

محاسبه عددی تحرک پذیری الکترونها در نیمرسانای GaN در میدان های الکتریکی ضعیف

عربشاهی ، هادی^۱؛ رضایی رکن آبادی، محمود^۱؛ گلمکانی، مهدی^۱^۱ گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد.

چکیده

در این پژوهش، تحرک پذیری الکترون ها برای نیم رسانای GaN با استفاده از روش تکرار در بازه دمایی K ۱۰۰ تا K ۵۰۰ در حد میدان های پایین محاسبه شده است. با در نظر گرفتن سازوکارهای پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی، پراکندگی از ناخالصی یونیده شده و پراکندگی از فونون های اکوستیکی (پتانسیل تغییر شکل یافته و پیزوالکتریک)، معادله ترابری بولتزمن را با استفاده از روش تکرار حل می کنیم. در محاسبه تحرک پذیری، ساختار نوار رسانش نیم رسانای GaN را بصورت غیرسهمی در نظر می گیریم. در مجموع، ترکیب توابع موج و استتار الکترون را مورد توجه قرار داده و در نهایت یک بستگی دمایی و یک بستگی تراکم دهنده، برای تحرک پذیری نیم رسانای مورد نظر بدست می آوریم.

Numerical Calculation of Electron Mobility in GaN Semiconductor at Low Electric Field Application

Arabshhi, Hadi¹; Rezaei ruknabadi, Mahmud¹; Golmakani, Mahdi¹¹ Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad

Abstract

In this work, the electron mobility of GaN semiconductor is calculated using iterative method in range of 100K-500K. We primarily considered polar optic phonon scattering, impurity scattering, polar acoustic phonon scattering (piezoelectric scattering) and non-polar acoustic phonon scattering (deformation-potential scattering) mechanisms. Boltzman transport equation is solved using iterative method. The conduction-band structure of GaN has taken to be non-parabolic. In addition, we took into account the mixing of wave functions and electron screening, and we investigated temperature dependence and donor concentration dependence of mobility for the given compound.

PACS No. 1362,1368

تلاش های اولیه برای مطالعه این ماده به خاطر مشکلات رشد آن به تاخیر افتاده بود پیشرفت های اخیر برای کیفیت ساخت ماده شمار قطعاتی که اساس شان روی GaN می باشد را افزایش داده است. بخصوص لیزرها و ترانزیستورها و اشکارسازهای نوری با این ماده ساخته شده است. به منظور طراحی بهتر قطعاتی که پایه شان روی GaN است دانستن ترابری الکترون در این ماده

مقدمه

GaN مدت زمان زیادی است که ماده ای مفید برای استفاده در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی بوده است. گاف انرژی مستقیم و عریض و هدایت گرمایی بالا و ویژگی های ترابری الکترون مطلوب باعث شده است که GaN بطور ایده ال برای کاربردهای سرعت بالا و قدرت بالا مناسب باشد. هر چند که

دانست. پراکندگی از ناخالصی های یونیده شده در اثر وجود اتم های ناخالصی در نیم رسانا به وجود می آید. جایگزینی یک اتم ناخالصی در یک محل شبکه باعث بر هم خوردن نظم تناوبی بلور می گردد. بی نظمی در پتانسیل تناوبی شبکه طبق نظریه اغتشاش در کوانتوم مکانیک، ایجاد پتانسیل اغتشاش گر کرده که بر هم کنش الکترون با چنین پتانسیل اغتشاش گری باعث پراکندگی الکترون خواهد شد. در واقع سازوکارهای پراکندگی را می توان به دو نوع اصلی طبقه بندی کرد، آنهایی که ناشی از ارتعاشات شبکه هستند و پراکندگی از شبکه یا فونون نامیده می شوند و پراکندگی از ناکاملی های بلوری مانند حضور ناخالصی ها [3]. پراکندگی از ناخالصی های یونیده شده با استفاده از پتانسیل کولنی پوششی Brooks-Herring در محاسبات وارد شده و فقط دره (L) در اولین نوار رسانش برای ساختار بلوری GaN استفاده شده است. گاف انرژی، جرم مؤثر و ضریب غیر سهمی بودن از محاسبات شبه پتانسیل تجربی مشتق شده اند. پارامترهای الکتریکی و ساختار نواری نیمرسانای GaN در جدول (۱) گرد آوری شده اند.

