محاسبه تحرک پذیری الکترونها در ساختارهای 4H-SiC و6H-SiC با استفاده از حل معادله بولتزمن به روش برگشت پذیر در حضور میدانهای الکتریکی ضعیف

عربشاهی ، هادی[۱] ؛ فیضی، عذرا[۲]

[۱] دانشکده فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد

[۲] گروه فیزیک، پیام نورمرکز مشهد

چکیده

در این مقاله وابستگی تحرک پذیری الکترونها به دما و چگالی اتمهای ناخالصی در ساختارهای 4H-SiC و6H-SiC با حل معادله ترابردی بولتزمن به روش برگشت پذیر محاسبه شده است. در این محاسبه مکانیسمهای پراکندگی یعنی؛ پراکندگی از فونونهای اپتیکی قطبی، فونونهای آکوستیکی (پراکندگی از اثر پیزو الکتریک وپتانسیل تغییر شکل شبکه) و پراکندگی از اتمهای ناخالصی یونیده لحاظ شده است. با افزایش دما از ۱۰۰ تا ۵۰۰ درجه کلوین تحرک پذیری الکترونها به طور یکنواخت کاهش می یابد. دردماهای پایینتر با افزایش چگالی اتمهای ناخالصی تحرک پذیری الکترونها افزایش قابل توجه ای می یابد. نتایج بدست آمده از این روش با داده های تجربی در توافق خوبی است.

Low-Field Electron Mobility In 4H-SiC And 6H-SiC Structures Using An Iteration Model For Solving Boltzmann Equation

Arabshahi, Hadi[1]; Feyzi, Azra[2]

[1] Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad
[2] Department of Physics, Payam-e-Nour University of Mashhad

Abstract

Temperature and doping dependencies of electron mobility in 4H-SiC and 6H-SiC structures have been calculated using an iterative technique. The following scattering mechanisms, i.e. polar optical phonon, acoustic phonon (piezoelectric and deformation potential acoustic) and ionized impurity, are included in the calculation. It is found that the electron mobility decreases monotonically as the temperature increases from 100K to 500K. The low temperature value of electron mobility increases significantly with increasing doping concentration. The agreement of iterative results with the available experimental data is found to be satisfactory.

PACS No. 72

مقدمه

سیلیکون کرباید نیمرسانایی با گاف نواری بزرگ است بنابراین دارای میدان شکست بالا و سرعت گرمازایی کم است. رسانندگی گرمایی خوب و استحکام بالا باعث تمایز این ماده از دیگر نیمرساناها شده است. این ماده مدتهاست که به عنوان جانشینی برای سیلیکون خالص در الکترونیک مورد توجه قرار گرفته است، این نوع کریستال جریان را بسیار بهتر از سیلیکون خالص هدایت میکند و میتواند در حرارت بالا و تشعشات رادیویی هم به خوبی کار کند[۱-۲]. هدف مقاله، بررسی ترابرد الکترونها درساختارهای 4H-SiC و6H-SiC با استفاده از حل عددی معادله بولتزمن به

روش برگشت پذیر می باشد. در این مطالعه وابستگی تحرک پذیری الکترونها به دما و چگالی اتمهای ناخالصی وقتی که بلور تحت تأثیر میدان الکتریکی ثابت و ضعیف قرار دارد بررسی شده است.

جزئیات مدل

برای محاسبه تحرک پذیری الکترون باید معادله ترابردی بولتزمن را به روش برگشت پذیر حل کرد[۷-۹]:

$$(\frac{e}{\hbar})E.\nabla_k f=\int[S'f'(1-f)-Sf(1-f')]dk \qquad (۱)$$

که در آن f و f' به ترتیب تابع توزیع الکترونهایی با بردار موج k و k' و E شدت میدان الکتریکی اعمالی است. S و S' نیز به ترتیب آهنگ پراکندگی الکترونها به سمت خارج و داخل المان حجم d^3k است [۳]. مکانیسمهای پراکندگی در نظر گرفته شده در این پژوهش پراکندگی کشسان از فونونهای آکوستیکی (پراکندگی پیزوالکتریک و پراکندگی از پتانسیل تغییر شکل شبکه) پراکندگی از اتمهای ناخالصی یونیده و پراکندگی ناکشسان از فونونهای اپتیکی قطبی است. در هر مورد با در نظر گرفتن پتانسیل پراکندگی بعنوان یک پتانسیل اختلال و با استفاده از نظریه اختلال وابسته به زمان آهنگ پراکندگی محاسبه شده است.

