بررسی خواص ترابرد InP با استفاده از روش مونت کارلو در میدان الکتریکی بالا

اسلامی مقدم ،زهرا ; عربشاهی ، هادی

گروه فیزیک، دانشگاه تربیت معلم سبزوار، سبزوار محروه فیزیک ، دانشگاه فردوسی مشهد ، مشهد

چکيده:

در این مقاله بستگی دمایی و میدان الکتریکی ترابرد الکترونها در نیمرسانا InP به روش شبیه سازی مونت کارلو بررسی شده ، عوامل مختلف پراکندگی الکترونها از فونونها و ناخالصی های یونیزه نیز در نظر گرفته شده است. با استفاده از یک مدل سه دره ای ، سرعت سوق بدست آمده برای الکترونها در InP در دمای اتاق ^{InP مدا} × ۲/۳ در میدان آستانهٔ ^{INP د} ۱۱۰ می باشد. چنین سرعت سوق بالایی InP را کاندیدای خوبی جهت طراحی قطعات الکترونی در دما و توان های بالا معرفی می کند.

The Transport Properties of InP Determined by a Monte Carlo Method in High Electric Field Eslami Moghadam,Zahra¹; Arabshahi,Hadi²

¹ Department of Physics, Tarbiat Moallem University ,Sabzevar ,Iran ² Department of Physics, Ferdowsi University, Mashhad, Iran

Abstract

Temperature and electron field–dependent electron transport in InP has been simulated using an ensemble Monte Carlo and All dominant scattering proceess has been included in our calculations .our results show that InP has a electron drift velocity of $2/3 \times 10^5 \text{ms}^{-1}$ in break down electric field of $1 \times 10^6 \text{ Vm}^{-1}$.such a high electron drift velocity and break down electric field introduce InP for high-power and high-temperature device applications. *PACSNO.72*

و چگالی اتم های ناخالصی در نیمرسانایInP که در ساختار زینک بلند رشد یافته ، مورد مطالعه قرار گرفته است[۹].

جزئيات مدل :

اساس این کار پژوهشی مبنی بر استفاده از روش شبیه سازی مونت کارلو است. در این روش، معادله بولتزمن با استفاده از روش عددی آماری حل می شود. در شروع هر شبیه سازی پنج هزار شبه ذره در فضای اندازه حرکت بر طبق آمار ماکسول – بولتزمن توزیع می شوند. ذرات در حجم ماده توسط فونونهای اپتیکی قطبی، فونونهای آکوستیکی، فونونهای بین دره ای وناخالصی های یونیزه پراکنده می شوند.در یک ساختار تناوبی کامل فرض می شود اتم ها در نقاط شبکه براوه ثابت باشند، اما می دانیم که اتم ها حول مکان تعادلشان ارتعاشات گرمایی انجام می دهند که دامنهٔ آن بستگی به دما دارد. پراکندگی از شبکه بر اثر همین ارتعاشات اتم های تشکیل دهندهٔ بلور در اطراف محل های تعادلی آنها رخ می دهد. این ارتعاشات، درسال های اخیر نیمرسانای InP به دلیل داشتن گاف انرژی مستقیم، درساخت قطعات اپتوالکترونیک و زیر لایه های لازم در حد طول موج های بلند، کاربرد فراوانی پیدا کرده است[۲-۱]. با استفاده از تکنیک مونت کارلوکه اخیرا برای تعیین خواص ترابرد استفاده شده، بستگی دمایی خواص ترابرد الکترون در InP را محاسبه کرده ایم[۴-۳]. با این روش می توان ساختار نواری ایده ال و تمام فرایندهای پراکندگی مرتبط را وارد محاسبات کرد و در عین حال تابع توزیع الکترون را به صورت دقیق ارزیابی وخواص ترابرد را محاسبه نمود. این محاسبات برای دماهای شبکه در محدودهٔ

مقدمه:



