

## مقایسه خواص ترابرد الکترونی در حالت پایدار نیمرساناهای GaN و AlN, InN

## با استفاده از روش مونت کارلو در میدان الکتریکی بالا

اسلامی مقدم، زهرا<sup>۱</sup>؛ مجیدیان، مسعود<sup>۱</sup>؛ عربشاهی، هادی<sup>۲</sup>

گروه فیزیک، دانشگاه تربیت معلم سبزوار، سبزوار

گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

## چکیده

در این مقاله برای مقایسه خواص ترابرد الکترون در  $InN, AlN, GaN$  از روش مونت کارلو استفاده شده است. در هر سه مورد دریافتیم، الکترون تنها وقتی بالاترین سرعت را کسب می کند که میدان الکتریکی به مقادیر بالاتر از میدان آستانه افزایش یابد. میدان آستانه شدیداً به ماده بستگی دارد، طوری که در  $InN$   $7900 \text{ KVm}^{-1}$ ، در  $AlN$  حدود  $4 \times 10^4 \text{ KVm}^{-1}$  و برای  $GaN$   $2 \times 10^4 \text{ KVm}^{-1}$  می باشد. در میدانهای الکتریکی بالا سرعت سوق کاهش می یابد و به مقدار اشباع در  $GaN$  و  $InN$  حدود  $1.5 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$  و در  $AlN$  به حدود  $8 \times 10^4 \text{ ms}^{-1}$  می رسد.

### Comparison Of Steady-state Electron Transport in InN , AlN , GaN by a Monte Carlo Method in High Electric Field

Eslami Moghadam, Zahra<sup>1</sup>; majidian, masoud<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 Of Mashhad, Mashhad, Iran

## Abstract

An ensemble Monte Carlo simulation is used to compare high field electron transport in bulk InN, AlN and GaN. For all materials, We find that electron velocity overshoot only occurs when the electric field is increased to a value above a certain critical field. This critical field is strongly dependent on the material, about  $7900 \text{ KVm}^{-1}$  for the case of InN,  $4 \times 10^4 \text{ KVm}^{-1}$  for AlN and  $2 \times 10^4 \text{ KVm}^{-1}$  for GaN. At higher electric fields the drift velocity decreases, eventually saturating at around  $1.5 \times 10^5 \text{ ms}^{-1}$  for both GaN and InN and at  $8 \times 10^4 \text{ ms}^{-1}$  for AlN.

## PACS No72

بالا و محیطهای شیمیایی و نیز قطعات توان و سنسورهای گرمایی کاربرد گسترده ای پیدا کرده اند [۲]. از روش های عددی متفاوتی می توان برای محاسبه خواص ترابرد الکترونی در نیمرساناها و قطعات ساخته شده از آنها استفاده کرد، از این روش ها می توان به روش های تقریب زمان واهلش، روش های برگشت پذیر برای حل معادله بولتزمن و یا استفاده از قانون ماتیسن اشاره کرد. امروزه غالباً از روش مونت کارلو برای محاسبه خواص ترابرد الکترونیهای داغ در حضور میدان های الکتریکی بالا استفاده می شود. با استفاده از این تکنیک می توان شبیه سازی حرکت تعدادی از الکترونها را در فضای اندازه حرکت با در نظر گرفتن اثر پراکندگی های متفاوت، انجام داد [۳-۴]. با این روش ساختار نواری ایده ال و

## مقدمه

در سال های اخیر نیمرساناهای نیتروژندار که شامل ترکیبات  $InN, AlN, GaN$  و آلیاژهای آنها می باشند، به دلیل داشتن ویژگیهای منحصر به فرد از جمله گاف انرژی پهن در گسترده ای در حدود (  $0.7-6.2 \text{ eV}$  ) که محدوده وسیعی از طیف الکترو مغناطیسی از IR تا UV را شامل می شود، کاربردهای فراوانی در قطعات اپتو الکترونیکی مانند دیودهای نوری ( LEDs ) و دیودهای لیزری ( LDs ) پیدا کرده اند [۱]. نیمرساناهای نیتروژندار علاوه بر خصوصیات اپتیکی به دلیل پایداری شیمیایی خوب و عملکرد مناسب در دماهای بالا در قطعات الکترونیکی فرکانس بالا مانند ساختارهای HEMT و قطعات به کار گرفته شده در دماهای

از شبکه بر اثر همپین 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 برهمکنش الکترونها با کوانتوم ارتعاشات شبکه که فونون نامیده می شود دانست. پراکندگی از ناخالصی های یونیزه در اثر وجود اتم های ناخالصی در نیمرسانا به وجود می آید. جایگزینی یک اتم ناخالصی در یک محل شبکه باعث برهم 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 [6]. پارامترهای دره ای ساختار نوار انرژی نیمرساناها در جدول ۱ گرد آوری شده اند.

