

УДК 612.382

**ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ  
В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ПРИБОРАХ НА ОСНОВЕ GaN**

В.В. МУРАВЬЕВ, А.А. ТАМЕЛО, В.Н. МИЩЕНКО

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники  
П. Бровка, 6, Минск, 220013, Беларусь**Поступила в редакцию 13 сентября 2004*

В статье приводятся результаты исследования особенностей переноса электронов в материале GaN. Наиболее общим подходом при моделировании движения электронов в полупроводниковых структурах является использование уравнения Больцмана, для численного решения которого используется метод Монте-Карло. Определены основные электрофизические параметры материала GaN, которые необходимы для исследования переноса носителей заряда с использованием метода Монте-Карло. Рассчитаны значения частот рассеяния электронов в материале GaN.

*Ключевые слова:* нитриды, миллиметровые волны, метод Монте-Карло, частоты рассеяния.

**Введение**

Полупроводниковые структуры типа  $A^{III}-B^V$ , такие как GaN, InN и AlN, являются в настоящее время весьма перспективными для создания различных электронных приборов миллиметрового диапазона длин волн. Это связано с тем, что использование данных материалов с широкой запрещенной зоной позволяет значительно, по сравнению с материалом GaAs, увеличить плотность потока электронов. Учитывая наличие более высокого пробивного напряжения и повышенного значения теплопроводности, можно надеяться на создание приборов с более высокой выходной мощностью. Более того, известно о факторе ослабления генерационно-рекомбинационных процессов через межграницные и поверхностные уровни, что способствует уменьшению уровня шумов. Достижения, связанные с совершенствованием технологии получения таких материалов, позволяют надеяться на создание широкой гаммы приборов с уникальными характеристиками, включая СВЧ и КВЧ транзисторы и лазеры. Исследования полупроводниковых приборов группы нитридов типа  $A^{III}-B^V$  проводились в течение ряда лет многими научными коллективами и отдельными исследователями [1–9]. Значительные усилия были направлены на моделирование процессов переноса электронов в таких структурах. Это обусловлено тем, что ряд параметров, характеризующих различные механизмы рассеяния, особенно при больших энергиях электронов, и детальная структура энергетических зон пока достоверно не установлены.

В данной статье приводятся результаты исследования особенностей переноса электронов в материале GaN, относящегося к классу полупроводниковых материалов, имеющих более широкую запрещенную зону, по сравнению с распространенными материалами GaAs и InP. Для исследования процессов переноса электронов в GaN возможно использование различных вычислительных моделей. Однако наибольшую точность среди них обеспечивают те модели, в

которых используется метод Монте-Карло. Применение метода Монте-Карло для решения уравнения Больцмана позволило решить ряд задач в газовой динамике [10]. Для решения задач, связанных с переносом электронов в GaN, необходимо рассчитать значения частот рассеяния, а затем после нахождения частот релаксации исходное интегро-дифференциальное уравнение Больцмана решается методом моментов [11]. В настоящее время определены не все электрофизические параметры GaN, необходимые для моделирования приборов. Кроме того, для использования метода Монте-Карло необходимо определение частот рассеяния электронов на полярных оптических фононах, на акустических фононах, на ионизированных примесях и при переходах электронов между эквивалентными и неэквивалентными долинами. Значения этих частот, в свою очередь, дают возможность определить предельные параметры приборов на основе широкозонного полупроводникового материала, каким является GaN.

### Моделирования процессов переноса электронов в полупроводниковых структурах

При моделировании движения электронов в полупроводниковых структурах используется уравнение Больцмана, которое для функции распределения  $f$  [12, 13] имеет следующий вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \nabla_r f + \dot{k} \nabla_k f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{н\ddot{o}}} . \quad (1)$$

Функция распределения позволяет описать среднее количество электронов  $f(k, r, t)$  области фазового пространства около точки с координатами  $(k, r)$ , где  $k$  — волновой вектор. Эта функция может изменяться в результате рассеяния, наличия потока электронов в пространстве, определяемого скоростью  $v$ , и наличия потока электронов в  $k$ -пространстве, определяемого производной  $k$  по времени. Свободное движение электронов прерывается столкновениями, после которых частица переходит в другие точки фазового пространства.

