



شبیه سازی تراپرد الکترون در شبکه بلوری GaP با استفاده از روش مونت کارلو
*خلوی، محمد رضا^۱، مخلص گرامی، عادله^۲، عرب‌شاھی، هادی^۳، رحیم پور سلیمانی، حیدر^۴، ایزدی فرد، منصوری^۵

^۱دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شاھرود

^۲دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان

^۳گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

فرازینه انتقال حاملها در حضور میدانیایی الکتریکی در بلور GaP به وسیله روش مونت کارلو شبیه سازی می‌شود. مکانیزم پراکنده‌گی هایی که به حساب آورده می‌شود ناشی از پراکنده‌گی های اکسونیک، فونون اپتیکی قطبی، فونون اپتیکی غیر قطبی و پراکنده‌گی ناخالصی بیرونیه شده می‌باشد. در این مقاله نتایج شبیه سازی مونت کارلو در شماهی ۳۰۰ و ۵۰۰ کلوین گزارش داده شده است، و همچنین در این بررسی مشخصات تراپرد الکترونی در بلور GaAs مقایسه گردیده است.

Simulation of electron transport in GaP crystal by using of Monte Carlo method

Khalvati, mohammad¹-mokhles gerami,Adeleh²-Arabshahi,Hadi³-Rahimpour soleimani,Hamid²-Izadi fard, Morteza¹

¹Physics Department, Shahrood University of Technology.khalvati.mohammad@gmail.com

²Physics Department, Guilan University

³Physics Department, Ferdowsi University

Abstract

The transport process of carriers in electric field is simulated in GaP crystal by using a Monte Carlo method. The scattering mechanisms taken into account are those due to acoustic phonons, non-polar optical phonons, polar optical phonons and ionized impurities. In this paper, The simulation of Monte Carlo results are reported for temperatures 300 and 500 k, and the characteristic of electron transport in GaP crystal are compared with GaAs crystal too.

مقدمه

در سالهای اخیر ماده GaP در ساخت بسیاری از قطعات الکترونیکی و اپتیکی در حد ولتاژ‌ها و دمای‌ها بالا کاربرد فراوانی داشته است. این ماده برای یک مدت زمان طولانی برای ساخت دیوبهای گسلی نور به کار برده می‌شود [۱]. بلور GaP مانند بلور Si دارای گف نواری غیر مستقیم بوده و در ساختار بلوری زینک بلند رشد می‌یابد. مطالعات ساختار نواری در این ماده نشان می‌دهد که در اولین نوار انرژی، پایین ترین درجه ها در موقعیت های X ، Γ ، L واقع شده است [۲]. اکثر نیمه رساناهای ترکیبی گروه (III-V) دارای ساختار بلور مکعبی زینک بلند می‌باشند. در ارایش بلوری زینک بلند 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 ارایش بلوری دارای شبکه برآوه fcc با او اتم در هر چهاره می‌باشد. این اتمها در امتداد قطر اصلی و به فاصله یک چهارم قطر اصلی از یکدیگر قرار دارند.

مطالعه و بررسی تراپرد حاملها در بلورها یکی از مهمترین موضوعاتی است که امروزه در صنایع الکترونیک در نظر گرفته می‌شود. با توجه به پیچیدگی های موجود در روش های تجزیی برای بررسی خواص تراپرد الکترونی در بلورها، ضروریست تا با استفاده از شبیه سازی های کامپیوتری، این مواد را در ساخت قطعات الکترونیکی بینهای سازی نمود. بررسی تئوری انتقال اغلب بر اساس حل عددی معادله انتقال بولتزمن پایه ریزی شده است، یکی از روش‌های هم ارز حل معادله انتقال بولتزمن استفاده از روش نیمه کلاسیک مونت کارلو است، در این روش جزئیات زیادی از دینامیک میکروسکوپیک حاملها به دست می‌آید [۳].

در این مقاله، جزئیاتی از پارامترهای باند رسالت ماده شبیه سازی شده بیان می‌شود، روش شبیه سازی مونت کارلو و تحرک پذیری الکترونی در گستره دمایی ۱۰۰ تا ۵۰۰ کلوین گزارش داده شده است و همچنین در این بررسی مشخصات تراپرد الکترونی در بلور GaP با بلور GaAs که بلوری کاملاً شناخته شده است، مقایسه گردیده است. نتایج بدست امده در این مقاله با نتایج تجربی در توافق بسیار خوبی است [۳].

