مقایسه ترابرد الکترون در حالت پایدار و ناپایدار *GaN*، *InN* و *AlN* با استفاده از شبیه سازی مونت کارلو در حد میدان های الکتریکی بالا

اسلامی مقدم،زهرا[۱] عربشاهی،هادی[۲]

[۱]گروه فیزیک، دانشگاه تربیت معلم سبزوار، سبزوار

[۲]گروه فیزیک ، دانشگاه فردوسی مشهد ، مشهد

چکیده

در این مقاله، فرآیندهای پراکندگی مربوط به ترابرد الکترون در AlN,InN,GaN را با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو با هم مقایسه خواهیم کرد. از مهم‌ترین عوامل محدود کنندهٔ رسانندگی الکتریکی در ترکیبات نیمرسانا، پراکندگی الکترون‌ها هنگام اعمال میدان الکتریکی خارجی است فرآیندهای پراکندگی در نظر گرفته شده در این مقاله عبارتند از پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه، پراکندگی پیزوالکتریک، پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه که در هر مورد با در نظر گرفتن این پتانسیل به عنوان یک پتانسیل اختلال از نظریه اختلال وابسته به زمان، آهنگ پراکندگی محاسبه شده است.

مقدمه

ترکیبات نیمرساناهای AlN,InN,GaN عموماً در ساختار بلوری وورتسایت و زینک بلند متبلور می‌شوند[۱]. رشد ساختار بلوری وورتسایت شایع‌ترین روش رشد این ترکیبات است ولی می‌توان تحت شرایط خاص و روش‌های رشد بلور ویژه، این ترکیبات را در ساختار مکعبی زینک بلند نیز رشد داد. در این مقاله می بینیم که تفاوت پارامترهای فیزیکی در این ترکیبات باعث می شود که آهنگ پراکندگی در آنها با هم متفاوت باشد. در سال‌های اخیر نیترات‌های گروه III (AlN,InN,GaN) بویژه AlN ,GaN به دلیل داشتن گاف نواری بزرگ، از پیشرفت‌های قابل ملاحظه‌ای در توسعهٔ ابزارهای نوری و الکتریکی مانند ترانزیستورهای اثر میدان، دیودهای گسیل نوری و دیودهای لیزری که در محدودهٔ طیفی ماورای بنفش آبی و سبز کار می‌کنند برخوردار بوده است[۲و۳و٤].

جزئیات مدل

اساس این کار پژوهشی مبنی بر استفاده از روش شبیه سازی مونت کارلو است[۵و٦] 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.

مکانیسم‌های پراکندگی را می‌توان به دو نوع اصلی طبقه‌بندی کرد. آنهایی که ناشی از ارتعاشات شبکه هستند و پراکندگی از شبکه یا از فونون نامیده می‌شوند، و پراکندگی از نواقص بلوری مانند حضور ناخالصی‌ها اثر این برهم‌کنش‌ها به صورت اختلال در پتانسیل دوره‌ای اتم‌های شبکه منظور می‌شود. به این ترتیب می‌توان اثر ناکاملی‌های بلور بر حرکت الکترون را به کمک روش اختلال وابسته به زمان بررسی کرد[۷]. در این روش اثر ناکاملی‌های بلور به صورت پتانسیل‌های مختل‌کنندهٔ پتانسیل دوره‌ای اتم‌های بلور درنظر گرفته می‌شود. برهم‌کنش الکترون با این

