بررسی خواص ترابرد الکترونها در نیمه رسانای In N برای طراحی و بهینه سازی قطعات اپتوالکترونیکی در حد طول موج بلند

خلوتی ، محمد رضا[۱] ؛ مخلص گرامی، عادله[۲] ؛ عربشاهی، هادی[۳] ؛ ایزدی فرد ، مرتضی[۱]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه شاهرود،ایران

[۲] گروه فیزیک دانشگاه گیلان،خیابان نامجو،رشت،ایران

[۳] گروه فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد،ایران

چکیده

با استفاده از شبیه سازی مونت کارلو، مدلی سه دره ای برای بررسی خواص ترابرد الکترونها در نیمرسانای InN و در حضور میدان های الکتریکی شدید در حالت پایدار و ناپایدار مورد بررسی قرار گرفته است. عوامل مختلف پراکندگی الکترونها از فنون ها و اتم های ناخالصی در این شبیه سازی در نظر گرفته شده است. مطالعات ما نشان می دهد که این ماده دارای سرعت سوق الکترونی بالایی است و با تغییر غلظت نا خالصی ها، تغییرات ناچیزی در خواص ترابردی این ماده ایجاد می شود. همچنین سرعت سوق دراین ماده با تغییرات دما به کندی کاهش می یابد، از این رو انتظار می رود که این ماده قابلیت بالایی در ساخت قطعات اپتیکی از خود نشان دهد. همچنین با استفاده از نمودارهای زمان ترابرد و سرعت سوق الکترونها بر حسب ابعاد قطعه، می توان استفاده از این ماده در ساخت قطعات اپتیکی را بهینه سازی نمود.

A study of electron transport properties in InN for optoelectronic device optimization in low wave lenghts

Khalvati, Mohammad Reza [1], Mokhles gerami,Adeleh[2], Arabshahi Hadi [3],Izadi Fard,Morteza[1]

[1] *Physics Department, Sharood University of Technology , Iran*
[2] *Department of Physics, University of guilan, Rasht*
[3] *Physics Department, Ferdowsi Universty, Mashhad , Iran*

Abstract

We present a comprehensive study of the transport dynamics of electrons in the binary compound of InN. Calculations are made using a nonparabolic effective mass energy band model, Monte Carlo simulation that includes all of the major scattering mechanisms. The band parameters used in the simulation are extracted from optimized pseudopotential band calculations to ensure excellent agreement with experimental information and ab initio band models. The steady-state and transient velocity field curves are calculated up to 500 K. High electron drift velocity of InN shows its potential for optoelectronic device fabrication. The results are in fair agreement with other recent calculations.

PACS No. 72

مقدمه

در سال های اخیر نیمرسانای InN به دلیل داشتن گاف انرژی مستقیم، کاربرد فراوانی در ساخت قطعات اپتو الکترونیکی و زیر لایه های لازم در حد طول موج های بلند داشته است. این ماده در ساختار کریستالی شش گوشی و نوع ساختار ورتسایت رشد می یابد[۱] و مطالعات ساختار نواری نشان می دهد که در دو نوار اول انرژی این ماده، پایین ترین دره ها در موقعیت های Γ و Γ_3 و A قرار دارند. در این پژوهش، نتایج شبیه سازی مونت کارلو از خواص ترابرد الکترونها در حجم این ماده و در دمای اتاق بررسی شده است. اثرات در نظر گرفتن دره های بالاتر انرژی (Γ_3 و A) و تغییرات منحنی سرعت سوق الکترونها با دما و چگالی

ناخالصی های یونیزه در میدان های الکتریکی اعمالی، محاسبه شده است. در بخش های بعدی ابتدا روش شبیه سازی به کار برده شده توضیح داده می شود و در پایان نتایج بدست آمده بررسی می شود.

روش شبیه سازی

با استفاده از روش آنسامبلی مونت کارلو مشخصه ترابرد الکترونها در نیمرسانای InN مورد بررسی قرار گرفته شده است. در این مدل به کار برده شده، سه دره از دو نوار اول رسانش در نظر گرفته شده است. در ابتدا ده هزار شبه ذره در فضای اندازه حرکت، دره مرکزی (Γ) را اشغال نموده اند. دره های بعدی در موقعیت های Γ_3 و A قرار گرفته اند. همچنین در این مدل اثر غیر سهموی بودن دره های انرژی با معادله زیر اصلاح شده است.

$$E(k)[1+a_i E(k)] = \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*} \qquad (1)$$

که در رابطه بالا m^* جرم موثر الکترونهاست و α_i ضریب غیر سهموی دره i ام است[۲]. پارامترهای مهم بکار برده شده در این مدل در جداول ۱ و ۲ گردآوری شده است. در این شبیه سازی پراکندگی الکترونها از عوامل ناخالصی های یونیزه و نیز پراکندگی های فونون اپتیکی و صوتی درون دره ای و بین دره ای در نظر گرفته شده است[۳].

