

# 不同温度下 ZnS 的高场输运特性 \*

赵 辉 王永生 侯延冰 徐 征 徐 叙

(北方交通大学光电子技术研究所 北京 100044)

(1999年8月26日收到; 1999年9月21日收到修改稿)

研究了 ZnS 中的电子声子相互作用,以此为基础 利用 Monte Carlo 方法研究了 ZnS 中电子在不同温度下的高场输运特性。电子加速的瞬态时间基本不随温度变化,电子的动能分布函数随温度升高向低能方向移动,即平均动能降低。电子在各能谷间的分布随温度升高而向低能谷移动。电子的漂移速度则随温度升高而降低,给出了这些物理量随温度变化的具体规律。

PACC : 7220 ; 0270 ; 7210

## 1 引 言

输运过程是半导体中的基本过程之一,它决定了半导体的诸多电学性质。随着半导体技术的发展,器件的集成度越来越高,与此同时,器件内部的工作场强也越来越高,高场效应不可避免地影响着器件的性能。另外,在一些场合,我们也有意识的利用高场效应,实现某些特定的功能。电子在高场下的输运过程是半导体中高场效应的最主要的来源,对这一过程的研究,将为整个高场效应的研究奠定基础,并为半导体器件的设计提供基本规律。

半导体的输运过程可用 Boltzmann 方程描述。它是一个微分-积分方程,难于求解。特别是在高场的情况下,无法通过适当的近似方法求解。平衡方程<sup>[1-3]</sup>和 Monte Carlo 方法<sup>[4]</sup>均为研究输运问题的重要方法。ZnS 作为一种重要的 II-VI 族半导体材料,已在众多领域获得了广泛的应用。Fogarty 等<sup>[1]</sup>曾采用 Monte Carlo 方法研究了 ZnS 在室温下的电子输运特性。我们也曾经研究了在室温条件下 ZnS 的电子输运过程,得出了关于瞬态加速、能谷转移等的有关规律<sup>[6-8]</sup>。本文仍以 ZnS 为例,利用 Monte Carlo 方法研究其在不同温度下的高场输运特性,其方法也适用于其他半导体材料。

## 2 理论分析

### 2.1 散射过程

半导体中的输运过程是电场对载流子的加速过程受声子散射过程制约的结果。声子散射过程严重地制约了电场的加速效果。我们采用非抛物的多能谷能带模型,计算了 ZnS 中的声子散射过程<sup>[1]</sup>。

声学声子散射的速率可表示为

$$S_{\text{ac}}(E) = \frac{k_B T D_a^2}{\pi \hbar^4 u_l^2 \rho} (1 + 2a_n E) m^* \cdot \sqrt{2E(1 + a_n E)m^*}, \quad (1)$$

其中  $k_B$  为玻耳兹曼常数,  $T$  为温度,  $D_a$  为形变势,  $u_l$  为声速,  $\rho$  为密度,  $a_n$  为能带的非抛物因子,  $E$  为电子动能,  $m^*$  为有效质量。由于声学声子的能量远低于电子能量,这种散射可近似认为是弹性的、各向同性的散射,因此散射前后电子的能量、动量的大小均保持不变,而末态电子运动的方向则随机选择。

极化光学声子散射速率为

$$S_{\text{po}}(E) = \frac{e^2 E_{\text{po}} \sqrt{2m^*}}{8\pi\hbar^2 \epsilon_0} \left( \frac{1}{k_h} - \frac{1}{k_l} \right) \frac{1 + 2a_n(E \pm E_{\text{po}})}{\sqrt{\chi(E)}} \cdot \ln \frac{\sqrt{\chi(E)} + \sqrt{\chi(E \pm E_{\text{po}})}}{\sqrt{\chi(E)} - \sqrt{\chi(E \pm E_{\text{po}})}} \left( \frac{N_q}{N_{q+1}} \right), \quad (2)$$

其中  $\chi(E) = E(1 + a_n E)$ ,  $e$  为电子电量,  $E_{\text{po}}$  为极化

\* 国家自然科学基金重大项目(批准号:19974002)和高等学校博士学科点专项科研基金(批准号:97000401)资助的课题。

光学声子能量  $\varepsilon_0$  为真空中的介电常数,  $k_h, k_l$  为高频、低频介电常数,  $N_q, N_{q+1}$  为声子数, 满足玻色-爱因斯坦分布。极化光学声子的能量不可忽略, 因而散射是非弹性的。公式中的“+”和  $N_q$  对应吸收声子的过程; “-”和  $N_{q+1}$  则对应发射声子过程。散射前后电子能量的变化等于声子的能量, 动量大小保持不变。散射角(散射前后电子动量之间的夹角)由下式决定,

$$\cos\theta = [(1+f)-(1+2f)\gamma]f,$$

其中  $f=2\sqrt{EE'}/(\sqrt{E}-\sqrt{E'})^2$ ,  $E$  和  $E'$  分别是散射前后电子的能量,  $r$  是一个在 [0, 1] 间均匀分布的随机数。

