

# 用全带 Monte Carlo 方法模拟纤锌矿相 GaN 和 ZnO 材料的电子输运特性\*

郭宝增

(河北大学电子信息工程学院,保定 071002)

Umberto Ravaoli

(Beckman Institute, University of Illinois at Urbana-Champaign, 405 North Mathews, Urbana, IL, USA 61801)

(2002 年 1 月 19 日收到, 2002 年 3 月 5 日收到修改稿)

报告了用全带 Monte Carlo 方法模拟纤锌矿相 GaN 和 ZnO 材料电子输运特性的结果. 模拟所用的能带结构数据是用经验赝势法算得的. 通过模拟得到了两种材料的平均漂移速度和平均能量与电场强度关系曲线, 求得了电子迁移率. 并且将两种材料的结果以及文献报道的 GaAs 的模拟结果进行了比较.

关键词: 蒙特卡罗模拟, GaN, ZnO, 输运特性, 能带结构

PACC: 7280E, 5225F, 7115Q

## 1. 引 言

GaN 和 ZnO 两种材料都是宽禁带材料. 由于宽禁带特性, GaN 可用来制造从蓝光到紫外光波长范围内的光电器件及高温和高电压器件. ZnO 材料对于 400—700nm 波长的光是透明的, 而且在适当掺杂情况下呈现高电导率. 基于这些特性, ZnO 材料可以用来制造透明电极, 平板显示的窗口材料, 气体传感器, 光探测器和太阳能电池等. 此外, 由于 ZnO 与 GaN 材料的晶格常数能够很好的匹配, ZnO 还可以用作制备 GaN 层的衬底材料. 近年来, GaN 和 ZnO 材料和器件研究取得极大进展, 已经有多种结构和器件制造出来, 如用 GaN 材料制造的超晶格结构、量子阱器件、蓝光激光器、光探测器、发光二极管和高电子迁移率晶体管等<sup>[1-3]</sup>, 以及用 ZnO 制造的太阳能电池等<sup>[4]</sup>.

为了改进现有的器件技术, 开发新的高性能器件, 深入研究 GaN 和 ZnO 材料电子输运特性是非常必要的. 用 Monte Carlo 模拟方法来研究材料的输运特性, 具有所需基本参数少, 模拟精度高等优点, 已经发展成为研究新材料特性的标准技术. 目前已经有多篇关于用 Monte Carlo 模拟方法来研究 GaN 材料特性的报道, 这些报道都表明在 GaN 中电子的输

运呈现出微分负阻特性. 而对于 ZnO 材料, 作者尚未见有关用 Monte Carlo 模拟方法研究其输运特性的报道. 纤锌矿相 GaN 和 ZnO 在能带结构上有许多相似之处, 但也有一些明显的差别, 在输运特性方面也应该是既有相同之处, 也有一定差别. 为了研究纤锌矿相 ZnO 的输运特性, 并与 GaN 输运特性相比较, 我们开发了 GaN 和 ZnO 的全带 Monte Carlo 模拟程序, 通过运行此程序获得了 GaN 和 ZnO 的稳态输运特性. 本文将报告 GaN 和 ZnO 的模拟结果, 包括平均漂移速度和平均能量与电场的关系, 迁移率特性等, 并对两种材料的结果进行了比较和分析, 同时还与文献报道的 GaAs 的结果进行了比较.

## 2. 模型描述

已有许多介绍用 Monte Carlo 方法研究半导体材料特性技术的文献, 本文不再赘述<sup>[5-7]</sup>. 这里仅对近年才采用的全带 Monte Carlo 模拟作一简单介绍. 所谓全带 Monte Carlo 模拟是相对于常规分析带 Monte Carlo 模拟而言的. 两种方法的区别在于, 模拟中所用的能量与波矢量关系的模型不同. 在模拟中, 粒子在自由飞行结束时(即散射前), 要由已知的波矢量求出粒子能量, 而在新一次自由飞行开始前(即散射后), 又要由已知能量求出波矢量. 在分析带模拟方

\* 国家留学基金(批准号 98813054)资助的课题.

法中,假定能量与波矢量满足简单的解析关系,而全带模拟方法中,能量与波矢量的关系是通过能带理论计算得到的.后者需要计算复杂的能带结构,但模拟精度比较高,我们采用的就是这种方法.

