

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

بتول شرفی<sup>۱</sup>، بهرام بهرامی<sup>۲\*</sup>، زینب کیامهر<sup>۲</sup>، مجتبی گودرزی<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup> گروه علوم پایه، دانشگاه صنعتی اراک، اراک، ایران

<sup>۲\*</sup> گروه فیزیک، دانشگاه تفرش، تفرش، ایران

## چکیده

اطلاعات مقاله

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 نیتريد سه ظرفیتی است. در این پژوهش، تحرک‌پذیری سیستم یک بعدی نانونوار گالیم نیتريد 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 می‌کنیم. برای محاسبات از معادله ترابرد بولتزمن در تقریب زمان واهلش با در نظر گرفتن پتانسیل ناخالصی یونیزه شده استفاده شده است. اثر پارامترهای فیزیکی مربوطه متفاوت از قبیل عرض نانونوار، انرژی فرمی و چگالی ناخالصی بر روی تحرک بررسی شده است. در پایان تحرک الکترونی بر حسب تابعی از انرژی فرمی، فاصله میان ناخالصی با حامل‌ها و عرض نانونوار گالیم‌نیتريد رسم شده است. همانطور که انتظار می‌رفت، نتایج عددی نشان می‌دهد که تحرک نانونوار گالیم‌نیتريد برای عرض‌های خیلی بزرگ به سمت تحرک گاز الکترونی یک صفحه کاملاً دو بعدی میل می‌کند.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۱۱/۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۹/۲۱

تاریخ چاپ: ۱۴۰۳/۱۰/۱

شاپای چاپی: 2588-493x

شاپای الکترونیکی: 2588-4921

\* نویسنده مسئول

[bahrami@tafreshu.ac.ir](mailto:bahrami@tafreshu.ac.ir)



واژگان کلیدی: تحرک الکترونی، پراکندگی ناخالصی یونیزه شده، معادله ترابرد بولتزمن، گالیم‌نیتريد

## مقدمه

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

گالیوم نیتريد 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

اصطلاح نانوفناوری اغلب بر روی اندازه ساختار و تفاوت میان روش دستیابی کلی استوار می‌باشد. در چند سال گذشته بررسی تحرک‌پذیری نقطه‌های کوانتومی، سیم‌های کوانتومی، سیم‌های مولکولی و نانونوارها نواحی عمده پژوهش در فیزیک مزوسکوپیک بودند. عموماً 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

بولتزمن در تقریب زمان واهلش متناسب است. ویمان، (استمان) [۱۵]، نگ و همکارانش [۱۶]، 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 جابه‌جا شدن حامل‌ها که به عنوان مرکز پراکندگی کولمبی عمل می‌کنند این نتیجه تحرک‌پذیری را نشان می‌داد، توسعه دادند. آنها با موفقیت تحرک الکترونی نمونه‌ها را با مقدار تحرک مناسب پیش‌بینی 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 نیتريد 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 نیتريد را در میدان‌های ضعیف با روش مونت‌کارلو 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 نیتريد در سال ۱۹۷۵ انجام شده، با این حال با وجود پیشرفت علم هنوز به تقریب تحلیلی به اندازه کافی برای توجیه این وابستگی وجود ندارد [۲۰]. بررسی 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 نیتريد ورتزایت در حضور ناخالصی کولمبی می‌باشد، که با استفاده از تقریب زمان واهلش، معادله‌ی بولتزمن را حل کرده و معادله رسانندگی و تحرک‌پذیری را بدست می‌آوریم. بنابراین می‌توان یک برآورد از

