

مقایسه خواص ترابرد الکترونی در نیمرساناهای گاف بزرگ GaN، ZnO و SiC به روش مونت کارلو در حالت پایدار

بدیعیان باغسیاهی، فاطمه^۱ عربشاهی، هادی^۱ رضایی رکن آبادی، محمود^۱

^۱گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی، مشهد.

چکیده

سرعت سوق الکترونیها در نیمرساناهای گاف بزرگ ZnO، GaN و SiC به کمک شبیه سازی آنسامبلی مونت کارلو تا میدان 750 kV/cm دردهای مختلف و چگالی ناخالصیهای متفاوت محاسبه و مقایسه شده است. سرعت سوق بیشینه پیشبینی شده توسط این روش برای چگالی ناخالصی 10^{23} m^{-3} در دمای اتاق، برای GaN $3 \times 10^7 \text{ cm/s}$ و برای ZnO $2.2 \times 10^7 \text{ cm/s}$ است که با توجه به اینکه جرم موثر GaN در دره Γ کمتر از ZnO است بزرگتر بودن سرعت سوق بیشینه آن طبیعی است. در SiC در دمای 100 K شاهد رفتار حرکت دیفرانسیلی منفی هستیم که با افزایش دما این از بین می‌رود.

Monte Carlo simulation of steady state high field electron transport property in wurtzite phase of GaN, ZnO and SiC

Badieian Baghsiyahi, Fatemeh¹ Arabshahi, Hadi¹ Rezaee Rpkn-Abadi, Mahmud¹

¹ Department of Physics, Ferdowsi University, Mashhad

Abstract

Temperature and doping dependencies of electron drift velocity in wurtzite GaN, ZnO and SiC structure have been calculated using ensemble Monte Carlo method in steady-state situation. The following scattering mechanisms, i. e., impurity, polar optical phonon and acoustic phonon are included in the calculations. The maximum electron drift velocity that has obtained in room temperature for 10^{23} m^{-3} donor concentration are 3×10^7 and $2.2 \times 10^7 \text{ cm/s}$ for GaN and ZnO, respectively. SiC shows the negative differential mobility just in low temperature.

PACS No. 72

مقدمه

مواد نیمرسانای گاف بزرگ، اهمیت زیادی در ساخت قطعات نیمرسانا دارند. گاف انرژی بزرگ و مستقیم آنها سبب می‌شود که جذابیت زیادی برای کاربرد در قطعات الکترونیکی و همچنین اپتوالکترونیکی داشته باشند. این گاف بزرگ باعث می‌شود که قدرت میدان الکتریکی شکست آنها بسیار بالاتر از Si و GaAs باشد و در نتیجه کاندیداهای مناسبی برای ساخت ترانزیستورهای با فرکانس بالا و توان بالا هستند [۱-۲].

ZnO، GaN و SiC از جمله نیمرساناهای گاف بزرگ هستند که در شرایط عادی در ساختار وورتسایت بلوری می‌شوند. با توجه به مشخصات ساختار نواری این سه ماده، دره‌های Γ و U و K پایین‌ترین دره‌های نوار رسانش هستند. در این مقاله نتایج شبیه-

سازی مونت کارلو از خواص ترابرد الکترونیها در حجم این مواد در چند دما و چگالی ناخالصی متفاوت با استفاده از یک مدل سه دره‌ای بررسی شده است.

روش شبیه سازی

روش آنسامبل مونت کارلو برای پیش‌بینی سرعت سوق بر حسب میدان الکتریکی استفاده شده است. در این مدل اثر سه دره پایینی نوار رسانش در نظر گرفته شده است. تعداد ذرات به کاربرده شده در این شبیه سازی‌ها از مرتبه 10^4 ذره است که در ابتدا در فضای اندازه حرکت در دره مرکزی قرار دارند. سپس در حضور میدان الکتریکی و تحت اثر پراکندگی فونونهای اپتیکی قطبی، فونونهای اکوستیکی، فونونهای بین دره‌ای و ناخالصیهای یونیزه به دره‌های بالاتر پراکنده می‌شوند. در بین برخوردها، ذرات