通过经验赝势法计算能带结构数据,包括了材料导带的全部子带的数据(纤锌矿 GaN 的导带有 8 个能量子带,纤锌矿 ZnO 的导带有 7 个能量子带).纤锌矿 GaN 和 ZnO 的能带结构是六角型的,由于六角对称性,在能带计算中只需要计算简约布里渊区内的能量即可,其他区域的能量都可以通过对称操作得到.简约区域的体积( $K$  空间)是第一布里渊区体积的  $1/24$ .在  $K_x$  和  $K_y$  方向,电子波矢量由  $4\pi/\sqrt{3}a$  归一化,在  $K_z$  方向,波矢量由  $2\pi/c$  归一化,其中  $a$  和  $b$  为晶格常数.模拟中需要两种数据库,即稀疏格点的数据库和密集格点的数据库.前者用于电子自由飞行结束时,由波矢量确定能量;后者用于在电子经历各向同性的散射后,由能量确定波矢量.在经过上述的归一化后,稀疏格点的间隔在三个方向上均为 0.025,密集格点的间隔在三个方向上均为 0.01.按这种间隔,在简约区域和为了插值的需要选择了与简约区域相邻的一些格点,对稀疏格点共有 4991 个,对密集格点共有 38352 个.对 GaN 来说,导带有 8 个能量子带,因此就对应 306816 个能量值.

根据上次被散射后的初始波矢量,以及在电场中波矢量的变化量,便可计算出在电子自由飞行结束时的波矢量.由此波矢量,利用稀疏格点的能带数据,采用一种高级插值技术,便可确定电子能量.在经历散射后,由散射前的能量加上能量的变化量(对弹性散射,该变化量为 0),就可以确定散射后电子的能量.如果散射是各向同性的,就可以利用密集格点的能带数据,随机确定散射后的波矢量.但如果散射不是各向同性的,那么波矢量不仅取决于能量,还与散射前的波矢量有关,就要在能量和动量(波矢量)守恒前提下,利用随机数选择球坐标下的两个角度,用解析的方法来计算波矢量.由于能带的复杂性,这样算得的波矢量,不一定满足能带数据中的能量与波矢量的关系.我们的做法是利用求出的波矢量,到稀疏能带数据库中查找能量值,如果查出的值与原来的能量值不符合,再选择一组新的随机数重新计算,直到满意为止.

模拟中所包含的散射机理有极性光学声子散射,电离杂质散射,声学声子散射,碰撞电离散射和谷间散射等<sup>[5,8]</sup>.为了计算电离杂质散射,我们假定

材料的施主浓度为  $1 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ ,且杂质全部电离.

为了计算散射概率,我们把电子的能量分为两个区,即低能区和高能区.对 GaN 材料,低能区的能量小于 2.5eV;对 ZnO 材料,小于 3.0eV.在低能区,散射概率依赖于波矢量,各种散射机理对电子的散射概率可以通过费米黄金规则计算出来<sup>[5,6]</sup>.在散射后,电子的最终态可以精确地计算出来.比如,如果一个电子从  $\Gamma_1$  能谷散射到  $LM$  能谷,电子在  $LM$  能谷的波矢量就可以通过能带结构数据确定.在高能区,因为能量是强烈地简并的,即出现多个能量子带在  $K$  (波矢量)空间重合的情况,因此不可能通过上述的办法计算出各种散射机理的散射概率.因为散射概率是与电子最终态能量的态密度成正比的,所以在高能区的散射概率是通过低能态边界的散射概率由最终态能量标度化来实现的.图 1(a)和(b)分别表示 GaN 和 ZnO 材料的总散射概率.

