

## بررسی خواص ترابرد الکترونی در نیمرسانای ترکیبی $Ga_{0.47}In_{0.53}As$ در حالت پایدار

### و نا پایدار با استفاده از روش مونت کارلو در میدان های الکتریکی بالا

عربشاهی<sup>۱</sup>، هادی<sup>۱</sup>؛ رضایی رکن آبادی<sup>۲</sup>، محمود<sup>۲</sup>؛ دهقانی محمد آبادی<sup>۳</sup>، مسعود<sup>۳</sup>

گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد.

#### چکیده

در این مقاله با استفاده از تکنیک شبیه سازی مونت کارلو و در نظر گرفتن عوامل مختلف پراکندگی خواص ترابرد الکترونی در نیمرسانای ترکیبی  $Ga_{0.47}In_{0.53}As$  مورد مطالعه قرار گرفته است. با در نظر گرفتن یک مدل سه دره ای و غیر سهموی بودن نوار هدایت تغییرات سرعت سوق و تحرک پذیری برای مقادیر مختلف دما و ناخالصی بررسی شده است. محاسبات ما نشان می دهد میدان آستانه در این ماده با تغییرات دما و ناخالصی به میزان اندکی تغییر می کند و مقدار آن برابر  $6 \times 10^5$  V/m می باشد. در میدان های بالا سرعت سوق کاهش یافته و در دمای  $300$  k به مقدار اشباع  $0.85 \times 10^5$  m/s می رسد. در نهایت نیز تغییرات سرعت سوق در ابعاد قطعه برای میدان های مختلف را مورد بررسی قرار می دهیم.

## A study of electron transport in compound semiconductor $Ga_{0.47}In_{0.53}As$ under steady state and transient conditions by a monte carlo method in high electric field

Arabshahi Hadi<sup>1</sup>; Rezaee roknabadi, Mahmud<sup>2</sup>; Dehghani mohamad abadi, Masoud<sup>3</sup>

Department of Physics, Ferdowsi university of Mashhad, Mashhad

#### Abstract

An ensemble monte carlo simulation is used to model electron transport properties in compound semiconductor  $Ga_{0.47}In_{0.53}As$ . with consideration of different scattering mechanism, We have estimated variation of drift velocity and mobility for different values of impurity and temperature in three valley non parabolic bands model. Our calculation show that the electron drift velocity decreases at higher electric field. High electron drift velocity and it's low variation with different temperature, introduce this semiconductor as a good candidate for high speed and high power application.

PACS No. 72.10

زیرا با استفاده از آن می توان ساختار نواری دقیق و انواع مکانیسم های پراکندگی در حجم ماده را وارد نمود.

#### جزئیات مدل:

با توجه به اینکه اساس ترابرد الکترون در تمام نیمه هادی ها بر پایه معادله بولتزمن می باشد، حل این معادله و بدست آوردن تابع توزیع  $f$  اهمیت پیدا می کند. زیرا با داشتن  $f$  دیگر کمیت های لازم برای مطالعه ترابرد الکترونی در نیمرسانا بدست می آید. معادله بولتزمن به شکل زیر تعریف می شود:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V \cdot \nabla_r f + k \cdot \nabla_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}$$

این معادله به صورت تحلیلی و بدون انجام ساده سازی ها غیر قابل حل می باشد، اما با روش مونت کارلو که اساس کار این

#### مقدمه

نیمرساناهای ترکیبی با درصد های مختلف اجزای سازنده آن به دلیل داشتن خواص متنوع اپتیکی و الکترونیکی به طور گسترده مورد بررسی قرار گرفته اند، به طوری که سرعت سوق در نیمرسانای  $Ga_{0.47}In_{0.53}As$  از  $GaAs$  و  $Si$  بالاتر است، همچنین ترانزیستورهای HEMT که کانال آنها  $Ga_{0.47}In_{0.53}As$  است سرعت انتقال الکترونی بسیار بالایی دارند. با توجه به ضریب جذب بالای این ماده از آن در ساخت سلول های فوتو ولتایی و به دلیل داشتن گاف نواری کوچک به عنوان آشکار سازه های فرو سرخ در دوربین های مادون قرمز استفاده می شود [1].