درحد میدانهای الکتریکی ضعیف تابع توزیع الکترون را می توان به صورت بسط تابع لژاندر از تابع توزیع فرمی- دیراک نوشت، بطوریکه:

$$f(k)=f_0(k)+g(k)\cos\theta+... \qquad (۲)$$

که در آن $f_0(k)$ تابع توزیع فرمی- دیراک، $g(k)$ تغییر در تابع توزیع الکترونها در اثر عوامل مختلف پراکندگی، یا توزیع اختلالی است و θ زاویه بین بردار موج k و میدان الکتریکی می باشد. با جایگذاری این رابطه در معادله ترابردی بولتزمن و حل آن به روش برگشت پذیر تابع توزیع اختلالی در مرتبه i+۱ ام برحسب جمله i ام بصورت زیر نوشته می شود [٤].

$$g_{i+1}=\frac{S_i(g_i')-(eE/\hbar)(\partial f/\partial k)}{S_o+v_{el}} \qquad (۳)$$

S_i آهنگ پراکندگی درون سو، S_0 آهنگ پراکندگی برون سو و v_{el} آهنگ پراکندگی کشسان کل یا سطح مقطع پراکندگی است.

در بررسی ساختار نوار انرژی SiC تنها برهمکنش بالاترین نوار ظرفیت و پائین ترین نوار رسانش برای شکافتگی اسپین - مدار صفر در نوار ظرفیت و نوار رسانش غیرسهموی در نظر گرفته شده است. در این حالت تابع موج الکترون بصورت ترکیب توابع موج حالت پایه نوار رسانش، نوع s و توابع موج حالت پایه نوار ظرفیت، نوع p خواهد بود [۵]. با محاسبه تابع توزیع اختلالی به روش برگشت پذیر، تحرک پذیری الکترونها از رابطه زیر بدست می آید [۳]:

$$\mu_d=\frac{\hbar}{3m^*}\frac{\int_0^\infty k^3\frac{g(k)}{Ed}dk}{\int_0^\infty k^2 f_k(k)dk} \qquad (٤)$$

که در آن m* جرم موثر الکترون در دره مرکزی Γ و E میدان الکتریکی است. پارامتر d نیز عبارتست از:

$$1/d=1+[(m/m^*-1)/\alpha] \qquad (۵)$$

که در آن α عامل غیرسهموی بودن نوار رسانش و m جرم الکترون است.

حل تحلیلی معادله ترابردی بولتزمن تنها در حالت های خاص میسر است و این حالت های خاص معمولاً جهت بررسی سیستمهای واقعی کاربرد ندارند. برای حل عددی معادله ترابردی بولتزمن یک برنامه کامپیوتری نوشته شده است. این برنامه ابتدا آهنگ پراکندگی هر یک از مکانیسمهای پراکندگی را محاسبه میکند و سپس با استفاده از روش برگشت پذیر تابع توزیع اختلالی را تعیین میکند. با در اختیار داشتن مقدار g(k) می توانیم تحرک پذیری را به کمک رابطه بالا محاسبه کرده و وابستگی آن به عواملی مانند دما و تراکم الکترونها را مورد بررسی قرار دهیم.

نتایج و تحلیلها

در این بخش نتایج بدست آمده از حل معادله بولتزمن، برای میدان الکتریکی اعمالی $۱۰^٤\ Vm^{-1}$ را مورد بررسی قرار خواهیم داد. کلیهٔ پارامترهای ساختاری و الکتریکی مورد استفاده برای محاسبهٔ تحرک پذیری الکترونها در جدول (۱) آورده شده است. شکل (۱- الف) نمودار تغییرات تحرک پذیری بر حسب دما را

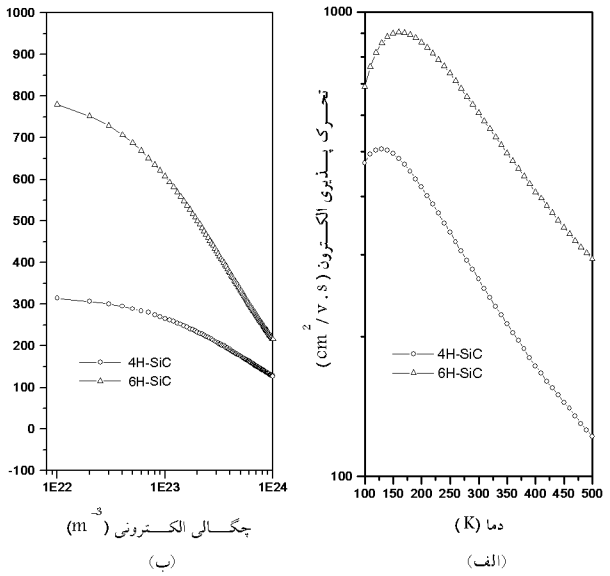
برای ترکیبات نیمرسانای 6H-SiC و 4H-SiC با پارامترهای ذکر شده در جدول (۱) نشان می دهد. در این محاسبه چگالی الکترونها $۱۰^{۲۳}$ الکترون بر متر مکعب در نظر گرفته شده است.

