تخمین تحرکپذیری سیستم یک بعدی نانونوار گالیم نیترید در حضور ناخالصی یونیزه شده

بتول شرفی^۱، بهرام بهرامی^{*۲}، زینب کیامهر^۲، مجتبی گودرزی^۱ ^۱ گروه علوم پایه، دانشگاه صنعتی اراک، اراک، ایران ^{2*.} گروه فیزیک، دانشگاه تفرش، تفرش، ایران

> تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۱۱/۵ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۹/۲۱ تاریخ چاپ: ۱۴۰۳/۱۰/۱

اطلاعات مقاله

شاپای چاپی: 493x-2588 شاپای الکترونیکی: 4921-2588

* نویسنده مسئول <u>bahrami@tafreshu.ac.ir</u>



چکیدہ

ترکیبات نیترات با گاف نواری وسیع خود جایگاه مهمی در حوزه اپتوالکترونیک و قطعات الکترونیکی با توان و فرکانس بالا یافتهاند. از میان آنها GaN مهمترین و پرکاربردترین نیترید سه ظرفیتی است. در این پژوهش، تحرکپذیری سیستم یک بعدی نانونوار گالیم نیترید در حضور ناخالصی یونیزه شده در دمای صفر و دماهای پایین مورد بررسی قرار میدهیم و نتایج را با تحرکپذیری سیستم گاز الکترونی دو بعدی مقایسه می کنیم. برای محاسبات از معادله ترابرد بولتزمن در تقریب زمان واهلش با در نظر گرفتن پتانسیل ناخالصی یونیزه شده است. اثر پارامترهای فیزیکی مربوطه متفاوت از قبیل عرض نانونوار، انرژی فرمی و چگالی ناخالصی بر روی تحرک بررسی شده است. در پایان نانونوار گالیمنیترید رسم شده است. همانطور که انتظار میرفت، نتایج عددی نشان میدهد که تحرک نانونوار گالیمنیترید برای عرضهای خیلی بزرگ به سمت تحرک گاز الکترونی یک صفحه کاملاً دو بعدی میل می کند.

واژگان كليدى: تحركالكترونى، پراكندگى ناخالصى يونيزه شده، معادله ترابرد بولتزمن، گاليمنيتريد

مقدمه

اصطلاح نانوفناوری اغلب بر روی اندازه ساختار و تفاوت میان روش دستیابی کلی استوار میباشد. در چند سال گذشته بررسی تحرک پذیری نقطه های کوانتومی، سیمهای کوانتومی، سیمهای مولکولی و نانونوارها نواحی عمده پژوهش در فیزیک مزوسکوپیک بودند. عموما نوار به ساختاری گفته میشود که در یک جهت (جهت طولی) گسترش مییابد و در دو جهت دیگر بسیار محدود میباشد. اگر عرض صفحات نوار را کاهش داده، نانو نوارهایی باریک به وجود میآید که عرض محدود و طول نامحدودی دارند. خواص

نانو نوارها به هندسهی لبهها و عرض نانونوارها بستگی دارند که با تکنولوژی امروزه اندازه وشکل نانو نوارها به طور دقیقتر می توانند کنترل شوند [۱و ۲].