جدول(۱): پارامترهای فیزیکی مهم در محاسبات پراکندگی [4-5]

Wz-GaN	Zb-GaN	
۴۳۳۰	۴۵۷۰	سرعت صوت (ms^{-1})
۶۱۵۰	۶۱۰۰	چگالی (kgm^{-3})
۰/۳۷۵	۰/۳۷۵	ثابت پیزوالکتریک (cm^{-2})
۹/۵	۹/۵	ثابت دی الکتریک فرکانس پایین
۵/۳۵	۵/۳۵	ثابت دی الکتریک فرکانس بالا
۸/۳	۸/۳	ثابت پتانسیل تغییر شکل (eV)
۰/۰۹۹۵	۰/۰۹۹۵	انرژی فونونهای اپتیکی (eV)
۰/۱۸۹	۰/۲۱۳	ضریب غیرسهمی (ev^{-1})
۰/۲	۰/۱۵	جرم مؤثر الکترون در دره Γ

لازم است. این کار نتایج محاسبات عددی برگشت پذیر در ترابری الکترون در ماده موردنظر را نشان می دهد. در محاسبات ما از مدل دره ای بیضوی غیر سهمی برای توصیف ترابری در باند هدایت استفاده شده است. [1-2]

جزئیات مدل:

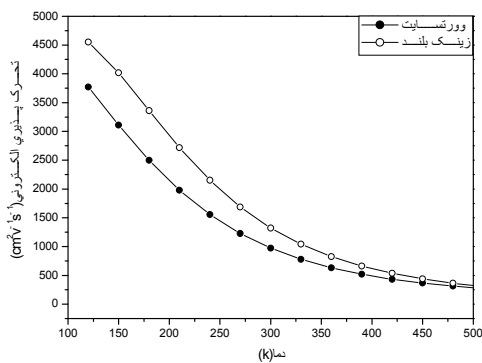
اساس این کار پژوهشی مبنی بر استفاده از روش عددی برگشت پذیر برای حل معادله بولتزمن می باشد. به منظور سادگی حل و بحث معادله بولتزمن انتخاب شرایط اولیه اعمال شده بر بلور ضروری است. بدین منظور در این پژوهش شرایط را طوری در نظر می گیریم که اولاً، میدان الکتریکی خارجی اعمال شده بر بلور نیم رسانا یکنواخت بوده و مستقل از زمان باشد و همچنین ترابری الکترون ها را در ماده نیم رسانا در حالت پایا بررسی می کنیم. این بدان معناست که تابع توزیع الکترون ها در بلور به مختصه مکانی بلور وابسته نیست. به منظور حل و بحث معادله بولتزمن تحت شرایط حالت پایا، فرض می کنیم الکترون ها در غیاب هر گونه میدان الکتریکی خارجی در پایین ترین دره نوار رسانش (دره Γ) با تابع توزیع $f_0(k)$ حضور داشته باشند. با اعمال میدان الکتریکی خارجی ضعیف تابع توزیع الکترون ها از حالت تعادل خارج شده و می توان آن را طبق نظریه اغتشاش در مکانیک کوانتومی بررسی نمود. ذرات در حجم ماده توسط فونون های اپتیکی قطبی، فونون های آکوستیکی، فونون های بین دره ای و ناخالصی های یونیده شده پراکنده می شوند. البته پراکندگی از اثر پیزو الکتریک در ساختارهای زینک بلند به علت تقارن مکعبی بلور، سهم ناچیزی در پراکندگی الکترون ها دارد. در یک ساختار تناوبی کامل فرض می شود اتم ها در نقاط شبکه برآوه ثابت باشند، اما می دانیم که اتم ها حول مکان تعادلشان ارتعاشات گرمایی انجام می دهند که دامنه آن بستگی به دما دارد.

پراکندگی از شبکه بر اثر همین ارتعاشات اتم های تشکیل دهنده بلور در اطراف محل های تعادلی آنها رخ می دهد. این ارتعاشات، پتانسیل دوره ای شبکه را تغییر می دهند که نتیجه آن پراکندگی الکترون است. ارتعاشات شبکه را می توان کوانتیزه در نظر گرفت و فرآیندهای پراکندگی شبکه را می توان به عنوان بر همکنش الکترون ها با کوانتوم ارتعاشات شبکه که فونون نامیده می شود

نتایج و بحث

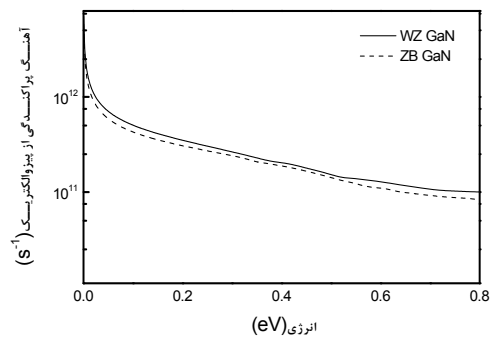
چنانچه در شکل (۲) ملاحظه می شود، آهنگ پراکندگی الکترون ها از ناخالصی های یونیده شده با افزایش انرژی الکترون کاهش می یابد زیرا با افزایش انرژی الکترون، سرعت حرکت آن افزایش می یابد و الکترون مدت زمان کمتری اثر پتانسیل پوششی کولنی از نوع *Brooks - Herring* ناشی از اتم های ناخالصی را احساس می کند. بنابراین در حد میدان های الکتریکی شدید و برای الکترون های پر انرژی پراکندگی از اتم های ناخالصی اهمیت چندانی در ترابرد حامل ها در جامدات بلورین ندارد.