ما از میان روش های مختلف شبیه سازی (روش برگشت پذیر، تقریب زمان واهلش و.....) تکنیک مونت کارلو را بکار گرفته ایم،

جدول 1: پامتر های فیزیکی  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  در دمای اتاق

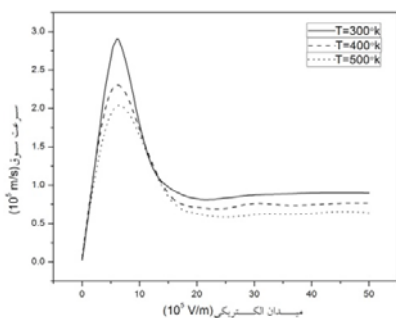
|                                 |        |
|---------------------------------|--------|
| چگالی $\text{kg/m}^3$           | 5480   |
| ثابت دی الکتریک در فرکانس بالا  | 11.09  |
| ثابت دی الکتریک در فرکانس پایین | 13.85  |
| انرژی فونون های اپتیکی (eV)     | 0.0327 |
| سرعت صوت (m/s)                  | 4550   |

جدول 2: مشخصات نواری ساختار زینک بلند  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$

| تعداد دره ها | گاف انرژی (eV) | ضریب غیر سهموی | جرم مؤثر $m^*/m_0$ | دره      |
|--------------|----------------|----------------|--------------------|----------|
| 1            | 0.75           | 0.11           | 0.0463             | $\Gamma$ |
| 4            | 1.33           | 0.74           | 0.256              | L        |
| 3            | 1.77           | 0.29           | 0.529              | X        |

### نتایج شبیه سازی

در این بخش نتایج شبیه سازی مونت کارلو در نیمرسانای  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  و در حضور میدان های الکتریکی شدید در دو حالت پایا و گذرا نشان داده می شود. در شکل 1 سرعت سوق بر حسب تابعی از میدان برای دماهای مختلف و در چگالی ناخالصی  $10^{23} \text{ m}^{-3}$  در حالت پایدار رسم شده است. از روی نمودار مشخص است که سرعت سوق با افزایش میدان ابتدا افزایش یافته، طوری که در میدان آستانه ای برابر  $6 \times 10^5 \text{ Vm}^{-1}$  و در دماهای 300k، 400k و 500k به ترتیب مقادیر بیشینه ای برابر  $2.8 \times 10^5 \text{ m/s}$ ،  $2.4 \times 10^5 \text{ m/s}$  و  $2.1 \times 10^5 \text{ m/s}$  را اختیار میکند. اما پس از اینکه میدان از یک مقدار آستانه عبور می کند، سرعت سوق به تدریج کاهش یافته تا به یک مقدار اشباع برسد که در دماهای فوق به ترتیب عبارت اند از  $0.89 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$  و  $0.75 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$  و  $0.62 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$ .



شکل 1: تغییرات سرعت سوق بر حسب میدان در دماهای مختلف

مقاله نیز می باشد معادله بولتزمن به طور تصادفی در یک بازه زمانی حل شده و تابع توزیع به طور دقیق محاسبه محاسبه می شود. در این روش اعداد تصادفی تولید شده توسط کامپیوتر برای برآورد کمیتهای مطلوب به کار گرفته می شود. به عنوان مثال زمان واهلش بین برخورد ها از رابطه زیر بدست می آید:

$$t_r = -\frac{1}{\Gamma} \ln(r)$$

که در آن  $\Gamma$  یک عدد تصادفی در بازه  $0 < r < 1$  می باشد و  $\Gamma$  آهنگ پراکندگی کل می باشد. یعنی:

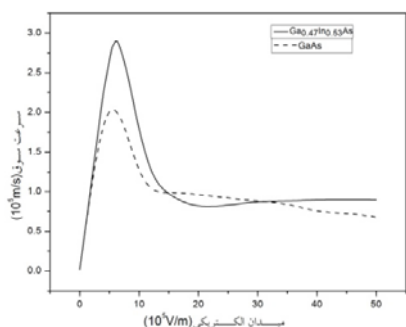
$$\Gamma_{\text{کل}} = \Gamma_{\text{ناخالصی}} + \Gamma_{\text{اپتیکی}} + \Gamma_{\text{اکوستیکی}} + \Gamma_{\text{دره ای}}$$