الکتریکی خارجی در حد میدان‌های ضعیف است. عوامل مختلفی در پراکندگی حاملها در یک بلور دخالت دارند که از جمله آنها پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه شده می‌باشد. این ناخالصی‌ها 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 می‌شود پس یک فاصله تعادلی برای آن نمی‌توان 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 می‌شود. عوامل پراکندگی کاملا وابسته به فرآیند روش لایه نشانی می‌باشند. همچنین انتخاب زیرلایه نقش بسیار مهمی در عوامل پراکندگی دارد. پس دو عامل فوق به صورت طبیعی نقش مؤثری بر تصادفی بودن مکان ناخالصی برعهده دارند [۲۳]. پس می‌توان گفت دانستن رفتار تحرک‌پذیری حاملها در حضور تعداد محدودی ناخالصی مهم می‌باشد. اگر ناخالصی در سیستم وجود نداشته باشد، تابع موج الکترون گسترده است و سیستم ترابری الکترونی خیلی بالایی دارد. با افزودن ناخالصی به سیستم از رسانایی الکترونی، به دلیل جایگزیده شدن تابع موج الکترون کاسته می‌شود. حامل‌های بار در گالیم نیتريد دارای تحرک‌پذیری بالایی هستند به طوری که مقادیر گزارش شده برای آن از مرتبه  $(2000 \text{ cm}^2 / \text{V} \cdot \text{S})$  است [۸-۴]. تحرک‌پذیری گالیم نیتريد توسط چندین گروه بررسی شده است [۹-۱۴]. که به طور واضح افزایش تحرک‌پذیری در گالیم نیتريد مشاهده می‌شود، که به طور واضح افزایش تحرک‌پذیری در گالیم نیتريد مشاهده می‌شود. رود و گاسیکل [۱۲]، برای محاسبه تحرک‌پذیری 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 الکترون روش دو لایه‌ای را توسعه دادند که این مدل با حل معادله

در واحد زمان یک الکترون در نوار  $n$  با بردار موج  $k$ ، در نتیجه یک برخورد به نوار  $n'$  با بردار موج  $k'$  پراکنده شود. در اینجا معادله خطی بولتزمن را برای نانونوار گالیم نیتريد به کار می‌بریم و رسانندگی نانونوار گالیم نیتريد را با در نظر گرفتن نقاط پراکندگی به صورت مراکز بارهای ناخالصی درون نوار، بدست می‌آوریم. در این بخش حرکت پذیری را با استفاده از معادله بولتزمن در تقریب زمان واهلش محاسبه می‌کنیم. نانونوار نیمه‌رسانا دارای پهنای  $W$  در راستای محور  $y$  و طول بی‌نهایت در راستای محور  $x$  بر روی یک زیر لایه با ثابت دی الکتریک  $\epsilon_r$  را در نظر می‌گیریم. با فرض اینکه حاملها در یک پتانسیل سد بی‌نهایت محدود باشند، هامیلتونی حاملها در سیستم شبه یک‌بعدی به صورت  $H = H_0 + U(x, y)$  نوشته می‌شود، که در آن  $H_0$  هامیلتونی در غیاب برهمکنش کولمبی و پتانسیل کولمبی ناخالصی  $U(x, y)$  که در مکان  $(0, \frac{W}{2}, d)$  قرار گرفته است به صورت زیر می‌باشد:

$$U(x, y) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\epsilon_r} \frac{1}{\sqrt{x^2 + (y - \frac{W}{2})^2 + d^2}} \quad (1)$$

ویژه مقادیر هامیلتونی  $H_0$  بصورت:

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

که در آن  $k$  بردار موج در راستای محور  $x$  و  $m^*$  جرم موثر و ویژه توابع هامیلتونی  $H_0$  به صورت زیر می‌باشند:

$$|n, k\rangle = \sqrt{\frac{2}{W}} e^{ikx} \sin \frac{n\pi y}{W} \quad (3)$$

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

تابع توزیع الکترون و در نتیجه خواص ترابرد بدست آورد. همچنین رابطه حرکت‌پذیری 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 به دست 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 می‌گیریم 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 نیست. به منظور حل معادله بولتزمن تحت شرایط حالت پایا، فرض می‌کنیم الکترون‌ها در غیاب هر گونه میدان الکتریکی خارجی در پایین‌ترین نوار رسانش با تابع توزیع حالت تعادل فرمی دیراک  $f_0(k)$  حضور داشته باشند. ذرات در ماده توسط ناخالصی‌های یونیزه شده پراکنده می‌شوند. پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه شده در اثر وجود اتم‌های ناخالصی در نیمه‌رسانا به وجود می‌آید. جایگزینی یک اتم ناخالصی در یک محل شبکه باعث برهم خوردن نظم تناوبی بلور می‌گردد. برهم‌کنش الکترون با ناخالصی باعث پراکندگی الکترون 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

$$T_{nn'} = \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{(\epsilon_r)^2} \frac{16n_i}{W} \frac{1}{\pi^2} \left[ \delta_{nn'} \sum_{\mu} \left( \frac{m^*}{\hbar^2} \right)^2 \frac{k_F^n}{k_F^\mu} v^2(n, k_F^n; \mu, k_F^\mu) - \left( \frac{m^*}{\hbar^2} \right)^2 v^2(n, k_F^n; n', k_F^{n'}) \right] \quad (11)$$