Выражение в правой части уравнения (1) обусловлено столкновениями (интеграл столкновений):

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{н\ddot{o}}} = \int [W(k', k) f_{k'} (1 - f_k) - W(k, k') f_k (1 - f_{k'})] dV_{k'} , \quad (2)$$

где интегрирование ведется по первой зоне Бриллюэна. Здесь  $W(k, k') dV_{k'} dt$  — вероятность перехода из состояния  $k$  в состояние  $k'$  в объеме  $dV_{k'}$  за время от  $t$  до  $t+dt$  при условии, что электрон находился первоначально в состоянии  $k$ , а состояние  $k'$  было пусто.

Стандартным методом численного решения уравнения Больцмана является метод Монте-Карло. Он основан на подходе, предложенном в работе [16]. Идея этого подхода состоит в том, чтобы моделировать движение электрона в  $k$ -пространстве. Рассматривается пролет свободного электрона, прерываемый процессами рассеяния. Если следить за одним электроном достаточно долгое время, то распределение времени, которое электрон проводит в окрестностях разных точек  $k$ -пространства, воспроизводит функцию распределения  $f(k)$ .

Изменение волнового вектора электрона между актами рассеяния определяется величиной электрического поля  $E$  [12, 14, 15]:

$$k(t) = k_0 + \frac{qE}{\hbar} t , \quad (3)$$

где  $k_0$  — начальное значение волнового вектора,  $q$  — заряд электрона,  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка,  $t$  — время движения электрона. Моменты времени, в которые происходят акты рассеяния, задаются случайным числом  $z$ , которое генерируется программным способом благодаря датчику случайных чисел.

Эти моменты времени зависят от полной частоты рассеяния

$$\lambda(k) = \sum_{i=1}^n \lambda_i(k), \quad (4)$$

где  $\lambda_i(k)$  — частота для разных механизмов рассеяния.

Поскольку вероятность прерывания свободного пролета  $i$ -м процессом рассеяния пропорциональна  $\lambda_i(k)$  и  $\sum_{i=0}^n \lambda_i = \Gamma$ , то для реализации стандартной процедуры метода Монте-

Карло необходимо лишь сгенерировать случайное число  $s$  между 0 и  $\Gamma$  и проверить выполнение неравенств

$$s < \sum_{i=0}^m \lambda_i(k) \quad (5)$$

для  $m=0, 1, 2, \dots, n$ . Здесь  $n$  — число реальных механизмов рассеяния. Если это неравенство удовлетворяется при  $m=0$ , считается, что реализовался процесс саморассеяния. Если неравенство удовлетворяется при  $m=1$  (числа  $m$  последовательно возрастают), то полагают, что выполнен первый механизм рассеяния и т. д.

Метод Монте-Карло может быть использован для описания переходных эффектов и исследования переноса электронов в полупроводниковых приборах с малой длиной активной области. Для таких применений моделирование проводится не для одного, а для тысяч электронов с равновесным начальным распределением волновых векторов  $k_0$ . Число столкновений для каждого электрона в таком моделировании может быть относительно мало.

Важное значение при моделировании процессов переноса электронов имеет знание основных электрофизических параметров и параметров модели зоны проводимости исследуемых материалов. Обзор публикаций позволил обобщить известные данные, которые для материала GaN приведены в табл. 1, 2. В основном, как и для материалов GaAs и InP, рассматривается трехдолинная модель [7–9]. В [7] анализируется трехдолинная модель, в которой нижней долине  $\Gamma_1$  сопутствуют верхние долины: одна долина  $\Gamma_2$  и выше ее шесть долин типа  $L-M$ . Однако в [8] рассматривается трехдолинная модель, в которой предусмотрено иное расположение долин и другие значения энергетических зазоров между ними. В этой модели выше нижней долины  $\Gamma_1$  располагаются шесть долин  $L-M$  и только затем следует верхняя долина  $\Gamma_2$ . Необходимо отметить, что и некоторые другие параметры модели еще окончательно не установлены и требуется их тщательное исследование. К ним относятся, например, такие параметры, как эффективная масса электронов и величины коэффициентов непараболичности для верхних долин, константы междолинной связи. Так, в [7] значение эффективной массы электронов во всех верхних долинах принималось равным 1, а в [8] значение эффективной массы электронов в долинах  $L-M$  равно 0,4, а в долине  $\Gamma_2$  — 0,6. Значение констант междолинной связи в известных публикациях [7–9] принималось одинаковым и равным 1 эВ/см, хотя из исследования материала GaAs известно, что эти константы имеют разное значение для разных долин.