در شکل (۳) تغییرات تحرک پذیری بر حسب دما برای هر دو ساختار زینک بلند و ورتسایت نشان داده شده است. همان طور که در شکل مشاهده می شود تحرک پذیری در دمای اتاق برای ساختار زینک بلند $1322 \text{ cm}^2/V.s$ و برای ساختار ورتسایت $972 \text{ cm}^2/V.s$ می باشد که با دیگر کار انجام شده قابل مقایسه می باشد [6]. تحرک پذیری کمتر در ساختار ورتسایت به دلیل جرم موثر بیشتر این ساختار می باشد ($m^* = 0.2$) نسبت به $m^* = 0.15$ ، هم چنین در هر دو ساختار با افزایش دما تحرک پذیری کاهش می یابد که ناشی از افزایش پراکندگی اپتیکی قطبی در دمای بالا است. در شکل (۴) تحرک پذیری بر حسب تراکم اتم های برای دو ساختار در دمای اتاق نشان داده شده است. با توجه به شکل مشاهده می شود در دو ساختار با افزایش تراکم دهنده ها تحرک پذیری در دمای ثابت کاهش می یابد، که ناشی از افزایش پراکندگی از ناخالصی های یونیده شده می باشد.

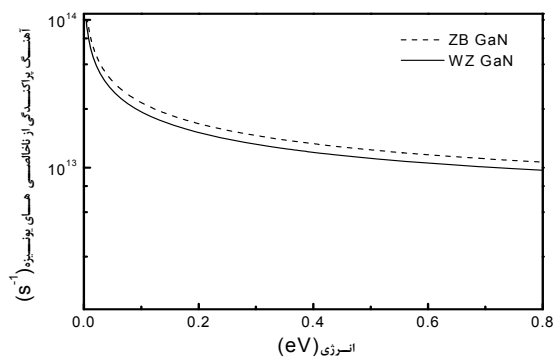


شکل (۳): تحرک پذیری بر حسب دما برای دو ساختار زینک بلند و ورتسایت برای تراکم اتم های ناخالصی 10^{22} m^{-3} .

در این تحقیق، ساختار زینک- بلند و ورتسایت نیم رسانای *GaN* و چهار فرآیند پراکندگی اصلی از فونون های اپتیکی قطبی، ناخالصی های یونیده شده، فونون های آکوستیکی تغییر شکل یافته و از اثر پیزوالکتریک (فونون های آکوستیکی قطبی) را در نظر می گیریم. پارامترهای الکتریکی لازم که در اندازه گیری تحرک پذیری میدان ضعیف استفاده می شوند در جدول (۱) آورده شده است.

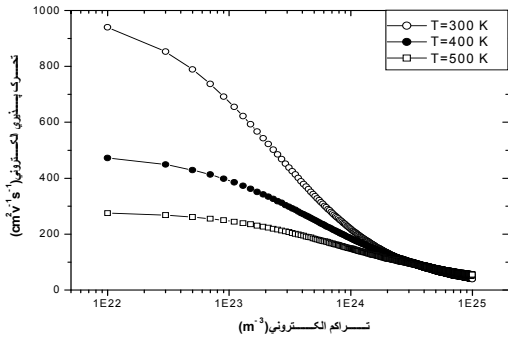


شکل (۱): تغییرات آهنگ پراکندگی الکترون از اثر پیروالکتریک بر حسب انرژی برای نیم رسانای *GaN* در دو ساختار ورتسایت و زینک بلند در دمای اتاق با توجه به شکل (۱)، آهنگ پراکندگی از اثر پیروالکتریک در ساختار ورتسایت بالاتر است که علت آن بالاتر بودن جرم موثر الکترون در این ساختار است.



شکل (۲): آهنگ پراکندگی الکترون از ناخالصی های یونیده شده بر حسب انرژی در دو ساختار ورتسایت و زینک بلند نیم رسانای *GaN* در دمای اتاق و با چگالی اتم های ناخالصی 10^{22} m^{-3} .

چنین افزایشی در انرژی فونون‌ها باعث برهم کنش قوی بین الکترون‌ها و این فونون‌ها شده که نتیجه آن افزایش آهنگ پراکندگی و نهایتاً کاهش تحرک پذیری الکترون‌ها است.