معادله رسانندگی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\sigma = \frac{2e^2}{W} \frac{2}{m^*} \frac{1}{\pi} \sum_n k_F^n \tau_n(\epsilon_F) \quad (12)$$

زمان واهلش  $\tau_n(\epsilon_F)$  را از رابطه (۱۰) جایگزین کرده و در نهایت  $\sigma$  را به صورت زیر بدست می‌آوریم:

$$\sigma = \frac{2e^2}{h} \frac{2}{\pi^2 W} \sum_n \sum_{n'} k_F^n k_F^{n'} (T^{-1})_{nn'} \quad (13) \quad (13)$$

اکنون معادله (۱۱) را در معادله (۱۳) که همان معادله رسانندگی است، قرار می‌دهیم و بدین ترتیب رسانندگی ناو

$$\sigma = \frac{2e^2}{h} \left( \frac{\epsilon_r}{e^2} \right)^2 \frac{1}{8n_i} \sum_{n,n'} k_F^n k_F^{n'} \left[ \delta_{nn'} \sum_{\mu} \left( \frac{m^*}{\hbar^2} \right)^2 \frac{k_F^n}{k_F^\mu} - \left( \frac{m^*}{\hbar^2} \right)^2 v^2(n, k_F^n, n', k_F^{n'}) \right]_{nn'}^{-1} \quad (14)$$

ناو گالیم نیتريد را به صورت زیر بدست می‌آوریم.

حال می‌توان تحرک را بر حسب رسانندگی بصورت:

$$\mu = \frac{\sigma}{ne} \quad (15)$$

به دست آورد که در آن

$$n = \frac{2}{\pi W} \sum_m k_F^m \quad (16)$$

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 ترانه‌های انرژی به صورت زیر می‌باشد:

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (17)$$

$$-\frac{eE}{\hbar} \frac{df(\epsilon_{nk})}{dk} = \sum_{n'} \sum_{k'} P_{n,n'}(k, k') \times [f_{n'}(k') - f_n(k)] \quad (4)$$

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 الکترون از  $k$  به  $k'$  در اثر وجود ناخالصی بصورت زیر می‌باشد:

$$P_{n,n'}(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n', k' | U | n, k \rangle|_{av}^2 \delta(\epsilon_{nk} - \epsilon_{n'k'}) \quad (5)$$

که در آن مقدار انتظاری پتانسیل کولمبی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\langle n', k' | U | n, k \rangle = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 WL \epsilon_r} v(n, k; n', k') \quad (6)$$

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

$$v(n, k; n', k') = 2 \int_0^W dy K_0(qy) \sin\left(\frac{n\pi y}{W}\right) \sin\left(\frac{n'\pi y}{W}\right) \quad (7)$$

که در آن

$$q = (k_F^n - k_F^{n'}) \quad (8)$$

و  $K_0$  تابع بسل اصلاح شده نوع دوم به صورت زیر نوشته می‌شود:

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

زمان واهلش  $\tau_n$  برای  $n$  امین حالت زیر ناو برحسب انرژی فرمی بصورت زیر بدست می‌آید:

$$\tau_n(\epsilon_F) = \frac{m^*}{2\pi^2 \hbar} \sum_n (T^{-1})'_{nn} k_F \quad (10)$$

که در آن  $k_F^n$  بردار موج فرمی در زیر ناو  $n'$  می‌باشد و  $T_{nn'}$  عناصر ماتریس انتقال می‌باشد که به صورت زیر بدست می‌آید:

پتانسیل کولمبی ناخالصی‌های درون صفحه به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} \quad (18)$$

زمان واهلش را به صورت زیر تعریف می‌کنیم [5].