谷间散射速率为

$$S_{iv}(E) = \frac{D_{if}Z(m_n^*)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi\hbar^2\rho E_{poi}}(1+2a_n\Delta E) \cdot \sqrt{\Delta E(1+a_n\Delta E)} \left( \frac{N_q}{N_{q+1}} \right), \quad (3)$$

式中  $\Delta E = E \pm E_{poi} - E_{if}$ ,  $D_{if}$  为谷间形变势,  $Z_f$  为等价谷的数目,  $E_{poi}$  为谷间声子能量,  $E_{if}$  则为谷间能量差。“±”及  $N$  的含义同极化光学声子散射。谷间散射中电子能量的变化为  $\Delta E$ , 动量则在末态能谷中相应的等能面上随机的选择。

## 2.2 碰撞离化

在高场的条件下, 高能电子引起的带间碰撞离化将影响输运过程。在我们的模拟中包括了这一过程。我们采用 Fogarty 的方法<sup>[1]</sup> 处理碰撞离化的问题, 即将其看作是一种附加的散射机制。当电子能量高于 4.41 eV(ZnS 禁带宽度的 1.2 倍) 时, 可能发生碰撞离化, 其速率为

$$S_{ii}(E) = S_{total}(E_{th})P\left(\frac{E-E_{th}}{E_{th}}\right)^2, \quad (4)$$

其中  $E_{th}$  为阈值能量(4.41 eV),  $S_{total}(E_{th})$  为声子总的散射速率,  $P$  是一个无量纲的常数, 在 ZnS 中取 500<sup>[1]</sup>。

## 2.3 Monte Carlo 模拟

以上研究了 ZnS 中的各种声子散射过程和碰撞离化过程。在此基础上, 我们可以利用 Monte Carlo 方法, 模拟在不同条件下电子的输运过程, 从而得出关于输运特性的有关规律。

固体中的电子在外加电场作用下运动的微观过程, 是由被电场加速与被声子散射这两种过程交叠

组成的, 我们分别称之为自由飞行过程和散射过程。在自由飞行过程中, 电子波矢随时间  $t$  的变化可表示为

$$k(t) = k_0 + Ft, \quad (5)$$

其中  $k_0$  为初态电子的波矢,  $F$  为电子所受的电场力。自由飞行时间是通过计算机产生一个随机数来确定的, 其概率分布则由各种散射机制的散射速率之和唯一确定。

自由飞行结束后, 电子将被散射。至于被哪一种机制散射, 也由一个随机数确定, 其概率分布由不同散射机制散射速率的相对大小唯一确定。设共有  $n$  种类型的散射机制, 其中第  $i$  种散射机制的散射速率为  $W_i$ , 则在一次散射中发生第  $m$  种散射的概率为

$$W_m / \sum_{i=1}^n W_i. \quad (6)$$

产生一个在 [0, 1] 区间内均匀分布的随机数  $r$ , 当  $r$  满足

$$\sum_{i=1}^{m-1} W_i / \sum_{i=1}^n W_i < r \leq \sum_{i=1}^m W_i / \sum_{i=1}^n W_i \quad (7)$$

时, 可以判断发生的是第  $m$  种散射。一旦确定了散射的类型, 就可以利用这一种散射的物理规律和散射的初态(即自由飞行的末态)来确定散射的末态。这一末态作为下一次自由飞行的初态而重复上述过程。

利用上述方法, 我们模拟了在各种条件下 50000 个电子的运动过程, 通过统计, 得出了关于 ZnS 中电子输运的有关规律。

## 3 结果与讨论

### 3.1 散射速率

利用(1)–(4)式, 我们计算了 ZnS 导带中  $\Gamma$  能谷、 $L$  能谷和  $X$  能谷中电子在各种温度下的声子散射速率和碰撞离化速率随电子能量的变化规律。图 1 给出了  $\Gamma$  能谷中电子在不同温度下(0.5 K–400 K) 总的散射速率(包括声子散射和碰撞离化)随电子能量的变化规律。由图可见, 随着电子能量的增加, 声子散射速率增大。也就是说, 散射对电子加速过程的影响随着电子能量的增加而越来越显著。这将把电子的能量限制在一定范围内而不是无限的增加。另外, 随着温度增加, 散射速率也在增大。这是声子数目随温度的升高而增大所造成的。曲线在 1.4 eV 左右的突