شبیه سازی مونت کارلو



روش مونت کارلو اغلب در شبیه سازی قطعات نیمه هادی به کار برده می شود، در این روش نیمه کلاسیک حاملها همچون ذرات کلاسیکی در نظر گرفته می شوند که تحت تأثیر فرایندهای مختلف پراکنده قرار می گیرند، این فرایندها باعث گذار الکترونها به حالت های مختلف می شوند که بر اساس روابط کوانتوم مکانیک مورد محاسبه قرار می گیرد [۴]. مکانیزم پراکنده در نظر گرفته شده در این شبیه سازی ناشی شده از پراکنده فونون اکوستیکی، فونون پیتیکی غیر قطبی و پراکنده ناخالصی بونیزه شده می باشد [۳]. دانستن جزئیات نوار انرژی بلور و فرایندهای پراکنده به منظور مطالعه دقیق خواص تراپری ضروری است، همچنین خصوصیات کلی نوار انرژی تا حدی تابع ساختار بلوری نیمه رسانا است، ساختار نوار انرژی نیمه رساناها بیان ساختار بلوری زینک-بلند نزدیکی مرکز منطقه اول بریلوون با جزئیات کامل توسط Kane مورد مطالعه قرار گرفته شد، طبق نظریه او تنها برهم کنش بالاترین نوار ظرفیت (Γ^7) و پایین ترین نوار رسانش (Γ^4) در نظر گرفته می شود و از تأثیر نوارهای بالاتر صرف نظر می گردد. برهم کنش Γ^7 - Γ^4 موجب می شود که نوار رسانش از حالت سهموی کامل خارج شده و اصطلاحاً نوارها غیر سهموی خواهیم داشت [۵].

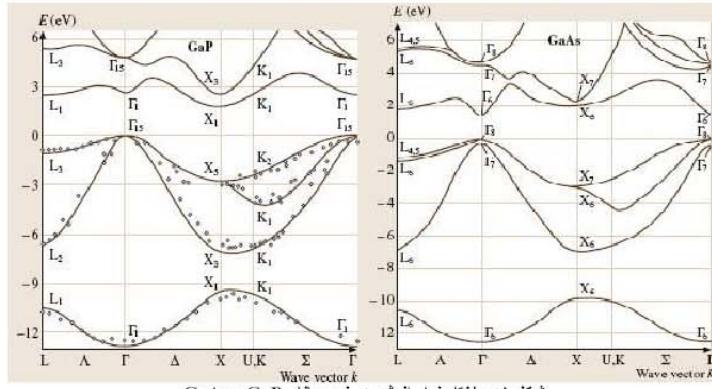
در این مقاله یک مدل سه دره ای از باند رسانش ماده GaP در نظر گرفته شده است. به منظور محاسبه سرعت سوق حاملها در میدان های الکتریکی بزرگ کافی است که دره های انرژی واقع در باند رسانش را در این شبیه سازی مورد بررسی قرار داد. در این بررسی، ۴ دره هم ارز X، یک دره هم ارز L ماده GaP به عنوان مینیمموم های باند رسانش در محاسباتمان وارد می شوند. همانگونه که از شکل ۱ ملاحظه می شود، GaP دارای گافت انرژی غیرمستقیم است و GaAs گافت نواری مستقیمی دارد، در ایندا ده هزار شبیه ذره در فضای اندازه حرکت در ۴ دره هم ارز X، GaP و در ۲ دره هم ارز X، GaAs در دره مرکزی Γ واقع شده اند. همچنین در این مدل اثرات غیر سهموی بودن دره های انرژی با معادله زیر اصلاح شده است.

$$E(k)[1 + \alpha_i E(k)] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1)$$

که در رابطه بالا m^* جرم موثر الکترونهاست و α_i ضریب غیر سهموی دره i است که از طریق مدل Kane داده شده است [۶]

$$\alpha_i = \frac{1}{E_g} \left[1 - \frac{2m^*}{m_0} \right] \left[1 - \frac{E_g \Delta}{3(E_g + \Delta)(E_g + 2\Delta/3)} \right] \quad (2)$$

در آن E_g انرژی بند گپ و Δ جفت شدگی امپین-مدار است.



شکل ۱: ساختار نوار انرژی در نیمرسانی GaAs و GaP

بارامترهای الکتریکی و ساختار نواری ماده GaP و GaAs که در این شبیه سازی مورد استفاده قرار گرفته در جداول ۱ و ۲ و ۳ آورده شده است.



جدول ۱ : پارامتر های فیزیکی مربوط به GaP و GaAs در دمای اتاق.

