

钐矿相 GaN 电子高场输运特性的 Monte Carlo 模拟研究*

郭宝增[†] 张锁良 刘鑫

(河北大学电子信息工程学院, 保定 071002)

(2010年8月14日收到;2010年9月13日收到修改稿)

应用全带多粒子 Monte Carlo 模拟方法,研究了钐矿相 GaN 材料电子的高场输运特性. 模拟中利用了基于第一性原理总能量赝势方法计算得到的钐矿 GaN 的能带结构数据. 用 Cartier 的方法,计算碰撞电离散射率. 计算得到了电子平均漂移速度和电子平均能量与电场的关系曲线. 电离系数的分析表明当电场强度大于1 MV/cm时,才会有明显的碰撞电离发生,量子产额的分析表明当电子的能量大于7 eV时,量子产额随能量增加迅速增大. 研究了在0—4 MV/cm 电场强度范围内电子在各导带的分布,低场下电子全部位于第1导带,随着电场增加电子跃迁到更高的导带上. 在所研究的电场范围内,电子主要位于第1和第2导带,高场下一些电子位于第3、第4和第5导带,第7和第8导带上的电子极少.

关键词: 碰撞电离, 高场输运, 能带结构, Monte Carlo 模拟

PACS: 87.55.kh, 72.20.Ht, 71.20.Mq, 73.40.Kp

1. 引言

宽禁带半导体材料 GaN 可以用于光电子器件、大功率器件和微波器件的制造. 近十几年来 GaN 材料制备及器件制造的研究和应用都取得了很大进展,一些 GaN 器件(如光电子器件)已经商品化. 与此同时,人们对 GaN 材料的载流子输运特性也进行了大量研究,这些研究深化了对材料基本特性的了解,对于设计和开发高性能器件十分重要.

在 GaN 材料输运的特性研究方面,较多的工作都关注器件的低场输运特性,因为对于常规器件,内部电场强度都较低,器件内部载流子的行为可以用低场输运特性描述. 然而一些 GaN 器件(如雪崩光探测器、深亚微米器件等)工作电压很高,内部电场很强,甚至工作在击穿区,因此有必要研究 GaN 材料的高场输运特性. 近年来,已经有不少作者报道了用 Monte Carlo 方法研究 GaN 材料的高场输运结果^[1-4]. 在现有的报道中,研究人员给出了碰撞电离系数与电场强度的关系、漂移速度与电场强度特性等,但是对电子在高电场下其他一些内部特

性,如高电场下电子数量按能量的分布、电子在各导带的分布情况等尚未见报道. 为了对电子在高电场下的输运特性进行更详细的研究,我们在原有 GaN 低场输运特性的 Monte Carlo 模拟程序代码的基础上,通过建立分析 GaN 高场输运特性的 Monte Carlo 模拟的模型,编写了分析 GaN 输运特性的 Monte Carlo 模拟程序,用来研究在较宽的电场范围内 GaN 载流子的输运特性. 我们在已有报道的基础上,通过 Monte Carlo 分析得到了材料的输运特性,还深入分析了电子输运的物理机理,包括量子产额、电子在各导带的分布等. 本文主要介绍 Monte Carlo 分析模型的建立及 Monte Carlo 模拟分析的结果,包括材料的电子输运特性以及电子内部输运机理等.

2. 模型描述

本工作采用全带多粒子 Monte Carlo 方法模拟 GaN 材料的电子输运特性. 所谓全带模拟,是指模拟电子的能量与波矢量的关系是通过能带理论计算得到的. 这种方法能够比较准确地确定能量与波

* 河北省自然科学基金(批准号:F2009000226)、河北省教育厅科学研究计划(批准号:2008308)资助的课题.

[†] E-mail: guobaozeng@yahoo.com.cn

矢量的关系,模拟精度比抛物面模型和非抛物面模型高,但是能带结构数据的计算和模拟过程都十分复杂. 所谓多粒子模拟,是指同时模拟大量电子在材料中的运动,通过求大量电子状态的平均值得到材料的宏观特性^[5,6]. 常压下 GaN 是纤锌矿结构,能带结构是六角对称的,其导带最小值和价带最大值位于布里渊区中心(即 Γ 点). 本研究采用第一性原理总能量赝势方法(first-principles total-energy pseudopotential method)计算纤锌矿 GaN 的能带结构. 在六角对称的能带结构中,简约布里渊区的 k 空间体积是第一布里渊区体积的 $1/24$. 在能带结构计算中,只需要计算简约布里渊区内的能量即可,其他区域的能量可以通过对称操作得到^[7]. 图 1 所示的是利用本工作所用的 GaN 能带结构数据画出的在几个高对称方向的能带结构图.