جدول ۱ : پارامتر های فیزیکی مربوط به InN در دمای اتاق

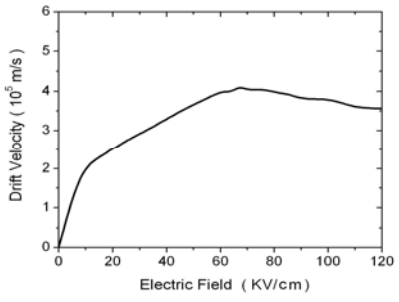
چگالی cm^{-3}	6810
ثابت دی الکترونیک در فرکانس های بالا ε_∞	۱۵,۳
ثابت دی الکترونیک در فرکانس های پایین ε_0	۸,٤
انرژی فونون های اپتیکی meV	۷۳
پتانسیل تغییر شکل آکوستیکی eV	۷,۱
سرعت صوت ms^{-1}	۵۱۰۰

جدول ۲ : مشخصات نواری استفاده شده در شبیه سازی مونتو کارلو برای ساختار ورتسایت In N.

نام دره	Γ	Γ_3	A
تعداد دره ها	۱	۱	۱
جرم موثر الکترون m^*/m_0	۰,۱۱	۱,۰	۱,۰
گاف انرژی eV	۱,۹۵	۲,٤۵	٤,۵۵

نتایج شبیه سازی

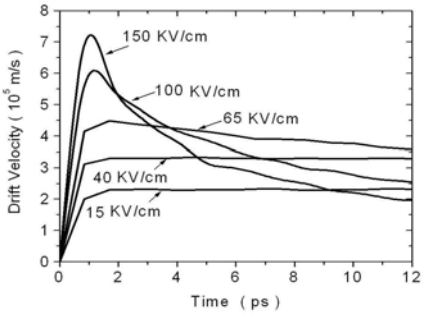
در این بخش نتایج شبیه سازی مونت کارلو در نیمرسانای InN و در حضور میدان های الکتریکی شدید، نشان داده می شود. نتایج بدست آمده از این شبیه سازی توانایی این ماده را در ساخت قطعات مختلف اپتیکی نشان خواهد داد. شکل ۱ مشخصه سرعت سوق الکترونی را در دمای اتاق و در حضور چگالی ناخالصی هایی از مرتبه 10^{17} cm^{-3} در حالت پایدار نشان می دهد. همانگونه که از این شکل مشاهده می شود، سرعت سوق الکترونی با افزایش میدان الکتریکی افزایش می یابد و در میدان آستانه ای از مرتبه ٦۵ KV/cm پیکی از مرتبه $٤,۲ \times 10^5$ m/s می زند. رسانندگی دیفرانسیلی منفی NDC ناشی از انتقال الکترونها از دره مرکزی Γ، که در آن الکترونها جرم موثر کوچکی دارند به دره های بالاتر انرژی (Γ_3 و A) که در آن الکترونها جرم موثر بزرگتری دارند، می باشد. با افزایش میدان الکتریکی اعمالی، الکترونها می توانند انرژی مورد نیاز برای پراکندگی به دره های بالاتر را از میدان الکتریکی اعمالی کسب نمایند. با اشغال دره های بالاتر انرژی اثر NDC به وجود می آید و بنابراین سرعت سوق الکترونی کاهش می یابد[۵-٤].



شکل ۱: سرعت سوق حالت پایدار الکترونها بر حسب میدان الکتریکی اعمالی در نیمرسانای InN در دمای اتاق.

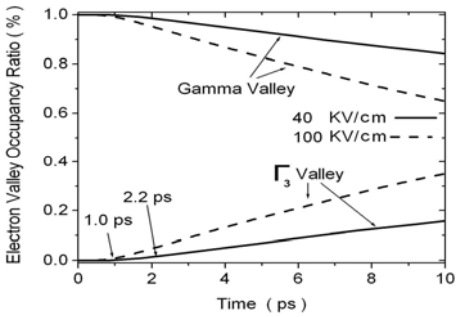
شکل ۲ پاسخ زمانی سرعت سوق الکترونی را در میدان های اعمالی متفاوت نشان می دهد. همانگونه که از این شکل ملاحظه می شود در میدان های کمتر از میدان آستانه، سرعت سوق الکترونی سریعا به پایداری می رسد. در میدان های ۱۰۰KV/cm و ۱۵۰KV/cm به ترتیب پیکی از مرتبه $٦,۰ \times 10^5$ m/s و