برای شروع پنج هزار شبه ذره در فضای اندازه حرکت طبق آمار ماکول-بولتزمن توزیع شده و در اثر پراکندگی های مختلف در حجم ماده (از جمله پراکندگی از ناخالصی های یونیزه، فونون های اپتیکی قطبی، فونون های اکوستیکی و ...) حالت های آنها تغییر می کند. با توجه به اینکه نمونه ما ساختار زینک بلند دارد، به علت تقارن مکعبی بلور پراکندگی پیزو الکتریک قابل صرف نظر کردن می باشد. با توجه به حضور میدان های الکتریکی شدید در محاسبات ( $E > 10^5$ ) باید علاوه بر دره مرکزی  $\Gamma$  دره های دیگر نوار رسانش یعنی L و X را نیز در نظر بگیریم (مدل سه دره ای)، که البته این دره ها به صورت غیر سهموی می باشند و اثر آن در معادله زیر وارد شده است:

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

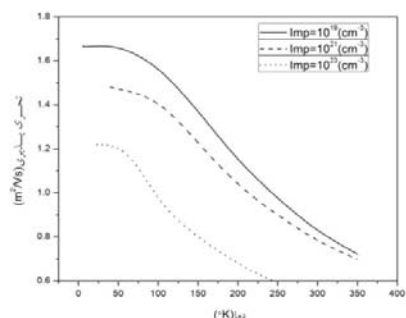
که در آن  $\alpha_n$  ضریب غیر سهموی مربوط به دره  $n$ ام و  $m^*$  جرم مؤثر الکترون هاست [2,5]. از آنجا که یک بلور واقعی به صورت یک ساختار تناوبی کامل نمی باشد باید برهم کنش الکترون با این نا کاملیها را نیز در نظر بگیریم. از جمله این نا کاملیها، غیاب یک اتم در محل اصلی خود و یا جا گذاری یک اتم ناخالصی در ساختار شبکه است. از طرفی ارتعاشات شبکه نیز پتانسیل تناوبی را بهم زده و باعث پراکندگی الکترون ها می شود. اثر این نا کاملیها را به صورت یک پتانسیل اغتشاش گر طبق نظریه مکانیک کوانتومی وارد محاسبات می کنیم. پارامتر های نواری و فیزیکی مربوط به  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  در جداول زیر آورده شده است.

ودو تایی در دمای اتاق و در چلالی های ناخالصی  $10^{23} \text{ m}^{-3}$  به ترتیب برابر  $6.3 \times 10^5 \text{ V/m}$  و  $6.1 \times 10^5 \text{ V/m}$  بوده و پیک سرعت های سوق نیز  $2.8 \times 10^5 \text{ m/s}$  و  $2 \times 10^5 \text{ m/s}$  است. سرعت سوق اشباع نیز در  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  برابر  $0.85 \times 10^5 \text{ m/s}$  و در  $\text{GaAs}$  برابر  $0.65 \times 10^5 \text{ m/s}$  می باشد



شکل 3: مقایسه سرعت های سوق بر حسب میدان برای دو نیم رسانای  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  و  $\text{GaAs}$  در دمای اتاق

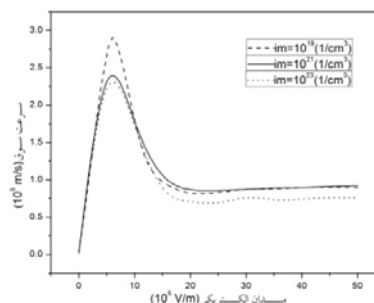
در شکل 4 تحرک پذیری  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  بر حسب دما در مقادیر مختلف چگالی ناخالصی ترسیم شده است. در میدان های الکتریکی ضعیف رابطه بین سرعت و میدان به صورت  $V = \mu E$  بوده و می توان تحرک پذیری  $\mu$  را از شیب نمودار  $V-E$  بدست آورد.



