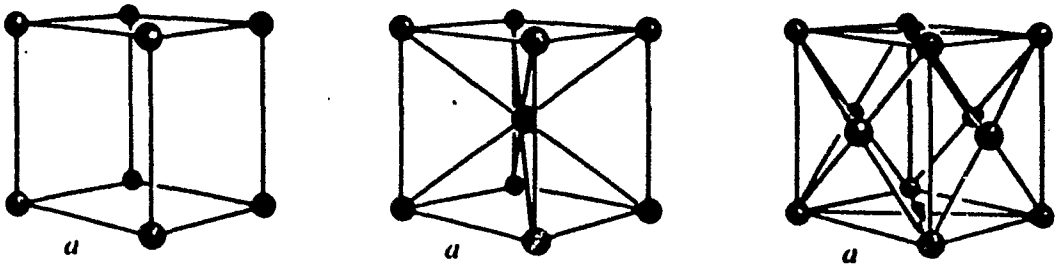
c) شبکهٔ مکعبی وجه مرکزدار[6] که چگالی اتم‌های پایه در آن معادل ۴ اتم می‌باشد. (fcc) (شکل ۱-۱- ج)

۱) شبکهٔ الماسی:

اما همواره ساختار بلور بوسیله یکی از شبکه‌های براوه توجیه نمی‌شود. بلکه گاهی ساختار شبکهٔ پایه ترکیبی از این شبکه‌های براوه است. مثل شبکهٔ الماسی که ساختار شبکه اغلب نیمه رسانای مهم از جمله Si و Ga است.

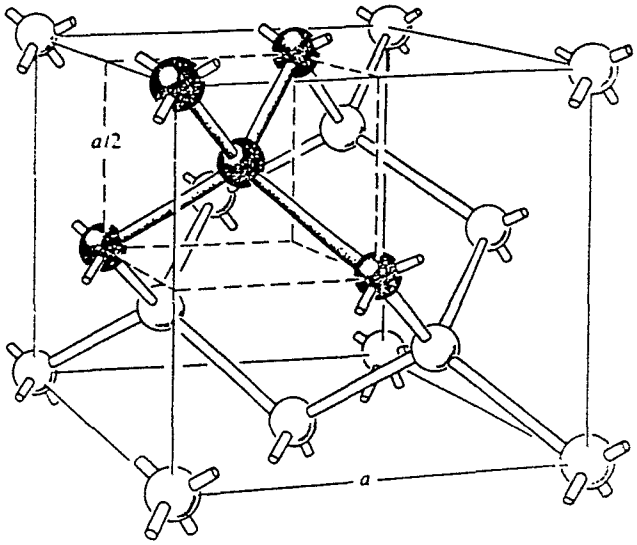
---

1. Crystal
2. Polycrystalline
3. A Morph
4. Simple cubic
5. Body centered cubic
6. Face centered cubic



مکعبی ساده　　مکعبی بدنه مرکزدار　　مکعبی وجه مرکزدار

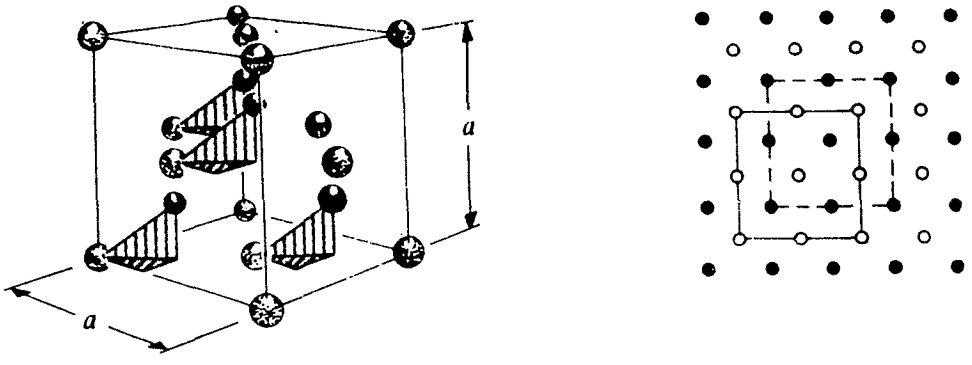
شکل ۱-۱: سلولهایی که برای ۳ نوع ساختار شبکهٔ مکعبی [۱]



