# بهبود پارامترهای الکترونیکی نانوسیمهای سیلیکونی با افزودن ناخالصی فسفر و آرسنیک

مريم معلقي'، عطيه كوهي سعدي'، پريسا طالبنيا'، نگين معنوىزاده\*'، مژگان صادقيان لمراسكي'

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، دانشکده مهندسی برق، تهران، ایران.

تاريخ ثبت اوليه: ١٣٩۴/٧/٢۶، تاريخ دريافت نسخهٔ اصلاح شده: ١٣٩۴/١٠/١٩، تاريخ پذيرش قطعي: ١٣٩۴/١٢/١١

چکیده در این مقاله به منظور بهبود پارامترهای الکترونیکی نانوسیمهای سیلیکونی، اثر اضافه کردن اتم ناخالصی آرسنیک و فسفر بررسی شده است. پارامترهای بررسی شده شامل طیف انتقال، قابلیت تحرک، طول آزاد میانگین و ساختار باند انرژی می باشد. جهت بررسی رسانایی و قابلیت تحرک نانوسیمهای سیلیکونی، انتقال در طول نانوسیمهای بلند در حضور تعداد زیادی ناکاملی (مانند ناخالصی، جای خالی، بی نظمی و ناهمواریهای سطحی) مورد بررسی قرار گرفته است. در این مقاله به منظور انجام محاسبات سادهتر، نانوسیمهای با طول کوتاه و ناکاملیهای جزیی مطالعه شده است. از این و نانوسیمهای با طول محدود را یک بار با افزودن فسفر و بار دیگر با افزودن آرسنیک، آلایش داده و نتایج حاصل از شبیه سازی تحلیل گردید. شبیه سازی با استفاده از نرمافزار ouantumWise انجام شده است. نتایج به دست آمده نشان می دهند که با اضافه شدن ناخالصیهای آرسنیک و فسفر به نانوسیمهای سیلیکونی، طیف انتقال بر حسب انرژی، افزایش می بابد. قابلیت تحرک برای چگالیهای بار الکترون بیش از <sup>30</sup> 10<sup>18</sup> کاهش یافته، در حالی که در چگالیهای کمتر از این مقدار، تقریبا ثابت می ماند.

كلمات كليدى: نانوسيم سيليكوني، طيف انتقال، طول آزاد ميانگين، قابليت تحرك.

# Improving Electronic Parameters of Silicon Nanowires by Arsenic and Phosphor dopants

#### Maryam Moalaghi<sup>1</sup>, Atieh Koohisaadi<sup>1</sup>, Parisa Talebnia<sup>1</sup>, Negin Manavizadeh<sup>\*1</sup>, Mojgan Sadeghian Lemraski<sup>1</sup>

#### <sup>1</sup> K. N. Toosi University of Technology, Faculty of Electrical Engineering, Tehran, Iran.

**Abstract** In this paper, to improve the electronic parameters of silicon nanowires, the influence of As and P dopants are investigated. These electronic parameters include transmission spectra, mobility, mean free path and energy band diagram. To study the conduction mechanism and mobility of the Sinanowires, carrier transport along the long nanowires in presence of many defects (including dopant, vacancy, disorderly and surface roughness) has been investigated. In this paper, to simplify the calculations, short Si nanowires with small amount of defects are considered. Therefore, short length silicon nanowires have been doped by As and P and the effects of the dopants have been analyzed. Simulation results demonstrate that, by increasing the energy, transmission spectra increases. It is shown that mobility decreases carrier concentration more than  $10^{18} cm^{-3}$  and for concentration less than this value, mobility is approximately constant.

Keywords: Si Nanowire, Transmission Spectra, Mean Free Path, Electron Mobility.