پارامتر	GaAs	GaP
چگالی cm ⁻³	۵۳۷۰	۴۱۳۸
ثابت دی الکترونیک در فرکانس های بالا ε _۰	۱۰.۹	۹.۱۱
ثابت دی الکترونیک در فرکانس های پایین ε	۱۲.۹	۱۱.۱
انرژی فونون های اپتیکی eV	۰.۰۳۵	۰.۰۵۱
پتانسیل تغییر شکل اکوستیکی eV	۷	۳.۱
سرعت صوت ms ^{-۱}	۵۲۲۰	۵۸۵۰

جدول ۲ : مشخصات نواری استفاده شده در شبیه سازی مونت کارلو برای ساختار زینک بند GaP

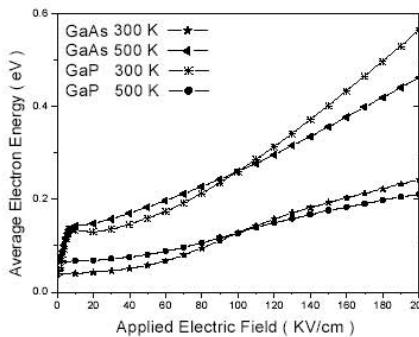
نام دره	X	Γ	L
تعداد دره ها	۲	۱	۳
اجرم موثر الکترون m [*] /m _۰	۰.۱۷	۰.۳۰	۰.۶۴
گاف انرژی eV	2.0	۲.۲۴	2.76

جدول ۳ : مشخصات نواری استفاده شده در شبیه سازی مونت کارلو برای ساختار زینک بند GaAs

نام دره	X	Γ	L
تعداد دره ها	۴	۱	۳
اجرم موثر الکترون m [*] /m _۰	۰.۵۸	۰.۰۶۳	۰.۲۲
گاف انرژی eV	۱.۹۴۲	۱.۴۲	۱.۷۵

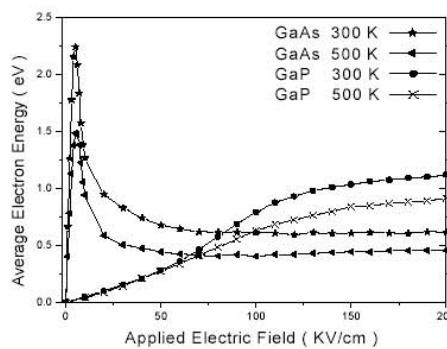
نتایج شبیه سازی مونت کارلو

شکل ۲ نمایشی از انرژی میانگین حاملها بر حسب میدان الکتریکی است. همانطور که از این شکل مشاهده می شود در میدان های الکتریکی اعمالی ضعف به سبب اینکه مکانیزم پراکنده فونون اکوستیکی یک مکانیزم غالیبی است در نتیجه با توجه به طبیعت نیمه الاستیک این مکانیزم، انرژی میانگین حاملها افزایش می یابد. با افزایش قدرت میدان الکتریکی مکانیزم پراکنده فونون اپتیکی اثر غالیتری را ایفا می کند و بر مکانیزم پراکنده فونون اکوستیکی غالب می گردد، به دلیل اینکه در فرایند پراکنده فونون اپتیکی انرژی حالت اولیه و نهایی الکترونها برایر نمی باشد و در اثر پراکنده حاملها از طریق فونون اندازه حرکتشان تغییر می نمایند، بنابراین تغییراتی را در نمودار انرژی بر حسب میدان الکتریکی اعمالی خواهیم داشت. همانگونه که از این شکل ملاحظه می شود، در ماده GaAs الکترونها در میدان های اعمالی پایین تری نسبت به GaP برای پراکنده بودند و در اثر انرژی را بدست می اورند و زود تر به دره های بالاتر انرژی پراکنده می شوند. پراکنده الکترونها در میدان های پایین تر در GaAs نسبت به GaP را می توان ناشی از جرم موثر الکترونی بسیار کمتر در دره ای که الکترونها در ابتدا در آن قرار دارند نسبت به دره X در GaP دانست. بنابراین الکترونها در GaAs در میدان اعمالی پایینتر در حدود 4Kv/cm از میدان کمی نمایند. به دلیل اینکه در شدت میدانهای قوی با افزایش دما میزان پراکنده حاملها افزایش می یابد و با در نظر گرفتن این نکته که با افزایش انرژی الکtron پراکنده کاهش می یابد در نتیجه با کاهش دما انرژی میانگین حاملها را افزایش می دهد. در شدت میدانهای ضعیف حاملها نمی توانند انرژی لازم را برای پراکنده شون به دره های بالاتر انرژی از میدان کسب کنند در نتیجه آن با افزایش دما نرخ پراکنده درون دره ای از جمله پراکنده فونون اکوستیکی افزایش می یابد و از آنجاییکه با افزایش نرخ پراکنده فونون اکوستیکی انرژی الکtron افزایش می یابد پس با افزایش دما انرژی میانگین حاملها افزایش می یابد.