پتانسیل دوره ای شبکه را تغییر می دهند که نتیجهٔ آن پراکندگی الکترون است. ارتعاشات شبکه را می توان کوانتیزه در نظر گرفت و فرآیندهای پراکندگی شبکه را می توان به عنوان بر همکنش الکترونها با کوانتوم ارتعاشات شبکه که فونون نامیده می شود در نظر گرفت. پراکندگی از ناخالصی های یونیزه در اثر وجود اتم های ناخالصی در نیمرسانا به وجود می آید. جایگزینی یک اتم ناخالصی در یک محل شبکه باعث بر هم خوردن نظم تناوبی بلور می گردد. بی نظمی در پتانسیل تناوبی شبکه طبق نظریهٔ اغتشاش در کوانتوم مكانيك، ايجاد پتانسيل اغتشاش گر كرده كه بر هم كنش الكترون با چنین پتانسیل اغتشاش گری باعث پراکندگی الکترون خواهد شد. در واقع مکانیزم های پراکندگی را می توان به دو نوع اصلی طبقه بندی کرد، آنهایی که ناشی از ارتعاشات شبکه هستند و پراکندگی از شبکه یا فونون نامیده می شوند و پراکندگی از نواقص بلوری مانند حضور ناخالصی ها[10]. نتایج بدست آمده درمورد پراکندگی از فونون ها و ناخالصی های یونیزه در توافق خوبی با محاسبات انجام شده توسط دیگران است[12]. پراکندگی از ناخالصی های یونیزه با استفاده از پتانسیل کولنی پوششی Brooks-Herring در محاسبات وارد شده وتقریب سه دره ای (L,Xو Gama) در اولین نوار رسانش برای ساختار بلوری زینک بلند InP استفاده شده است. گاف انرژی ، جرم مؤثرو ضریب غیر سهموی بودن از محاسبات شبه پتانسیل تجربی مشتق شده اند[۶–۵]. پارامترهای الکتریکی و ساختار نواری نیمرسانای InP در جداول ۱و۲ گرد آوری شده اند.

جدول ۱.مشخصات نواری استفاده شده در شبیه سازی مونت کارلودرساختار InP

نام دره		L	Х
	Gama		
(ev) گاف انرژی	۱/۳۵	•/Và	•/9
جرم مؤثر الكترون	•/•٧٣	۰/٣	•/9
ضريب غيرسهموي	• /V	•/10	۰/۵

لندگی	گ پراک	ن آهنًا	محاسبان	در	نياز	مورد	InP	فيزيكى	ζ	۲.پارامترهای	جدول

پارا مترها



ثابت دی الکتریک فرکانس پایین	17/4
ثابت دى الكتريك فركانش بالا	٩/۵۵
انرژی فونونهای اپتیکی (e v)	•/•۶
ثابت پتانسیل تغییر شکل(e v)	٨/٣
سرعت صوت (ms ⁻¹)	۵۳۰۰
چگالی (kgm ⁻³)	471.

نتایج شبیه سازی:



شکل ۱.سرعت سوق الکترون در ساختار زینک بلند InP بر حسب میدان الکتریکی در دماهای شبکه ای مختلف و چگالی ناخالصی از مرتبهٔ ^۳

شکل ۱ سرعت های سوق اندازه گیری شده را به صورت تابعی از شدت میدان الکتریکی در InP در دماهای مختلف نشان می دهد. با افزایش دما، کاهش در سرعت سوق الکترون در میدان های پایین ناشی از افزایش پراکندگی فونونهای اپتیکی قطبی درون دره ای و در میدان های بالا ناشی ازافزایش پراکندگی درون دره ای وبین دره ای است. همانطور که در شکل مشاهده می شود، با افزایش دما از همین افزایش دما، میدان آستانه فقط مقدار کمی افزایش یافته و از همین افزایش دما، میدان آستانه فقط مقدار کمی افزایش یافته و از ۱۰۰۷۳¹ ۲ ۱۰۶۷۳ به ۲۰۰۴ به ۱ مارگرون ناشی از افزایش آهنگ پراکندگی کل با دما است که انرژی الکترون را کاهش داده و باعث کاهش جمعیت الکترونها دردره های بعدی می شود.