شکل 4: تحرک پذیری  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  بر حسب دما در مقادیر مختلف چگالی ناخالصی

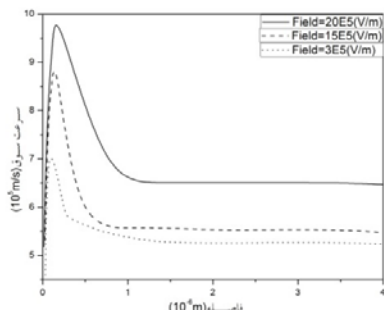
از این نمودار مشخص می شود که چگالی ناخالصی و دما تاثیر زیادی بر روی تحرک پذیری دارد. افزایش دما و ناخالصی پراکندگی از فونون های اپتیکی قطبی و پتانسیل کولنی را افزایش داده که نتیجه آن کاهش تحرک پذیری است. در دمای  $200 \text{ k}$  و تراکم های الکترونی  $10^{19}$  و  $10^{21}$  و  $10^{23} \text{ m}^{-3}$  تحرک پذیری به ترتیب مقادیر  $0.7$ ،  $1.1$ ،  $1.3 \text{ m}^2/\text{Vs}$  را اختیار می کند.

این تغییرات سرعت به این خاطر است که در ابتدا الکترون ها در دره مرکزی  $\Gamma$  از میدان انرژی کسب کرده و سرعتشان زیاد می شود، اما با افزایش میدان الکترون ها انرژی لازم برای انتقال بین دره ای را کسب کرده و در دره های بالا تر  $L$  و  $X$  جرم مؤثر بیشتری را تجربه میکنند. از آنجا که آهنگ پراکندگی با جرم رابطه مستقیم دارد، انرژی جنبشی مولکول ها کاهش یافته و سرعت کم می شود. تاثیر افزایش دما نیز افزایش انرژی فونون های اپتیکی قطبی است که نتیجه آن پراکندگی بیشتر و سرعت کمتر است. همچنین میدان آستانه با افزایش دما تغییر چندانی نکرده است. در شکل 2 نمودار تغییرات سرعت در ساختار زینک بلند  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  بر حسب میدان برای مقادیر مختلفی از ناخالصی یونیده ترسیم شده است. تمام این نمودار ها در دمای  $300 \text{ k}$  می باشد. همانطور که ملاحظه می شود با افزایش چگالی ناخالصی سرعت سوق در میدان آستانه و در مقادیر کمتر از آن کاهش یافته است، زیرا با افزودن چگالی ناخالصی در واقع مراکز پراکنده کننده الکترون ها را افزایش داده ایم و نتیجه آن بر هم کنش کولنی الکترون با این مراکز یونیده است که سبب افزایش پراکندگی الکترون ها شده و سرعت سوق کاهش می یابد. از طرفی در میدان های بالا انرژی الکترون ها زیاد بوده و مدت زمان کمتری را در مجاورت اتمهای ناخالصی سپری می کنند و در نتیجه تغییرات چگالی ناخالصی تاثیر چندانی در سرعت سوق نخواهد داشت.



شکل 2: تغییرات سرعت سوق بر حسب میدان در چگالی های ناخالصی مختلف شکل 3 مقایسه ای بین سرعت های سوق در دو نیم رسانای  $\text{GaAs}$  و  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  در دمای اتاق آورده شده است که مزیت ترکیب سه تایی مورد مطالعه ما را نسبت به ترکیب دو تایی  $\text{GaAs}$  نشان می دهد. آستانه های محاسبه شده برای ترکیب سه تایی

در شکل 7 سرعت سوق حالت بر حسب ابعاد قطعه در میدان های اعمالی مختلف نشان داده شده است. با توجه به شکل در میدان های کمتر از آستانه، سرعت سوق در فواصل کمتر در میدان های بالاتر در فواصل بیشتر به اشباع می رسد. بنابراین در ساخت قطعات الکترونیکی در ابعاد زیر میکرون باید سرعت سوق الکترون ها در حالت ناپایدار را نیز در نظر داشته باشیم.