شکل ۲-۱: سلول یکّهٔ شبکهٔ الماسی که ساختار چهار نزدیکترین همسایه را نشان می‌دهد. [۱]

شبکهٔ الماسی را می‌توان به شکل یک ساختار fcc در نظر گرفت که یک اتم اضافی در فاصلهٔ $\frac{a}{4}+\frac{b}{4}+\frac{c}{4}$ از هر یک از اتم‌های fcc دارد. به عبارتی یک شبکهٔ الماسی از تداخل دو

شبکهٔ fcc بوجود آمده، که غیر از fcc اصلی، fcc متداخل دیگری وجود دارد که به اندازهٔ $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$ نسبت به fcc اصلی در راستای قطر اصلی fcc اصلی جابجا شده است. شکل (الف – ۳-۱) شکل شبکهٔ الماسی را از بالا (یا با نگاه در راستای <100>) نشان می‌دهد و شکل (ب-۳-۱) در شبکهٔ متداخل fcc را بصورت گسترده نشان می‌دهد که اتم‌های متعلق به fcc اصلی با دایره‌های توخالی نشان داده شده‌اند و شبکهٔ فرعی نفوذکننده دایره‌های توپر هستند.

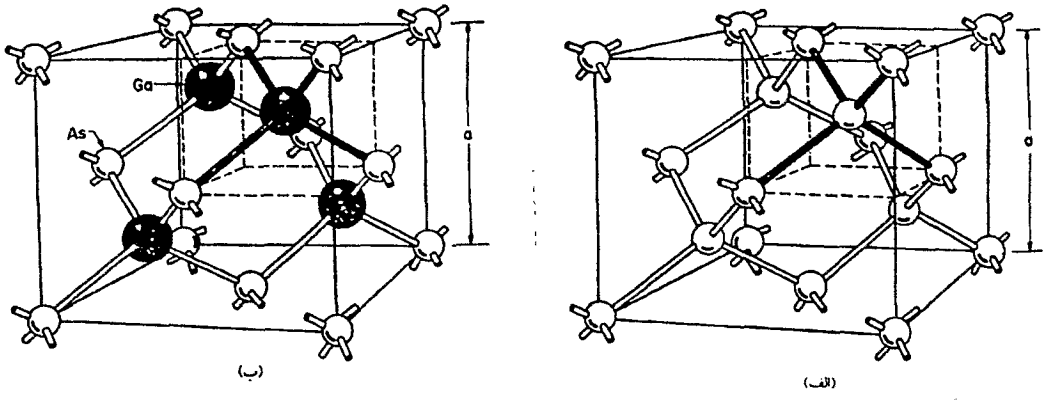


(الف) (ب)

شکل ۳-۱: ساختار شبکهٔ الماسی: الف) یک سلول یکه از شبکهٔ الماسی که با قرار دادن اتم‌هایی در فاصلهٔ $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4})$ از هر یک از اتم‌ها در fcc ساخته شده است. (ب) نمایی از بالای (در راستای هر جهت <100>) یک شبکهٔ الماسی گسترده. دایره‌های توخالی نشان‌دهندهٔ یک شبکهٔ فرعی fcc و دایره‌های توپر نشان دهندهٔ fcc نفوذکننده است. [۱]

در این نوع ساختار اگر اتم‌ها همگی مشابه باشند، ساختار را شبکهٔ الماسی می‌نامیم ولی اگر اتم‌ها یک در میان متفاوت باشند، (fcc اول از یک نوع و fcc دوم از اتم دیگر باشد) ساختار

را سولفید روی یا زینک بلند[1] گویند. که گـالیم آرسـناید (Ga As) یکـی از نیمـه رسـاناهای ترکیبی است که دارای این ساختار می‌باشد. [۱]



شکل ۴-۱: الف) شبکهٔ الماسی ب) شبکهٔ زینک بلند [۲]

II) نیمه رسانا:

نیمه رساناها گروهی از مواد هستند که رسانایی الکتریکی آنها بین فلزات و عایق‌هـا قـرار دارد. ویژگی مهم این مواد این است که رسانایی آنها بـا تغیـیر دمـا، برانگـیزش نـوری و مـیزان ناخالصی به نحو قابل ملاحظه‌ای تغییر می‌کند. این قابلیت تغییر خواص الکـتریکی، مـواد نیمـه رسانا را انتخاب مناسبی برای تحقیق در زمینهٔ قطعات الکترونیکی ساخته است.