جدول ۱: پارامترهای دره ای ساختار نوار انرژی در شبیه سازی مونت کارلو برای ساختار وورتسایت  $GaN$ ،  $AIN$  و  $InN$  و ساختار زینک بلند  $GaN$  در دمای اتاق [7].  $E_x$ ، فاصله انرژی دره ها از بالای نوار ظرفیت است.

ترکیب	دره	جرم مؤثر الکترون	ضریب غیرسهومی	$E_x(eV)$
GaN(ZB)	$\Gamma$	۰/۱۵	۰/۲۱۳	۳/۲
GaN(WZ)	$\Gamma$	۰/۱۸	۰/۱۸۹	۳/۵
InN	$\Gamma$	۰/۱۱	۰/۴۱۹	۱/۸۹
AIN	$\Gamma$	۰/۳۱	۰/۲۵	۶/۲

### نتایج شبیه سازی :

در شکل ۱ سرعت سوق الکترونها بر حسب میدان الکتریکی را در نیتراهای گروه V-III نشان می دهد. در هر سه نیمرسانا محاسبات در دمای  $300K$  و چگالی اتم های ناخالصی  $10^{22} m^{-3}$  انجام شده است. پیک سرعت سوق در  $InN$  حدود  $2/7 \times 10^6 ms^{-1}$  در حالی که در  $GaN$  و  $AIN$  به ترتیب حدود  $2/26 \times 10^6 ms^{-1}$  و  $1/2 \times 10^6 ms^{-1}$  است. در میدان های الکتریکی بالا سرعت سوق کاهش می یابد و به مقدار اشباع در

تمام فرایندهای پراکندگی مرتبط را می توان وارد محاسبات کرد و در عین حال تابع توزیع الکترون را به صورت دقیق ارزیابی و خواص ترابرد را محاسبه نمود.

### جزئیات مدل :

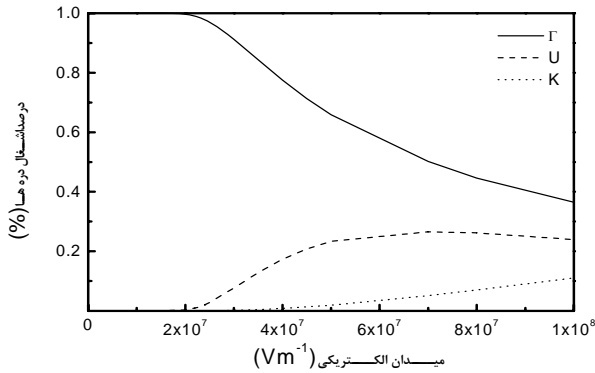
اساس این کار پژوهشی مبنی بر استفاده از روش شبیه سازی مونت کارلو است. در این روش، معادله بولتزمن با استفاده از روش عددی آماری حل می شود. حل این معادله یک کار نظری دشوار است. علی رغم مطالعات و کار زیاد انجام شده، حل تحلیلی این معادله و تعیین شکل تابع توزیع برای نیمرساناها فقط در حالت های خاص انجام شده است. معادله ترابرد الکترونی بولتزمن برای تابع توزیع الکترونی  $f(r, k, t)$ ، به فرم زیر است [5]:

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

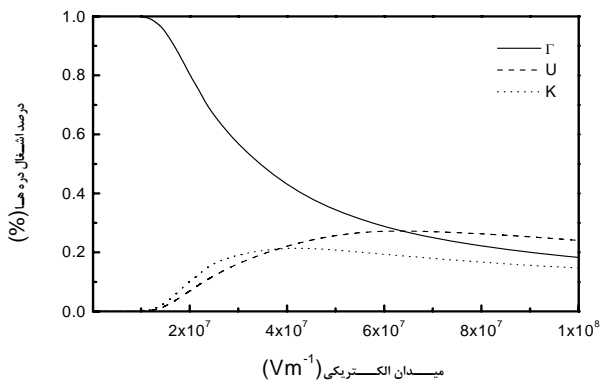
که در آن  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$  تغییر تابع توزیع الکترونها ناشی از بر خوردهای متفاوت است. در این مقاله، معادله فوق با استفاده از روش آماری مونت کارلو برای تعدادی از نمونه های الکترونها، حل و بحث می گردد. امروزه حل عددی معادله ترابرد بولتزمن و تعیین تابع توزیع الکترون با استفاده از کامپیوترهای سریع میسر است. در این روش ها با توجه به معادلاتی که دینامیک حرکت الکترون ها را در بلور مشخص می کند، حرکت الکترون ها در فضای فاز شبیه سازی می شود. با در دست داشتن بردار موج الکترون ها در هر لحظه می توان تابع توزیع الکترون ها را مشخص کرد، بدین ترتیب جواب معادله بولتزمن بدست می آید.

در شروع هر شبیه سازی پنج هزار شبه ذره در فضای اندازه حرکت بر طبق آمار ماکسول - بولتزمن توزیع می شوند. ذرات در حجم ماده توسط فونونهای اپتیکی قطبی، فونونهای آکوستیکی، فونونهای بین دره ای و ناخالصی های یونیزه پراکنده می شوند. البته پراکندگی پیزو الکتریک در ساختارهای زینک بلند به علت تقارن مکعبی بلور، سهم ناچیزی در پراکندگی الکترونها دارد. در یک ساختار تناوبی کامل فرض می شود اتم ها در نقاط شبکه براوه ثابت باشند، اما می دانیم که اتم ها حول مکان تعادلشان ارتعاشات گرمایی انجام می دهند که دامنه آن بستگی به دما دارد. پراکندگی

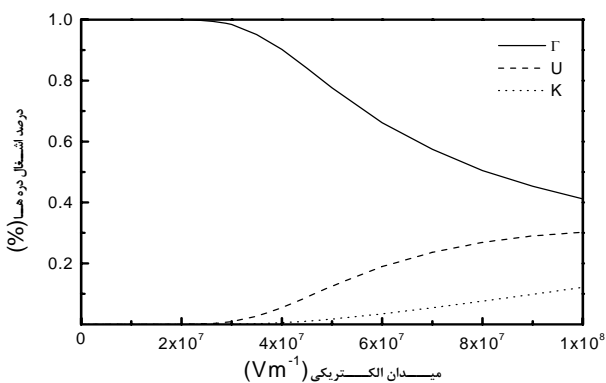
است. در میدان آستانه در نیمرسانای  $AlN$  ۱۵٪ الکترون‌ها دره  $U$  و ۳٪ الکترون‌ها دره  $K$  را اشغال کرده‌اند در حالی که  $Albrecht$  [10] سهم اشغال الکترون‌ها را در مدل سه دره‌ای در دره  $U$ ، ۲۱٪ و دره  $K$ ، ۵٪ بدست آورده است.



الف



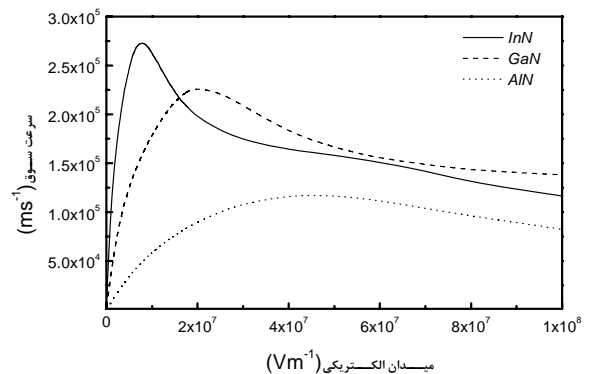
ب



ج

شکل ۲: درصد اشغال دره‌های مجاور به صورت تابعی از میدان الکتریکی با استفاده از مدل نوار غیر سهموی الف ( $GaN$  ب)  $InN$  ج)  $AlN$  در دمای اتاق.