گالیوم نیتراید یک نیمرسانا است که خواص الکترونی این نیمرسانا از جمله گافانرژی عریض و ثابتهای دی الکتریک کوچک، ساخت لیزرهای نیمه رسانا با طول موج آبی و فرابنفش را میسر ساخته است [۳]. مهمترین پارامتر انتقال در مواد نیمهرسانا ضریب تحرکپذیری حاملها میباشد، که نشاندهنده ارتباط بین سرعت میانگین حاملها و میدان بولتزمن در تقریب زمان واهلش متناسب است. ویمان، (استمان) [10]، نگ و همکارانش [18]، نقش جابهجاشدگی را در پراکندگی بررسی کردند که در آن کاهش تحرک الکترون در غلظتهای کم به پراکندگی الکترونها نسبت داده شد به اینصورت که بوسیله جابه جا شدن حاملها که به عنوان مرکز پراکندگی کولمبی عمل میکنند این نتیجه تحرکپذیری را نشان میداد، توسعه دادند. آنها با موفقیت تحرك الكتروني نمونهها را با مقدار تحرك مناسب پيشبيني کردند. همچنین چن و همکارانش [۱۷]، برای محاسبه تحرک الکترونی میدانهای ضعیف از اصول متغیر استفاده کردند و نتایج خود را با نتایج تجربی در نمونههای قدیم مقایسه کردند. در نمونههای قدیم، تحرک الکترونی کم ناشی از زیر لایههای با کیفیت پایین و مشکلات مربوط به رشد میباشند. این روش توسط رود و گاسیکل تکرار شد و برای تحرک الکترونی میدان ضعیف در گالیم نیترید وابستگی تحرک به غلظت الکترونها با نادیده گرفتن اثر دمایی، در نظر گرفته شده است و اثر ناخالصی یونیزه شده، با تقریب بورن سنجیده شد. اکارزو ،ایداگا [۱۸] همچنین تحرک الکترونی گالیم نیترید را در میدانهای ضعیف با روش مونت کارلو محاسبه کردند [۱۹]. دادههای تجربی در وابستگی تحرک، به دما و سطح ناخالصی در بسیاری از مقالات گزارش شده است از جمله اینکه محاسبه تحرکپذیری گالیم نیترید در سال ۱۹۷۵ انجام شده، با این حال با وجود پیشرفت علم هنوز به تقریب تحلیلی به اندازه كافى براى توجيه اين وابستگى وجود ندارد[٢٠]. بررسى تحرکپذیری سیمهای کوانتومی، سیمهای مولکولی و نانونوارها حوزههای عمده پژوهش در فیزیک مزوسکوپیک بودند. هدف از این مقاله ارائه روش تحلیلی برای محاسبه تحرک در نانونوار گالیم نیترید ورتزایت در حضور ناخالصی كولمبى مىباشد، كه با استفاده از تقريب زمان واهلش، معادلهی بولتزمن را حل کرده و معادله رسانندگی و تحرک پذیری را بدست می آوریم. بنابراین می توان یک بر آورد از الكتريكي خارجي در حد ميدانهاي ضعيف است. عوامل مختلفي در پراکندگی حاملها در یک بلور دخالت دارند که از جمله آنها پراکندگی از ناخالصی های یونیزه شده می باشد. این ناخالصی ها در دماهای پائین مهمترین نقش را در فرآیندهای پراکندگی دارند. در این مقاله ترک در حضور ناخالصی یونیزه شده در نظر گرفته شده است، این ناخالصی به صورت کاملا تصادفی در یک نقطه قرار گرفته است. از آنجائیکه ناخالصی به صورت تصادفی در نظر گرفته می شود پس یک فاصله تعادلی برای آن نمی توان در نظر گرفت تا کمیتهای مختلف بر اساس این فاصله محاسبه شود. در عمل و به صورت آزمایشگاهی لایه نازک به روش برآرایی پرتومولکولی (The molecular beam epitaxy method) بر روی یک زیرلایه رشد داده می شود. عوامل پراکندگی کاملا وابسته به فرآیند روش لايه نشانی می باشند. همچنين انتخاب زيرلايه نقش بسيار مهمی در عوامل پراکندگی دارد. پس دو عامل فوق به صورت طبیعی نقش مؤثری بر تصادفی بودن مکان ناخالصی برعهده دارند [۲۳]. پس می توان گفت دانستن رفتار تحرکپذیری حاملها در حضور تعداد محدودی ناخالصی مهم میباشد. اگر ناخالصی در سیستم وجود نداشته باشد، تابع موج الكترون گسترده است و سيستم ترابری الکترونی خیلی بالایی دارد. با افزودن ناخالصی به سیستم از رسانایی الکترونی، به دلیل جایگزیده شدن تابع موج الکترون کاسته می شود. حامل های بار در گالیم نیترید دارای تحرک پذیری بالایی هستند به طوری که مقادیر گزارش شده برای آن از مرتبه (2000(cm²/V.S) است [۴-۸]. تحرک پذیری گالیم نیترید توسط چندین گروه بررسی شده است[۱۴-۹]. که به طور واضح افزایش تحرکپذیری در گالیم نیترید مشاهده می شود، که به طور واضح افزایش تحرک پذیری در گالیم نیترید مشاهده می شود. رود و گاسکیل [۱۲]، برای محاسبه تحرک پذیری از یک فرمول تجربی به عنوان تابعی از غلظت ناخالصی استفاده کردند، در این روش، نتایج بهدست آمده در غلظتهای کم الکترون با دادههای تجربی تطابق دارند اما نتایج به دست آمده در غلظتهای بالاتر تطابق ندارد. لووک و همکارانش[۱۳] و لووک و مولنار [۱۴]، برای تحرکپذیری الكترون روش دو لايهاى را توسعه دادند كه اين مدل با حل معادله

تابع توزیع الکترون و در نتیجه خواص ترابرد بدست آورد. همچنین رابطه تحرکپذیری را برای دماهای پایین برحسب پارامترهای فیزیکی محاسبه میکنیم.