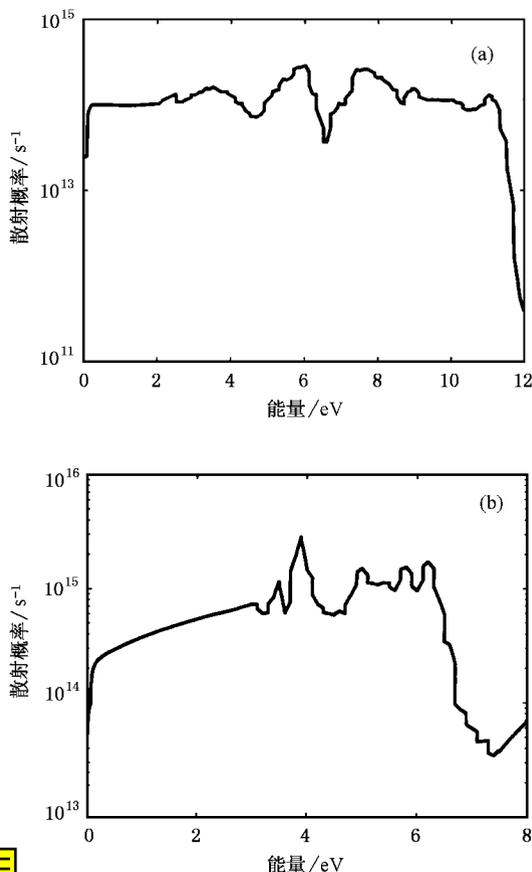


图 1 室温下能量与散射概率关系曲线(掺杂浓度为  $10^{17} \text{cm}^{-3}$ , (a)GaN (b)ZnO)

因为 Monte Carlo 方法是通过模拟大量电子运动,求出其宏观特性,所以所用的参数比较少,表 1

给出了模拟使用的两种材料的参数. 这些参数主要用来计算电子的散射概率.

表 1 纤锌矿 GaN 和 ZnO 的材料参数<sup>[9-15]</sup>

参数名称	GaN	ZnO
晶格常数/nm		
$a$	0.318	0.325
$c$	0.5185	0.5207
介电常数		
$\epsilon_0$	9.5	8.5
$\epsilon_\infty$	5.35	4.0
质量密度 $\rho/(g/cm^3)$	6.095	5.676
声速 $(cm/s)$	$4.33 \times 10^5$	$2.7 \times 10^5$
声学波形变势/eV	10.1	34.7
能谷间散射形变势 $(eV/cm)$	$1 \times 10^9$	$1 \times 10^9$
极性光学声子能量/eV	0.092	0.073

我们采用的是组合 Monte Carlo 模拟方法, 这种方法的特点是同时模拟大量电子的运动, 而不是模拟单个电子的运动. 我们模拟 20000 个电子的运动, 初始时电子的能量遵从麦克斯韦分布. 模拟的时间步长为  $2 \times 10^{-15}$  s. 对一个给定的电场值, 需要进行 10000 个时间步的模拟.

### 3. 模拟结果

我们分别计算了 GaN 和 ZnO 材料的平均漂移速度与电场强度的关系, 电场沿材料的(100)方向, 假定掺杂浓度为  $1 \times 10^{17} cm^{-3}$ , 且杂质全部电离, 晶格温度为 300K. 图 2 所示的是平均漂移速度与电场的关系曲线. GaN 的平均漂移速度与电场的关系曲线, 已有几篇文献报道<sup>[8]</sup>, 我们的结果与文献报道的结果能够很好地符合. 为了便于比较, 同时还引用了文献 [7] 中 GaAs 的平均漂移速度与电场强度的关系曲线.

由图 2 可以看出, 三种材料的平均漂移速度与电场强度曲线形状基本相同, 可分为 3 个区域. 第一个区域是线性区, 在此区域, 电子的能量很接近热平衡能量, 因为电子能量较低, 主要散射机理是电离杂质散射, 声学声子散射等, 此时, 极性光学散射的概率很小, 曲线的斜率(即迁移率)基本上是一个常数, 即电子平均漂移速度随电场增加而线性增加. 当电场进一步增加时, 曲线进入低斜率区域, 由于极性光学发射的散射概率随着电子能量增加而增加, 并成

为占优势的散射机理, 电子在电场中获得的能量, 由于这种散射而损失掉, 平均漂移速度增加趋缓. 电场增加到某一值时, 平均漂移速度达到最大值. 当电场再进一步增加时, 平均漂移速度随电场的增加反而下降, 即进入了微分负阻区. 微分负阻现象是由于谷间散射而引起的, 在能量较低的情况下, 电子位于中心能谷的底部, 随着能量的增加, 电子就处于中心能谷的较高的位置, 当能量达到某一阈值时, 电子就可以通过能谷间散射, 跃迁到高能谷上, 电子在 高能谷上的有效质量比中心能谷的有效质量大, 在这些能谷上的电子漂移速度就比较小. 随着迁移到这些能谷上的电子数量的增加, 平均漂移速度会随之减小.