Таблица 1. Электрофизические параметры материала GaN [7]

Параметр, размерность	Значение параметра
Плотность, г/см <sup>3</sup>	6,15
Продольная скорость звука, 10 <sup>3</sup> м/с	6,56
Поперечная скорость звука, 10 <sup>3</sup> м/с	2,68
Акустический деформационный потенциал, эВ	8,3
Статическая диэлектрическая проницаемость	8,9
Высокочастотная диэлектрическая проницаемость	5,35
Пьезоэлектрическая постоянная, С/м <sup>3</sup>	0,375
Энергетический зазор между зонами, эВ	3,39
Энергия оптического фонона, мэВ	91,2
Константа междолинной связи, эВ/см	1,0
Энергия междолинного фонона, мэВ	91,2

Поэтому в исследованиях, результаты которых представлены ниже, были сделаны следующие предположения, необходимые для проведения моделирования. Предполагалось, что эффективная масса электронов для верхних долин  $\Gamma_2$  и  $L-M$  равнялась массе свободного электрона. Значения коэффициентов непараболичности для верхних долин  $\Gamma_2$  и  $L-M$  принимались такими же, как и для нижней долины  $\Gamma_1$ . Значения остальных электрофизических параметров для GaN принимались такими же, как в [7].

Таблица 2. Параметры электронных долин материала GaN [7]

Долины	$\Gamma_1$	$\Gamma_2$	$L-M$
Число эквивалентных долин	1	1	6
Эффективная масса	0,2	1,0	1,0
Междолинный зазор, эВ	–	1,9	2,1
Энергетический зазор, эВ	3,39	5,29	5,49
Коэффициент непараболичности, эВ <sup>-1</sup>	0,189	0,189	0,189

При моделировании процессов переноса электронов в материале GaN шаг пространственного интегрирования уравнений движения электронов и уравнения Пуассона выбран равным  $2,5 \cdot 10^{-6}$  м, а интервал временной дискретизации, согласованный по электрическому полю —  $1,0 \cdot 10^{-15}$  с, при равновесной концентрации электронов, равной  $10^{17}$  см<sup>-3</sup>.

### Определение зависимостей частот рассеяния электронов в материале GaN от величины энергии

Были рассчитаны зависимости для следующих частот рассеяния:  
на полярных оптических фононах,  
на акустических фононах,  
на ионизированных примесях,  
при переходах электронов между неэквивалентными долинами.

Расчеты выполнялись для значения температуры  $T=300$  К и значения равновесной концентрации электронов, равной  $10^{17}$  см<sup>-3</sup>. Полученные зависимости частот рассеяния показаны на рис. 1–4.

На рис. 1 представлены зависимости частот рассеяния от энергии: на полярных оптических фононах с испусканием (кривая 1) и с поглощением (кривая 2) фононов, на акустических фононах (кривая 3) и на примесях (кривая 4).

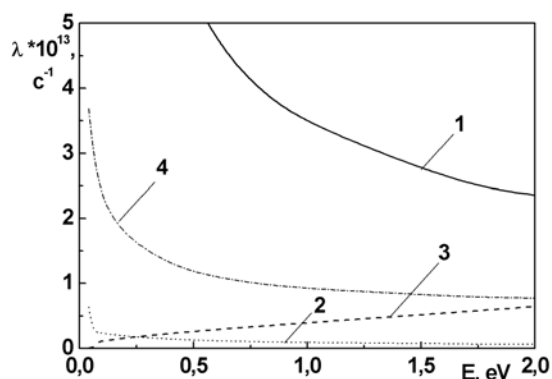


Рис. 1. Зависимости частот рассеяния от энергии: на полярных оптических и акустических фононах

Анализ этих кривых показывает, что с ростом энергии частоты рассеяния на полярных оптических фононах и на примесях монотонно уменьшаются. Для зависимости частоты рассеяния на акустических фононах наблюдается увеличение частоты рассеяния с ростом энергии. Видно, что для энергий электронов, значения которых не превышают приблизительно 2 эВ, преобладает рассеяние на полярных оптических фононах с испусканием фононов.