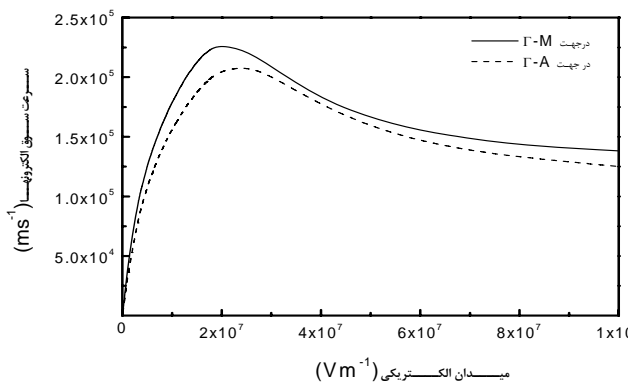
$GaN$  و  $InN$  حدود  $1/5 \times 10^6 ms^{-1}$  و در  $AlN$  به حدود  $8 \times 10^4 ms^{-1}$  می‌رسد.



شکل ۱: سرعت سوق الکترون محاسبه شده در نیمرساناهای  $AlN$  و  $InN, GaN$  به صورت تابعی از میدان الکتریکی در دمای اتاق.

در نیمرسانای  $InN$  پیک سرعت سوق در میدان الکتریکی پایین حدود  $10^7 Vm^{-1}$  اتفاق می‌افتد که در مقایسه با نتایج  $Bellotti$  [8] که از مدل پنج دره‌ای و  $o''Leary$  [9] که از مدل سه دره‌ای استفاده کرده در توافق نسبتاً خوبی است. پیک سرعت سوق در  $InN$  بزرگتر از  $GaN$  و در میدان الکتریکی کوچک اتفاق می‌افتد. که این به علت تفاوت در ساختار نوار انرژی آن‌ها و همچنین تفاوت جرم مؤثر الکترون در دره مرکزی است. (جرم مؤثر  $InN$ ؛  $m^* = 0.11 m_0$ ؛  $GaN$ ؛  $m^* = 0.31 m_0$ ؛  $AlN$ ؛  $m^* = 0.2 m_0$  است). ملاحظه می‌شود که با بزرگتر شدن جرم مؤثر، سرعت سوق الکترون کاهش می‌یابد.

درصد اشغال دره‌های  $\Gamma$ ،  $U$ ،  $K$  در سه نیمرسانای  $GaN$ ،  $InN$  و  $AlN$  در شکل‌های ۲ نشان داده شده‌است که اهمیت سهم دره‌های مجاور را در این شبیه‌سازی نشان می‌دهند. بیشتر پراکندگی‌های بین دره‌ای در میدان‌های بالای میدان آستانه اتفاق می‌افتد. چون الکترون‌هایی که در دره مرکزی  $\Gamma$  قرار دارند انرژی جنبشی کمتری دارند و تحت تأثیر میدان الکتریکی قوی به شدت پراکنده می‌شوند. بیشتر بودن انتقال بین دره‌ای در  $InN$  در یک محدوده میدان الکتریکی به خاطر ترکیب عوامل جرم مؤثر پایین دره  $\Gamma$ ، گاف انرژی بزرگ و آهنگ پراکندگی فونون در دره  $\Gamma$  است. با توجه به شکل ملاحظه می‌شود که رفتار  $AlN$  خیلی متفاوت با دو نیمرسانای دیگر است، علت آن کوچک بودن گاف انرژی دره  $\Gamma$  با دره‌های  $U$ ،  $K$  و همچنین بیشتر بودن جرم مؤثر دره  $\Gamma$  در  $AlN$



شکل ۴: سرعت سوق الکترون بر حسب میدان الکتریکی در دو جهت  $\Gamma-A$ ,  $\Gamma-M$  در ساختار وورتسایت  $GaN$  در دمای اتاق.

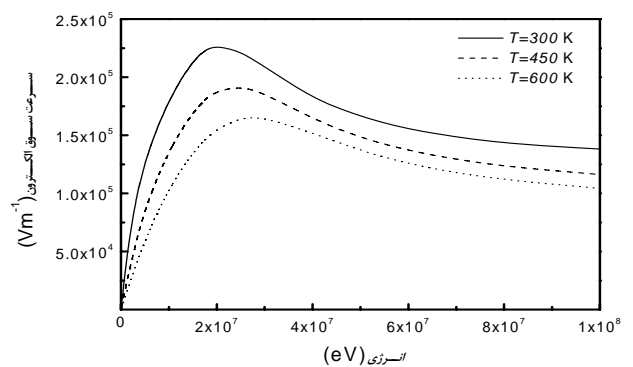
### نتیجه گیری:

همان طور که در این مقاله بررسی شد تفاوت در ساختار نوار انرژی  $InN$ ,  $GaN$ ,  $AlN$  از عوامل تأثیر گذار در متفاوت بودن خواص ترابرد الکترون ها در این ترکیبات است. از این روش، برای نمونه در مورد سرعت سوق در ترکیب  $GaN$ ، نتیجه می گیریم سرعت سوق الکترون در حد میدانهای الکتریکی قوی به طور قابل ملاحظه‌ای در این ترکیب زیاد است (همچنین سرعت سوق  $GaN$  بستگی کمی به دما دارد) در نتیجه استفاده از آن در ساخت ترانزیستورهای اثر میدان که در آنها تولید الکترون‌ها با سرعت بالا اهمیت دارد پیشنهاد می‌شود که اهمیت این محاسبات را روشن می‌سازد.