جدول۱ : پارامترهای فیزیکی مربوط به ترکیبات نیمرسانای 6H-SiC ، 4H-SiC [۱۰].

پارامتر	6H-SiC	4H-SiC
چگالی (m^{-3})	۳۲۱۰	۳۲۱۱
ثابت دی الکتریک در فرکانس پایین ε_0	۹/٦٦	۹/٦٦
ثابت دی الکتریک در فرکانس بالا ε_∞	٦/٥٢	٦/٥٢
انرژی فونون های اپتیکی $\hbar\omega_{op}(meV)$	۱۰٤/۲	۱۰٤/۲
ثابت پیزوالکتریک (Cm^{-2})	۰/٤	۰/۳۷٥
ثابت پتانسیل آکوستیکی (eV)	٦/٥	٦/٥
ثابت شبکه (A°)	۳/۰۷۳	۳/۰۷۳
سرعت صوت (ms^{-1})	٤۰۰۰	٤۰۰۰
جرم موثر الکترون m^*/m_0	۰/۲۹	۰/۲
گاف انرژی $E_g(eV)$	۳/۲۳	۳/۰
ضریب انحراف درهٔ Γ $\alpha\,(eV)^{-1}$	۰/۱٥٦	۰/۲۱۳

همانطور که از شکل پیداست در دمای اتاق تحرک پذیری ذاتی 6H-SiC حدود $cm^2V^{-1}s^{-1}$ ٦۰۰ و4H-SiC در حدود $۲۷۰\,cm^2V^{-1}s^{-1}$ است که در توافق خوبی با نتایج دیگر مقالات است [٦]. با افزایش دما تحرک پذیری افزایش می یابد و در دمای حدود ۱٥۰ درجه کلوین برای 6H-SiC و حدود ۱۲٥ درجه کلوین برای 4H-SiC به یک بیشینه می رسد و سپس کاهش پیدا می کند. دلیل افزایش تحرک پذیری در دماهای زیر دمای بیشینه کاهش پراکندگی ناشی از اتمهای ناخالصی است که در دماهای پایین اثر غالب را در پراکندگی الکترونها دارد، این در حالی است که در دماهای بالاتر نیز به دلیل شروع فرآیندهای پراکندگی فونونی بویژه پراکندگی ناشی از فونونهای اپتیکی قطبی، کاهش تحرک پذیری الکترونها را داریم.

در شکل (۱- ب) تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب تابعی از چگالی اتمهای ناخالصی برای هر دو ساختار در دمای اتاق نشان داده شده است. شدت میدان الکتریکی اعمال شده نیز مانند قبل $۱۰^{٤}\ Vm^{-1}$ در نظر گرفته شده است. همانطور که از شکل پیداست با افزایش تراکم ناخالصیها، تحرک پذیری در هر دو ساختار نیمرسانا کاهش پیدا می کند، که دلیل آن افزایش مراکز ناخالصی یونیده و در نتیجه افزایش آهنگ پراکندگی از این مراکز ناخالصی است.



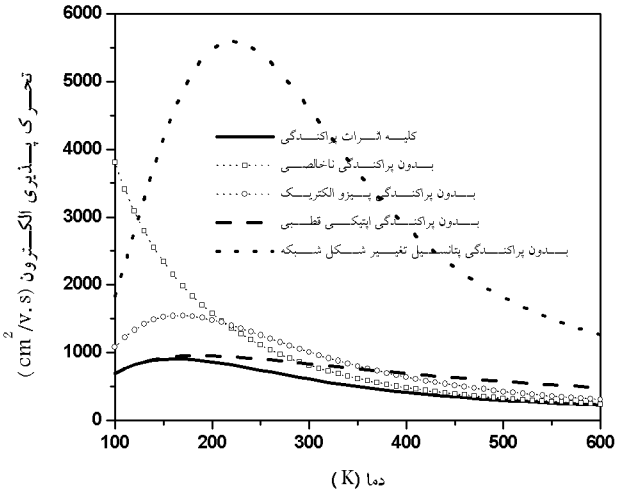
شکل۱: تغییرات تحرک پذیری الکترون برحسب (الف) تابعی از دما و (ب) چگالی اتمهای ناخالصی ا برای دو ساختار *4H- SiC* و *6H-SiC*

از هر دو نمودار شکل (۱- الف) و (۱- ب) چنین پیداست که تحرک پذیری ترکیب نیمرسانای 6H-SiC بیشتر از 4H-SiCاست. میتوان چنین گفت که؛ مهم ترین عامل در بالاتر بودن تحرک پذیری الکترون در ساختار 6H-SiC کمتر بودن جرم مؤثر آن نسبت به 4H-SiC است.