جدول ۱: پارامترهای فیزیکی و نواری ساختار وورتسایت

ترکیبات **SiC** و **ZnO**, **GaN**

پارامترهای فیزیکی ماده	GaN	ZnO	SiC	
چگالی, ρ (kgm ⁻³)	۶۱۵۰	۵۶۰۰	۳۲۰۰	
سرعت صوت, v_s (ms ⁻¹)	۴۳۳۰	۶۴۰۰	۱۳۷۳	
ثابت دی الکتریک فرکانس ϵ_0 , پایین	۹/۵	۸/۲	۹/۷	
ϵ_m , ثابت دی الکتریک فرکانس بالا	۵/۳۵	۳/۷	۶/۵	
پتانسیل تغییر شکل D (eV), اکوستیکی	۸/۳	۱۴	۱۵	
انرژی فونونهای اپتیکی $\hbar\omega_{op}$ (meV)	۹۹	۷۲	۱۲۰	
گاف انرژی, E_g (meV)	۳/۵	۳/۴۳	۳/۲	
مشخصات ساختار نواری				
	Γ	U	K	
جرم موثر (m^*/m_0)	GaN	۰/۲	۰/۴	۰/۳
	ZnO	۰/۲۵	۰/۴	۰/۳
	SiC	۰/۲۸	۰/۳۹	۰/۵۴
ضریب غیر سهموی (eV^{-1})	GaN	۰/۱۸۹	۰/۰۶۵	۰/۷
	ZnO	۰/۳۱۲	۰/۰۵۹	۰/۶۵
	SiC	۰/۳۲	۰/۵	۰/۰۳
شکافتگی بین دره ای نسبت به دره مرکزی (eV)	GaN	۰	۲	۳/۱
	ZnO	۰	۲/۱	۲/۹
	SiC	۰	۰/۶۱	۰/۶۷
تعداد دره های هم ارز	۱	۶	۲	

الکتریکی را در این سه ماده نشان می دهند. مشاهده می شود که تا میدانهای نزدیک میدان آستانه الکترونها در دره مرکزی Γ باقی می مانند. پس با افزایش بیشتر میدان الکتریکی، الکترونها به دره های بالاتر صعود می کنند، اما از آنجاییکه در دره های بالاتر جرم موثر الکترونها بیشتر از دره مرکزی است تحرک حاملها و در نتیجه سرعت سوق الکترونها کاهش می یابد و رفتار تحرک دیفرانسیلی منفی در میدانهای بیشتر از میدان آستانه مشاهده می شود. البته در مورد SiC در محدوده میدانهای مورد بررسی ما چنین رفتاری مشاهده نمی کنیم که با نتایج دیگران نیز همخوانی دارد [۷].

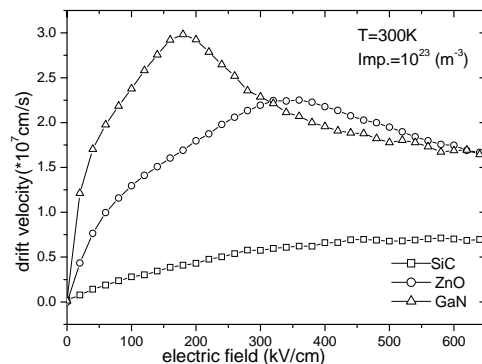
به صورت کلاسیکی فرض می شوند. زمان پرواز آزاد ذرات و نوع پراکندگی در پایان این زمان با تولید اعداد تصادفی تعیین می شود. در این مدل اثر غیر سهموی بودن دره های انرژی با معادله زیر اصلاح شده است [۳].