شکل ۲: نمودار تغییرات انرژی متوسط الکترون با میدان الکتریکی برای GaAs و GaP در دو دمای ۳۰۰ و ۵۰۰ کلوین

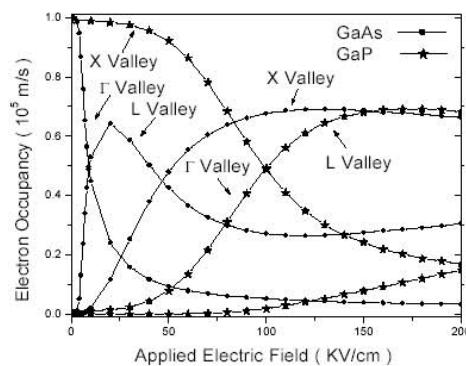
در شکل ۳ نمودار سرعت سوق الکترونها بر حسب میدان الکتریکی اعمالی نمایش داده شده است. همانگونه که از این شکل ملاحظه می شود، در نیمه رسانای GaAs پیکی در نمودار سرعت-میدان وجود دارد در حالیکه در نیمه رسانای GaP وجود ندارد. به طور کلی سرعت سوق الکترونی با افزایش میدان الکتریکی افزایش می یابد تا به مقدار استانه ایش برسد و قطبی میدان الکتریکی از این مقدار استانه ایش می یابد اثر رساندنگی دیفرانسیلی منفی (NDC) باعث می شود که سرعت الکترون کاهش یابد اثر NDC ناشی از انتقال الکترون از دره مرکزی Γ که جرم موثر کوچک دارند به دره های بالاتر انرژی که جرم موثر بزرگتر دارند، می باشد. اثر دما بر روی نمودار سرعت - میدان باعث می شود که اثر NDC زوینتر پدیدار شود. با افزایش میدان الکتریکی، حاملها در باند رسانش انرژی لازم را برای پراکنده شدن از دره مرکزی Γ با انرژی پایین و تحرک بالا به دره های بالاتر با انرژی بالاتر و تحرک پایین، از میدان کسب می کنند. بنابراین برای میدان های الکتریکی بالاتر از میدان استانه مقدار سرعت الکترون سریعاً کاهش می یابد و به یک مقدار اشباع شده ای می رسند. اثر NDC برای نیمه رسانای GaP برقرار نمی باشد با توجه به ساختار بلوری آن که، گاف نواری این ماده غیر مستقیم بوده و موقعیت اولیه الکترونها در دره X می باشد و با توجه به این نکته که جرم موثر الکترونی در دره X، GaP نسبت به دره Γ ، GaAs بزرگتر می یابد در نتیجه در شدت میدانهای قوی الکترونها قادر به پراکنده شدن به دره های بالاتر انرژی می شوند و به علت اینکه با کاهش دما تحرک افزایش می یابد در نتیجه ان سرعت میانگین حاملها افزایش می یابد.



شکل ۳: نمودار تغییرات سرعت الکترون با میدان الکتریکی برای GaAs و GaP در دو دمای ۳۰۰ و ۵۰۰ کلوین