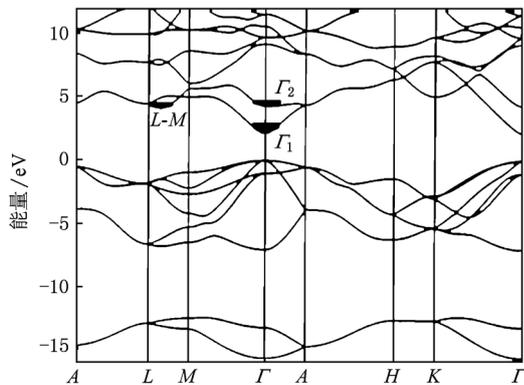


图 1 纤锌矿 GaN 能带结构及能谷分布

本工作研究电子的输运特性,模拟中只使用导带电子结构的数据,电子波矢量和能量必须满足能带结构数据的对应关系. 模拟中需要两种能带结构的数据,即稀疏格点的数据和密集格点的数据. 前者用于电子自由飞行结束时,由波矢量确定能量,后者用于电子经历各向同性散射后,由能量确定波矢量.

从图 1 所示的能带结构可以看出, Γ_1 能谷和 $L-M$ 能谷在第 1 导带上, Γ_2 能谷在第 2 导带上,由于布里渊区的六角对称性,共有六个 $L-M$ 能谷. $L-M$ 能谷与 Γ_1 能谷的间隔为 1.98 eV, Γ_2 能谷与 Γ_1 能谷的间隔为 2.15 eV. 电子的状态由温度和电场强度决定,并遵从玻尔兹曼统计分布,室温下,电场强度为零时大多数电子位于导带底附近,即第 1 能量导带的 Γ_1 能谷上. 随着电场强度的增加,电子平均能量增加,电子向高能态迁移,当电子平均能量较

高时就会有部分电子跃迁到 $L-M$ 能谷或 Γ_2 能谷上. 如果电场强度继续增加,电子就会跃迁到更高的能量状态上. 在 Monte Carlo 模拟中,当电子能量位于上述 3 个能谷时,可根据各能谷的散射率来模拟电子的跃迁过程. 当电子处于更高的能量状态时,由于各导带交叠,模拟电子的跃迁过程将变得非常复杂. 我们基于 GaN 能带结构数据的分析,确定 2.5 eV 为能量的阈值,低于阈值时基于费米黄金规则求出电子在各能谷的散射率,电子能量高于此阈值时,因为散射率与最终态的态密度成正比,分别求出 8 个导带的态密度,对能量状态求态密度之和,基于阈值能量上的散射率和态密度求出各能量状态的散射率. 当电子散射到某一简并能量状态时,随机确定电子所处的能带.

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、碰撞电离散射和能谷间散射等. 为了计算电离杂质散射,设杂质全部电离. 电离杂质散射为弹性散射,能谷间散射为各向同性散射. 表 1 给出了在计算散射概率时使用纤锌矿 GaN 材料的一些主要参数^[8-10].

表 1 纤锌矿相 GaN 材料参数

参数名称	参数值
禁带宽度/eV	3.5
晶格常数 a /nm	0.1800
晶格常数 c /nm	0.5185
介电常数 ϵ_0	9.50
介电常数 ϵ_∞	5.35
质量密度 ρ /g · cm ⁻³	6.095
纵向声子速度 u_{10} /cm · s ⁻¹	6.6×10^5
横向声子速度 u_{11} /cm · s ⁻¹	2.7×10^5
声学形变势/eV	10.1
谷间形变势/eV · cm ⁻¹	1×10^9
极性光学声子能量/eV	0.092

本工作主要研究电子高场输运特性,高场输运特性的特点之一是电子平均能量高,部分电子被激发到高能态上,关于高能态电子的散射率计算方法上面已经介绍了. 在高场电子输运情况下,获得高能量的电子会与晶格碰撞,发生碰撞电离,产生电子-空穴对. 碰撞电离的仿真需要求出碰撞电离散射率. 通过费米黄金规则可以求出依赖于能量的碰撞电离散射率,文献[2]给出了纤锌矿相 GaN 电离散射率的计算结果. 在我们的 Monte Carlo 模

拟中,采用 Cartier 的公式计算碰撞电离散射率^[11],即

$$\frac{1}{\tau(E)} = \sum_{i=1}^3 \theta(E - E_{th}^{(i)}) P^{(i)} \left(\frac{E - E_{th}^{(i)}}{E_{th}^{(i)}} \right)^2, \quad (1)$$

其中, E 为电子动态能量, θ 为阶跃函数, $P^{(i)}$ 和 $E_{th}^{(i)}$ 的取值依据是拟合现有的基于费米黄金规则计算的散射率结果.