مواد نیمه رسانا شکل عناصر ستون چهارم جدول تناوبی یـا ترکیبـی از عنـاصر سـتونهای مجاور آن هستند. به عبارت دیگر نیمه رسانا یا تک عنصری[2] هستند یعنی از اتم‌های همجنـس

1. Zinc blend
2. elemental

تشکیل شده‌اند یا اینکه علاوه بر این مواد تک عنصری ترکیب اتم‌های ستون سوم و پنجم و نیز ترکیبهای خاصی از عناصر ستون دوم و ششم نیمه رساناهای ترکیبی[1] را می‌دهد.

نیمه‌رساناها از جمله عناصری هستند که ساختار بلوری دارند و ساختار شبکه برای اغلب نیمه رساناهای مهم (Si و Ga) شبکهٔ الماسی است. البته اتم‌ها در بسیاری از نیمه رساناهای ترکیبی آرایش زنیک بلند دارند.

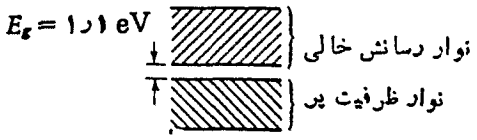
یادآور می‌شویم که نوع پیوند در این شبکه‌های الماسی از نوع کووالانس است. یعنی هر اتم در شبکهٔ الماسی توسط چهار نزدیکترین همسایه، که هر یک دارای چهار الکترون در مدار بیرونی است احاطه شده است. به این ترتیب هر اتم الکترونهای ظرفیت خود را با چهار اتم همسایه تقسیم می‌کند. در ساختار الماسی کووالانسی (شکل ۲-۱) همانند بلورهای یونی هیچگونه الکترون آزاد در شبکه وجود ندارد. البته نیمه رساناهای ترکیبی مانند Ga As دارای پیوند مختلطی هستند که در آن هر دو نیروی پیوندی یونی و کووالانسی مشارکت دارند.

دقت شود که برای تشکیل یک جامد اتم‌ها طوری گرد هم می‌آیند که ترازهای انرژی تقسیم شده اساساً نوارهای پیوستهٔ انرژی را تشکیل می‌دهد و در فاصله بین این نوارهای انرژی مناطقی قرار دارند که حضور الکترونها در آنها غیرمجاز است و الکترونی در آن یافت نمی‌شود. به این مناطق، مناطق ممنوعه گفته می‌شود. پس برخلاف الکترون در خلاء، الکترون در جامد فقط می‌تواند مقادیر محدودی از انرژی را بپذیرد. هر نوار انرژی مجاز شامل تعداد محدودی حالت است که می‌توانند تعداد معینی الکترون در خود جای دهند. در نیمه‌رسانا، الکترونهای ظرفیت گرد هم می‌آیند تا نواری از ترازهای انرژی موسوم به نوار ظرفیت را اشغال کنند. نوار انرژی مجاز بعدی موسوم به نوار رسانش، به اندازهٔ گاف ممنوع انرژی Eg از نوار قبلی

---

1. Compound

انرژی مجاز بعدی موسوم به نوار رسانش، به اندازهٔ گاف ممنوع انـرژی Eg از نـوار قبلـی فاصلـه دارد. این تصویر فیزیکی که نمودار نوار انرژی نامیده می‌شود برای یک نیمه رسانا در شـکل (۵-۱) نشان داده شده است.