۱- مدلسازی براساس معادله ترابرد بولتزمن

اساس این کار پژوهشی مبنی بر استفاده از تقریب زمان واهلش برای حل معادله بولتزمن میباشد. معادله بولتزمن یک تقریب خوبی برای بهدست آوردن ترابرد سیستمهای فیزیکی به شمار میرود. این معادله را میتوان برای توصیف رفتار حاملها در حضور منابع پراکندگی در سیستمهای شبه یک بعدی مانند نانونوارها مورد استفاده قرار داد. به منظور سادگی حل و بحث معادله بولتزمن انتخاب شرایط اولیه اعمال شده بر روی بلور ضروری است. بدین منظور در این پژوهش شرایط را طوری در نظر می گیریم که اولاً، میدان الکتریکی خارجی اعمال شده بر بلور نیمهرسانا یکنواخت بوده و مستقل از زمان باشد. همچنین ترابری الکترونها در ماده نیمهرسانا را در حالت پایا بررسی میکنیم. این بدان معناست که تابع توزیع الکترونها در بلور به مختصه مکانی بلور وابسته نيست. به منظور حل معادله بولتزمن تحت شرايط حالت پایا، فرض می کنیم الکترون ها در غیاب هر گونه میدان الکتریکی خارجی در پایین ترین نوار رسانش با تابع توزیع حالت تعادل فرمی دیراک $f_0(k)$ حضور داشته باشند. ذرات در ماده توسط ناخالصیهای یونیزه شده پراکنده می شوند. پراکندگی از ناخالصیهای یونیزه شده در اثر وجود اتمهای ناخالصی در نيمهرسانا به وجود ميآيد. جايگزيني يک اتم ناخالصي در يک محل شبکه باعث برهم خوردن نظم تناوبی بلور می گردد. برهم كنش الكترون با ناخالصي باعث پراكندگي الكترون خواهد شد [۲۱ و ۲۲]. پراکندگی از ناخالصیهای یونیزه شده با استفاده از پتانسیل کولمبی در محاسبات وارد شده است. برخوردها در تقریب زمان واهلش، بر این فرض استوار است که احتمالی وجود دارد که

در واحد زمان یک الکترون در نوار n با بردار موجk، در نتيجه يک برخورد به نوارn' با بردار موجk' پراکنده شود. در اینجا معادله خطی بولتزمن را برای نانونوار گالیم نیترید به کار میبریم و رسانندگی نانونوار گالیم نیترید را با در نظر گرفتن نقاط پراکندگی به صورت مراکز بارهای ناخالصی درون نوار، بدست می آوریم. در این بخش تحرک پذیری را با استفاده از معادله بولتزمن در تقريب زمان واهلش محاسبه میکنیم. نانونوار نیمهرسانا دارای پهنای W در راستای محور و طول بینهایت در راستای محور x بر روی یک زیر لایه yبا ثابت دی الکتریک \mathcal{E}_r را در نظر می گیریم. با فرض اینکه حاملها در یک پتانسیل سد بینهایت محدود باشند، H=هامیلتونی حاملها در سیستم شبه یکبعدی به صورت نوشته می شود، که در آن $H_0+U(x,y)$ در غياب برهمكنش كولمبي و پتانسيل كولمبي ناخالصي که در مکان $(0, rac{W}{2}, d)$ قرار گرفته است به U(x, y)صورت زیر میباشد:

$$U(x,y) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\varepsilon_r} \frac{1}{\sqrt{x^2 + (y - \frac{W}{2})^2 + d^2}}$$
(1)

ويژه مقادير هاميلتونى H_{0} بصورت:

$$\varepsilon_{nk} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m^* W^2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$
(۲)

که در آن k بردار موج در راستای محور x و m^* جرم موثر

و ویژه توابع هامیلتونی H_0 به صورت زیر میباشند:

$$|n,k\rangle = \sqrt{\frac{2}{W}}e^{ikx}\sin\frac{n\pi y}{W} \tag{(7)}$$

معادله خطی بولتزمن سیستمهای شبه یک بعدی در تقریب زمان واهلش به صورت زیر بهدست میآید[۴]:

$$-\frac{eE}{\hbar}\frac{df(\varepsilon_{nk})}{dk} = \sum_{n'}\sum_{k'}P_{n,n'}(k,k') \times \left[f_{n'}(k') - f_n(k)\right]$$
(*)

که در آن E میدان الکتریکی اعمال شده، $f_n(k)$ تابع توزیع یک حالت با بردار موج k و $P_{k,k'}$ احتمال پراکندگی الکتروناز kبه k در اثر وجود ناخالصی بصورت زیر میباشد:

$$P_{n,n'}(k,k') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n',k'|U|n,k\rangle|^2_{av} \delta(\varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k'})$$
(δ)

$$\langle n', k' | U | n, k \rangle = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{2}{WL} \frac{1}{\varepsilon_r} v(n, k; n', k')$$
^(F)

که در آن
$$v$$
 عناصر ماتریس پراکندگی به صورت زیر میباشد:

$$v(n,k;n',k') = 2 \int_0^W dy K_0(qy) \sin\left(\frac{n\pi y}{W}\right) \sin\left(\frac{n'\pi y}{W}\right)$$
^(Y)

