

## خواص تراپرد الکترونهای داغ در حالت پایدار در نیمرسانای ZnO

گل افروز شهری، سپیده<sup>۱</sup>؛ عربشاهی، هادی<sup>۲</sup>

گروه فیزیک، دانشگاه تربیت معلم، سبزوار

گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

### چکیده:

با استفاده از شبیه‌سازی آنسامبلی مونت‌کارلو، سرعت سوق الکترونها در ماده نیمرسانای ZnO در مقایسه با  $GaN$  محاسبه شده است. این شبیه‌سازی بر اساس مدل سه درهای بوده و اثرات غیرسهمی بودن نوارها نیز منظر را شده است. هم‌چنین در این شبیه‌سازی عوامل مختلف و پراکنده‌گی الکترون‌ها از فونون‌ها و اتم‌های ناخالصی در نظر گرفته شده است. مشخصه‌های تراپرد الکترون‌ها در نیمرسانای ZnO نشان می‌دهد که ماکریم سرعت سوق الکترون‌ها در این ماده از مرتبه  $10^6 \text{ m s}^{-1}$  در میدان شکستی از مرتبه  $10^7 \text{ V m}^{-1}$  است. سرعت سوق و میدان شکست بالا در  $ZnO$  کاربردهای این ماده در طراحی قطعات الکترونیکی در توان‌ها و دماهای بالا را پیشنهاد می‌کند.

## Hot Electron Transport Properties in Steady-State in ZnO

Golafrooz Shahri, Sepideh<sup>1</sup>; Arabshahi, Hadi<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Tarbiat Moallem University, Sabzevar, Iran

<sup>2</sup> Department of Physics, Ferdowsi University, Mashhad, Iran

### Abstract

The result of an ensemble Monte carlo simulation of electron drift velocity respons on the application field in bulk ZnO and GaN are presented All dominant scattering mechanisms in the structure considered have been taken into account. It is found that electron velocity overshoot only occurs when the electric field is increased to a valve above a certain critical field.the Maximum electron velocity in ZnO is about  $10^5 \text{ ms}^{-1}$  at the break down electric field of  $10^7 \text{ V m}^{-1}$  our steady-state results are I fair agreement with other recent calculation.

PACS No.72

موقعیت‌های  $\Gamma$ ،  $U$ ،  $K$  قرار می‌گیرند. این دره‌های انرژی غیرسهمی بوده و لذا لازم است که در محاسبات خواص تراپرد الکترون‌ها در این مواد عامل غیرسهمی بودن نواری و تاثیر آن بر روی جرم موثر الکترون‌ها در هر دره در نظر گرفته شود. در این پژوهش نتایج شبیه‌سازی مونت‌کارلو از خواص تراپرد الکترون‌ها در حجم ماده نیمرسانای ZnO در مقایسه با  $GaN$  در دمای اتاق و دماهای بالاتر بررسی شده است. اثرات در نظر گرفتن دره‌های بالاتر

### مقدمه:

امروزه اکسیدروی به عنوان یک ماده مناسب برای دماهای بالا، ساخت وسایل الکترونی توان بالا و همچنین در ساخت زیرلایه‌های مناسب در ترکیبات دوتایی نیتریدهای گروه III بسیار مورد توجه است [۳-۸]. این نیمرسانا دارای گاف انرژی مستقیم از مرتبه  $3,4 \text{ eV}$  و ساختار بلوری وورتسایت است. مطالعات ساختار نواری در این ماده نشان می‌دهد که در اولین نوار انرژی، پایین دره‌ها در

جدول ۱ - مشخصات نواری استفاده شده در شبیه سازی مونت کارلو برای ساختار وورتسایت  $ZnO$

نام دره	$\Gamma$	U	K
تعداد دره ها	۱	۶	۲
$\alpha (eV^{-1})$ ضریب غیر سه‌های	۰/۶۶	۰/۰۵	۰/۵
جرم مؤثر	۰/۱۷	۰/۷	۰/۹
(eV) گاف انرژی	۳/۴۳	۲	۳/۸

جدول ۲- پارامتر های فیزیکی  $ZnO$  در دمای اتاق

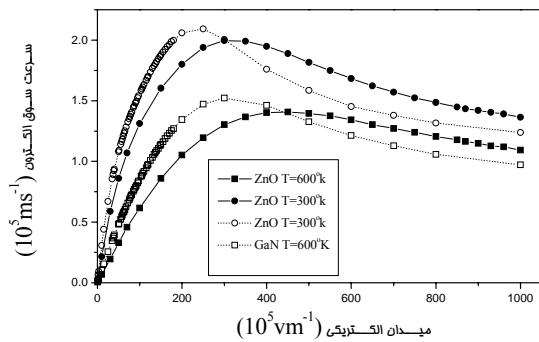
پارامتر	
$\epsilon_{\infty}^{-3}$ (cm <sup>-3</sup> ) چگالی	۵۶۰۰
$\epsilon_0$ ثابت دی الکتریک در فرکانس بالا	۳/۷
$\epsilon_0$ ثابت دی الکتریک در فرکانس پایین	۸/۲
انرژی فونون های اپتیکی (eV)	۰/۹۹
(eV) پتانسیل تغییر شکل آکوستیکی	۱۵
(ms <sup>-1</sup> ) سرعت صوت	۶۴۰۰

انرژی (U) در تراپرد الکترونها بررسی شده و سپس تحرک‌پذیری الکترونها در میدان‌های ضعیف نیز محاسبه شده‌اند. در بخش‌های بعدی ابتدا روش شبیه‌سازی به کار برده شده [۱-۲]، توضیح داده شده و در پایان نتایج به دست آمده بررسی می‌گردد.