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

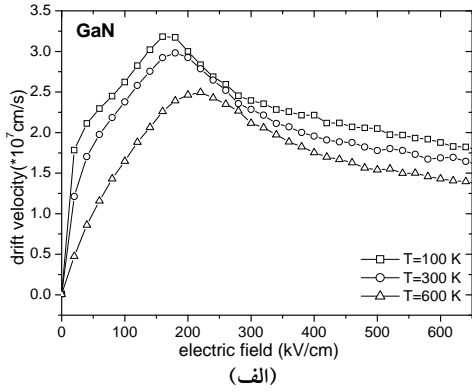
که در آن m^* جرم موثر الکترونها در دره i ام و α_i ضریب غیر سهموی دره i ام است. پارامترهای مورد استفاده در جدول (۱) مشاهده می شوند [۴].

نتایج شبیه سازی

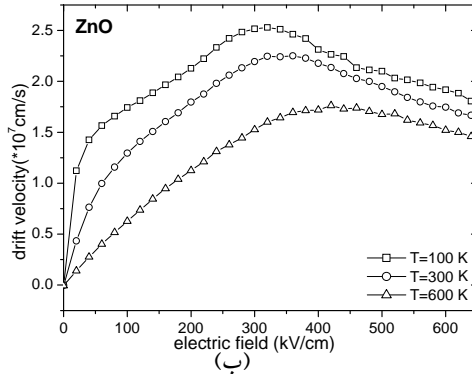
منحنیهای سرعت سوق الکترونها بر حسب میدان الکتریکی در دمای $T=300K$ و چگالی ناخالصی $10^{23} m^{-3}$ در شکل (۱) نشان داده شده اند. همانطور که مشاهده می شود دو ترکیب GaN و ZnO رفتار تحرک دیفرانسیلی منفی از خود نشان می دهند و سرعت سوق بیشینه به دست آمده برای آنها به ترتیب برابر با $3 \times 10^7 cm/s$ در میدان $180 kV/cm$ و $2.2 \times 10^7 cm/s$ در میدان حدود $360 kV/cm$ است که با مقادیر به دست آمده در کارهای گذشته همخوانی نسبتاً خوبی دارد [۲-۶]. همانطور که مشاهده می شود قله مربوط به GaN در میدانهای پایین تری قرار گرفته است که با توجه به اینکه اثر دره Γ در شبیه سازی بیشتر است و جرم موثر الکترونها در دره Γ در GaN کمتر از دو ترکیب دیگر است مشاهده این رفتار دور از ذهن نیست. شکلهای ۲ (الف) تا (ج) تغییرات درصد اشغال دره ها با تغییر میدان



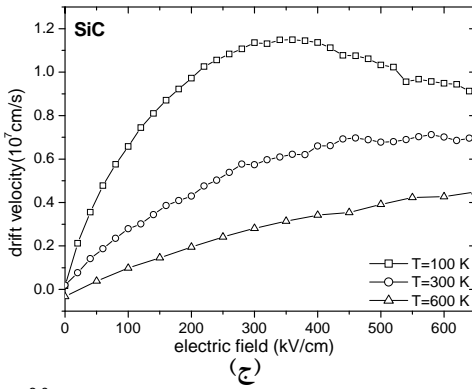
شکل ۱: سرعت سوق حالت پایدار الکترونها بر حسب میدان الکتریکی در نیم رساناهای GaN, ZnO و SiC در دمای اتاق و چگالی ناخالصی $10^{23} m^{-3}$.



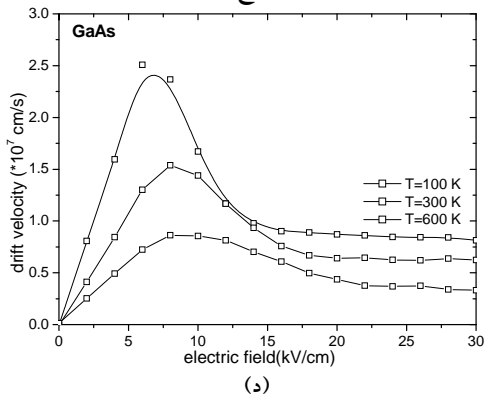
(الف)



(ب)