که در آن

$$q = (k_F^n - k_F^{n'}) \tag{(A)}$$

و K_0 تابع بسل اصلاح شده نوع دوم به صورت زیر نوشته می شود:

$$K_0 = \int_0^\infty \frac{\cos(xt)}{\sqrt{t^2 + 1}} dt \tag{9}$$

زمان واهلش au_n برایn امین حالت زیر نوار برحسب انرژی فرمی بصورت زیر بدست میآید :

$$\tau_n(\varepsilon_F) = \frac{m^*}{2\pi^2\hbar} \sum_n '(T^{-1})'_{nn} k_F \tag{(1.1)}$$

 $T_{nn'}$ که در آن $\overset{n'}{F}$ بردار موج فرمی در زیر نوار $\overset{n'}{r}$ میباشد و عناصر ماتریس انتقال میباشد که به صورت زیر بهدست میآید:

$$\begin{split} T_{nn'} &= \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \frac{1}{(\varepsilon_r)^2} \frac{16n_i}{W} \frac{1}{\pi^2} \Bigg[\delta_{nn'} \sum_{\mu} \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^2 \frac{k_F^n}{k_F^{\mu}} v^2 \left(n, k_F^n; \mu, k_F^{\mu}\right) \\ &- \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^2 v^2 \left(n, k_F^n; n', k_F^{n'}\right) \Bigg] \end{split}$$

(11)

معادله رسانندگی به صورت زیر بدست میآید:

$$\sigma = \frac{2e^2}{W} \frac{2}{m^*} \frac{1}{\pi} \sum_n k_F^n \tau_n(\varepsilon_F) \tag{17}$$

زمان واهلش
$$au_n(arepsilon_F)$$
 را از رابطه (۱۰) جایگزین کرده و در
نهایت σ را به صورت زیر بدست میآوریم:

$$\sigma = \frac{2e^2}{h} \frac{2}{\pi^2 W} \sum_{n} \sum_{n'} k_F^n k_F^{n'} (T^{-1})_{nn'} \qquad (17)17)$$

$$\sigma = \frac{2e^{2}}{h} \left(\frac{\varepsilon_{r}}{e^{2}}\right)^{2} \frac{1}{8n_{i}} \sum_{n,n'} k_{F}^{n} k_{F}^{n'} \left[\delta_{nn'} \sum_{\mu} \left(\frac{m^{*}}{\hbar^{2}}\right)^{2} \frac{k_{F}^{n}}{k_{F}^{\mu}} - \left(\frac{m^{*}}{\hbar^{2}}\right)^{2} v^{2} \left(n, k_{F}^{n}, n', k_{F}^{n'}\right)\right]_{nn'}^{-1}$$
(14)

نوار گالیم نیترید را به صورت زیر بدست می آوریم. حال می توان تحرک را بر حسب رسانندگی بصورت:

$$\mu = \frac{\sigma}{ne} \tag{10}$$

به دست آورد که در آن

$$n = \frac{2}{\pi W} \sum_{m} k_F^m \tag{19}$$

چگالی الکترونها میباشد. با استفاده از رابطه (۱۵) میتوانیم تحرک را برحسب پارامترهای مختلف مثل انرژی فرمی، پهنای نانونوار و فاصله ناخالصی از نانونوار و غیره بدست آوریم. در ادامه به محاسبه تحرک یک سیستم کاملاً دو بعدی میپردازیم. برای یک صفحه کاملاً دو بعدی ترازهای انرژی به صورت زیر میباشد:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \tag{1Y}$$

پتانسیل کولمبی ناخالصیهای درون صفحه به صورت زیر نوشته میشود:

$$U = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r r} \tag{11}$$

زمان واهلش را به صورت زير تعريف مي كنيم [۵].

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \sum_{\vec{k}}^{\sum (1 - \cos \theta_{k\vec{k}'}) \left(\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}'}\right)} u^2 \left(\vec{k} - \vec{k'}\right) \quad (19)$$

که در آن $heta_{k,k'}$ زاویه بین بردار موج $ec{k}$ و $ec{k}$ است. تبدیل فوریه پتانسیل کولمبی دو بعدی به صورت:

بصو
$$u(\vec{q}) = \frac{2\pi e^2}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r q}$$
 (۲۰)

$$\tau(\vec{k}) = \left(\frac{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}{2\pi e^2}\right)^2 \frac{2\pi}{n_i} \frac{\hbar\varepsilon_F}{\pi} \tag{(1)}$$

و رسانندگی یک سیستم کاملا دو بعدی به صورت زیر به دست میآید:

$$\sigma^{2D} = \frac{e^2}{h} \left[\left(\frac{4\pi\varepsilon_0 \varepsilon_r}{2\pi e^2} \right)^2 \frac{4}{n_i} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right)^2 \right] \tag{(TT)}$$