#### ۱– مقدمه

در نانوساختارهای یک بعدی مانند نانوسیمها و نانولولهها، فضایی برای ایجاد شدن نقصهای کریستالی وجود ندارد، بهطوریکه الکترون و حفره به سهولت میتوانند درون این ساختارها حرکت کنند. از آنجایی که هدایت کنترلپذیر و قابل پیشبینی برای کاربردهای الکتریکی در مقیاس نانو ضروری است، این نانوساختارها بسیار حائز اهمیت میباشند ا-1]. نانوسیمها در طراحی ترانزیستورها، سنسورها و ادوات نوری نقش بسزایی دارند؛ زیرا نسبت سطح به حجم نانوسیمها قابل توجه بوده و تمام سطح نیمههادی میتواند با مولکولها پیوند برقرار کند. نانوسیمهای نیمههادی میتوانند بر بسیاری از نانوسیمهای نیمههادی عدم وابستگی نیمههادی نسبت به قطر محدودیتهای نانولولههای کربنی غلبه کنند به طوریکه نانوسیمهای نیمههادی عدم وابستگی نیمههادی نسبت به قطر میتوان از خواص آنها نیز بهره جست [۶–۴].

در بین نانوسیمهای نیمههادی، نانوسیمهای سیلیکونی به دلیل ویژگیهایی مانند سمی نبودن و بیخطر بودن برای سلولها بسيار مورد توجه مي باشند. اين نانوسيمها بيشترين کاربرد خود را در عرصه پزشکی مانند تشخیص نشانههای سرطان و رشد سلولهای بنیادی نشان دادهاند. اخیرا نانوسیمهای سیلیکونی طیف وسیعی از ادوات الکترونیکی مانند ترانزیستورهای مورد استفاده در دیودهای ساطعکننده نور (LEDs)، ترانزیستورهای اثر میدانی بالستیک (FETs) و نانوحسگرهای با حساسیت بالا را پوشش میدهند. سلولهای خورشیدی مبتنی بر نانوسیم سیلیکونی، با افزایش جذب نور، با صرف هزینه کمتر، منجر به بازده بالاتر می شوند. از طریق ناخالصی نانوسیمهای سیلیکونی، می توان خواص الکترونی و نوری آنها را متناسب با کاربردها تغییر داد [۹–۷]؛ بنابراین درک دقیق خواص ساختاری و الکترونیکی نانوسیمهای سیلیکونی ناخالص شده، حائز اهمیت است. فسفر و آرسنیک از جمله ناخالصی های رایج مورد استفاده برای ایجاد سیلیکون نوع n مي باشند [۱۳–۱۰].

در این مقاله، به بررسی اثر ناخالصی آرسنیک و فسفر در نانوسیم سیلیکونی پرداخته میشود؛ بدین منظور، پارامترهای موثر در نانوسیمها که عبارتند از طیف انتقال، طول آزاد میانگین و قابلیت تحرک، مورد بررسی قرار گرفته است. برای بهدست آوردن این پارامترها نیاز به اطلاعات نظری میباشد که در ادامه توضیح داده خواهد شد.

### ۲- تئوری و روش محاسبه

شبیه سازی ها با نرمافزار Quantumwise انجام شده و طبق محاسبات مقالات قبلی برای نانوسیم سیلیکونی [۹] از تئوری تابع چگالی (DFT) برای محاسبه هندسه نانوسیم سیلیکونی و بررسی تاثیر ناخالصی فسفر و آرسنیک روی آن، استفاده گردیده است. شبیه سازی در دمای اتاق انجام گرفت. از تابع موج DZP به عنوان تابع پایه استفاده شده تا هم دقّت افزایش یابد و هم پلاریزاسیون اوربیتالهای خارجی در محاسبات لحاظ شود. تعداد حلقه های باشد.

در این بخش پارامترهای مورد استفاده و روابط بین آنها توضیح داده میشود [۱۴]. در دمای پایین، هدایت یک سیستم با رابطه (G=G<sub>0</sub>T(E<sub>F</sub>) مشخص میشود که در آن G<sub>0</sub>=2e<sup>2</sup>/h مدایت کوانتومی و (T(E<sub>F</sub>) انتقال در انرژی تراز فرمی است. مقاومت سیستم نیز از رابطه R=1/G بهدست میآید. با تعمیم این روابط، مقاومت وابسته به انرژی (R(E)=1/T(E) (که بدون واحد و عکس انتقال میباشد)، قابل دستیابی است.