变来源于此时  $\Gamma$  能谷中的电子开始向  $L$  能谷和  $X$  能谷散射, 即开始发生谷间散射。而当能量达到 4.41 eV 时, 碰撞离化开始发生, 总的散射速率急剧上升。图 2 具体示出了各种声子散射过程的速率随温度的变化关系。 $L$  谷和  $X$  谷中电子的声子散射规律与  $\Gamma$  能谷中的规律相一致, 在此不再赘述。

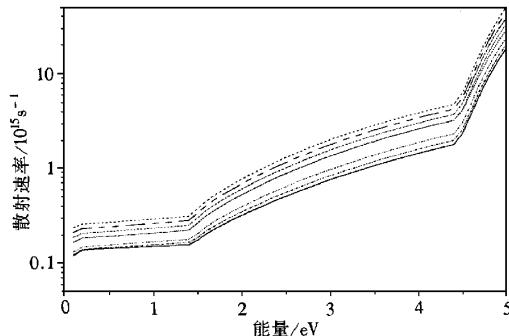


图 1 总散射速率随电子能量的变化(各条曲线由下到上依次对应温度为 0.5 K, 1 K, 10 K, 100 K, 150 K, 200 K, 250 K, 300 K, 350 K, 400 K)

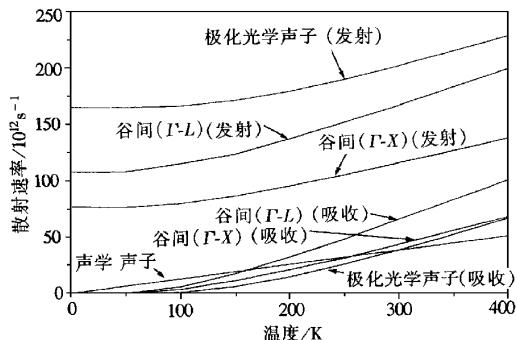


图 2 各种声子散射的速率随温度的变化(电子能量取 2 eV)

### 3.2 电子加速的瞬态过程

材料中的电子在电场作用下的输运过程是由两个阶段组成的: 瞬态加速过程和稳态输运过程。无外加电场时, 电子的能量很低。加电场后, 电子被电场加速, 能量逐渐增大。这就是瞬态加速过程。随着电子能量的增加, 散射过程对电子加速的影响加剧, 电子能量增加的速度变慢。当电场的加速作用和声子散射作用达到动态平衡时, 瞬态加速过程结束, 电子能量保持不变, 进入稳态输运过程。瞬态过程的长短直接影响器件的响应速度。我们研究了在不同温度下电子能量随时间变化的过程, 如图 3 所示。由图可明显看出上述的两个过程。经过计算, 在各种温度下(1 K—500 K), 电子能量达到稳态值的 97% 的时间(可认为是瞬态时间)均为 80 fs 左右。对于瞬态时间

与温度无关这一现象, 我们认为原因如下: 随着温度的升高, 一方面, 散射速率变大, 电子达到动态平衡所需时间应该变长; 另一方面, 稳态的能量值变小, 使得电子能量能在较短时间内达到这个值, 两者的作用相互抵消, 使得瞬态时间随温度变化不大。

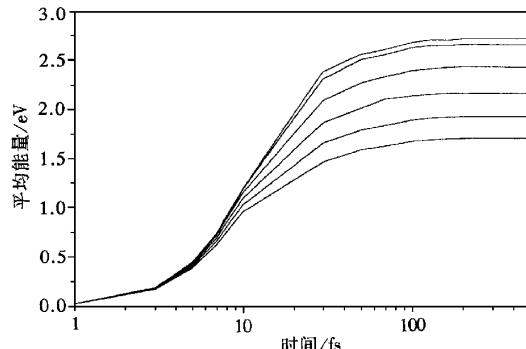


图 3 电子平均能量随时间的变化过程(各条曲线从上到下依次对应温度为 1 K, 100 K, 200 K, 300 K, 400 K, 500 K, 场强 3 MV/cm)