شکل۲.نمودار سرعت بر حسب میدان در ساختار زینک بلند InP در دمای ۳۰۰ K برای تراکم های ناخالصی مختلف

شکل ۲ تغییرات مشخصه سرعت – میدان را در دمای K به ازای چگالی ناخالصی بخشنده متفاوت نشان می دهد. تراکم الکترونی با تراکم ناخالصی بخشنده یکسان فرض شده است. همان طور که در شکل مشاهده می شود در دمای اتاق ، با افزایش تراکم ناخالصی، سرعت سوق در میدان های پایین کاهش می یابد و سرعت در میدان آستانه نیز کم می شود ولی میدان آستانه فقط مقدار کمی تغییر می کند[۸–۷]، به طوری که برای تراکم ناخالصی ^۳-۲۰،میدان آستانه برابر ^{1-۷} ۱۰⁶ ۲س و برای تراکم ناخالصی ^۳-



شکل ۳.مقایسه ای از تراکم الکترونها در دره های انرژی در نیمرسانای InP

شکل ۳ درصد اشغال الکترون ها را در دره های انرژی بر حسب میدان الکتریکی اعمالی نشان می دهد. انتقال الکترون به دره های بالاتر فقط زمانی قابل ملاحظه است که شدت میدان الکتریکی بسیار نزدیک به مقدار آستانه باشد و تا قبل از میدان آستانه کسر بزرگی از الکترون ها در درهٔ مرکزی گاما هستند البته میدان آستانه برای انتقال الکترونها از دره مرکزی گاما به دره های بالاتر در هر ماده تابعی از

فاصله جدایی بین دره ای و چگالی حالات الکترونی در آن دره انرژی است. چنانچه از شکل ملاحظه می شود، قبل از میدان بحرانی تمامی الکترونها در دره مرکزی گاما بوده و سپس با افزایش میدان الکتریکی اعمالی، الکترونها به دره های بالاتر پراکنده می شوند.



شکل ۴.مقایسه ای از سرعت سوق الکترونها در ساختار های InPو GaAs

با توجه به شکل ۴ برای هر ترکیب، یک پیک سرعت–میدان مشاهده می شود. پیک سرعت سوق برای InP حدود ^{I-ms} ۱۰^۵ ۳۲ و برای GaAs حدود ^{I-ms} ۲۰۱ ۲/۱ است. در میدان های الکتریکی بالاتر(^{I-ms} ۱۰^۴ ۷m)، به دلیل وجود پراکندگی بین دره ای ناشی از فونون های نوری، سرعت سوق برای دو ماده به حد اشباع ^{Imm} از فونون های نوری، سرعت سوق برای دو ماده به حد اشباع ^{Imm} از فونون های نوری، سرعت سوق برای دو ماده به حد اشباع Im¹⁰ از فونون های نوری، سرعت سوق برای دو ماده به حد اشباع Im² از فونون های زری برای پراکندگی الکترون ها از دره مرکزی گاما به دره های بالاتر انرژی برای InP و GaAs به ترتیب در حدود^{I-In} ۱۰^۴ ۷۳ او ^{I-In} ۸۰^۴ ۱۰۳

در حد میدان های ضعیف، رابطهٔ سرعت بر حسب میدان خطی است تا اینکه سرعت سوق به مقدار بیشینه می رسد در این حالت وابستگی میدانی سرعت سوق به میدان الکتریکی شروع به انحراف از رابطهٔ خطی می کند، درمیدان های الکتریکی بالاتر، گسیل فونونهای اپتیکی بین دره ای، باعث کاهش سرعت سوق می شود. پیک ایجاد شده در منحنی سرعت میدان شکل های او ۲و۴ نتیجهٔ شروع پراکندگی الکترونها از کمینهٔ نوار انرژی با تحرک بالا (درهٔ گاما)، به دره های مجاور با انرژی بالاتر و تحرک پایین است، چون در دره های بالاتر جرم مؤثر بیشتر است در نتیجهٔ سرعت سوق الکترون کاهش می یابد[11].