 $1/G_0$  برای به دست آوردن مقاومت، (R(E) باید در  $R(G_0)$  باید در  $R(G_0)$  ضرب شود. برای یک سیستم یک بعدی بدون هیچ ناکاملی، انتقال همیشه مقداری صحیح است ((T<sub>0</sub>(E)=N(E)). متناظر با آن باید مقاومت (R<sub>c</sub>(E)=1/T0(E) به عنوان مقاومت اتصال مشخص گردد. اگر سیستم دچار یک نقص ساختاری شود، انتقال همواره کمتر از انتقال ساختار بدون ناکاملی میباشد؛ یعنی (T<sub>0</sub>(E)=T<sub>1</sub>(E) مقاومت سیستم دارای ناکاملی، از رابطه (۱) قابل دستیابی است:

معادله (۱)

$$\frac{1}{T_{1}(E)} = R_{1}(E) = R_{C}(E) + R_{1,S}(E)$$

که در آن (R<sub>1,s</sub>(E مقاومت پراکندگی<sup>۱</sup> مربوط به ناکاملی شماره ۱ است. در صورتی که ناکاملیهای مختلفی رخ دهد (که میتواند ناشی از ناخالصی در مکانهای متفاوت باشد)، میانگین انتقال<sup>۲</sup> محاسبه میشود (<(T(E)>). مشابه معادله (۱)، میتوان میانگین مقاومت پراکندگی<sup>۳</sup> <(Rs(E)> را طبق معادله (۲) و (۳) تعیین کرد:

$$\frac{1}{\langle T_1(E) \rangle} = \langle R(E) \rangle = R_C(E) + \langle R_s(E) \rangle$$
(Y) sale (Y)  
$$\langle R_s(E) \rangle = \langle R(E) \rangle - R_c(E) = \frac{1}{\langle T(E) \rangle} - \frac{1}{T_0(E)}$$
(Y)

نتایج بهدست آمده نشان میدهند که مقاومت وابسته به طول و انرژی در یک سیم بلند به طول L (، که شامل تعداد زیادی ناکاملی تصادفی بوده و میانگین فاصله بین دو ناکاملی d میباشد)، با معادله (۴) تخمین زده می شود [10–11]:

$$R(L,E) = R_c(E) + \langle R_s(E) \rangle \frac{L}{d}$$

$$R(L, E) = R_c(E) + (1 + \frac{L}{L_{mfp}})(E)$$
 (a) associate (b)

$$L_{mfp}(E) = d \frac{\langle R_s(E) \rangle}{R_c(E)} \tag{(9)}$$

T(L,E) =رابطه انتقال در طول یک سیم بلند I/R(L,E) است. بنابراین هدایت یک سیم به طول L با رابطه 1/R(L,E) تخمین زده می شود: (۷)

معادله

$$G(L, E_F) = \int_{-\infty}^{\infty} T(E, L) \left[ -\frac{\partial f(E, E_F)}{\partial E} \right] dE$$

معادله فوق تعمیم رابطه G=G<sub>0</sub>T(E<sub>F</sub>) به دماهای محدود است. در معادله (۷)، f(E,EF) تابع توزیع فرمی – دیراک برای الکترودهای راست و چپ با تراز فرمی متوسط E<sub>f</sub> است.

هدایت سیستم نیز با استفاده از معادله (۸) قابل محاسبه میباشد:

$$s = G.L$$
 (A) sale (A)

بنابراین می توان تحرک را به صورت معادله (۹) تخمین زد:

$$m = \frac{s}{e.n} \tag{(4)}$$

که در آن n چگالی الکترونها و e میزان بار یک الکترون است.

تراز فرمی متناظر با میزان ناخالصی، با استفاده از محاسبات ساختار باند انرژی و جبرانسازی بار ناخالصی به دست میآید.

محاسبات مورد نیاز برای محاسبه طول آزاد میانگین عبارتند از:

- طيف انتقال نانوسيم اوليه (بدون ناكاملي)،
- طیف انتقال برای هر نانوسیم دارای ناکاملی (در این مقاله چند موقعیت مختلف از ناخالصی بررسی شده است که با انجام این محاسبات، میانگین انتقال < (T(E) > به دست میآید.)