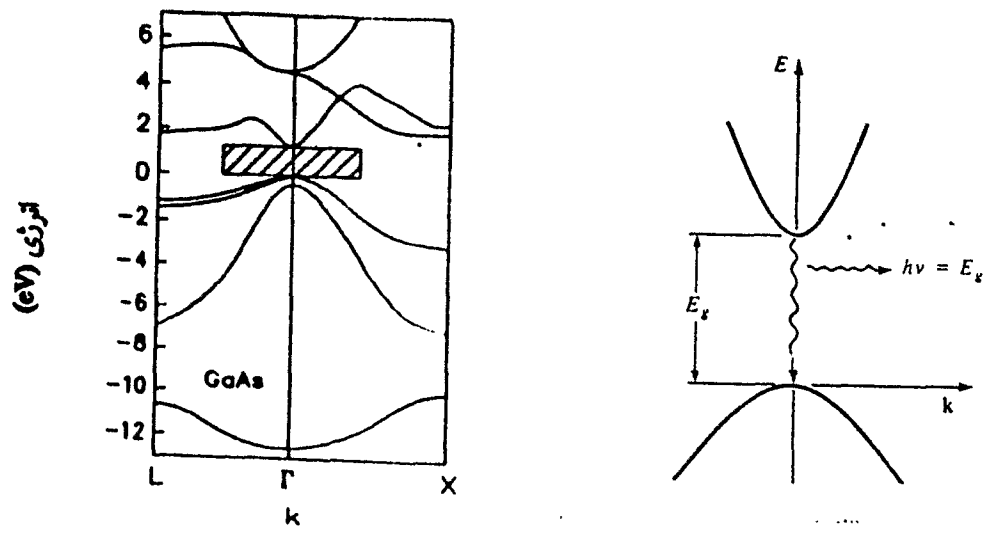


سیلیسیم

شکل ۵-۱: نمودار نوار انرژی برای نیمه رسانا (سلسیم) در 0K که محور قائم انرژی و محور افقی وضعیت فضایی را نشان می‌دهد. [۳]

در یک نیمه رسانا برخلاف عایق‌ها گاف ممنوع انرژی Eg در حدود 1 eV است. ایـن امـر باعث می‌شود که پیوند الکترونهای ظرفیت چندان محکم نباشد. یعنی در دمـای اتـاق برخـی از الکترونهای ظرفیت ممکن است انرژی گرمایی کافی دریافت کنند تا بر گاف ممنوع غالب آمـده و به نوار رسانش برسند. [۳]

متداول است که دو گروه اصلی نیمه رساناها را که دارای گافهای مسـتقیم و غیرمسـتقیم هستند از هم متمایز سازیم. وقتی در فضای K می‌نیمم نوار رسانایی منطبق بـا ماکسـیمم نـوار ظرفیت گردد، نیمه رسانا را نیمه رسانای گـاف مسـتقیم مـی‌گوینـد. در ایـن مـورد می‌تـوان از ترکیبات III-V یا II-VI مانند Ga As ، cd S یا In Sb را نام برد. در این گذار همـانطور کـه در شکل (۶-۱) دیده می‌شود. فقط تغییر انرژی رخ می‌دهد و عدد مـوج k (یـا مومنتـوم $p = \hbar k$) تغییر نمی‌کند.



شکل ۶-۱: گذار مستقیم a [۴] b [۱]

از جهت دیگر، وقتی می‌نیمم نوار رسانایی در فضای k منطبق با ماکسیمم نوار ظرفیت نباشد دارای نیم رسانای گاف غیرمستقیم هستیم. عناصر نیمه رسانای Si و Ga مثالهای مهمی از نیمه رساناهای غیرمستقیم هستند. طبق شکل (۷-۱) در این نوع نیمه رساناها برای رفتن الکترون از نوار هدایت به ظرفیت و برعکس احتیاج به تغییر در عدد موج k (یا مومنتوم ηk داریم. دقت شود که در این نوع نیمه‌رساناها گذر از طریق مراکز باز ترکیب یا تله‌ها انجام می‌گیرد.[۴]

هدایت الکتریکی در نیمه رساناها برعهدهٔ الکترونها و حفره‌هاست. در صفحه کلوین نوار ظرفیت درنیمه رساناها پرونوارهدایت خالی است. با بالا رفتن دما بعضی الکترونهای نوار ظرفیت برانگیخته شده و به نوار هدایت می‌جهند. این الکترونهای برانگیخته در نوار هدایت نقش مهمی