$7,4\times 10^{5}$ m/s می زند. ملاحظه می شود که با زیاد شدن میدان الکتریکی اعمالی، پیک سرعت سوق به مقادیر بالاتری می رسد و به سمت زمان های کمتر میل می نماید. این رفتار سرعت سوق الکترونها، ناشی از اشغال کامل دره مرکزی توسط الکترون ها در زمان های کمتر از ۱ پیکو ثانیه است. بنابراین در این مدت، احتمال پراکندگی بین دره ای الکترونها کمتر است و در نتیجه عوامل کاهنده سرعت الکترونها کمتر می شود. با سپری شدن زمان، الکترونها انرژی لازم برای پراکنده شدن به دره های بالاتر انرژی را بدست می آورند. از آنجایی که جرم موثر الکترونی در دره های بالاتر، بیشتر از دره مرکزی است احتمال پراکندگی الکترونها افزایش می یابد و در نتیجه سرعت سوق الکترونها به تدریج کم می شود. سرانجام با گذشت زمان های بیشتر، آهنگ های پراکندگی الکترونها به تعادل می رسند و سرعت سوق الکترونی به حالت پایدار می رسد.



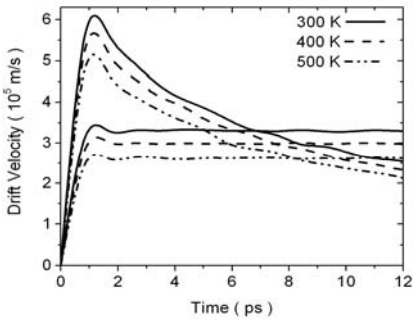
شکل ۲: پاسخ زمانی سرعت سوق حالت ناپایدار الکترونها در نیمرسانای InN در دمای اتاق.

شکل ۳ درصد اشغال الکترونی در دو دره Γ و Γ_3 را بر حسب زمان نشان می دهد. همانگونه که از این شکل ملاحظه می شود با افزایش میدان الکتریکی اعمالی الکترونها در زمان های کمتری به در های بالاتر انرژی پراکنده می شوند. اشغال دره های بالاتر انرژی توسط الکترونها در میدان های بالاتر ناشی از افزایش پراکندگی الکترونها توسط فونون های اپتیکی بین دره ای، با افزایش میدان الکتریکی اعمالی است.



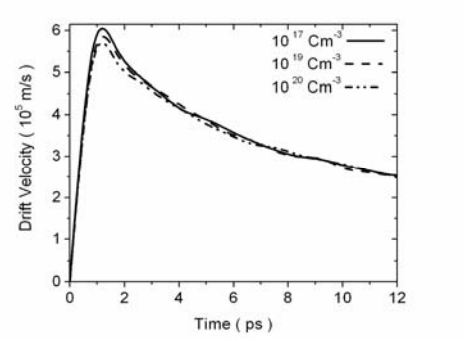
شکل ۳: درصد اشغال دو دره Γ و Γ_3 توسط الکترون ها بر حسب زمان در نیمرسانای InN در دمای اتاق.

شکل ٤ تغییرات پاسخ زمانی سرعت سوق الکترونها را در سه دمای متفاوت ۳۰۰ و ٤۰۰ و ۵۰۰ کلوین و برای دو میدان اعمالی ٤۰KV/cm و ۱۰۰KV/cm نشان می دهد. چنانچه از این شکل ملاحظه می شود، با افزایش دما پیک سرعت سوق الکترونی کاهش می یابد و به سمت زمان های بیشتر میل می نماید. این رفتار منحنی سرعت سوق ناشی از زیاد شدن احتمال پراکندگی با افزایش دما است.



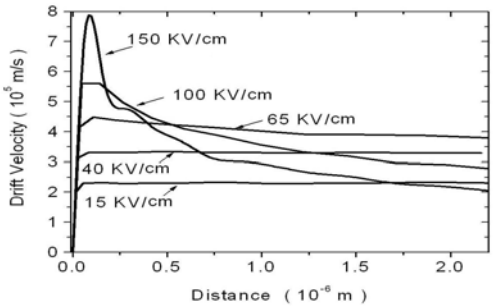
شکل ٤: تغییرات پاسخ زمانی سرعت سوق الکترونی با دما در نیمرسانای InN

شکل ۵ تغییرات پاسخ زمانی الکترون ها را برای سه چگالی ناخالصی 10^{17} و 10^{19} و10^{20} و در میدان الکتریکی اعمالی ۱۰۰KV/cm نشان می دهد. همانگونه که از این شکل ملاحظه می شود، با افزایش چگالی ناخالصی ها پیک سرعت به کندی کاهش می یابد، این پدیده کاهش ناشی از این نکته است که با افزایش تعداد مراکز ناخالصی یونیزه شده، الکترونها دفعات بیشتری تحت تاثیر پتانسیل کولنی قرار می گیرند، در نتیجه آهنگ پراکندگی ناشی از ناخالصی یونیزه شده افزایش می یابد و موجب کاهش سرعت حاملها می گردد [۶].