### 3.3 电子动能

电子动能是反映输运过程的基本物理量, 对它的描述有两种方式: 一是动能分布函数, 二是平均动能。动能分布函数描述了具有各种动能的电子的数目, 较为全面的体现了输运特性。我们模拟了在 3.0 MV/cm 电场作用下, 在不同温度下 ZnS 中的电子输运过程, 得出的电子动能分布函数如图 4 所示。由图可见, 电子的动能基本分布在 0—5 eV 范围内, 随着温度的降低, 电子的动能分布函数向高能方向移动, 这是温度降低后, 声子散射变小的必然结果。

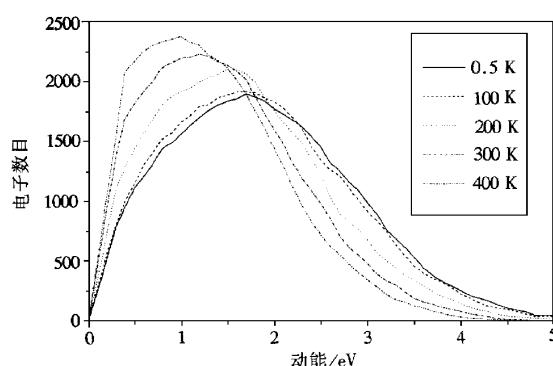


图 4 不同温度下的电子动能分布函数(场强 3 MV/cm)

由动能分布函数可以方便地求出电子的平均动

能。利用平均动能可以直观的反映输运特性随其他条件变化的规律。图 5 示出了在不同电场作用下,电子平均动能随温度的变化曲线。随着温度的升高,平均动能降低。我们得出的结果在室温条件下与 Fogarty 等的结果<sup>[1]</sup>基本一致。但我们给出了在其他温度条件下的有关数据。

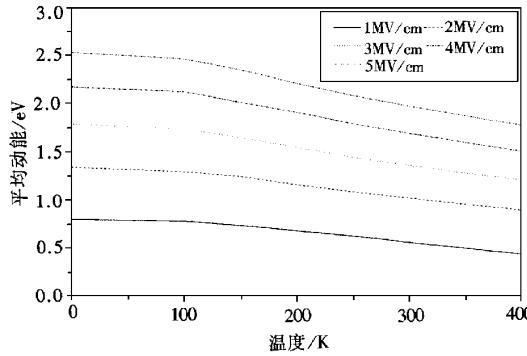


图 5 电子平均动能随温度的变化关系

### 3.4 电子的谷间分布

在 ZnS 的导带中有 3 个能谷,  $\Gamma$  谷、 $L$  谷和  $X$  谷。不同能谷中的电子呈现不同的性质。因此, 电子在各能谷间的分布也是反映材料特性的重要参数。由于  $\Gamma$  谷的能量最低, 在没有外场的情况下, 大多数电子分布在  $\Gamma$  谷。加电场后, 随着能量的增加, 电子向高能谷转移。我们曾研究了室温下 ZnS 中电子的谷间分布随电场的变化过程<sup>[7]</sup>。本文进一步得出了温度对谷间分布的影响, 如图 6 所示。随着温度的升高,  $\Gamma$  谷中的电子增多, 而  $L$ ,  $X$  谷中的电子减少, 表明了谷间分布随温度升高向低能谷转移。这是电子能量降低的必然结果。

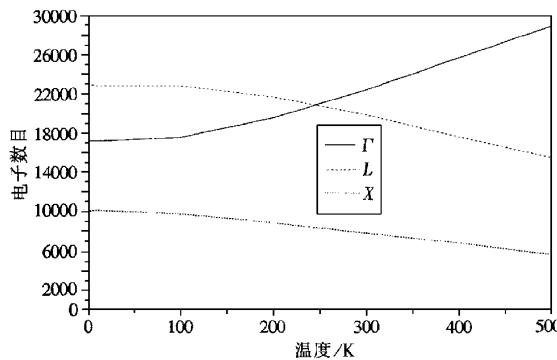


图 6 ZnS 导带中电子在各能谷的分布随温度的变化(场强 3 MV/cm)

### 3.5 电子漂移速度

加电场后, 材料中的电子在原有各向同性的热运动基础上叠加一个沿电场反方向的速度。所有电子在电场方向上速度分量的平均值为电子的漂移速度。它反映了电子在电场作用下运动的基本特征。通过它可直接获得迁移率、电导等材料基本参数。我们研究了电子漂移速度随温度的变化情况, 如图 7 所示。由图可见, 随着温度的升高, 漂移速度变小。这一变化在低温区更为显著。超过室温后, 变化趋于缓慢。同时, 我们也得出了不同温度下电子漂移速度随电场强度的变化规律, 如图 8 所示。当电场强度较小时, 漂移速度随电场强度变化较快。随着电场的升高, 漂移速度的变化减慢, 趋于饱和。