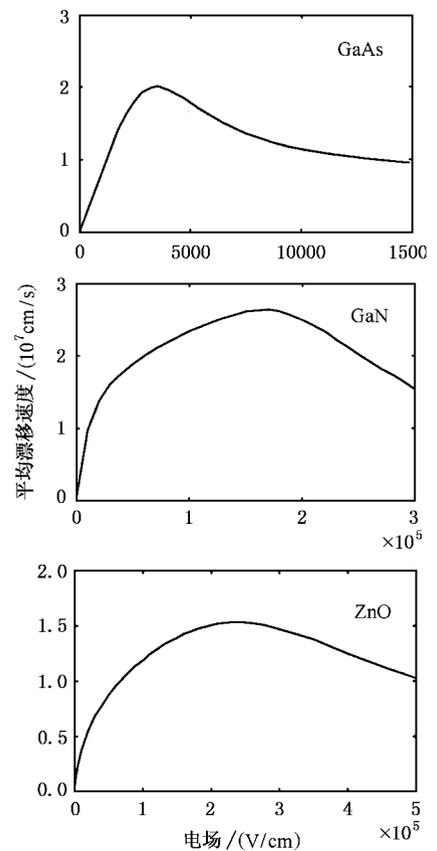


图 2 GaAs, GaN 和 ZnO 平均漂移速度与电场强度关系曲线

从图 2 还可以看出, 三种材料的阈值电场和峰值平均漂移速度, 有明显差异(如表 2 所列). 这是由于三种材料能带结构的差异而造成的, 具体地说是由三种材料的最低能谷与较高能谷的间隙不同而造成的. 我们首先比较 GaN 和 ZnO 两种材料能带结构方面的一些差异. GaN 材料有两种晶体结构, 即闪锌矿结构和纤锌矿结构, 在室温下的稳定相是纤锌矿

结构,我们研究的就是这种结构,ZnO 也是纤锌矿结构,因此这两种材料的能带结构是类似的,但是各能谷的间隙不同(见表 3)。从表中可以看出,对 GaN 材料,距最低能谷  $\Gamma_1$  近的是  $\Gamma_2$  能谷,间隔为 1.98eV;对 ZnO 材料,距  $\Gamma_1$  能谷最近的是 A 能谷,间隔为 2.66eV。在 GaN 中,发生能谷间散射所需能量约为 1.98eV,在 ZnO 中,发生能谷间散射所需能量约为 2.66eV,因此 GaN 的阈值电场要比 ZnO 的阈值电场低。GaAs 的晶体结构是闪锌矿结构,谷间散射最先发生在  $\Gamma$  能谷和 L 能谷之间,两能谷间隙为 0.29eV,因此阈值电场比另外两种材料低得多。各种材料在平均漂移速度方面的差别,与能带结构和散射参数两种因素有关。比如与能带结构有关的参数最低能谷的有效质量就决定了低场漂移速度。

表 2 三种材料的阈值电场和峰值平均漂移速度

	阈值电场 (kV/cm)	峰值平均漂移速度 (cm/s)
GaAs	3.5	$2.02 \times 10^7$
GaN	180	$2.5 \times 10^7$
ZnO	240	$1.5 \times 10^7$

表 3 GaN 和 ZnO 能谷参数

能谷	$\Gamma_1$		$\Gamma_2$		LM		A	
	GaN	ZnO	GaN	ZnO	GaN	ZnO	GaN	ZnO
等能谷数	1	1	1	1	6	6	1	1
能谷间隙/eV	0	0	1.98	4.32	2.15	4.64	2.23	2.66
有效质量( $m_i/m_0$ )	0.19	0.59	0.40	1	0.60	1	1	1