Зависимость частоты рассеяния при переходах электронов между неэквивалентными долинами представлены на рис. 2: кривая 2 соответствует переходу электронов из долины  $\Gamma_1$  в долину  $\Gamma_2$  с поглощением фонона, а кривая 1 — из долины  $\Gamma_1$  в долины  $L-M$  с поглощением фонона, и на рис. 3: кривая 1 — из долины  $\Gamma_1$  в долину  $\Gamma_2$  с излучением фонона, и кривая 2 — из долины  $\Gamma_1$  в долины  $L-M$  с излучением фо-

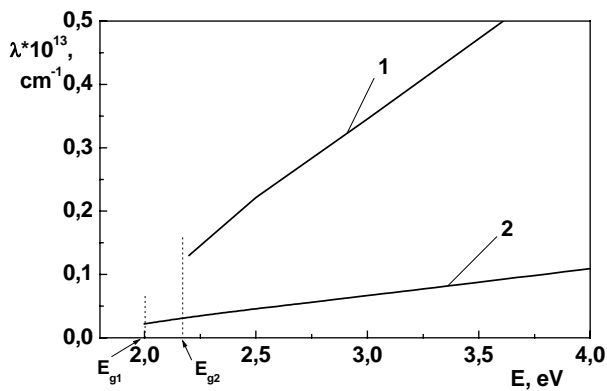


Рис. 2. Зависимости частот междолинного рассеяния между неэквивалентными долинами от величины энергии

даются эффекты рассеяния на полярных оптических фононах с поглощением фонона, на акустических фононах и на ионизированных примесях, причем последний вид рассеяния преобладает. Начиная с энергии  $\sim 0,1$  эВ, наблюдаются эффекты рассеяния на полярных оптических фононах с испусканием фонона, что предопределяет резкий подъем зависимости суммарной частоты рассеяния, показанной на рис. 4. При дальнейшем увеличении энергии суммарная частота рассеяния уменьшается. Увеличение частоты рассеяния при энергиях (приблизительно больше 2 эВ) обусловлено включением механизмов рассеяния между неэквивалентными долинами, что видно из рис. 3 (кривая 3).

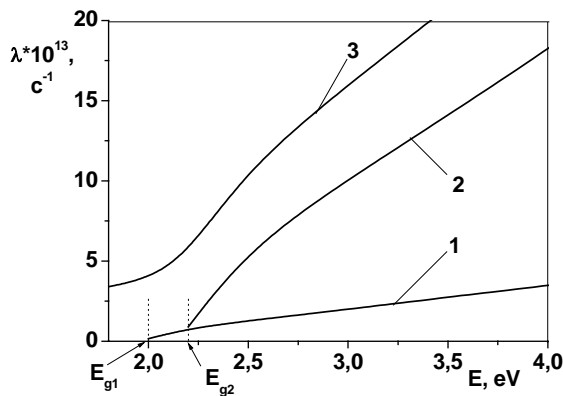


Рис. 3. Зависимости частот междолинного рассеяния между неэквивалентными долинами (кривые 1,2) и суммарной частоты рассеивания (кривая 3) от величины энергии

нона. Характер поведения этих кривых одинаков и определяется ростом частоты рассеяния с увеличением энергии.

Частоты рассеяния при переходах электронов между эквивалентными долинами  $L-M$  при данном моделировании не учитывались, так как такой вид рассеяния будет влиять на характеристики переноса при очень больших энергиях.

Зависимость суммарной частоты рассеяния от энергии представлены на рис. 3 (кривая 3) и на рис. 4 соответственно при больших (более 2 эВ) и малых (до 1 эВ) энергиях. Эти кривые имеют сложную форму и их характер поведения определяется тем, какой вид рассеяния преобладает при данной энергии. Так при малых энергиях (до  $\sim 0,1$  эВ) наблюдаются эффекты рассеяния на полярных оптических фононах с испусканием фонона, что предопределяет резкий подъем зависимости суммарной частоты рассеяния, показанной на рис. 4.

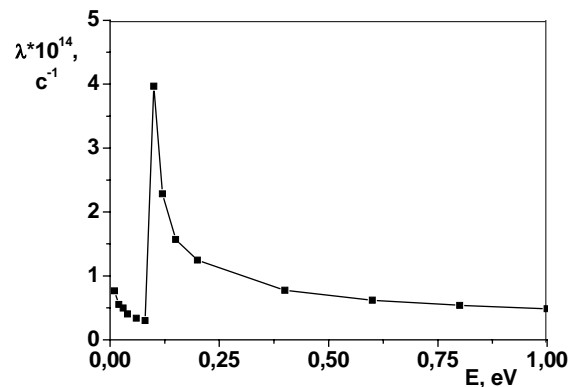


Рис. 4. Зависимость суммарной частоты рассеяния для небольших энергий

### Определение предельной частоты работы приборов на основе материала GaN

Для того чтобы избежать трудностей, возникающих при использовании метода Монте-Карло, в частности большой трудоемкости расчетов, был предложен подход, связанный с использованием частных дифференциальных уравнений, которые учитывают баланс энергии и