在高场下的 Monte Carlo 模拟,每个模拟周期中电子漂移的距离必须小于德拜长度,为保证模拟精度和稳定性,模拟的时间步长应适当减小,本文取 3×10^{-16} s. 在低电场下用 2×10^{-15} s 和 1×10^{-16} s 时间步长分别模拟,两者的结果基本相同,不过用短的模拟周期增加了模拟时间. 为了兼顾高场输运情况,均采用较小的步长,即 1×10^{-16} s.

本文的结果均在电场为 Γ - M 方向,温度为 300 K,掺杂浓度为 1×10^{-17} cm⁻³ 条件下得到.

3. 模拟结果

图 2 所示是由方程(1)计算得到的钕锌矿相 GaN 的电离散射率与电子能量的关系,其中的参数数值为 $E_{th}^{(i)} = 4.8, 5.8, 6.5$ eV, $P^{(i)} = 5 \times 10^8, 5 \times 10^{12}, 7.0 \times 10^{14}$ s⁻¹. 这些参数选取的原则是尽可能匹配用费米黄金规则计算的结果^[2]. 在我们的模拟中用这种方法计算电离散射率,避免了基于能带结构数据的复杂计算.

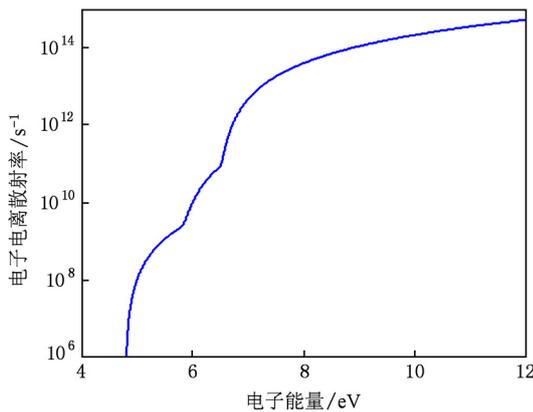


图 2 电子电离散射率与电子能量的关系

从图 2 可以看到,电子发生碰撞电离的能量比较大,当散射率为 1×10^6 s⁻¹ 时电子能量约为 5 eV. 文献[12—14]分别对半导体电离散射率的问题进行了研究,他们指出了一些经典教科书的中的错

误,提出了硬阈值和软阈值的概念,硬阈值为禁带宽度,但碰撞电离不仅遵守能量守恒和还要遵守动量守恒,因此实际发生碰撞电离的能量要比硬阈值大,称为软阈值. 为了匹配实验和复杂计算的结果,我们取 $E_{th}^{(1)}$ 为 4.8 eV.

图 3 所示是用 Monte Carlo 模拟得到的电子平均漂移速度与电场强度关系曲线. 最大平均电子漂移速度为 2.77×10^7 cm/s, 电场强度为 1.9×10^5 V/cm. 此后随电场强度的增加,部分电子获得足够高的能量,从 Γ_1 能谷迁移到 L - M 能谷或 Γ_2 能谷,迁移到高能谷上的电子将部分动能转化为势能,且高能谷上的有效质量大,导致平均漂移速度随电场增加而减少. 随着电场强度的进一步增加,电子的平均能量增加,更多的电子迁移到更高的能量导带上,电子在高能量的导带上的输运规律更加复杂,电子平均漂移速度随着平均能量的增加而下降,但下降得比较缓慢.