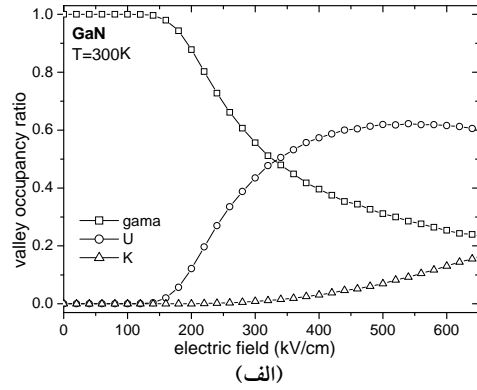


(ج)

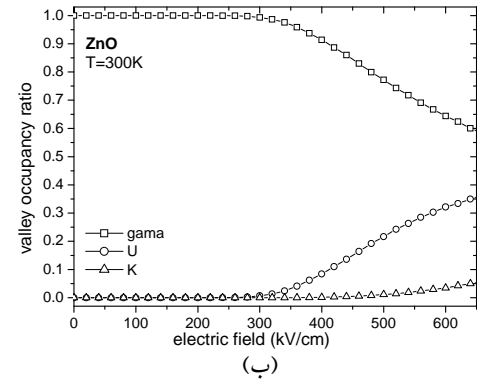


(د)

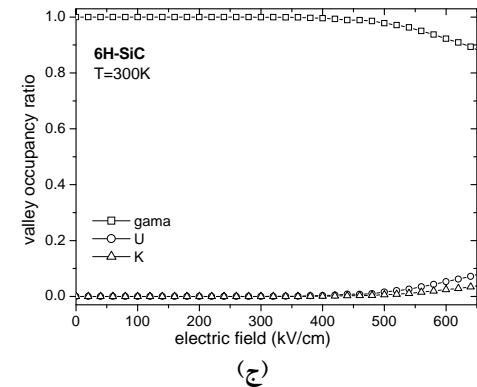
شکل ۳: تاثیر دما بر رفتار میدانی سرعت سوق الکترونها برای چگالی ناخالصی $10^{23} m^{-3}$.



(الف)



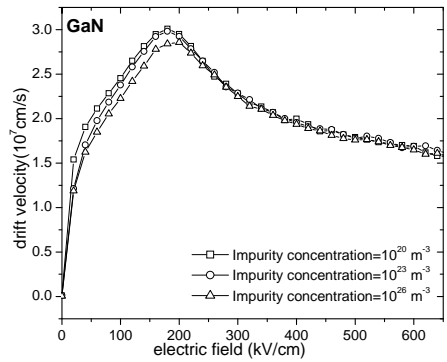
(ب)



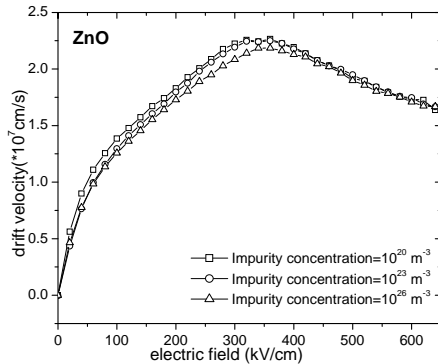
(ج)

شکل ۲: نمودار درصد اشغال دره‌ها با میدان الکتریکی برای الف) GaN (ب) ZnO و ج) SiC در دمای ۳۰۰ کلوین و چگالی ناخالصی $10^{23} m^{-3}$.