баланс импульса [12, 17]. Уравнение, использующее время релаксации энергии  $\tau_\varepsilon$ , выглядит следующим образом [7]:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = qE\nu - \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\tau_\varepsilon(\varepsilon)}, \quad (6)$$

где  $q$  — заряд электрона,  $\nu$  — средняя скорость электронов и  $E$  — величина приложенного электрического поля. Уравнение, использующее время релаксации импульса  $\tau_m$ , можно записать как

$$\frac{d[m^*(\varepsilon)\nu]}{dt} = qE - \frac{m^*(\varepsilon)\nu}{\tau_m(\varepsilon)}, \quad (7)$$

где  $\varepsilon$  — усредненная величина энергии,  $\varepsilon_0$  — усредненная величина энергии при отсутствии внешнего поля. Выражения определения значений  $\tau_\varepsilon$  и  $\tau_m$  могут быть найдены из уравнений (8) и (9):

$$\tau_\varepsilon(\varepsilon) = \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{qE_{ss}(\varepsilon)\nu_{ss}(\varepsilon)}, \quad (8)$$

$$\tau_m(\varepsilon) = \frac{m^*(\varepsilon)\nu_{ss}(\varepsilon)}{qE_{ss}(\varepsilon)}, \quad (9)$$

где  $\nu_{ss}(\varepsilon)$  — зависимость средней дрейфовой скорости электронов от величины энергии  $\varepsilon$  и  $E_{ss}(\varepsilon)$  — зависимость напряженности электрического поля от величины энергии  $\varepsilon$ . Зависимости  $\nu_{ss}(\varepsilon)$  и  $E_{ss}(\varepsilon)$  были найдены с использованием метода Монте-Карло.

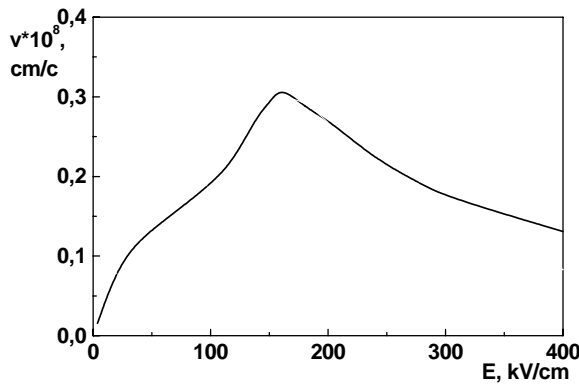


Рис. 5 Зависимость средней скорости электронов в материале GaN от напряженности электрического поля

ского поля, полученные по формуле

$$f_t = \frac{\nu}{2\pi l}, \quad (10)$$

где  $\nu$  — средняя дрейфовая скорость,  $l$  — длина пролетной области полупроводниковой структуры из материала GaN. Анализ этих зависимостей показывает, что при длине пролетной области 0,2 мкм максимальная частота отсечки приблизительно равняется 233 ГГц, а при длине 1 мкм — 46 ГГц.

На рис. 5 показана зависимость средней дрейфовой скорости электронов от величины напряженности электрического поля. Анализ этой кривой показывает, что максимальная величина скорости электронов, равная  $0,314 \cdot 10^8$  см/с, наблюдается при напряженности 140 кВ/см, что приблизительно соответствует ранее полученным в [7, 8] значениям.