به منظور بررسی اثر پراکندگی الکترونها تحت تأثیر عوامل مختلف پراکندگی بر رسانش الکتریکی، در شکل (۲) تحرک پذیری الکترونها در ترکیب نیمرسانای 6H-SiC برحسب تابعی از دما در غیاب برخی از عوامل مهم پراکندگی در مقایسه با نمودار کلی نشان داده شده است.

چنانچه در شکل دیده می شود تحرک پذیری الکترونها در غیاب پراکندگی از اتمهای ناخالصی در دماهای پایین به شدت افزایش می یابد. این شکل بوضوح نشان می دهد که اثر پراکندگی از اتم های ناخالصی بر تحرک پذیری الکترونها در دماهای پایین بسیار شدیدتر از عوامل دیگر است. علت این امر آنست که در

دماهای پایین انرژی جنبشی الکترونها به شدت کاهش می یابد و این امر باعث می شود که الکترونها به آهستگی از کنار اتم های ناخالصی حرکت کنند و لذا اثر پتانسیل دافعهٔ کولنی بین اتم ناخالصی و الکترون بیشتر شود و بنابراین آهنگ پراکندگی از اتمهای ناخالصی افزایش یابد.



شکل ۲: تحرک پذیری الکترون برحسب دما در غیاب برخی از عوامل پراکندگی الکترون در نیمرسانای 6H-SiC.

همچنین در این شکل ملاحظه می شود که پراکندگی از فونونهای آکوستیکی از طریق پتانسیل تغییر شکل شبکه مهمترین عامل پراکندگی است که باعث محدود نمودن تحرک پذیری الکترونها در نیمرسانا می گردد. پراکندگی ناشی از اثر پیزوالکتریک در دماهای پایین و پراکندگی ناشی از فونونهای اپتیکی قطبی در دماهای بالا نیز اثر کمی بر تحرک پذیری الکترون در مقایسه با دیگر عوامل دارند.

نتیجه گیری

با حل معادله بولتزمن به روش برگشت پذیر و در نظر گرفتن اثر پراکندگی الکترون ها از عوامل فونونی، پیزوالکتریسیته و حضور اتم های ناخالصی، تحرک پذیری الکترون ها در دو ساختار نیمرسانای 4H-SiC و 6H-SiC محاسبه و با یکدیگر مقایسه شده است. محاسبات نشان می دهد که به علت جرم مؤثر الکترونی کوچکتر در6H-SiC تحرک پذیری الکترون ها در حضور میدان های الکتریکی ضعیف در این ماده بیشتر از تحرک پذیری الکترون ها در4H-SiC است. همچنین در دماهای بالا پراکندگی غالب ناشی از فونون های آکوستیکی از طریق پتانسیل تغییر شکل شبکه است، در حالی که در دماهای پایین پراکندگی محدودکننده تحرک پذیری الکترونها، پراکندگی از ناخالصی یونیده است

مرجع ها

[۱] Philip G, Neudec; "*Progress towards high temperature high power SiC device*"; Int. conf. Series 141 (1994)

[۲] R. Mickevicius and J. H. Zhao," *J. Appl. Phys".* **83**, 3161 (1998)

[۳] D. L . Rode, "*Semiconductors and Semimetals*, eds". R.K. Willardson and A.C. Beer, Academic Press

[٤] Subhabrata Dhare and Subhasis Ghosh; " *J. Appl. Phys".* **86**, 2668(1999)

[٥] K . Ridley," *Electrons and phonons in semiconductor multilayers*" , Cambridge University (1997)

[٦] Rezaee Rokn-Abadi and others, "Comparison of Low Field Electron Transport in SiC and GaN Structures for High-Power and High- Temperature Device Modeling" ,*Modern Physics Letters* B,**Vol, 22**, no 13. (2008)

[۷] D. L. Rode, *Phys. Rev. B* **2** 1012 (1970)

[۸] D. L. Rode, *Phys. Rev. B* **3** 3287 (1971)

[۹] D. L. Rode and A. C. Beer, *Phys. Rev. B* **3** 2534 (1971)

[۱۰] M . Levinshten, S . Rumyantsev, M. Shur ,"*Handbook Series On Semiconductor Parameters" 439- 440*