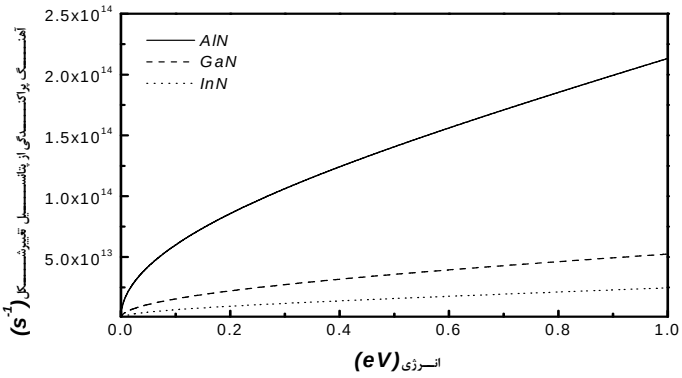
پتانسیل‌ها موجب تغییر حالت الکترون می‌شود. در این مقاله، رفتار آهنگ پراکندگی را بـه عنـوان تـابعی از انـرژی در ساختار وورتسایت AlN,InN,GaN بررسی خواهیم نمود. پارامترهای فیزیکی که در محاسبات آهنگ پراکندگی مورد نیاز است در جدول ۱ گردآوری شده است.

جدول۱ : پارامترهای فیزیکی *GaN* ، *InN* و *AlN* که در محاسبات آهنگ پراکندگی مورد نیاز است [۸].

پارامترهای فیزیکی	*GaN*	*InN*	*AlN*
ثابت دی الکتریک فرکانس پایین ε_0	۹/۵	۱۵/٤	۸/۵
ثابت دی الکتریک فرکانس بالا ε_∞	۵/۳۵	۸/٤	٤/۷۷
انرژی فونون‌های اپتیکی (eV)	۰/۰۹۹۵	۰/۰۸۹	۹/۵
ثابت پیزوالکتریک (C/m^2)	۰/۳۷۵	۰/۰٦۵۲	۰/۹۲
ثابت پتانسیل تغییر شکل (eV)	۸/۳	۷/۱	۹/۵
چگالی $(kg\,m^{-3})$	٦۱۵۰	٦۱۸۰	۳۲۲۰
سرعت صوت (ms^{-1})	٤۳۳۰	٦۲٤۰	۹۰٦۰

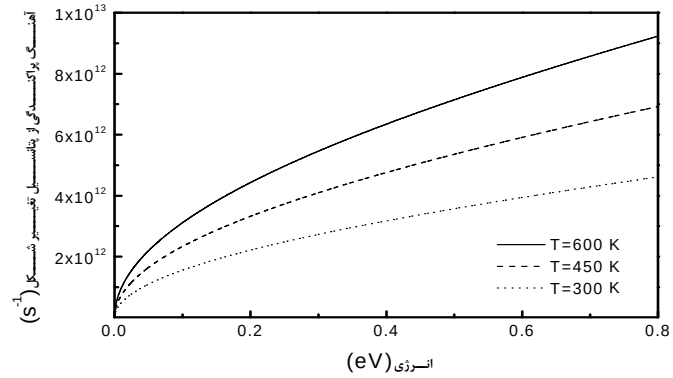
نتایج شبیه سازی

شکل۱ آهنگ پراکندگی از فونون‌های آکوستیکی پتانسیل تغییر شکل شبکه را بر حسب تابعی از انرژی الکترون برای سه نیمرسانای AlN,InN,GaN در دمای اتاق نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در هر سه مورد با افزایش انرژی الکترون، آهنگ پراکندگی افزایش می‌یابد، در انرژی $۰/۸ev$ آهنگ پراکندگی در نیمرساناهای AlN,InN,GaN به ترتیب به حدود s^{-1} $۱۰^{۱۲}$,$۱۰^{۱۳}$,$۱۰^{۱٤}$ می‌رسد. همان‌طور که از شکل ملاحظه می‌شود زیاد بودن این آهنگ پراکندگی در AlN نسبت به GaN و InN به خاطر زیاد بودن پتانسیل تغییر شکل شبکه و جرم مؤثر الکترون در AlN نسبت به دو نیمرسانای دیگر است. چون آهنگ پراکندگی پتانسیل تغییر شکل شبکه با پتانسیل تغییر شکل و جرم مؤثر رابطه مستقیم دارد.