رابطه تحرک به صورت:

$$\mu^{2D} = \frac{\sigma^{2D}}{n^{2D}e} \tag{(YT)}$$

به دست میآید، که در آن n^{2D} چگالی الکترونی یک صفحه کاملاً دو بعدی میباشد.

$$n^{2D} = \frac{\varepsilon_F}{2\pi} \frac{2m^*}{\hbar^2} \tag{(7f)}$$

که در آن *E_F* انرژی فرمی یک صفحه کاملاً دو بعدی میباشد. با استفاده از رابطه (۲۳) میتوانیم تحرک سیستم گاز الکترون

دوبعدی را برحسب انرژی فرمی بدست آوریم و با مقادیر بدست آمده از رابطه (۱۵) برای یک نانونوار مقایسه کنیم. در پایان رابطه تحرک پذیری سیستم یک بعدی نانونوار گالیم نیترید در حضور ناخالصی یونیزه شده در دمای غیر صفر را

مورد بررسی قرار میدهیم. برای دمای غیر صفر رسانندگی به صورت زیر بدست میآید:

$$\sigma = \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \sigma(\varepsilon) \tag{74}$$

$$\sigma = \frac{2e^2}{h} \left(\frac{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}{e^2}\right)^2 \frac{1}{8n_i} \int k^n k^{n'} d\varepsilon \left[\delta_{nn'} \sum_{\mu} \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^2 \frac{k^n}{k^{\mu}} v^2(n, k^n; \mu, k^{\mu}) - \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^2 v^2(n, k^n; n', k^{n'})\right]_{nn'}^{-1} \frac{1}{\varepsilon_F T} \frac{e^{\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F} - 1\right)}}{\left(1 + e^{\left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_F} - 1\right)}\right)^2}$$
(Y?)

(۱۵) میتوان تحرک سیستم نانونوار را برحسب پهنای نانونوار برای پارامترهای متفاوت بدست آورد.

۲- محاسبات و نتایج

با توجه به مطالب بیان شده در بخش سوم، تئوری لازم برای بررسی تحرکپذیری در نانونوار گالیم نیترید را با در نظر گرفتن پراکندگی از مراکز تصادفی بارهای ناخالصی، بدست آوردیم. همچنین مکانیزم غالب پراکندگی حاملها را پراکندگی برهمکنش کولمبی ناشی از بارهای ناخالصی تصادفی در مجاورت نانونوار در نظر گرفتیم. در این بخش تحرکپذیری سیستم مورد نظر را در دوحالت دمای صفر و فرترن و نرمافزار origin، نمودار تحرکپذیری را بر حسب فرترن و نرمافزار (W)، افزایش انرژی فرمی (F_{F}) و فاصلهی ناخالصی تا نوار (D)، رسم خواهیم کرد. محاسبات را برای نانونوار گالیمنیترید با ساختار ورتزایت و جرم موثر = *mمانونوار گالیمنیترید با ساختار ورتزایت و جرم موثر = *3

۲-۲. تحرک پذیری برای مقادیر ناخالصی مختلف

نمودارهای تحرکپذیری برای مقادیر ناخالصی مختلف برحسب پهنای نانونوار، انرژی فرمی، فاصله ناخالصی از نانونوار و دما با استفاده از رابطهی (۱۵) و برای یک صفحه کاملاً دو بعدی با استفاده از رابطه (۲۳) رسم شد. در شکل (الف) علاوه بر نمایش افزایش تحرک پذیری برحسب افزایش انرژیفرمی، تاثیرات مقادیر مختلف ناخالصی را نیز در نظر گرفتهایم. همان طور که می بینید، با کاهش ناخالصی تحرکپذیری افزایش مییابد. یعنی هر چه مقدار ناخالصی در نانونوار کمتر باشد، حاملها کمتر پراکنده می شوند در نتیجه تحرکپذیری افزایش مییابد. در شکل (الف) تحرکپذیری یک لایه کاملاً دوبعدی بر حسب انرژی فرمی نیز رسم شده است که بهصورت پیوسته با افزایش انرژی فرمی افزایش مییابد. نمودارهای موجی شکل مربوط به نانونوار و خطوط مستقیم نشان داده شده در شکل (ب) مربوط به تحرک یک لایه کاملاً دو بعدی می باشد که با استفاده از رابطه (۲۳) و برای مقایسه با تحرک پذیری نانونوار رسم شده است. در شکل (ج) نمودار تحرک نانونوار گالیمنیترید بر حسب دمای بدون بعد $\overline{T} = T/T_F$ برای مقادیر متفاوت ناخالصی رسم شده است. بیشترین تحرک پذیری را زمانی خواهیم داشت که کمترین ناخالصی را داشته باشیم. طبق شکل (ج) مشاهده می شود که با افزایش دما، تحرک نیز افزایش مى يابد زيرا با افزايش دما، سرعت حركت الكترون ها افزايش مى يابد و الكترونها مدت زمان كمترى اثر پتانسيل كولمبى ناشى از یونهای ناخالصی را احساس میکنند. در نتیجه پراکندگی الکترون کمتر می شود و در نهایت تحرک پذیری افزایش می یابد. در شکل (د) علاوه بر نمایش افزایش تحرک پذیری بر حسب افزایش فاصله ناخالصی از نوار، تاثیرات مقادیر مختلف ناخالصی را نیز در نظر گرفتهایم. همان طور که می بینید با کاهش ناخالصی تحرک پذیری افزایش می یابد یعنی هر چه مقدار ناخالصی در نانونوار کمتر باشد، حاملها کمتر پراکنده می شوند در نتیجه تحرک پذیری افزایش مىيابد.