### روش شبیه‌سازی مونت کارلو :

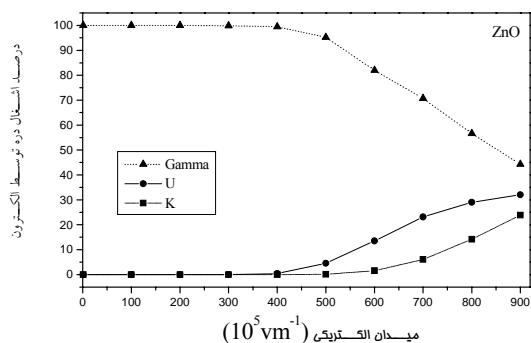
در مدل بکاربرده شده، فرض می‌شود که در ابتدا پنج هزار شبیه ذره در فضای اندازه حرکت، دره‌های انرژی غیرسه‌های را در اولین نوار رسانش مطابق با آمار مکسول-بولتزمن اشغال کرده‌اند. معادلات میدان الکتریکی بطور خود سازگار با استفاده از روش اختلاف معین حل شده است و در طی هر برخورد زمانی شبیه‌ذرات، پتانسیل شبکه‌ای در ماده نیمرسانا محاسبه گردیده است. در این شبیه‌سازی، پراکندگی الکترون‌ها توسط عوامل ناخالصی یونیزه شده و فونون‌های نوری و صوتی درون دره‌ای و بین دره‌ای در نظر گرفته شده است. پارامترهای الکتریکی و ساختار نواری نیمرسانای  $ZnO$  که در شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفته‌اند در جداول ۱ و ۲ گردآوری شده است.

همچنین ملاحظه می شود که ماکریم سرعت سوق با افزایش دما کاهش یافته و به سمت میدان های الکتریکی بزرگتر متوجه می شود.



شکل ۲ : اثر دما بر روی سرعت سوق الکترونها در ترکیبات نیمرسانای ZnO و GaN

شکل ۳ در صد اشغال الکترونها را در دره های انرژی بر حسب میدان الکتریکی اعمالی نشان می دهد. میدان آستانه برای انتقال الکترونها از دره مرکزی  $\Gamma$  به دره های بالاتر در هر ماده تابعی از فاصله جدایی بین دره های و چگالی حالات الکترونی در آن دره انرژی است. چنانچه از شکل ملاحظه می شود ، قبل از میدان بحرانی تمامی الکترونها در دره مرکزی  $\Gamma$  بوده و سپس با افزایش میدان الکتریکی اعمالی ، الکترونها به دره های بالاتر انرژی پراکنده می شوند.

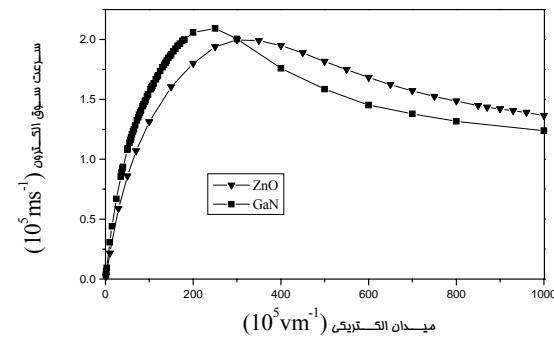


شکل ۳: مقایسه ای از تراکم الکترونها در دره های انرژی در نیمرسانای ZnO در دمای اتاق.

### نتایج شبیه سازی :

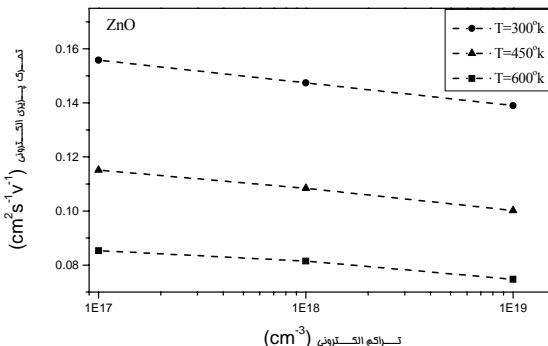
در این بخش نتایج شبیه سازی مونت کارلو در دو نیمرسانای ZnO و GaN در حضور میدان های الکتریکی شدید نشان داده می شود.