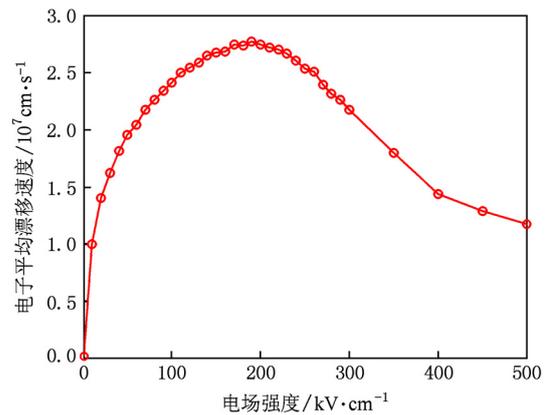


图 3 电子平均漂移速度与电场强度的关系曲线

碰撞电离系数是描述半导体材料高场输运特性的重要参数,通过碰撞电离系数可以预测材料的击穿电压. 电子电离系数 α 定义为电子在电场作用下漂移单位距离所产生的电子-空穴对数,或者描述为电子在经历两次碰撞之间的平均自由程的倒数. 用全带 Monte Carlo 模拟得到的电子电离系数与电场强度倒数的关系曲线如图 4 所示,所加电场方向为 Γ - M 方向,温度为 300 K. 图 4 中最高电场强度为 4 MV/cm, 当电场强度小于 1 MV/cm 时电离系数很小,比如模拟数据显示电场强度为 0.7 MV/cm 时,电离系数 $\alpha = 4 \times 10^{-3}$ cm⁻¹, 说明在此电场下发生碰撞电离的概率极小. 当电场强度为 4 MV/cm 时,电离系数 $\alpha = 7.7 \times 10^{+4}$ cm⁻¹.

量子产额是一个与碰撞电离有关的参数. 量子

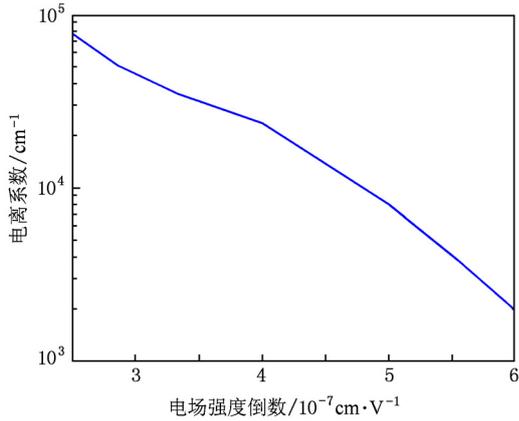


图4 电子电离系数与电场强度倒数的关系曲线 电场方向为 Γ - M 方向, 温度为 300 K

产额定义为高能电子在通过各种散射(包括碰撞电离散射)作用下使其能量弛豫到电离阈值以下的时间间隔内, 发生碰撞电离事件的次数. 量子产额也是碰撞电离散射率与电子-声子散射率之比的线性函数. 图5所示是量子产额与电子能量的关系曲线. 当电子的能量小于7 eV时, 电子发生电离散射的概率还比较小. 此后, 随着能量的增加, 其概率迅速增加. 当能量达到10 eV以上时, 量子产额接近于1, 说明电子在此能量下会迅速发生电离散射.

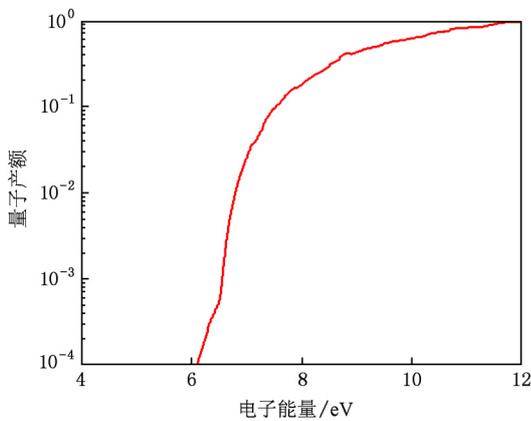


图5 量子产额与电子能量的关系曲线

图6所示是用全带 Monte Carlo 模拟得到在3种不同的电场强度下电子数按能量的分布. 图7所示的是平均电子能量与电场强度的关系曲线. 通过这两个图可以了解电子数、电子能量与电场强度关系的一些规律. 首先, 由图6可以看到, 随着电场强度的增加, 分布函数的峰值向能量大的方向偏移, 即电子能量随电场强度的增加而增加. 当电场强度