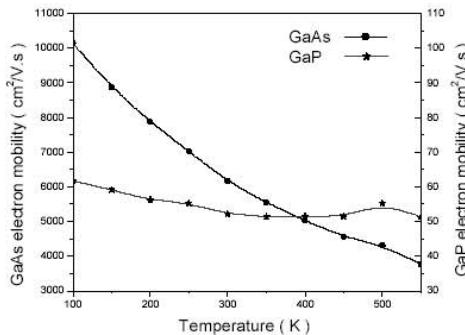


شکل ۴ نمودار درصد اشغال دره های انرژی نسبت به میدان الکتریکی است. این نمودار از طریق نمودار سرعت - میدان توجیه می گردد. در شبکه بلوری GaAs در میدانهای کمتر از میدان استانه الکترونها تمامًا در دره مرکزی Γ واقع اند در میدانهای بالاتر از میدان استانه الکترونها از دره مرکزی Γ به دره بالاتر انرژی L پراکنده می شود و این امر موجب کاهش نمودار سرعت - میدان می شود. با افزایش قدرت میدان الکتریکی حاملها انرژی لازم را برای پراکنده شدن به دره های بالاتر نیز از میدان کسب می کند و از دره L به دره X پراکنده می شود. با توجه به این نکته که جرم موثر الکترونها در دره X بزرگتر از دیگر دره ها می باشند این امر موجب کاهش بیشتر نمودار سرعت - میدان می گردد. در شبکه بلوری GaP در میدانهای کمتر از میدان استانه الکترونها در دره X واقع اند و با افزایش قدرت میدان به دره Γ پراکنده می شود و در شدت میدانهای بسیار قوی به دره L نیز پراکنده می شود. با توجه به این نکته که الکترونها در GaP در شرایط اولیشان در دره مرکزی واقع نمی باشند، در نتیجه آن نمودار سرعت - میدان GaP رفتاری شبیه به GaAs را نخواهد داشت و پیکی در نمودار سرعت آن به وجود نمی آید.



شکل ۴: نمودار درصد اشغال دره ها با میدان الکتریکی برای GaAs و GAP

شکل ۵ نمایشی از تحرک پذیری الکترونها بر حسب دما می باشد. با توجه به شکل تحرک پذیری الکترونی با افزایش دما کاهش می یابد علت این امر آن است که با افزایش دما ارتعاشات گرمایی اتمهای شبکه فزونی یافته و موجب افزایش برهم کنش الکترونها با فونون می گردد، در نتیجه آن تحرک الکترونی کاهش می یابد. در نیمه رسانایی GaP در دماهای بسیار بالا یا اینکه ارتعاشات گرمایی شبکه زیاد می باشد ولی مقدار برهم کنش الکترون - فونون به یک مقدار اشباع شده ای می رسد. تحرک پذیری الکترونی در GaAs تقریباً ۱۰۰ برابر GaP است. این پدیده ناشی از بسیار کمتر بودن جرم موثر الکترونی در GaAs نسبت به GaP است.



شکل ۵: نمودار تحرک پذیری الکترونی بر حسب تغییرات دما در نیمرسانی GaAs و GaP.

نتیجه گیری

نتایج شبهی سازی مونت کارلو بیانگر این نکته می باشد که در شبکه بلوری GaP با وضعیت پائده انرژی آن پیکی در نمودار سرعت آن وجود نخواهد داشت در حالیکه در نیمه رسانی GaAs این پیک وجود دارد و همچنین حاملها در شبکه بلوری GaAs در میدانهای ضعیف انرژی بالایی را از میدان کسب می کنند در حالیکه در این حدود میدان انرژی بسیار پایین تری را خواهند داشت و با افزایش قدرت میدان انرژی آنها افزایش می یابد. همچنین میزان تحرک پذیری الکترونی As-GaAs تقریباً ۱۰۰ برابر GaP است. این نتایج بیانگر این نکته است که ماده As و اصولاً موادی با گلف نواری مستقیم دارای خواص الکترونی بسیار بالایی در شدت میدانهای ضعیف است و در شدت میدانهای قوی ماده GaP با گلف نواری غیر مستقیم دارای بیهوده بالایی می باشد و به همین دلیل استفاده از این ماده را برای ساخت قطعات الکترونیکی و ایتوالکترونیکی بسیار توصیه می شود. همچنین موادی که نسبت به تغییرات دما حساس می باشند مناسب تر است که از این مواد در ساخت قطعاتی که در دماهای متغیر کار می کنند، استفاده نکرد همانطور که نشان داده شد نیمه رسانی GaP حساسیت کمتری نسبت به دما دارند.

مراجع

1. I. Vurgaftman and J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, "Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys", J. Appl. Phys., Vol. 89, No. 11, 1 June 2001
2. W.Martienssen and H.Warlimont (Eds.), "Springer hand book of condensed Matter and Materials Data", Springer, 2005.
3. C.Jacoboni and P.Lugi "The Monte Carlo Method for Semiconductor device Simulation" Springer: Roma, 1989
4. B.K.Ridley, "Quantum processes in semiconductors", Clarendon Press, Oxford 1993.
5. P.Yu. M. Cardona, "Fundamentals of Semiconductors", 3rd ed., Springer, Berlin, Heidelberg, 2001
6. E. O. Kane, J. Phys. Chem. Solids 1, 249 (1957)