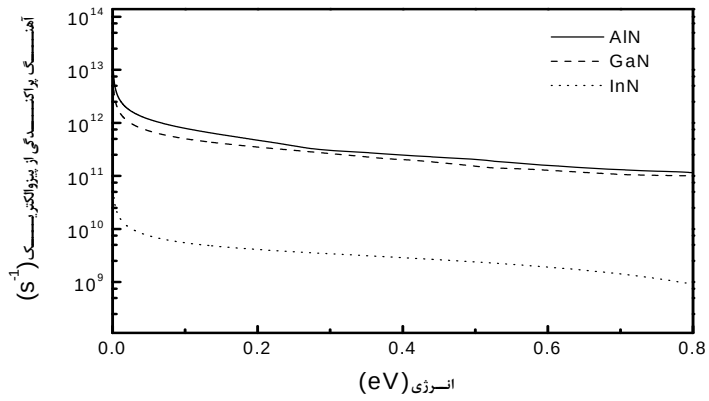
شکل ۱: آهنگ پراکندگی الکترون‌ها از پتانسیل تغییر شکل شبکه بر حسب انرژی برای سه نیمرسانای AlN,InN,GaN در دمای اتاق.

بررسی آهنگ پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه در دماهای مختلف نشان می‌دهد که در دماهای بالا اثر این پراکندگی از اهمیت بیشتری برخوردار است و نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد چنان‌که در شکل ۲ برای نمونه در ترکیب GaN نشان داده شده است.



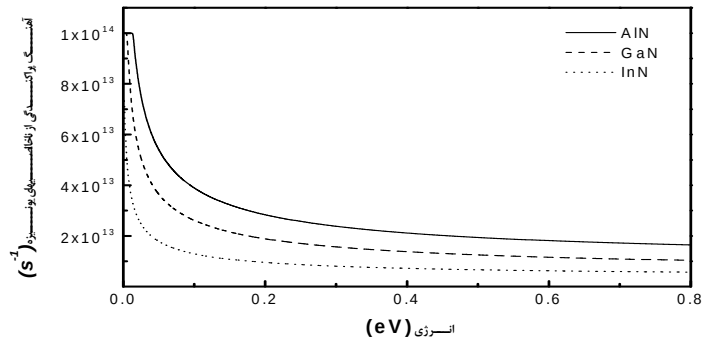
شکل ۲ :تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون از پتانسیل تغییر شبکه شکل برحسب انرژی در دماهای مختلف در نیمرسانای GaN.

شکل ۳ آهنگ پراکندگی از فونون‌های آکوستیکی پیزوالکتریک را بر حسب تابعی از انرژی الکترون برای سه نیمرسانای AlN,InN,GaN در دمای اتاق نشان می‌دهد. همان‌طور که ملاحظه می‌شود این آهنگ پراکندگی در AlN قوی‌تر از InN , GaN است که دلیل آن جرم مؤثر الکترونی و ثابت پیزوالکتریک بزرگتر در این نیمرسانا نسبت به InN, GaN است، چون آهنگ پراکندگی پیزوالکتریک با جرم مؤثر و ثابت پیزوالکتریک رابطه مستقیم دارد. با افزایش انرژی الکترون، آهنگ پراکندگی در هر سه نیمرسانا کاهش می‌یابد. لذا می‌توان نتیجه گرفت که پراکندگی پیزوالکتریک فقط در حد انرژی‌های الکترونی ضعیف دارای اهمیت است و در حد میدان‌های الکتریکی قوی که در آن انرژی الکترون‌ها بالا است اثر قابل توجهی در پراکندگی الکترون‌ها ندارد، لذا می‌توان از آن صرف‌نظر کرد.



شکل ۳ : آهنگ پراکندگی الکترون‌ها ناشی از اثر پیزوالکتریک بر حسب انرژی برای سه نیمرسانای AlN,InN,GaNدر دمای اتاق.