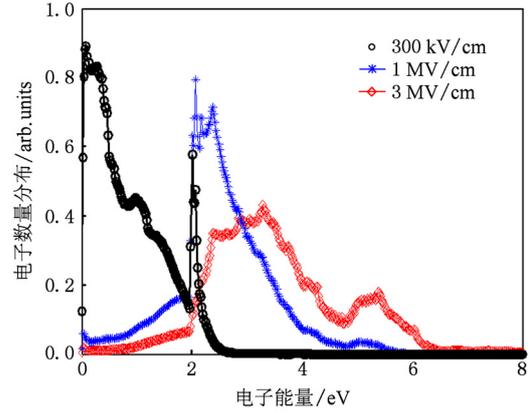


图6 不同电场下电子数随能量的分布

为300 kV/cm时, 由图7可知电子平均能量约为1 eV, 由图3可知, 此电场下平均漂移速度位于微分负阻区, 图6中其峰值位于0.29 eV, 即能量为0.29 eV附近的电子数最多, 此电场下分布函数还有一个峰值, 在2 eV附近, 因为 L - M 能谷和 Γ_2 能谷与导带底的间隙也在2 eV附近, 说明在此能量附近的电子由带间散射制被散射到 L - M 能谷和 Γ_2 能谷上, 而由于态密度的限制这些能谷上的电子通过散射回到 Γ_1 能谷的散射率较小, 因此高能谷上电子数量大. 当电场强度为1 MV/cm时, 分布函数的一个峰值在2.07 eV附近, 另一个峰值在2.4 eV附近, 2 eV附近的峰值也是因为 Γ_2 能谷和 L - M 能谷积累了较多电子的原因. 当电场强度为3 MV/cm时, 分布函数的峰值在3.27 eV附近. 分布函数与能带结构有关, 出现峰值处的态密度较大, 出现谷值处的态密度较低.

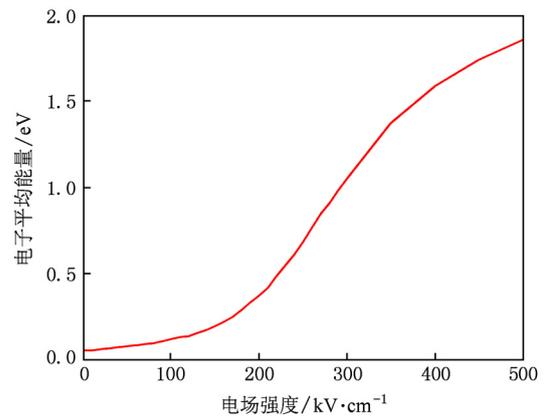


图7 电子平均能量与电场强度的关系曲线

通过 Monte Carlo 模拟, 还得到了电子在各能带

的分布情况. 电子在各导带的占据率等于该导带电子数除以总电子数, 各导带电子数之和等于总电子数, 因此各导带占据率之和为 1. 图 8 所示是电子在各导带占据率与电场强度的关系曲线. 钇矿相 GaN 共有 8 个导带, 图中没有关于第 7 和第 8 量子带曲线, 是因为在我们模拟的电场范围内, 这两个导带上没有电子占据. 从图 8 可以看出, 能量最低的第 1 导带, 在所研究的电场范围内占据率最高. 模拟数据表明, 当电场强度小于 1.9×10^5 V/cm 时, 电子几乎全部位于第 1 导带, 故第 1 导带的占据率为 1, 当电场大于 1.9×10^5 V/cm 时第 2 导带上的电

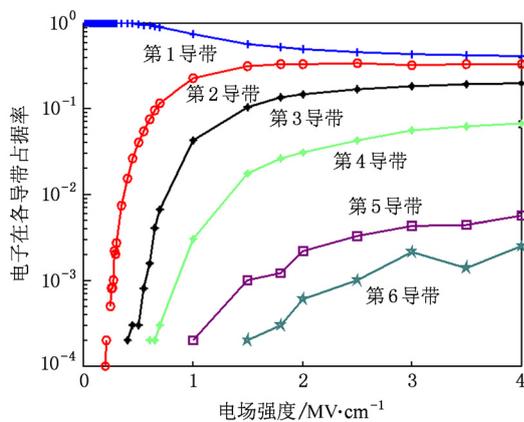


图 8 电子在各导带占据率与电场强度的关系曲线

子数量逐渐增加, 当电场强度为 1.0×10^6 V/cm 时占据率为 0.226, 此后占据率随电场的增加变化较慢, 占据率稳定在 0.33 附近. 第 3 导带和第 4 导带的变化规律与第 2 导带相同, 不过占据率更小, 在曲线的平坦区, 第 3 导带的占据率为 0.18 左右, 第 4 导带的占据率为 0.06 左右. 第 5 导带和第 6 导带的占据率更小, 而且第 6 导带的曲线起伏较大, 这是因为电子数很少, 每次模拟的统计平均涨落较大.