شکل ۱ مشخصه سرعت سوق الکترونها بر حسب میدان الکتریکی اعمالی در دمای اتاق و با چگالی الکترونی از مرتبه  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  را برای دو ماده نشان می دهد. چنانچه از این شکل ملاحظه می شود. پیک سرعت سوق برای ZnO در حدود  $1.98 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$  و برای GaN در حدود  $2 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$  است. در میدان های الکتریکی بالاتر ، به دلیل وجود پراکندگی بین دره های ناشی از فونون های نوری ، سرعت سوق برای دو ماده به حد اشباع  $1.33 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$  می رسد. میدان های اشباع آستانه برای پراکندگی الکترونها از دره مرکزی  $\Gamma$  به دره های بالاتر انرژی برای ZnO و GaN به ترتیب در حدود  $3 \times 10^7 \text{ V m}^{-1}$  و  $2.35 \times 10^5 \text{ V m}^{-1}$  است. سرعت سوق الکترونی کمتر ZnO نسبت به GaN ناشی از جرم مؤثر بیشتر الکترونها در دره های مجاور (K) و همچنین فواصل بین دره های بیشتر در این ماده نسبت به GaN است.



شکل ۱ : مقایسه ای از سرعت سوق الکترونها در ساختارهای ZnO و GaN در دمای اتاق.

شکل ۲ اثر دما بر روی سرعت سوق الکترونها را در حجم نیمرساناهای ZnO و GaN نشان می دهد. همانطور که از شکل مشاهده می شود ، با افزایش دما ، سرعت سوق کاهش می یابد. چنین اثری ناشی از افزایش آهنگ پراکندگی درون دره ای و بین دره ای است



شکل ۵: نمودار تغییرات تحرک پذیری الکترونی  $ZnO$  بر حسب تراکم الکترون در دماهای مختلف.

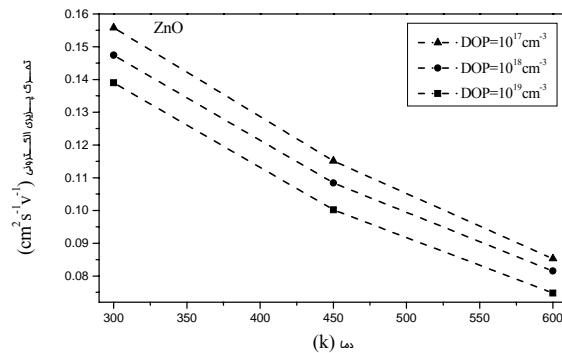
### نتیجه گیری:

شبیه‌سازی مونت‌کارلو برای تراپرد الکترون‌ها در حالت پایدار در  $ZnO$  انجام پذیرفته است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که این ماده دارای سرعت سوچی از مرتبه  $1/98 \times 10^0 ms^{-1}$  است و میدان آستانه آن در حدود  $3 \times 10^7 Vm^{-1}$  می‌باشد. چنان سرعت سوچی و میدان آستانه بالایی، قابلیت این ماده را در ساخت قطعات الکترونیکی در دماها و توان‌های بالا را پیشنهاد می‌کند.

### مراجع:

- [1] H. Arabshahi, *Modern Physics Letters B*, **20** 787 (2006)
- [2] H. Arabshahi and M. H. Ghasemian, *Modern Physics Letters B*, **22** 1397 (2006)88 (1998)
- [3] Y. Chen, D. M. Bagnall, H. J. Koh, K. T. Park, Z. Q. Zhu and T. Yao, *J. Appl. Phys.* **84**, 3912 (1998)
- [4] P. Fons, K. Iwata, S. Niki, A. Yamada and K. Matsubara, *J. Crystal Growth* **201**, 627 (1999)
- [5] R. D. Vispute, V. Talyansky, Z. Trajanovic, S. Choopun, M. Downes, R. P. Sharma and A. A. Iliaidis, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 2735 (1997)
- [6] J. Narayan, K. Dovidenko, A. K. Sharma and S. Oktyabrskay, *J. Appl. Phys.* **84**, 2597 (1998)
- [7] Y. Segawa, A. Ohtomo, M. Kawasaki, H. Koinuma, Z. K. Tang, P. Yu and G. K. L. Wong, *Phys. Stat. Sol.* **202**, 669 (1997)
- [8] Y. Liu, C. R. Gorla, S. Liang, N. Emanetoglu and M. Wraback, *J. Electron Mater* **29**,69 (2000)

شکل ۶: تغییرات تحرک پذیری الکترون را بر حسب دما برای ساختار  $ZnO$  در حد میدان‌های الکتریکی پایین نشان می‌دهد. همانطور که ملاحظه می‌شود نمونه با تراکم الکترونی کمتر در تمام دماها دارای تحرک پذیری بیشتری است و با افزایش دما این تحرک پذیری کم می‌شود چرا که با افزایش دما آهنگ پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه بیشتر است.



شکل ۶: نمودار تغییرات تحرک پذیری الکترونی  $ZnO$  بر حسب دما برای چگالی اتمهای ناخالصی متفاوت.

شکل ۵ تغییرات تحرک پذیری الکترون بر حسب تراکم الکترون‌ها را در حد میدان‌های پایین در دماهای مختلف نشان می‌دهد که ملاحظه می‌شود با افزایش دما تحرک پذیری الکترونی کاهش می‌باید.