به منظور محاسبه تحرک در یک ناخالصی معین، علاوه بر موارد فوق به محاسبات مربوط به ساختار باند انرژی (با استفاده از سلول واحد نانوسیم) نیاز است. این محاسبات با جبرانسازی بار ناخالصی برای محاسبه سطح فرمی متناظر با چگالی ناخالصی انجام می شود.

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>. Scattering resistance

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>. Average transmission

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup>. Average scattering resistance

۳- اثر ناخالصی بر مکانهای مختلف نانوسیمهای سيليكوني

ابتدا برای انجام شبیهسازی و بررسی اثر ناخالصی در مکانهای مختلف، یک نانوسیم سیلیکونی که با اتمهای هیدروژن غیرفعال شده در نظر گرفته می شود. غیرفعال کردن به منظور کاهش واکنشپذیری اتمهای سطحی و تثبیت باند ممنوعه (Eg) صورت گرفته و ساختار بهینه میگردد. بهینهسازی به منظور حداقل کردن انرژی نهایی سیستم صورت گرفته (شکل۱) و سپس طیف انتقال برای نانوسیم بدون ناخالصي رسم ميشود (شکل ۲).

از آنجا که وجود ناخالصیها و ایجاد ناکاملی در ساختار نانوسیمهای سیلیکونی منجر به کشش در محل ناکاملی میشود (نرمافزار طوری طراحی شده که کشش ناشی از اندازههای متفاوت شعاع اتمی در شکل ظاهری دیده نمیشود ولی در محاسبات لحاظ مي گردد)، به منظور مطالعه اثر ناخالصي آرسنیک و فسفر برروی خواص الکترونیکی نانوسیمهای سیلیکونی، در ساختار نانوسیمهای سیلیکونی بدون ناخالصی، یک بار به جای یکی از اتمهای سیلیکون اتم آرسنیک و بار ديگر اتم فسفر جايگزين ميگردد. همچنين اثر وجود ناخالصي ها بر طول آزاد ميانگين، ساختار باند انرژي و قابليت تحرک مورد بررسی قرار میگیرد. بنابراین قبل از بهدست آوردن طیف انتقال، ساختار بار دیگر بهینهسازی میشود. سپس نانوساختار بهينه شده، به عنوان يک افزاره بررسي گرديد.



شكل ١. ساختار نانوسيم بهينهسازي شده.



از اینرو، یکبار اتم ناخالصی فسفر و بار دیگر آرسنیک، تقریبا به صورت تصادفی در مکانهای مختلف نانوسیم Si قرار داده می شود (شکل۳.۵ و ۳.۵). از آنجایی که طيف انتقال براي اتمهاي ناخالصي در مكانهاي مختلف متفاوت است، متوسط آنها در (شکل ۴.a و ۴.b) به ترتیب در مورد ناخالصی آرسنیک و فسفر در نقاط مختلف نشان داده شده است. ملاحظه میشود که با افزودن ناخالصی به نانوسیم ذاتی، بهدلیل افزایش جذب نور که ناشی از کاهش شکاف باند میباشد، درصد انتقال کاهش مییابد.



(b)



شکل۳. ساختار نانوسیم آلایش شده a) فسفر و b) آرسنیک.





برای بهدست آوردن تحرک برحسب چگالی ناخالصی، به فاصله تراز فرمی تا باند هدایت در چگالیهای ناخالصی متفاوت نیاز است. بدین منظور از ساختار باند انرژی نانوسیمی که به صورت یکنواخت ناخالصیشده، استفاده میشود. از این رو، ساختار باند انرژی برای چگالیهای <sup>14-10</sup> تا <sup>10</sup> محاسبه گردیده و در شکل (۶) آورده شده است. همانطور که از نتایج شبیه سازی ملاحظه میشود با افزایش چگالی ناخالصی، فاصله تراز فرمی از باند هدایت کم میشود؛ زیرا افزایش چگالی ناخالصی احتمال حضور الکترون در باند هدایت را بالا میبرد.







(b) أرسنيک و (b) أرسنيک و (b) أرسنيک و (b) فسفر.