4. 结 论

报道了应用全带多粒子 Monte Carlo 模拟方法, 对钇矿相 GaN 材料电子的高场输运特性的研究结果. 介绍了高场输运特性模拟的方法, 包括电子碰撞电离散射率的计算方法、高场下电子在高能量导带上散射的处理方法以及高电场下模拟时间步的选择问题等. 通过 Monte Carlo 模拟得到了电子平均漂移速度和电子平均能量与电场的关系, 这些结果与现有报道的结果基本相同. 重点分析了与碰撞电离有关的特性, 包括碰撞电离散射率、碰撞电离系数. 研究表明, 当电场强度大于 1 MV/cm 时碰撞电离系数增加较快, 发生碰撞电离的概率较大. 通过 Monte Carlo 分析, 还得到了电子能量的分布及电子在各导带的分布等.

- [1] Kolnik J, Qğuzman I H, Brennan K F 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 726
- [2] Bertazzi F, Moresco M, Bellotti E 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 063718
- [3] Zheng Z Y, Mai Y X, Wang G 2009 *J. Appl. Phys.* **106** 023716
- [4] Zhou L G, Shen W Z 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5863 (in Chinese) [周立刚、沈文忠 2006 物理学报 **58** 5863]
- [5] Guo B Z, Ravaioli U, Staedele M 2006 *Comput. Phys. Commun.* **175** 482
- [6] Guo B Z, Gong N, Shi J Y, Wang Z Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2471 (in Chinese) [郭宝增、宫娜、师建英、王志宇 2006 物理学报 **55** 2471]
- [7] Chohen M L, Chelikowsky J R 1989 *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors* (2nd Ed.) (New York: Springer-Verlag) 140—157
- [8] Kolnik J, Qğuzman I H, Brennan K F, Wang R P, Ruden P P, Wang Y 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 1033
- [9] Bhapkar U V, Shur M S 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 1649
- [10] O'Leary S K, Foutz B E, Shur M S, Bhapkar U V, Eastman L F 1998 *Solid State Commun.* **105** 621
- [11] Cartier E, Fischetti M V, Eklund E A, McFeely F R 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 3339
- [12] Bude J, Hess K 1992 *J. Appl. Phys.* **72** 3554
- [13] Sano N, Aoki T, Yoshi A 1989 *Appl. Phys. Lett.* **55** 1418
- [14] Bellotti E, Dosshi B K, Brennan K F 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 916

Electron transport property in wurtzite GaN at high electric field with Monte Carlo simulation*

Guo Bao-Zeng[†] Zhang Suo-Liang Liu Xin

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

(Received 14 August 2010; revised manuscript received 13 September 2010)

Abstract

We present the results of the electron transport property in wurtzite GaN using an ensemble full band Monte Carlo simulation. The data of wurtzite GaN band structure calculated with the first-principles total-energy pseudopotential method is used in the simulations. The impact ionization scattering rate is calculated based on Cartier's method. The average electron drift velocity and the average electron energy each as a function of electric field are computed. The electron impact ionization coefficient is calculated as a function of applied electric field. The analysis of the impact ionization coefficient shows that when the applied electric field is greater than 1 MV/cm, the obvious impact ionization events occur. The analysis of the quantum yield shows that when the electron energy is greater than 7 eV, the quantum yield increases rapidly with electron energy increasing. We study the occupancy of the electrons in the eight conduction bands at the applied electric field ranging from 0 to 4 MV/cm. For the case of the low applied electric field all of the electrons are located in the 1st conduction band. With the increase of the applied electric field, some of the electrons move to high index conduction bands. For the whole range of the applied electric field, most of the electrons are located in the 1st conduction band and 2nd conduction band, a small number of the electrons are located in the 3rd, 4th and 5th conduction band, and very few electrons are located in the 7th and 8th conduction band.

Keywords: impact ionization, high field transport, energy band structure, Monte Carlo simulation

PACS: 87.55.kh, 72.20.Ht, 71.20.Mq, 73.40.Kp

* Project supported by the Natural Science Foundation of Hebei Province, China (Grant No. F2009000226) and the Scientific Research Program of the Education Bureau of Hebei Province, China (Grant No. 2008308).

[†] E-mail: guobaozeng@yahoo.com.cn