شکل (۱):ن مودار تحرکپذیری برای مقادیر مختلف چگالی ناخالصی الف) برحسب انرژی فرمی در W = 20nm و 0 = 0 ، ب) برحسب پهنای نانونوار در $E_F = 100meV$ و 0 = b، چ) بر حسب دما در W = 20nm ، $\mathcal{E}_F = 100meV$ و 0 = b و د) بر حسب فاصله ناخالصی از نانونوار در W = 100meV و $\mathcal{E}_F = 100meV$ می باشد.

۲-۲. تحرکپذیری برای فواصل مختلف ناخالصی از نانونوار

در شکل (الف)، تاثیرات فاصله ناخالصی از نوار به ازای اترژی فرمی های مختلف در نظر گرفته شده است. همان طور که میبینید، با افزایش فاصله ناخالصی از نانونوار تحرکپذیری افزایش مییابد، به این دلیل که با افزایش فاصله ناخالصی از نانونوار، برهم کنش بین الکترونها و ناخالصیها کمتر میشود. در نتیجه پراکندگی حاملها نیز کمتر شده و در نهایت تحرکپذیری افزایش مییابد. در شکل (ب) نمودار ترک پذیری نانونوار گالیم نیترید بر حسب عرض نوار (*W*) برای سه مقدار متفاوت فاصله ناخالصی از نانونوار با استفاده برای سه مقدار متفاوت فاصله ناخالصی از نانونوار با استفاده از رابطه (۱۵) رسم شده است. در شکل (ب) همان طور که افزایش مییابد، به این دلیل که با افزایش فاصله ناخالصی از نوار، بر هم کنش بین الکترونها و ناخالصیها کمتر میشود. در نتیجه پراکندگی حاملها نیز کمتر شده و در نهایت تحرکپذیری افزایش مییابد.



۲-۳. نمودار تعداد زیرنوارها برحسب پهنای نانونوار

نمودار تعداد زیرنوارها بر حسب انرژی فرمی نانونوار در شکل (الف) و برحسب پهنای نانونوار در شکل (ب) رسم شده است. همانطور که از شکل پیداست با افزایش انرژیفرمی و پهنای نوار، تعداد زیرنوارها به صورت پلهای افزایش خواهد یافت.



سکل (۲) . تمودار تعداد ریرتوارها الف) بر حسب ادری قرمی برای – v میباشد. $e_F = 100 meV$ و ب) بر حسب پهنای نانونوار که $e_F = 100 meV$ میباشد.

۴-۴. تحرک پذیری بر حسب پهنای نانونوار برای مقادیر متفاوت جرمموثر

در شکل (الف) تحر Σ پذیری بر حسب پهنای نانونوار برای هر دو ساختار بلندروی و ورتزایت که دارای جرمموثر متفاوت می اشند، نشان داده شده است. تحر Σ پذیری بیشتر در ساختار بلندروی به دلیل جرم موثر کمتر این ساختار می باشد. جرم موثر بلندروی $m^* = 0.15$ و جرم موثر ورتزایت 0.2 $m^* = m$ می باشد.



 $arepsilon_F = m$ شكل(۴): نمودار تحر ك پذيرى برحسب پهناى نانونوار با $arepsilon_F = n_i$ براى ساختار ورتزايت $n_i = 10^{12} cm^{-2}$ براى ساختار ورتزايت و بلندروى مى باشد.