با استفاده از معادلات (۱) تا (۶) و میانگین طیف انتقالی به دست آمده برای حالتهای مختلف ناخالصی، طول آزاد میانگین حاصل می گردد که در شکل (۵) نشان داده شده است. همانطور که در این دو شکل مشاهده می شود، برای هر دو نوع ناخالصی، طیف انتقال با افزایش انرژی، افزایش می یابد. (a)



.10<sup>19</sup>cm<sup>-3</sup> (b)



طبق معادله (۴)، طیف انتقال با افزایش طول کاهش پیدا میکند. به عبارتی دیگر در محاسبات انجام شده به دلیل ثابت بودن طول نانوسیم، طیف انتقال ثابت است و با تغییر چگالی ناخالصی فقط ترازهای فرمی تغییر میکنند.

برای نانوسیم بدون ناخالصی، هدایت و تعداد حاملها با افزایش چگالی ناخالصی، به دلیل نزدیک شدن تراز فرمی به تراز هدایت، افزایش مییابد. طیف انتقال در یک سیم بلند به طول بستگی ندارد و در نتیجه، رسانش (G) مستقل از طول بوده و بنابراین ضریب هدایت متناسب با طول است (Δ × σ). بنابراین قابلیت تحرک در نانوسیم اولیه یکتا نبوده و با تغییر طول نانوسیم تغییر میکند. بر اساس نتایج بهدست آمده در مراحل قبل، تحرک بر حسب تراكم ناخالصي قابل محاسبه است. به منظور بررسي رسانایی و قابلیت تحرک، یک نانوسیم با طول 1µm با فرضهای زیر در نظر گرفته شده است: ۱– هر اتم به صورت کامل یونیزه و یک الکترون به باند هدایت منتقل شده است. ۲- طیف انتقال یک نانوسیم بلند با تعداد زیادی ناخالصی را مي توان بر اساس طيف انتقال نانوسيمي با يک اتم ناخالصي تخمين زد [۱۶–۱۴]. نمودارهای قابلیت تحرک و رسانایی برای دو حالت زیر محاسبه و در شکل (۷) نشان داده شده است: الف) منحنى علامت گذارى شده با مثلث مربوط به نانوسيم خالص می باشد که برای رسم آن از طیف انتقال مربوطه استفاده شده است. ب) منحنی علامت گذاری شده با دایره مربوط به نانوسیم آلایش شده می باشد که از پراکندگی ناخالصی در محاسبه طیف



1. C.M. Lieber, One-dimensional nanostructures: chemistry, physics & applications. *Solid state communications*, 1998, 107.11: 607-616.

مراجع

- 2. J. Voit, One-dimensional Fermi liquids.*Reports on Progress in Physics*, 1995, 58.9: 977.
- C. Kane, L. Balents, M.P. Fisher, Coulomb interactions and mesoscopic effects in carbon nanotubes. *Physical review letters*, 1997, 79.25: 5086.
- 4. A.M. Morales, C. M. Lieber, A laser ablation method for the synthesis of crystalline semiconductor nanowires. *Science*, 1998, 279.5348: 208-211.
- 5. X. Duan, J. Wang, C.M. Lieber, Synthesis and optical properties of gallium arsenide nanowires. *Applied Physics Letters*, 2000, 76.9: 1116-1118.
- J. Hu, M. Ouyang, P. Yang, C.M. Lieber, Controlled growth and electrical properties of heterojunctions of carbon nanotubes and silicon nanowires. *Nature*, 1999, 399.6731: 48-51.
- Y. Wang, K. K. Lew, T.T. Ho, L. Pan, S.W. Novak, E.C. Dickey, T.S. Mayer, Use of phosphine as an ntype dopant source for vapor-liquid-solid growth of silicon nanowires. *Nano letters*, 2005, 5.11: 2139-2143.
- A.L. Vallett, S. Minassian, P. Kaszuba, S. Datta, J.M. Redwing, T.S. Mayer, Fabrication and characterization of axially doped silicon nanowire tunnel field-effect transistors. *Nano letters*, 2010, 10.12: 4813-4818.
- 9. S. Wippermann, Understanding substrate-supported atomic-scale nanowires from ab initio theory, 2010, Paderborn, den 28.01.2010, M.Sc.
- X. Pi, C. Delerue, Tight-Binding Calculations of the Optical Response of Optimally P-Doped Si Nanocrystals: A Model for Localized Surface Plasmon Resonance. *Physical review letters*, 2013, 111.17: 177402.
- 11. R. Khelifi, D. Mathiot, R. Gupta, D. Muller, M. Roussel, S. Duguay, Efficient n-type doping of Si nanocrystals embedded in SiO2 by ion beam synthesis. *Applied Physics Letters*, 2013, 102.1: 013116.
- 12. R. Khelifi, D. Mathiot, R. Gupta, D. Muller, M. Roussel, S. Duguay, Efficient n-type doping of Si nanocrystals embedded in SiO2 by ion beam synthesis. *Applied Physics Letters*, 2013, 102.1: 013116.
- H. Gnaser, S. Gutsch, M. Wahl, R. Schiller, M. Kopnarski, D. Hiller, M. Zacharias, Phosphorus doping of Si nanocrystals embedded in silicon oxynitride determined by atom probe tomography. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115.3: 034304.
- 14. T. Markussen, R. Rurali, A.P. Jauho, M. Brandbyge, Scaling theory put into practice: first-principles modeling of transport in doped silicon nanowires. *Physical review letters*, 2007, 99.7: 076803.
- 15. T. Markussen, A.P. Jauho, M. Brandbyge, Electron and phonon transport in silicon nanowires: Atomistic approach to thermoelectric properties. *Physical Review B*, 2009, 79.3: 035415.
- 16. T. Markussen, Surface disordered Ge–Si core–shell nanowires as efficient thermoelectric materials. *Nano letters*, 2012, 12.9: 4698-4704.