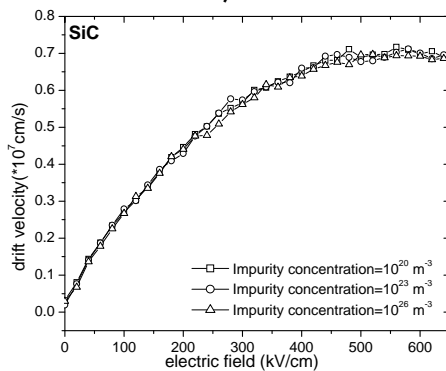
شکل‌های ۳ (الف) تا (د) تاثیر دما بر منحنی سرعت سوق را برای این سه ترکیب و GaAs نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که افزایش دما باعث کاهش سرعت سوق می‌شود و مکان پیک منحنیها نیز به سمت میدانهای بزرگتر منتقل می‌شود. افزایش دما سبب افزایش آهنگ پراکندگی الکترونها از فونونها و اکوستیکی و امتهای ناخالصی می‌شود، بنابراین تحرک و در نتیجه سرعت سوق



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۴: تاثیر تغییر چگالی ناخالصی بر رفتار میدانی سرعت سوق الکترونها در دمای اتاق.

الکترونها کاهش می‌یابد. نکته قابل توجه در این منحینها مشاهده رفتار تحرک دیفرانسیلی منفی SiC در دمای ۱۰۰ K است که با افزایش دما از بین می‌رود. البته با توجه به رفتار دمایی دو ترکیب GaN و ZnO طبیعی است که انتظار داشته باشیم برای دماهای بالاتر در میدانهای بزرگتری شاهد این رفتار باشیم. نکته قابل توجه مقدار بسیار کم میدان آستانه در GaAs نسبت به سه ترکیب دیگر است. علاوه بر این تغییرات دمایی سرعت سوق در GaAs نسبت به GaN و ZnO شدیدتر است. تاثیر تغییر چگالی ناخالصی بر سرعت سوق نیز در شکلهای ۴ (الف) تا (ج) بررسی شده است. همانطور که مشاهده می‌شود تغییر چگالی ناخالصی در دمای ثابت تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر روی رفتار میدانی سرعت سوق حاملها ندارد.

نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی ترابرد الکترون در نیمرساناهای گاف بزرگ GaN، ZnO و SiC نشان می‌دهد که بیشینه سرعت سوق الکترونها در GaN به دلیل جرم موثر کمتر، بیشتر می‌باشد. از طرفی در نیمرساناهای GaN و ZnO رفتار تحرک دیفرانسیلی منفی در دماهای 100, 300, 600 K مشاهده می‌شود در حالیکه SiC تنها در دمای ۱۰۰ K رفتار تحرک دیفرانسیلی منفی دارد. با توجه به اینکه میدان آستانه این سه ترکیب نسبت به GaAs بالاتر است لذا انتظار می‌رود که این ترکیبات کاندیدهای خوبی برای ساخت قطعات نیمرسانای فرکانس بالا و توان بالا باشند. علاوه بر اینکه GaN و ZnO به دلیل تغییرات دمایی کمتر نسبت به GaAs برای ساخت قطعات نیمرسانایی که در دماهای بالا کار می‌کنند نیز مناسب هستند.

مرجعها

- [۵]- J. D. Albrecht and et. al., "High field electron transport properties of bulk ZnO", *J. Appl. Phys.* **86** (1999) 6864-6867.
 [۶]- Enrico Furno and et. al., "Hydrodynamic transport parameters of wurtzite ZnO from analytic- and full-band Monte Carlo simulation", *Solid-State Electronics* **52** (2008) 1796-1801.
 [۷]- Rimvydas Mickevicius and Jian H. Zhao, "Monte Carlo Study of electron transport in SiC", *J. Appl. Phys.* **83** (1998) 3161-3167.

- [۱]- H. Arabshahi, "Potential performance of SiC and GaN based metal semiconductor field effect transistors", *Brazilian J. of Phys.*, **39** (2009) 35-38
 [۲]- Maziar Farahmand and et. Al., "Monte carlo simulation of electron transport in the III-Nitride wurtzite phase materials system: binaries and ternaries", *IEEE TRANSACTION ON ELECTRON DEVICES*, **48** (2001) 535-542.
 [۳]- C. Moglestue, "Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices", first edition 1993, Chapman & Hall.
 [۴]- H. Arabshahi, "Comparison of SiC and ZnO field effect transistors for high power applications", *Modern Physics Letters B*, **23** (2009) 2533-2540.