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \sum_{\vec{k}'} \frac{\Sigma(1-\cos\theta_{kk'}) (\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}'})}{u^2(\vec{k} - \vec{k}')} \quad (19)$$

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

$$u(\vec{q}) = \frac{2\pi e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r q} \quad (20)$$

و رابطه زمان واهلش را به صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$\tau(\vec{k}) = \left(\frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}{2\pi e^2}\right)^2 \frac{2\pi \hbar \epsilon_F}{n_i \pi} \quad (21)$$

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

$$\sigma^{2D} = \frac{e^2}{h} \left[ \left(\frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}{2\pi e^2}\right)^2 \frac{4}{n_i} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}\right)^2 \right] \quad (22)$$

رابطه تحرک به صورت:

$$\mu^{2D} = \frac{\sigma^{2D}}{n^{2D} e} \quad (23)$$

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

$$n^{2D} = \frac{\epsilon_F}{2\pi} \frac{2m^*}{\hbar^2} \quad (24)$$

که در آن  $\epsilon_F$  انرژی فرمی یک صفحه کاملاً دو بعدی می‌باشد. با استفاده از رابطه (23) می‌توانیم تحرک سیستم گاز الکترون

دو بعدی را برحسب انرژی فرمی بدست آوریم و با مقادیر بدست آمده از رابطه (15) برای یک نانونوار مقایسه کنیم.

در پایان رابطه تحرک‌پذیری سیستم یک بعدی نانونوار گالیم نیتريد در حضور ناخالصی یونیزه شده در دمای غیر صفر را مورد بررسی قرار می‌دهیم. برای دمای غیر صفر رسانندگی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$\sigma = \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f_0(\epsilon)}{\partial \epsilon}\right) \sigma(\epsilon) \quad (25)$$

با جایگذاری  $\sigma(\epsilon)$  از رابطه (14) در رابطه (25) رسانندگی بصورت زیر بدست می‌آید. با جایگذاری رابطه (26) در رابطه

$$\sigma = \frac{2e^2}{h} \left(\frac{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}{e^2}\right)^2 \frac{1}{8n_i} \int k^n k'^n d\epsilon \left[ \delta_{nn'} \Sigma \mu \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^2 \frac{k^n}{k'^n} v^2(n, k^n; \mu, k^\mu) - \left(\frac{m^*}{\hbar^2}\right)^2 v^2(n, k^n; n', k'^n) \right]^{-1} \frac{1}{\epsilon_F T} \frac{e^{\left(\frac{\epsilon}{\epsilon_F} - 1\right)}}{\left(1 + e^{-\left(\frac{\epsilon}{\epsilon_F} - 1\right)}\right)^2} \quad (26)$$

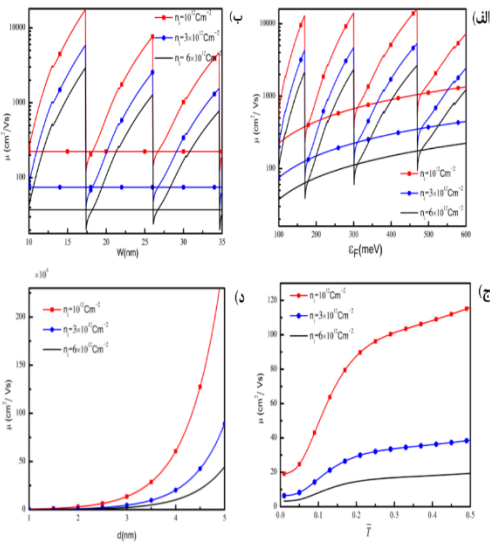
(15) می‌توان تحرک سیستم نانونوار را برحسب پهنای نانونوار برای پارامترهای متفاوت بدست آورد.

## ۲- محاسبات و نتایج

با توجه به مطالب بیان شده در بخش سوم، تئوری لازم برای بررسی تحرک‌پذیری در نانونوار گالیم نیتريد 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 دو حالت دمای صفر و دمای غیر صفر بررسی می‌کنیم و با استفاده از برنامه‌نویسی فرترن و نرم‌افزار origin، نمودار تحرک‌پذیری را بر حسب افزایش عرض نوار ( $W$ )، افزایش انرژی فرمی ( $\epsilon_F$ ) و فاصله‌ی ناخالصی تا نوار ( $d$ )، رسم خواهیم کرد. محاسبات را برای نانونوار گالیم‌نیتريد با ساختار ورتزایت و جرم موثر  $m^* = 0.2m_e$  و ثابت دی‌الکتریک  $\epsilon_r = 8.9$  انجام می‌دهیم.