شکل 7: سرعت سوق بر حسب ابعاد قطعه در میدان های اعمالی مختلف

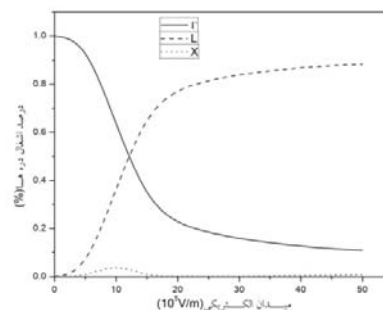
### نتیجه گیری :

در این مقاله خواص ترابرد الکترون ها را در نیمرسانای ترکیبی  $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$  در حالت پایدار و ناپایدار با استفاده از روش مونت کارلو در یک مدل سه دره ای مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می دهد پیک سرعت سوق این ماده در دمای اتاق برابر  $2.8 \times 10^5 \text{ m/s}$  بوده که در حالت اشباع به  $0.85 \times 10^5 \text{ m/s}$  می رسد. میدان آستانه نیز از مرتبه  $6 \times 10^5 \text{ m/s}$  بوده و با افزایش دما تغییرات چندانی نمی کند. سرعت سوق و تحرک پذیری زیاد این ماده آن را کاندید خوبی برای ساخت قطعات الکترونیکی سرعت بالا و توان بالا از جمله ترانزیستورهای HEMT معرفی میکند.

### مرجع ها :

- [1] Martinussen, W., Warlimont, H., 'Springer Handbook of Condensed Matter and materials Data' Springer, Berlin, 2005
- [2] J. D. Albrecht, R. P. Wang, P. P. Ruden and K. F. Brennan, J. Appl. Phys. 83 (1998) 2185.
- [3] H. Arabshahi, M. R. Benam and B. Salahi, Mod. Phys. Lett. B 21 (2007) 1715.
- [4] H. Arabshahi, Mod. Phys. Lett. B 21 (2007) 199.
- [5] C. Moglestue, Monte Carlo Simulation of Semiconductor Devices (Chapman and Hall, (1993).

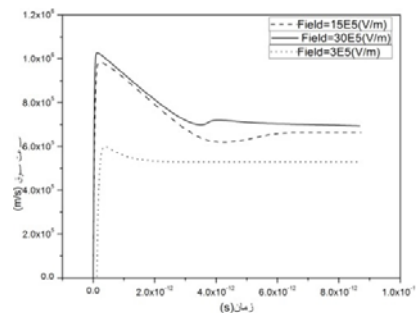
شکل 5 درصد اشغال دره مرکزی  $\Gamma$  و دره های بالاتر انرژی نوار هدایت L و X را بر حسب میدان در دمای اتاق نشان می دهد. این شکل اهمیت دره های بالاتر انرژی را در میدانهای زیاد نشان می دهد. تا قبل از میدان آستانه اکثریت الکترون ها در دره مرکزی قرار دارند، اما با افزایش میدان، درصد الکترون ها در دره مرکزی



شکل 5: درصد اشغال دره های انرژی به صورت تابعی از میدان با استفاده از مدل نواری غیر سهموی

کاهش یافته و در دره های دیگر افزایش می یابد. درصد اشغال دره های  $\Gamma$ ، L و X در میدان انتخابی  $10 \times 10^5 \text{ V/m}$  به ترتیب برابر 05٪، 40٪ و 50٪ درصد می باشد.

در شکل 6 سرعت سوق در حالت گذرا برای میدانهای مختلف بر حسب زمان نشان داده شده است. در زمان های کم پراکندگی های درون دره ای و بین دره ای سرعت الکترونها را به مقدار زیاد تغییر می دهد، اما با گذشت زمان آهنگ های پراکندگی به تعادل رسیده و سرعت سوق اشباع می شود. با توجه به این شکل در میدانهای کمتر از میدان آستانه، سرعت سوق خیلی سریع به حالت اشباع می رسد. در میدان های کم سرعت سوق در مدت کمتر از یک پیکو ثانیه به اشباع می رسد.



شکل 6: سرعت سوق در حالت گذرا برای میدانهای مختلف بر حسب زمان