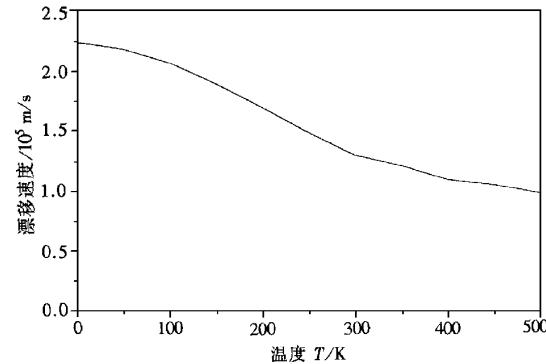


图 7 电子的漂移速度随温度的变化(场强 3 MV/cm)

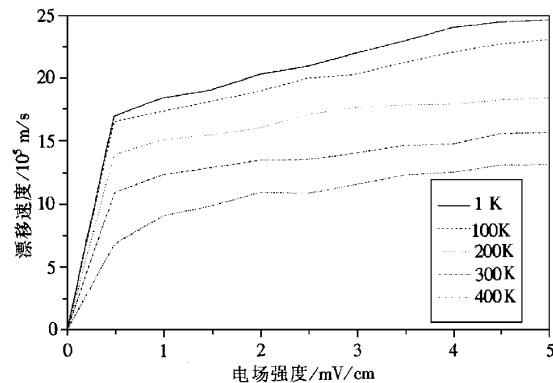


图 8 不同温度下漂移速度与电场之间的关系

## 4 结 论

在电场作用下的输运过程是固体中的基本过程

之一。它是诸多电子器件应用的物理基础。本文研究了 ZnS 中电子声子的相互作用,得出了各种声子散射的速率以及散射过程中电子状态的变化规律。进而利用 Monte Carlo 方法,研究了不同温度下 ZnS 中电子在高场作用下的输运过程。得出了电子输运的瞬态过程、动能分布、平均动能、谷间分布以及漂移速度等描述输运特性的主要物理量随温度的变化规律。这些结果的得出,为研究 ZnS 型器件的物理过程及各种特性提供了基本数据。

- [1] J. Fogarty, W. Kong, R. Solanki, *Solid State Electronics*, **38** (1995) 653.

- [2] C. Jacoboni, R. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation* (Springer-Verlag Wien, New York, 1989), p. 254.
- [3] J. C. Cao, X. L. Lei, *Solid State Electronics*, **A1** (1997), 1181.
- [4] J. C. Cao, X. L. Lei, *Eur. Phys. J.*, **B7** (1999), 79.
- [5] J. C. Cao, X. L. Lei, *Phys. Rev.*, **B59** (1999), 2199.
- [6] H. Zhao, Y. S. Wang, Z. Xu, X. R. Xu, *J. Phys.: Cond. Matt.*, **11** (1999), 2145.
- [7] H. Zhao, Y. S. Wang, Z. Xu, X. R. Xu, *Acta Physica Sinica*, **A8** (1999) 533 [in Chinese] 赵辉、王永生、徐征、徐叙, *物理学报*, **A8** (1999) 533].
- [8] H. Zhao, Y. S. Wang, Z. Xu, X. R. Xu, *Science in China (E)*, **42** (1999) 282.

## HIGH FIELD TRANSPORT PROPERTIES OF ZnS AT DIFFERENT TEMPERATURES<sup>\*</sup>

ZHAO HUI WANG YONG-SHENG HOU YAN-BING XU ZHENG XU XU-RONG

(Institute of Optoelectronic Technology, Northern Jiaotong University, Beijing 100044, China)

(Received 26 August 1999; revised manuscript received 21 September 1999)

### ABSTRACT

Electron-phonon interactions in ZnS are studied. Based on these results, high field transport processes at different temperatures are investigated by means of Monte Carlo method. The transient acceleration time of electrons do not vary with temperature. As the temperature increases, the kinetic energy distribution shifts to lower energy side and the average kinetic energy drops. The intervalley distribution of electrons shifts to lower valley as the temperature increases. The drift velocity of electrons decreases with increasing temperature. The detailed changes of these parameters with temperature are also given in this article.

PACC : 7220 ; 0270 ; 7210

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19974002) and by the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education of China (Grant No. 97000401).