## ۱-۲. تحرک پذیری برای مقادیر ناخالصی مختلف

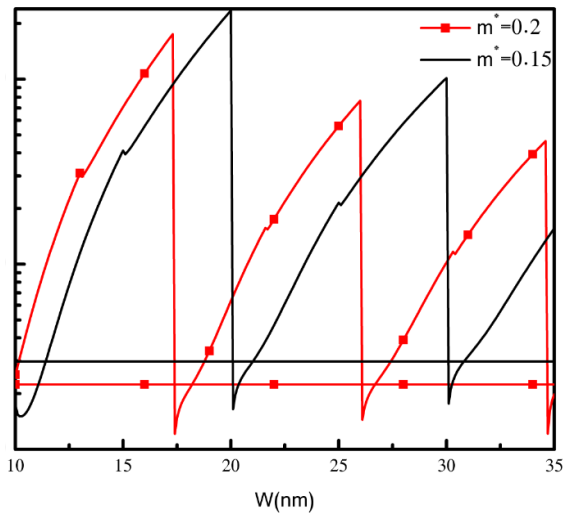
نمودارهای تحرک پذیری برای مقادیر ناخالصی مختلف برحسب پهنای نانونوار، انرژی فرمی، فاصله ناخالصی از نانونوار و دما با استفاده از رابطه (۱۵) و برای یک صفحه کاملاً دو بعدی با استفاده از رابطه (۲۳) رسم شد. در شکل (الف) علاوه بر نمایش افزایش تحرک پذیری برحسب افزایش انرژی فرمی، تاثیرات مقادیر مختلف ناخالصی را نیز در نظر گرفته‌ایم. همان‌طور که می‌بینید، با کاهش ناخالصی تحرک پذیری افزایش می‌یابد. یعنی هر چه مقدار ناخالصی در نانونوار کمتر باشد، حامل‌ها کمتر پراکنده می‌شوند در نتیجه تحرک پذیری افزایش می‌یابد. در شکل (الف) تحرک پذیری یک لایه کاملاً دو بعدی بر حسب انرژی فرمی نیز رسم شده است که به صورت 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 می‌باشد که با استفاده از رابطه (۲۳) و برای مقایسه با تحرک پذیری نانونوار رسم شده است. در شکل (ج) نمودار تحرک نانونوار گالیوم‌نیتريد بر حسب دمای بدون بعد  $\bar{T} = T/T_F$  برای مقادیر متفاوت ناخالصی رسم شده است. بیشترین تحرک پذیری را زمانی خواهیم داشت که کمترین ناخالصی را داشته باشیم. طبق شکل (ج) مشاهده می‌شود که با افزایش دما، تحرک نیز افزایش می‌یابد زیرا با افزایش دما، سرعت حرکت الکترون‌ها افزایش می‌یابد و الکترون‌ها مدت زمان کمتری اثر پتانسیل کولمبی ناشی از یون‌های ناخالصی را احساس می‌کنند. در نتیجه پراکندگی الکترون کمتر می‌شود و در نهایت تحرک پذیری افزایش می‌یابد. 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. همان‌طور که می‌بینید با کاهش ناخالصی تحرک پذیری افزایش می‌یابد یعنی هر چه مقدار ناخالصی در نانونوار کمتر باشد، حامل‌ها کمتر پراکنده می‌شوند در نتیجه تحرک پذیری افزایش می‌یابد.



شکل (۱): ن نمودار تحرک پذیری برای مقادیر مختلف چگالی ناخالصی (الف) بر حسب انرژی فرمی در  $d = 0$  و  $W = 20nm$ ، (ب) بر حسب پهنای نانونوار در  $d = 0$  و  $\epsilon_F = 100meV$ ، (ج) بر حسب دما در  $d = 0$  و  $W = 20nm$ ،  $\epsilon_F = 100meV$  و (د) بر حسب فاصله ناخالصی از نانونوار در  $\epsilon_F = 100meV$  و  $W = 20nm$  می‌باشد.