图 3 所示的是 GaN 和 ZnO 的电子平均能量与电场强度的关系。电子平均能量随电场强度增大而增大。在开始时增加比较缓慢,当电场强度大于阈值电场时,曲线斜率增大,平均能量迅速增加。但 GaN 平均能量的增加比 ZnO 要快,这主要是由以下几个原因造成的。首先,GaN 的能谷间跃迁的阈值能量比 ZnO 小,对 GaN, $\Gamma_1$  能谷与其最近邻的能谷  $\Gamma_2$  的间隙为 1.98eV,而对 ZnO, $\Gamma_1$  能谷与其最近邻的能谷 A 的间隙为 2.66eV。其次,GaN 的几个高能谷比较接近  $\Gamma_1$  能谷上的电子除了可以散射到  $\Gamma_2$ ,还可以散射到稍高一些的 LM 能谷,而对 ZnO,除了 A 能谷外,其他能谷与  $\Gamma_1$  的间隙都在 4.32eV 以上,电子被散射到这些能谷上的概率很小。此外,GaN 的 LM 能谷有六个,假定其他条件都相同, $\Gamma_1$  上的电子散射到 LM 上的概率,要比相反的过程(即从 LM 散射到

$\Gamma_1$ ) 大六倍,在高能谷上的电子不容易损失能量,故能量增加快。而 ZnO,A 能谷只有一个,电子从  $\Gamma_1$  散射到 A 的概率与从 A 到  $\Gamma_1$  的概率相差不大,能量积累较慢。

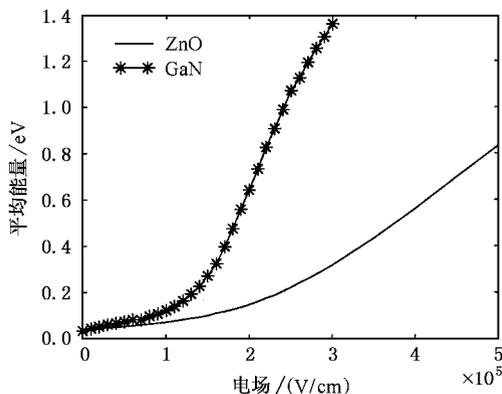


图 3 电子平均能量与电场强度关系曲线

模拟还计算了电子迁移率。模拟程序通过电子扩散速度,来计算电子迁移率,而不是通过漂移速度来计算电子迁移率。这种方法可以在零电场的情况下计算迁移率,从而避免了迁移率与电场有关的问题。因为模拟中只是在一个方向上记录电子的运动,扩散系数是一个标量,可以表示为

$$D = \frac{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}{\Delta t} \quad (1)$$

$\langle x^2 \rangle$  是电子的位移方均值, $\langle x \rangle$  是电子位移的平均值, $\Delta t$  是模拟的时间间隔。基于扩散系数的迁移率可以由下式求出<sup>[16,17]</sup>:

$$\mu = \frac{qD}{\left(1 + \frac{n}{N_c}\right) k_B T_e} \quad (2)$$

式中  $n$  是自由电子浓度, $N_c$  为导带态密度。由这种方法,计算了在室温、掺杂浓度为  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  情况下 GaN 和 ZnO 的迁移率,GaN 的电子迁移率为  $1000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ,ZnO 的电子迁移率为  $285 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ,这一结果与有关实验结果符合得比较好。电子的迁移率主要与  $\Gamma_1$  能谷的有效质量和低能量下的散射概率等因素有关。在散射概率差别不很大的情况下,主要取决于前者。在模拟中我们并没有直接用到有效质量这一参数,它是隐含在能带结构数据之中的。GaN 和 ZnO 的有效质量分别为  $0.19m_0$  和  $0.54m_0$ , $m_0$  为自由电子的有效质量。因为 ZnO 的有效质量比 GaN 的大,故迁移率比 GaN 低。GaAs 的电子有效质量更低,为  $0.067m_0$ ,所以迁移率比上述两种材料高得

多,约为  $8000\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ .

## 4. 结 论

本文报告了用 Monte Carlo 方法模拟纤锌矿相 GaN 和 ZnO 的模拟结果,并将两者结果进行了比较,此外,还与文献中 GaAs 的有关结果进行了比较,并

且分析了几种材料有关特性差别的原因.据作者所知,有关 ZnO 输运特性 Monte Carlo 模拟研究的结果,还是第一次报道.模拟结果表明,GaN 和 ZnO 的输运特性与一般化合物半导体基本相同,平均漂移速度呈现微分负阻特性.但阈值电场比常用材料 GaAs 高得多,因此适合制造高电压工作器件.