### مرجع‌ها:

- [1] M Iwaya, S terao, T Sano, T ukai, R Nakamura, S Kamiama, H Amano and I Akasaki, *J. Crystal Growth* **237-239** (2002) 951.
- [2] S Nakamura and G Fasol, *The Blue Laser Diode*, Springer-Verlag, Berlin (1997).
- [3] C. Moglestue, *Monte Carlo Simulation of semiconductor Device*, **1993**, Chapman and Hall
- [4] C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo for semiconductor and Device Simulation*, **1989**, Springer-Verlag
- [5] David K. Ferry "Semiconductors" Macmillan Publishing Company, New York, (1991).
- [6] Charles M. Wolfe and Nick Holonak, Jr; Gregory E. Stillman "Physical Properties of Semiconductors" Prentice-Hall, New Jersey, (1989).
- [7] B. E. Foutz, L. F. Eastman, U. V. Bhapkar and M. F. Shur, *J. Appl. Phys. Lett.* **70**, (1997) p2849.
- [8] E. Bellotti, B. K. Doshi and K. F. Brennan, *J. Appl. Phys.* **85**, (1999) P916.
- [9] S. K. O'Leary, B. E. Foutz and M. S. Shur, *J. Appl. Phys.* **83**, (1998) p826.
- [10] H. Morkoc, "Nitride Semiconductor and Devices", Springer-Verlag (1999).

شکل ۳، سرعت سوق الکترون‌ها بر حسب میدان الکتریکی را در ساختار وورتسایت  $GaN$  در دماهای متفاوت نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود، کاهش سرعت سوق با افزایش دما در میدانهای الکتریکی کمتر از میدان آستانه، ناشی از افزایش آهنگ پراکندگی درون دره‌ای (پراکندگی ناشی از فونون‌های آکوستیکی، پیژوالکتریک، ناخالصی‌های یونیزه) می‌باشد. کاهش سرعت در میدانهای بالا، به خاطر افزایش پراکندگی بین دره‌ای است. همچنین مشاهده می‌شود که ماکزیمم سرعت سوق با افزایش دما، کاهش یافته و به سمت میدانهای الکتریکی بالا متمایل می‌شوند. با افزایش دما آهنگ پراکندگی کل افزایش می‌یابد و انرژی الکترون‌ها در اثر برخوردها کاهش می‌یابد در نتیجه جمعیت الکترون‌ها در دره مرکزی  $\Gamma$  افزایش یافته و در دره‌های مجاور کاهش می‌یابد.



شکل ۵: سرعت سوق الکترون در ساختار وورتسایت  $GaN$  به صورت تابعی از میدان الکتریکی در دماهای شبکه متفاوت.

برای بررسی اثر جهت میدان الکتریکی بر روی خواص ترابردی الکترون در ساختار وورتسایت  $GaN$  در شبیه‌سازی مونت کارلو، میدان الکتریکی در دو جهت  $\Gamma-M$  (عمود بر محور  $c$ ) و  $\Gamma-A$  (موازی محور  $c$ ) اعمال شده است. شکل ۴ سرعت سوق الکترون در ساختار وورتسایت  $GaN$  را بر حسب میدان الکتریکی در دو جهت  $\Gamma-A$ ,  $\Gamma-M$  نشان می‌دهد.

در میدانهای الکتریکی پایین تحرک پذیری، از شیب نمودار سرعت - میدان محاسبه می‌شود در میدانهای زیر  $10^6 V/cm$ ، وقتی میدان در دو جهت  $\Gamma-A$ ,  $\Gamma-M$  اعمال می‌شود تحرک پذیری  $950 \text{ cm}^2 V^{-1} s^{-1}$ ،  $790 \text{ cm}^2 V^{-1} s^{-1}$  بدست می‌آید.