## ۲-۲. تحرک پذیری برای فواصل مختلف ناخالصی از نانونوار

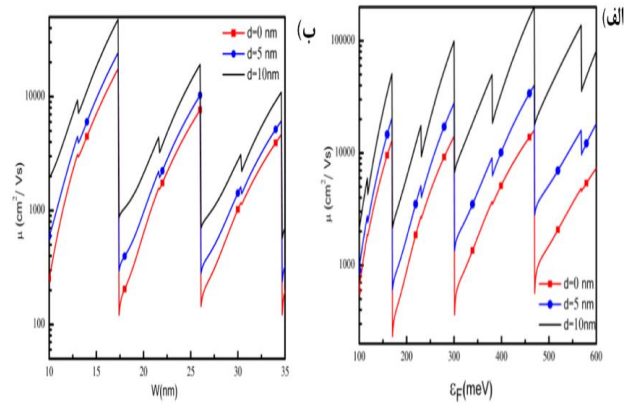
در شکل (الف)، تاثیرات فاصله ناخالصی از نوار به ازای انرژی فرمی های مختلف در نظر گرفته شده است. همان‌طور که می‌بینید، با افزایش فاصله ناخالصی از نانونوار تحرک پذیری افزایش می‌یابد، به این دلیل که با افزایش فاصله ناخالصی از نانونوار، برهم‌کنش بین الکترون‌ها و ناخالصی‌ها کمتر می‌شود. در نتیجه پراکندگی حامل‌ها نیز کمتر شده و در نهایت تحرک پذیری افزایش می‌یابد. در شکل (ب) نمودار تحرک پذیری نانونوار گالیوم‌نیتريد بر حسب عرض نوار ( $W$ ) برای سه مقدار متفاوت فاصله ناخالصی از نانونوار با استفاده از رابطه (۱۵) رسم شده است. در شکل (ب) همان‌طور که می‌بینید، با افزایش فاصله ناخالصی از نوار، تحرک پذیری افزایش می‌یابد، به این دلیل که با افزایش فاصله ناخالصی از نوار، بر هم‌کنش بین الکترون‌ها و ناخالصی‌ها کمتر می‌شود. در نتیجه پراکندگی حامل‌ها نیز کمتر شده و در نهایت تحرک پذیری افزایش می‌یابد.



شکل (۴): نمودار تحرک پذیری برحسب پهنای نانونوار با  $\varepsilon_F = 100\text{meV}$  و  $n_i = 10^{12}\text{cm}^{-2}$  برای ساختار ورتزایت  $d = 0$  و بلندی می باشد.

### ۳- نتیجه گیری

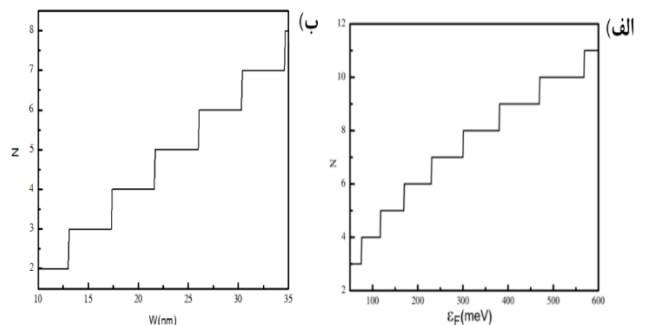
نانو به عنوان یک فناوری کاربردی، از همگرایی علوم فیزیک، شیمی و زیست به وجود آمده است و یک رویکرد جدید در تمامی رشته‌هاست. مطالعات نظری و مشاهدات تجربی در برهمکنش موج الکترومغناطیسی با مواد نشان داده است که در مقایسه با مواد توده‌ای، نانو ساختارها با توجه به مساحت سطح بزرگ و اثرات محدودیت کوانتومی، خواص گرمایی، شیمیایی، الکترونی و اپتیکی متفاوتی از خود نشان می‌دهند. به همین دلیل بررسی ساختار الکترونی موادی که 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 می‌شود، 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 نیترا با گاف نوری وسیع خود جایگاه مهمی در حوزه اپتوالکترونیک و قطعات الکترونیکی با توان فرکانس بالا یافته‌اند.



شکل (۲): نمودار تحرک پذیری برای فواصل مختلف ناخالصی (الف) برحسب انرژی فرمی که  $n_i = 10^{12}\text{cm}^{-2}$  و  $W = 20\text{nm}$  (ب) برحسب پهنای نانونوار که  $\varepsilon_F = 100\text{meV}$  و  $n_i = 10^{12}\text{cm}^{-2}$  می‌باشد.