- |   |  |
|---|--|
| <p>[ 1 ] Chow T P ,Khemkav Fedison J ,Ramingul N ,Mato C K ,Tang Y and Gutmann R J 2000 <i>Solid-State Electronics</i> <b>44</b> 277</p> <p>[ 2 ] Van Zeghbroeck B ,Chang S S ,Waters R L ,Torvik J and Pankov J 2000 <i>Solid-State Electronics</i> <b>44</b> 265</p> <p>[ 3 ] Shuji Nakamura ,Masayuki Senoh and Nagahama Shin-ichi <i>et al</i> 2000 <i>Apply physics letter</i> <b>76</b> 22</p> <p>[ 4 ] Mi Y ,Odaka H and Iwata S 1999 <i>Jpn . J . Appl . Phys .</i> <b>38</b> 3454</p> <p>[ 5 ] Mark Lundstrom 1990 <i>Volume X Fundamentals of Carrier Transport</i> ( Addison-Wesley Publishing Company ) p45</p> <p>[ 6 ] Jacoboni C and Reggiani L 1983 <i>Reviews of Modern Physics</i> <b>55</b> 645</p> <p>[ 7 ] Fawcett W ,Boardman A D and Swain S. 1970 <i>J. Phys . Chem . Solids</i> <b>31</b> 1963</p> | <p>[ 8 ] Zheng J ,Liu W D and Yu C X 2001 <i>Acta Phys . Sin .</i> <b>50</b> 721( in Chinese ) 郑 坚、刘万东、俞昌旋 2001 <i>物理学报</i> <b>50</b> 721 ]</p> <p>[ 9 ] Kolnik J ,Oguzman I H ,Brennan K F ,Wang Rongping ,Paul R P and Wang Y 1995 <i>J. Appl . Phys .</i> <b>78</b> 1033</p> <p>[ 10 ] Strite S and Morkoc H 1992 <i>J. Vac . Sci . Technol .</i> B <b>10</b> 1237</p> <p>[ 11 ] Wagner P and Helbig R 1974 <i>J. Phys . Chem . Solids</i> <b>35</b> 327</p> <p>[ 12 ] Rode D L 1970 <i>Physical Review B</i> <b>2</b> 4036</p> <p>[ 13 ] Wagner P and Helbig R 1974 <i>J. Phys . Chem . Solids</i> <b>35</b> 327</p> <p>[ 14 ] Hutson A R 1957 <i>Physical Review</i> <b>108</b> 222</p> <p>[ 15 ] Lambrecht W R L ,Limpijumngok Sukit and Segall B 1999 <i>Mat . Res . Soc . Symp . Proc .</i> <b>537</b> G6.8</p> <p>[ 16 ] Bhapkar U V and Shur M. S. 1997 <i>J. Appl . Phys .</i> <b>82</b> 1649</p> <p>[ 17 ] Sze S M 1981 <i>Physics of Semiconductor Devices</i>( New York :Wiley )pl</p> |
|---|--|

# Study of electron transport properties for wurtzite GaN and ZnO with full band Monte Carlo simulation<sup>\*</sup>

Guo Bao-Zeng

( College of Electronic and Informational Engineering ,University of Hebei ,Baoding 071002 ,China )

Umberto Ravaoli

( Beckman Institute ,University of Illinois at Urbana-Champaign ,405 North Mathews Urbana ,IL ,USA 61801 )

( Received 19 January 2002 ; revised manuscript received 5 March 2002 )

## Abstract

We present the first calculated results of electron transport properties of the wurtzite GaN and ZnO with the full band Monte Carlo simulations. The band structure data being used in the simulations are based on the empirical pseudopotential method. The characteristics of drift velocity-field and average energy-field for both materials are obtained from Monte Carlo calculations ,and electron mobility also are obtained. The comparison among the results of both materials ,as well as the Monte Carlo results of GaAs reported by other authors have been made.

**Keywords :** Monte Carlo simulation , GaN , ZnO , transport properties , band structure

**PACC :** 7280E , 5225F , 7115Q

<sup>\*</sup> Project supported by the China Scholarship Council( Grant No.98813054 ).