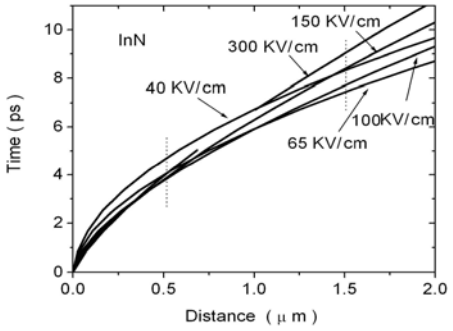
شکل ۵: تغییرات پاسخ زمانی سرعت سوق الکترونی بر حسب تغییرات چگـالی ناخالصی ها در نیمرسانای InN در دمای اتاق.

در شکل ٦ سرعت سوق الکترونها بر حسب ابعاد قطعه رسم شده است. سرعت سوق برای این ماده در میدان هایی کمتر از میدان آستانه، در ابعادی به طولμm ۰,۱ به حالت پایدار می رسد ولی در میدان های بالاتر از میدان آستانه در μm ۱,۵ به حالت پایدار می رسد. بنابراین در ساختن قطعاتی با ابعادی بزرگتر از این مقادیر، لحاظ کردن سرعت سوق حالت پایدار کافی است ولی در ساخت قطعاتی که می خواهیم ابعادی کمتر از این مقادیر داشته باشند، باید حالت ناپایدار سرعت سوق الکترونها را لحاظ نماییم



شکل ٦: سرعت سوق الکترونی بر حسب ابعاد قطعه در نیمرسانای InN در دمای اتاق.

در شکل ۷ زمان ترابرد الکترونها بر حسب ابعاد قطعه ترسیم شده است. با استفاده از این نمودار می توانیم عملکرد قطعه را بهینه سازی کنیم و میدان الکتریکی لازم را برای داشتن کمترین زمان ترابرد الکترونی در قطعه ای با طول مفروض تعیین نماییم. به عنوان مثال برای طول گیت μm ۱,۵ کمترین زمان ترابرد الکترونها، مربوط به میدان KV/cm ٦٥ می باشد ولی در قطعاتی با طول μm ۰,۵ بهترین میدان الکتریکی اعمالی KV/cm ۱۰۰ می باشد.



شکل ۷: زمان ترابرد الکترون ها بر حسب ابعاد قطعه در نیمرسانای InN در دمای اتاق.

نتیجه گیری

در این کار پژوهشی، خواص ترابرد الکترونی در نیمرسانای InN به وسیله مدلی سه دره ای و با استفاده از تکنیک شبیه سازی مونت کارلو، مورد بررسی قرار گرفته است. مطالعات ما نشان می دهد که این ماده میدان آستانه ای از مرتبه KV/cm ٦٥ دارد. همچنین سرعت سوق این ماده در میدان هایی بالاتر از میدان آستانه، در زمان های طولانی تری به حالت پایدار می رسند و بنابراین در ساخت قطعاتی که در این میدان های اعمالی کار می کنند، باید ابعاد قطعه را با استفاده از نمودار سرعت سوق الکترونی بر حسب ابعاد قطعه و همچنین یافتن مینیم های نمودار زمان ترابرد الکترونها بر حسب ابعاد قطعه، تعیین نمود. همچنین مشخصه سرعت سوق در این ماده به تغیرات دما حساس بوده و از این رو استفاده از این ماده در ساخت وسایل اپتیکی در محیط هایی که دما، تغییرات زیادی دارد، توصیه نمی شود.

مرجع‌ها

[1] Martienssen, W., Warlimont, H., "*Springer Handbook of Condensed Matter and Materials Data*" **Springer,** berlin. 2005

[2] C. Jacobani and P.Lugli, "*The monte carlo method for semiconductor and device simulation*" **Springer-Village** , 1989

[3] H. Arabshahi, M. R. Khalvati and M. Rezaee rokn-abadi, "*Comparison of steady-state and transient electron transport in InAs, InP and GaAs*" , **Modern Physics Letters B**, Vol. 22, No. 17 (2008) 1695-1702

[4] K. Tomizawa, "*Numerical Simulation of Submicron Semiconductor devices"*, Artech House, 1993

[5] C. Moglest, "*Monte Carlo simulation of semiconductor devices* ",**Chapman and Hall** , 1993.

[6] Arabshahi, H., Khalvati, M. R., Rezaee Rokn Abadi, M., " *Temperature and Doping Dependencies of Electron Mobility in InAs,AlAs and AlGaAs at High Electric Field Application*" **Brazilian Journal of Physics**, 2008 , 38, 3A