### 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 انرژی فرمی و پهنای نوار، تعداد زیرنوارها به صورت پله‌ای افزایش خواهد یافت.



شکل (۳): نمودار تعداد زیرنوارها (الف) بر حسب انرژی فرمی برای  $W = 20\text{nm}$  (ب) بر حسب پهنای نانونوار که  $\varepsilon_F = 100\text{meV}$  می‌باشد.

### ۲-۴. تحرک پذیری بر حسب پهنای نانونوار برای مقادیر متفاوت جرم موثر

در شکل (الف) تحرک پذیری بر حسب پهنای نانونوار برای هر دو ساختار بلندی و ورتزایت که دارای جرم موثر متفاوت می‌باشند، نشان داده شده است. تحرک پذیری بیشتر در ساختار بلندی به دلیل جرم موثر کمتر این ساختار می‌باشد. جرم موثر بلندی  $m^* = 0.15$  و جرم موثر ورتزایت  $m^* = 0.2$  می‌باشد.



[۵] 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.

[۶] 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.

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

[۸] 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.

[۹] 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.

[۱۰] K. Hirama, Y. Taniyasu, M. Kasu, "AlGaIn/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.

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

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

[۱۳] 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، تحرک‌پذیری سیستم یک بعدی نانونوار گالیم نیتريد در حضور ناخالصی یونیزه شده در دمای صفر و دماهای پایین مورد بررسی قرار گرفت و نتایج با تحرک‌پذیری سیستم گاز الکترونی دو بعدی مقایسه شد. برای محاسبات از معادله ترازد 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 گالیم‌نیتريد رسم شد. در دماهای پایین فرایند پراکندگی غالب پراکندگی از ناخالصی‌های یونیزه شده می‌باشد که این نوع پراکندگی مهم‌ترین عامل در تحت تاثیر قراردادن تحرک‌پذیری در دماهای پایین در نظر گرفته می‌شود. افزایش تحرک‌پذیری را در افزایش فاصله ناخالصی از نانونوار نشان دادیم که علت افزایش تحرک‌پذیری به خاطر ضعیف‌تر شدن برهمکنش کولمبی بین ناخالصی‌ها و الکترون‌ها می‌باشد. همچنین با افزایش انرژی فرمی به علت افزایش تعداد زیرنوارها تحرک‌پذیری افزایش می‌یابد و مشاهده کردیم که تحرک‌پذیری سیستم‌های یک بعدی برای عرض‌های بی‌نهایت به سمت تحرک‌پذیری یک سیستم کاملاً دو بعدی میل می‌کند.

## منابع

[۱] 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.

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

[۳] P. Rinke, M. Winkelkemper, 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.

[۴] 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.

[۲۰] 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.

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

[۲۲] 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, "Short-range disorder effects on electronic transport in two-dimensional semiconductor structures", *Physical Review B*, vol. 89, pp. 121413, 2014.

[۱۴] D. C. Look, R. J. Molnar, "Degenerate layer at GaN/sapphire interface: Influence on Hall-effect measurements", *Appl. Phys*, vol. 70, pp. 3377, 1997.

[۱۵] 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.

[۱۶] 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.

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

[۱۸] 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.

[۱۹] J. B. Webb, H. Tang, S. Rolfe, J. A. Bardwell, "Semi-insulating C-doped GaN and high-mobility AlGaIn/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

<sup>1</sup> B. Sharafi, <sup>2\*</sup> B. Bahrami, <sup>2</sup> Z. Kiamehr, <sup>1</sup> M. Goodarzi

<sup>1</sup> Department of Science, Arak University of Technology, Arak, Iran

<sup>2\*</sup> Department of Physics, Tafresh University, Tafresh, Iran

### Article details

Received: 2023/01/25

Accepted: 2024/12/11

Published: 2024/12/21

ISSN: 2588-493x

eISSN: 2588-4821

Correspondence email:

[bahrami@tafreshu.ac.ir](mailto:bahrami@tafreshu.ac.ir)



### Abstract

Nitrate compounds III-N with a wide band gap have an important role in the field of optoelectronics and electronic devices with high 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 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 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 in a two-dimensional electron gas.

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