۳- نتیجه گیری

نانو به عنوان یک فناوری کاربردی، از همگرایی علوم فیزیک، شیمی و زیست به وجود آمده است و یک رویکرد جدید در تمامی رشتههاست. مطالعات نظری و مشاهدات تجربی در برهمكنش موج الكترومغناطيسي با مواد نشان داده است كه در مقایسه با مواد تودهای، نانوساختارها با توجه به مساحت سطح بزرگ و اثرات محدودیت کوانتومی، خواص گرمایی، شیمیایی، الکترونی و اپتیکی متفاوتی از خود نشان مىدهند. به همين دليل بررسى ساختار الكترونى موادى كه دارای اندازه محدود میباشند، در فهم قطعات الکترونی و اپتو الکترونی اهمیت دارند. تحرک الکترونی به عنوان پارامتر مهمی برای مواد قابل استفاده در وسایل الکترونیکی در نظر گرفته می شود، لذا رفتار تحرک پذیری آنها در حضور تعداد محدودی ناخالصی مهم میباشد. بررسی تحرک پذیری نقطه های کوانتومی، سیمهای کوانتومی، سیمهای مولکولی و نانونوارها نواحی عمده پژوهش در فیزیک مزوسکوپیک بودند. ترکیبات نیترات با گاف نواری وسیع خود جایگاه مهمی در حوزه اپتوالکترونیک و قطعات الکترونیکی با توان و فركانس بالا يافتهاند. [°] Y. Du, B. Chang, X. Fu, X. Wang, M. Wang, "Electronic structure and optical properties of zinc-blende GaN", *Optik-International Journal for Light and Electron Optics*, vol. 23, no. 24, pp. 2208-2212, 2012.

[7] G. Y. Gao, K. L. Yao, Z. L. Liu, Y. L. Li, Y. C. Li, Q. M. Liu, "Ab initio pseudopotential studies of the pressure dependences of structural, electronic and optical properties for GaN". *Solid state communications*, vol. 138, no. 10-11, pp. 494-497, 2006.

[^V] K. Shimada, T. Sota, K. Suzuki, "Firstprinciples study on electronic and elastic properties of BN, AlN, and GaN". *Journal of Applied Physics*, vol. 84, no. 09, pp. 4951-4958, 1998.

[^A] C. Bungaro, K. Rapcewicz, J. Bernholc, "Ab initio phonon dispersions of wurtzite AlN, GaN, and InN", *Physical Review*, vol. 61, no. 10, pp. 6720-6725, 2000.

[[¶]] W. A. Hadi, S. Chowdhury, M. S. Shur, S. K. O'Leary, "A detailed characterization of the transient electron transport within zinc oxide, gallium nitride, and gallium arsenide". *Journal of Applied Physics*, vol. 112, no. 12, pp. 123722, 2012.

[1.] K. Hirama, Y. Taniyasu, M. Kasu, "AlGaN/GaN high-electron-mobility transistors with low thermal resistance grown on single-crystal diamond (111) substrates by metalorganic vapor-phase epitaxy". *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 16, pp. 162112, 2011.

[1] R. Neuberger, G. Müller, O. Ambacher, M. Stutzmann, "High-Electron-Mobility AlGaN/GaN Transistors (HEMTs) for Fluid Monitoring Applications". *physica status solidi*, vol. 185, no. 01, pp. 85-89, 2001.

[¹^Y] D. L. Rode, D. K. Gaskill, "Electron Hall mobility of n- GaN", *Appl. Phys*, vol. 66, pp. 2418, 1995.

[1^r] D. C. Look, D.C. Reynolds, J. W. Hemsky, J. R. Sizelove, R. L. Jones, and R. J. Molnar, "Defect Donor and Acceptor in GaN", *Phys. Rev*, vol. 79, pp. 2273, 1997.

در این پژوهش، تحرک پذیری سیستم یک بعدی نانونوار گالیم نیترید در حضور ناخالصی یونیزه شده در دمای صفر و دماهای پایین مورد بررسی قرار گرفت و نتایج با تحرک پذیری سیستم گاز الکترونی دو بعدی مقایسه شد. برای محاسبات از معادله ترابرد بولتزمن در تقریب زمان واهلش با در نظر گرفتن پتانسیل ناخالصی یونیزه شده استفاده شد. اثر پارامترهای فیزیکی مربوطه متفاوت از قبیل عرض نانونوار، انرژی فرمی و چگالی ناخالصی بر روی تحرک بررسی شده و در پایان تحرک الکترونی بر حسب تابعی از انرژی فرمی، فاصله میان ناخالصی با حاملها و عرض نانونوار گالیمنیترید رسم شد. در دماهای پایین فرایند پراکندگی غالب پراکندگی از ناخالصیهای یونیزه شده میباشد که این نوع پراکندگی مهمترین عامل در تحت تاثیر قراردادن تحرکیذیری در دماهای پایین در نظر گرفته می شود. افزایش تحرک پذیری را در افزایش فاصله ناخالصی از نانونوار نشان دادیم که علت افزایش تحرک پذیری به خاطر ضعيفتر شدن برهمكنش كولمبى بين ناخالصىها و الكترونها مي باشد. همچنين با افزايش انرژي فرمي به علت افزايش تعداد زیرنوارها تحرکپذیری افزایش می یابد و مشاهده کردیم که تحرکپذیری سیستمهای یک بعدی برای عرضهای بینهایت به سمت تحرک پذیری یک سیستم کاملاً دو بعدی میل می کند. منابع

[¹] X. Li, J. Xu, Y. Tang, et al. "GaN based ultraviolet detectors and its recent development", *Infrared and Laser Engineering*, 2006, vol. 35, no. 3, pp. 276-280, 2006.