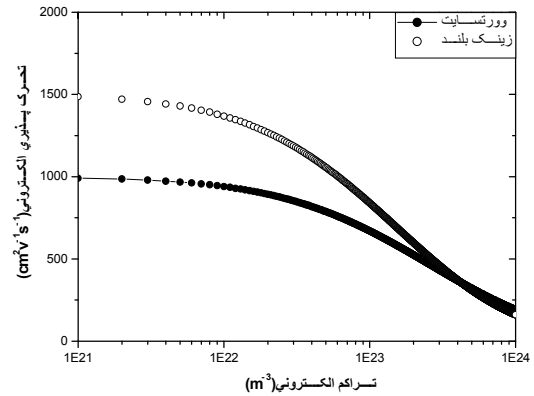
شکل (۶): تحرک پذیری بر حسب تراکم الکترونی در ساختار وورتسایت برای دماهای $T=300$ و 400 و $500 K$.

نتیجه‌گیری:

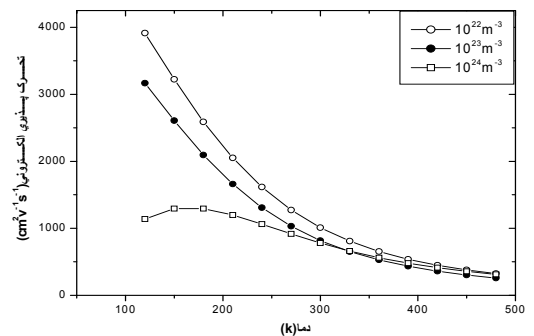
با استفاده از روش عددی برگشت پذیر و با طراحی یک برنامه کامپیوتری، ترابرد الکترون‌ها در ساختار زینک-بلند و وورتسایت *GaN* در دماهای مختلف و با تراکم‌های الکترونی مختلف مورد مطالعه قرار گرفت. همچنین محاسبات نشان داد که در دماهای پایین فرایند پراکندگی غالب، پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه است، که این پراکندگی عامل کاهش تحرک پذیری در دماهای پایین است و با افزایش دما ارتعاشات گرمایی شبکه بلور افزایش می‌یابد و مهمترین عامل محدود کننده تحرک پذیری الکترون‌ها در دماهای بالا پراکندگی از فونون‌های اپتیکی قطبی است. پراکندگی از اثر پیزوالکتریک در ساختارهای زینک بلند به دلیل متقارن بودن این ساختار سهم ناچیزی در تحرک پذیری دارد.

مرجع‌ها

[1] S. N. Mohammad and H. Morkoc, Prog. Quant. Electron. 20 (1996) 361.
 [2] H. Morkoc, Nitride Semiconductor and Devices (Springer-Verlag, 1999).
 [3] Rode, D.L., SemiConductors and Semimetals, Academic Press, Vol 50, (1970).
 [4] B. E. Foutz, L. F. Eastman, U. V. Bhapkar and M. Shur, Appl. Phys. Lett. 70 (1997)2849.
 [5] D. L. Rode, Phys. Rev. B 2 (1970) 1012.
 [6] V. W. Chin, T. L. Tansley and T. Osotchan, J. Appl. Phys. 75 (1994) 7365.



شکل (۴): تحرک پذیری بر حسب تراکم الکترونی برای دو ساختار در دمای اتاق در شکل (۵) تحرک پذیری بر حسب دما در ساختار وورتسایت برای تراکم‌های الکترونی مختلف رسم شده است. با توجه به شکل با افزایش تراکم الکترونی، تحرک پذیری در دماهای پایین به سرعت کم می‌شود، چون تحت این شرایط اثرهای پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه شده افزایش یافته و از طرفی در دماهای پایین انرژی جنبشی الکترون کم می‌باشد و لذا الکترون مدت زمان بیشتری در کنار اتم‌های ناخالصی خواهد بود و اثر پتانسیل کولنی ناشی از آن را بیشتر احساس خواهد کرد، حال هر چه تراکم الکترونی بیشتر شود این اثر بیشتر و تحرک پذیری کمتر خواهد شد.



شکل (۵): تحرک پذیری بر حسب دما در ساختار وورتسایت برای تراکم ناخالصی 10^{22} و 10^{23} و $10^{24} m^{-3}$.

در شکل (۶) تحرک پذیری بر حسب تراکم الکترونی در ساختار وورتسایت را برای دماهای $T=300$ و 400 و $500 K$ داریم. با افزایش دما آهنگ پراکندگی از فونون‌ها افزایش پیدا کرده و از طرفی افزایش دما باعث افزایش انرژی فونون‌ها هم می‌شود.