وقتی پراکندگی ناشی از ناخالصی وجود دارد، دو عامل بر رسانش تاثیرگذار خواهند بود: ۱- همانند نانوسیم بدون ناخالصی، با افزایش چگالی ناخالصی، تراز فرمی به تراز هدایت نزدیک شده که منجر به افزایش رسانش می گردد.

۲- به دلیل پراکندگی ایجاد شده توسط ناخالصیها، مقاومت ناشی از انرژی (R(E) به صورت خطی با طول افزایش پیدا میکند (طبق معادله ۴)، که باعث کاهش رسانش میشود.

طبق نمودار رسانش در شکل(۷) مشاهده می شود که دو عامل ذکر شده، در چگالی ناخالصی  $^{-3}$  cm  $^{-3}$  تقریبا اثر یکدیگر را خنثی کرده به طوری که رسانش تقریبا ثابت باقی می ماند. همچنین قابلیت تحرک  $\mu \propto 1/n$  برای چگالی می ماند. ام کاهش می یابد.

برای چگالی ناخالصی کمتر از <sup>5</sup> cm<sup>-3</sup>، متوسط فاصله ناخالصی بزرگتر از طول نانوسیم ( μm) می شود و به طور متوسط هیچ ناخالصی در طول نانوسیم وجود نخواهد داشت از اینرو در این بازه، نمودار نانوسیم اولیه و نانوسیم ناخالصی شده مشابه خواهند بود.

## ۴- نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از طیف انتقال نانوسیم سیلیکونی، برخی از پارامترهای آن، از جمله قابلیت تحرک، طول آزاد میانگین و رسانایی بررسی شده است. قابل ذکر میباشد که در نانوسیم آلایش شده، طیف انتقال و قابلیت تحرک با تغییر طول و جهت کریستالی، تغییر میکند. مشاهده شده که برای هر دو نوع ناخالصی، با افزایش ناخالصی درصد انتقال کاهش مییابد. براساس نمودارهای بهدست آمده، افزایش و کاهش همزمان هدایت، به ترتیب ناشی از نزدیک شدن تراز فرمی به تراز هدایت و افزایش مقاومت ناشی از انرژی ( $\mathbf{R}(\mathbf{E})$ ، موجب ثابت ماندن هدایت نانوسیم برای چگالی آلایش <sup>5-</sup> $\mathbf{R}$ ماندن هدایت تحرک نانوسیم، بهدلیل راکندگی فونون برای <sup>5-</sup> $\mathbf{m}$