آهنگ پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه برحسب تابعی از انرژی الکترون، برای سه نیمرسانایAlN,InN,GaN در دمای اتاق در شکل ٤ نشان داده شده است. چنان‌که مشاهده می‌شود در هر سه نیمرسانا با افزایش انرژی الکترون، آهنگ پراکندگی کاهش می‌یابد. در نیمرسانای InN در انرژی‌های بسیار پایین از مقدار حدود $۷\times۱۰^{۱۳}s^{-۱}$ به حدود $۰/۵\times۱۰^{۱۲}s^{-۱}$ در انرژی $۰/۸eV$ می‌رسد. این کاهش در نیمرسانای GaN کندتر است و در انرژی‌های بسیار پایین از حدود $۱۰^{۱۴}s^{-۱}$ به حدود $۱۰^{۱۳}s^{-۱}$ در انرژی ۰/۸ eV می‌رسد و در نیمرسانای AlN در انرژی‌های بسیار پایین از حدود $۲\times۱۰^{۱۴}s^{-۱}$ به حدود $۳\times۱۰^{۱۳}s^{-۱}$ در انرژی ۰/۸ eV می‌رسد. پراکندگی الکترون‌ها از ناخالصی‌های یونیزه تنها در انرژی‌های پایین فرآیند مهم و تأثیرگذاری در ترابرد الکترون می‌باشد و با افزایش انرژی الکترون، اثر آن به سرعت کاهش می‌یابد. افزایش آهنگ پراکندگی از اتم‌های ناخالصی یونیزه در نیمرسانای AlN نسبت به InN,GaN در تمامی مقادیر انرژی الکترونی بعلت جرم مؤثر بیشتر الکترون در AlN است. افزایش جرم مؤثر باعث کاهش انرژی جنبشی الکترون در بلور می‌شود، در نتیجه الکترون مدت زمان بیشتری تحت تأثیر پتانسیل کولنی حاصل از اتم‌های ناخالصی قرار گرفته و در نتیجه آهنگ پراکندگی از مراکز ناخالصی یونیزه زیاد می‌شود.پراکندگی از ناخالصی های یونیزه توسط پتانسیل پوششی کولمب از نوع *بروکس- هرینگ*در نظر گرفته شده است[۱۰].



شکل ٤: آهنگ پراکندگی در حضور اتم‌های ناخالصی با چگالی $۱۰^{۲۲}m^{-۳}$ بر حسب تابعی از انرژی در سه نیمرسانای *GaN* ، *InN* و *AlN*

نتیجه گیری

پراکندگی ناشی از فونون‌های اپتیکی قطبی مهم‌ترین مکانیسم پراکندگی در دمای اتـاق در نیمرسـاناهای گـروه III-V مانند GaN و یا ترکیبات دیگر نظیر AlN,InN است. زیرا در این گروه ترکیبات نیمرسانا انـرژی فونـون‌هـا بالاسـت [۱۰] وهمانند سایر موادIII-V پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه در دماهای بالا مهـم‌تـرین مکانیـسم پراکنـدگی است.

مرجع‌ها

1. W. L. Lambrecht, B. Segall, "*Band structure of the group – III nitride*", Academic press (1998).
2. Nakamara,s;"*The blue Diod-GaN based hight emitters and lasers*";Springer,Berlin.(1997).
3. M Iwaya,S terao, T Sano, T ukai,R Nakamura, S Kamiama, H Amano and I Akasaki, *J. Crystal Growth* ***237-239*** *(2002) 951*.
4. S Nakamura and G Fasol, The Blue Laser Diode, Springer-Verlag,Berlin (1997).
5. C. Moglestue, Monte Carlo Simulation of semiconductor Device, **1993**,Chapman and Hall
6. C.Jacoboni and P.Lugli,*The Monte Carlo for semiconductor and Device Simulation* **,1989**,springer-Verlag
7. Charles M. wolf; Nick Holonak, Jr.; Gregory E. Stillman "*Physical Properties of Semiconductors*" Prentice Hall, New Jeresey (1989).
8. S. J. Pearton, J. C. Zolper, R. J. shul and F. Ren, *J. Appl. Phys*. **86**, (1999).
9. H. Morkoc, "*Nitride Semiconductor and Devices*", Springer-Verlag (1999).