فیزیک مادہ چگال – شفاهی



شکل ۵. تغییرات تحرک پذیری الکترون بر حسب دما برای نیمرسانای InP به ازای تراکم های الکترونی متفاوت در میدان الکتریکی به شدت IO⁶Vm⁻¹. همانطور که در شکل ۵ ملاحظه می شود نمونه با تراکم الکترونی کمتر در تمام دماها دارای تحرک پذیری بیشتری است و با کاهش دما این تحرک پذیری به طور قابل ملاحظه ای کم می شود. در یک دمای معین نمونه با تراکم الکترونی بیشتر دارای تحرک پذیری کوچکتری است، زیرا در این نمونه تعداد مراکز ناخالصی یونیزه بیشتر است و الکترون دفعات بیشتری تحت تأثیر پتانسیل کولنی قرار می گیرد ، در نتیجه آهنگ پراکندگی از ناخالصی یونیزه در این نمونه بالاتر است .



شکل۶.تغییرات تحرک پذیری الکترونی بر حسب تراکم الکترونی در دماهای مختلف برای نیمرسانای InP

شکل⁹ تغییرات تحرک پذیری الکترونی بر حسب تراکم الکترونها را در دماهای متفاوت نشان می دهد . در یک تراکم الکترونی معین ، نمونه با دمای بیشتر دارای تحرک پذیری کوچکتری می باشد ، که دلیل آن افزایش ارتعاشات شبکه و بر همکنش الکترونها با فونونها است . همانطور که ملاحظه می شود ، تحرک پذیری در همه دماها با افزایش تراکم الکترونها به طور قابل ملاحظه ای کم می شود که دلیل آن افزایش پراکندگی از مراکز ناخالصی یونیزه است .



نتیجه گیری:

با استفاده از شبیه سازی مونت کارلو، ترابرد الکترونها در ساختار زینک – بلند InP در دماهای K ۹۰۰ و ۴۵۰ و ۳۰۰ مورد مطالعه قرار گرفت . با توجه به نمودار سرعت – میدان مشاهده می شود که با افزایش دما به دلیل افزایش آهنگ پراکندگی پیک سرعت سوق کاهش می یابد. همچنین محاسبات نشان داد که در دماهای پایین فرایند پراکندگی غالب ، پراکندگی از ناخالصی های یونیزه است، که این پراکندگی عامل کاهش تحرک پذیری در دماهای پایین است و مهمترین عامل محدود کننده تحرک پذیری الکترونها در دماهای بالا پراکندگی از فونونهای اپتیکی قطبی است. البته پراکندگی پیزو الکتریک در ساختارهای زینک بلند به علت تقارن مکعبی بلور، سهم ناچیزی در پراکندگی الکترونها و تحرک پذیری دارد.

مراجع:

- S. Adashi, "Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds" (1992) Willy, New York
- [2] F. Matoossi and F. Stern ; "*Physics Rev.111.*"; 472,(1996)
- [3] C. Moglestue, Monte Carlo Simulation of semiconductor Device,
- 1993, Chapman and Hall
- [4] C.Jacoboni and P.Lugli, *The Monte Carlo for semiconductor and Device Simulation*, 1989, springer-Verlag
- [5] J. Kolink; I. H. Oguzman; and K. F.Brennan; J. Appl. Phys.
- 78(1995)1033
- [6] J. D. Albrecht; R. P. Wang and P. P. Ruden ; K. F. Brennan; *J. Appl. Phys.* 83(1998)2185
- [7] N. S. Mansour; K. W. Kim; and M. A.Littlejohn; J.Appl.
- Phys.77(1995)2834
 [8] B. E. Foutz;S. K,O Leary, and M. S. Shur ; J. Appl. Phys.85(1999)7727
 [9] H. Arabshahi; "STEADY STATE AND TRANSIENT ELECTRON TRANSPORT WITHIN BULK InAs_xP_{1-x}, InAs and InP USING AN AEMICLASSICAL THREE-VALLEY MONTE CARLO SIMULATION
- ANALYSIS"; to be publish in International Modern Physics lettres B,2008 [10] Charles M.Wolfe and Nick Holonak , Jr; Gregory E.Stillman"Physical Properties of Semiconductors"Prentice-Hall, New Jersey, (1989).
 - [11] *فیزیک و تکنولوژی قطعات نیمرسانا* ،اس.ام.زی،ترجمهٔ غلامحسین سدیر
 - عابدی ،دانشگاه امام رضا(ع) مشهد،انتشارات آستان قدس رضوی (۱۳۷۵) .
- [12] J.G.Ruch and W.Fawcett, J.Appl. Phys. 41(1970)3846