[^Y] M. Benaissa, L.Gu, M. Korytov, T. Huault, P. Van Aken, J. Brault, "Phase separation in GaN/AlGaN quantum dots". *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 04, pp. 141901, 2009.

[r] P. Rinke, M. Winkelnkemper, A. Qteish, D. Bimberg, J. Neugebauer, M. Scheffler, "Consistent set of band parameters for the group-III nitrides AlN, GaN, and InN", *Physical Review B*, vol. 77, no. 07, pp. 075202-1 – 075202-15, 2008.

[[£]] M. Lundstrom, "Fundamentals of Carrier Transport, 2nd edn", *Measurement Science and Technology*, vol. 13, no. 02, pp. 230, 2002. Applied Physics letters, vol. 75, no. 07, pp. 953-955, 1999.

 $[^{\gamma} \cdot]$ N. S. Mansour, K. W. Kim, M. A. Littlejohn, "Theoretical study of electron transport in gallium nitride". *Journal of Applied Physics*, vol. 77, no. 06, pp. 2834-2836, 1995.

[^ү] J. Feilhauer, M. Moško, "Quantum and Boltzmann transport in a quasi-onedimensional wire with rough edges". *Physical Review B*, vol. 83, pp. 245328, 2011.

[^{YY]} M. I. Katsnelson, A. K. Geim,
"Electron scattering on microscopic corrugations in grapheme, Philosophical Transactions of the Royal Society of London A, Mathematical", *Physical and Engineering Sciences*, vol. 366, pp. 195-204, 2008.

[23]. S. D. Sarma, E. H. Hwang, "Shortrange disorder effects on electronic transport in two-dimensional semiconductor structures", *Physical Review B*, vol. 89, pp. 121413, 2014. [12] D. C. Look, R. J. Molnar, "Degenerate layer at GaN/sapphire interface: Influence on Halleffect measurements", *Appl. Phys*, vol. 70, pp. 3377, 1997.

[1°] N. Weimann and L. Eastman, J. Appl, "Scattering of electrons at threading dislocations in GaN", *Journal of Applied Physics*, vol. 83, no. 07, pp. 3656, 2012.

[¹] H. Ng, D. Doppalapudi, T. Moustakas, N. Weimann, and L. Eastman, "The role of dislocation scattering in n-type GaN films", *Applied Physics Letters*, vol. 73, pp. 821, 1998.

[^{\V}] S. Dhar, S. Ghosh, "Low field electron mobility in GaN", *Journal of applied physics*, vol. 86, no. 05, pp. 2668-2676, 1999.

[1A] M. Akarsu, S. Aydogu, O. Ozbas, "Calculation of the electron mobility of GaN semiconductor compound using the Monte Carlo method". *Romanian Journal of Physics*, vol. 50, pp. 869, 2005.

[14] J. B. Webb, H. Tang, S. Rolfe, J. A. Bardwell, "Semi-insulating C-doped GaN and high-mobility AlGaN/GaN heterostructures grown by ammonia molecular beam epitaxy".



Estimation of the mobility of a one-dimensional gallium nitride nanowire system in the presence of ionized impurity

¹ B. Sharafi, ^{2*} B. Bahrami, ² Z. Kiamehr, ¹ M. Goodarzi

¹ Department of Science, Arak University of Technology, Arak, Iran

^{2*} Department of Physics, Tafresh University, Tafresh, Iran

Article details	Abstract
Received: 2023/01/25	Nitrate compounds III-N with a wide band gap have an important role
Accepted: 2024/12/11	in the field of optoelectronics and electronic devices with high
Published:2024/12/21	frequency and power. Gallium nitride (GaN) has emerged as one of the
	most important and widely used semiconducting materials among them. In this article, the electron mobility in one-dimensional
ISSN: 2588-493x eSSN: 2588-4821	nanoribbon gallium nitride in the presence of impurities has been investigated. We compare our results with the electron mobility of two-dimensional systems. The Boltzmann transport equation and relaxation time approximation considering the ionized impurity
Correspondence email: bahrami@tafreshu.ac.ir	potential are used in calculations. The influence of different relevant physical parameters such as the width of nanoribbon strips, Fermi energy, and impurity density on the mobility is examined. Finally, the electron mobility as a function of Fermi energy, the distance between impurity with carriers, and the width of nanoribbons for gallium
	nitride are plotted. As expected, numerical results show that the mobility of GaN nanoribbon for a very large width moves toward
	mobility of GaN nanoribbon for a very large width moves toward

mobility in a two-dimensional electron gas.

Keywords: Fermi Energy, Gallium Nitride, Boltzmann Transport Equation, Nanoribbon.

43