На рис. 6, 7 представлены зависимости частоты отсечки  $f_t$  от величины напряженности электрического

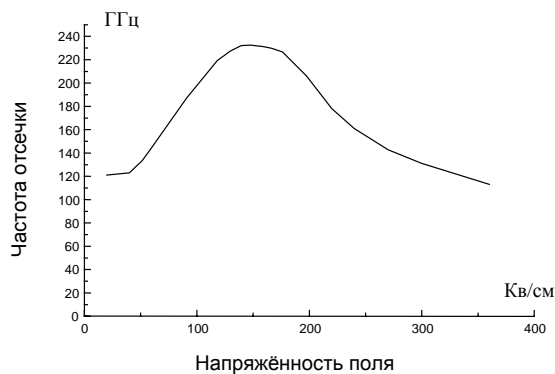


Рис. 6. Частота отсечки в зависимости от напряжённости поля при  $l=0,2$  мкм

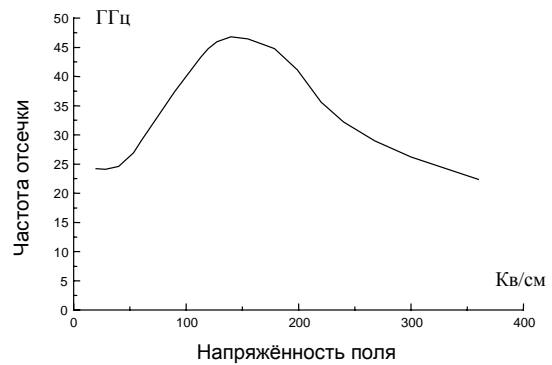


Рис. 7. Частота отсечки в зависимости от напряжённости поля при  $l=1$  мкм

### Заключение

Таким образом, в данной статье исследованы особенности переноса электронов в приборах на материале GaN. Определены основные электрофизические параметры для моделирования структур на основе GaN, а также размеры пространственного и временного шагов при моделировании. Рассчитаны значения частот рассеяния электронов в материале GaN, которые позволяют рассчитать предельные параметры приборов на основе данного широкозонного полупроводникового материала.

Авторы выражают признательность Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований за поддержку этих исследований.

## RESEARCH OF ELECTRON TRANSFER FEATURES IN GUNN SEMICONDUCTOR DEVICES

V.V. MURAVIEV, A.A. TAMELO, V.H. MISHCHENKO

### Abstract

Results of electron transfer features in GaN material research are cited. The most common approach of electron motion in semiconductor structures modelling is application of Boltzmann equation and Monte Carlo method used for its computational solution. Primary electrophysical parameters of GaN material are defined which are necessary for charge carriers transfer investigation applying Monte Carlo method. Frequencies of electron dispersion in GaN material are calculated.

### Литература

1. *Gehnont B., Shur M., Kim K.* // J. Appl. Phys. 1993. Vol. 74. P. 1818.
2. *Kolnik J., Oguzman I.H., Brennan K.F. et al.* // J. Appl. Phys. 1995. Vol. 78. P. 1033.
3. *Shur M., Gehnont B., Khan M.A.* // J. Electron. Mater. 1995. Vol. 25. P. 777.
4. *Krishnamunhy S., van Schilfgaarde M., Sher A., Chen A.-B.* // Appl. Phys. Lett. 1997. Vol. 71. P. 1999.
5. *Alhrecht J.D., Wans R.P., Ruden P. P. et al.* // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 83. P. 4777.
6. *O'Leary S.K., Fomz B.E., Shur M.S., et al.* // Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 1998. Vol. 482. P. 845.
7. *O'Leary S.K., Foutz B.R., Shur M.S., Eastman L.F.* // J. Appl. Phys. 1999. Vol. 85. P. 7727–7734.

8. *Bhapkar U.V., Shur M.S.* // *J. Appl. Phys.* 1997. Vol. 82(4). P. 1649–1655.
9. *O'Leary S.K., Foutz B.F., Shur M. S., et al.* // *Solid State Commun.* 1998 Vol. 105. P. 621.
10. Вычислительные методы в динамике разреженных частиц // Под ред. Де Леи Дж. Н. М., 1969.
11. *Revefied gas dynamics* / Eds. L. Trilling, H. Wachman. New York, Academic Press, 1969.
12. *Шур М.* Современные приборы на основе арсенида галлия: Пер. с англ. М., 1991. 632 с.
13. *Ruch J.G., Fawcett W.* // *J. Appl. Phys.* 1970 Vol. 41(9). P. 3843–3849.
14. *Smith A.C., Janak J.K., Adler R.B.* // *Electronic Conduction in Solids.* McGraw-Hills. New York, 1967.
15. *Fawcett W., Boardman A.D., Swain S.* // *J. Phys. Chem. Solids.*, 1970, Vol. 31. P. 1963–1990.
16. *Kurosawa T.* // *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.*, 1966. Vol. 21. P. 424.
17. *Shur M.* // *Electron. Lett.* 1976. Vol. 12. P. 615.