

# 纤锌矿相 GaN 空穴输运特性的 Monte Carlo 模拟研究<sup>\*</sup>

郭宝增<sup>†</sup> 宫 娜 师建英 王志宇

(河北大学电子信息工程学院, 保定 071002)

(2005 年 7 月 30 日收到, 2005 年 10 月 31 日收到修改稿)

用全带多粒子 Monte Carlo 方法模拟纤锌矿相(Wurtzite)GaN 空穴输运特性的结果. 用经验赝势法计算得到能带结构数据. 模拟包含了声学声子散射, 光学声子散射, 极性光学声子散射, 压电散射, 电离杂质散射及带间散射等散射机理. 计算得到了空穴沿 3 个主要对称方向上的空穴平均漂移速度和平均能量与电场强度的关系曲线, 室温下漂移速度呈现饱和特性. 在所研究的电场范围内, 最大平均漂移速度约为  $6 \times 10^6 \text{ cm s}^{-1}$ , 最大空穴平均能量约为 0.12eV, 这些值均比电子的相应参数低很多. 还给出了空穴的扩散迁移率与杂质浓度关系的模拟结果.

关键词: 蒙特卡罗, 氮化镓, 输运特性, 能带结构

PACC: 7280E, 7115Q, 7210

## 1. 引 言

近年来, GaN 材料的研究及其应用已经取得相当大的进展<sup>[1, 2]</sup>. 然而, 与 n 型 GaN 材料相比, p 型 GaN 材料的性能还比较差, 对其特性的了解也不如 n 型材料深入. 这是因为 p 型材料制备比较困难, 非掺杂的 GaN 样品一般都存在较高 n 型背景载流子浓度, 显示 n 型电导. 然而, 为了开发 GaN 材料的 p-n 结及其相应器件如发光二极管, 激光器和光探测器等, p 型 GaN 材料又是必不可少的. 目前已经发展了一些办法来制备 p 型材料, 并成功开发了发光二极管等器件<sup>[3, 4]</sup>. 在进行 p 型材料制备和应用研究的同时, 还必须进行材料特性的研究. 近来关于 GaN 价带能带结构及其散射机理等问题的研究也引起了人们的重视<sup>[5]</sup>.

Monte Carlo 模拟方法已经被广泛用来研究半导体材料和器件的特性, 被认为是最精确的模拟技术. 目前已经有不少关于用 Monte Carlo 方法进行 GaN 材料电子输运特性研究的报道. 但是, 用 Monte Carlo 方法研究空穴输运特性的报道还很少, 在我们所见的文献中, 关于用 Monte Carlo 方法研究空穴输运特性的文献中都没有包括压电散射及带间散射的

作用<sup>[6, 7]</sup>, 但研究表明这些散射机理对空穴输运特性有一定影响. 因此, 我们用全带多粒子 Monte Carlo 模拟方法对纤锌矿相 GaN 空穴的输运特性进行了研究, 在研究中包括了对空穴输运特性起较大作用的各种散射机理, 获得了空穴的平均漂移速度和平均能量与电场的关系及相关的外部特性, 这对于从内部机理上深入了解 p 型 GaN 材料的电学性质, 了解 p 型材料在性能方面的潜力具有一定意义.

## 2. 模型描述

在半导体材料和器件的 Monte Carlo 模拟中, 处理能量  $E$  与波矢量  $k$  的关系时有解析模型和全带模型两种方法. 在解析模型中,  $E$  与  $k$  的关系用解析式表示, 而全带模型则基于能带理论来计算  $E$  与  $k$  的关系, 计算过程较前者复杂, 但模拟更精确. 我们采用的是全带模型 Monte Carlo 方法. 能带结构数据用经验赝势法得到, 由于能带结构的对称性, 只需计算出第一布里渊区中简约区域的能带结构即可. 相对于闪锌矿结构, 纤锌矿结构的能带结构更加复杂, 量子子带数量大概是闪锌矿结构的二倍, 尤其是在价带中存在能带简并和交叠. 纤锌矿相材料具有六角对称性的能带结构, 简约区域的体积为第一布里

<sup>\*</sup> 河北省教育厅科研基金(批准号 2003130)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: guobaozeng@yahoo.com.cn

渊区体积的  $1/24$ , 其他区域的能带结构数据可以通过对称操作得到. 在能带计算中忽略了自旋轨道分裂的作用, 价带共有 8 个能量子带. 在能带计算中, 在  $k_x$  和  $k_y$  方向, 空穴波矢量由  $4\pi/\sqrt{3}a$  归一化, 在  $k_z$  方向, 波矢量由  $2\pi/c$  归一化, 其中  $a$  和  $c$  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散射后, 由能量确定波矢量. 在经过上述的标度化后, 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 个格点, 对密集格点共有 38352 个格点.

图 1 为利用本研究所用的能带结构数据画出的几个高对称方向上的能带结构. 如图所示价带本身有一个间隙, 其间隙在  $-7.0\text{eV}$  到  $-12.4\text{eV}$  之间(在以后的分析中假定价带顶的能量为 0, 空穴具有正的能量), 1—6 个子带位于间隙上面, 7, 8 个子带位于间隙下面. 距价带顶最近的有三个能量子带, 分别为重空穴带(HH), 轻空穴带(LH)和晶体场分裂带(CH), 在低场下空穴主要分布在这三个能量子带上, 空穴在 3 个能量子带上的分布及其跃迁过程是模拟中重点考虑的问题. 三个带的顶点都位于对称点  $\Gamma$ , HH 和 LH 的顶点位于价带顶, 在本研究所用的能带数据中, CL 与价带顶的距离为  $31\text{meV}$ . 此值比文献[8]报道的  $22\text{meV}$  稍高, 这是不同的能带计算方法所致.

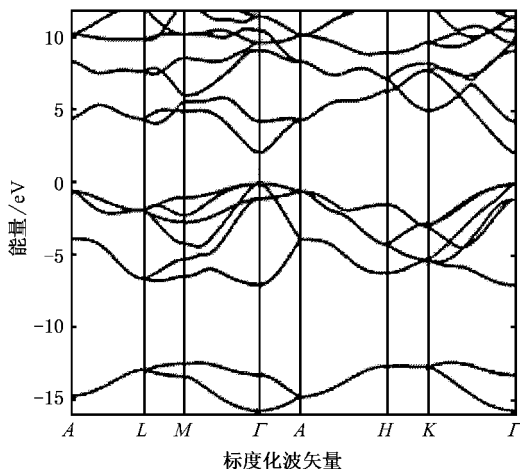


图 1 纤锌矿 GaN 能带结构

矩阵元, 利用费米黄金规则得到从初态到终态的散射率, 然后对各种可能的散射终态积分, 即得到粒子在各能量状态下的散射率.

在计算散射率时, 将空穴能量分为低能区和高能区两个部分, 临界点取为  $1\text{eV}$ . 在低能区, 空穴的能带结构比较简单, 起作用的是 HH, LH 和 CH 三个能量子带, 因此分别计算三个能量子带上的散射率, 其中也包括能量子带之间的散射率. 在高能区, 子带形状十分复杂, 而且相互交叠, 无法按常规方法计算散射率和散射终态. 因为散射率是与散射最终态的态密度成正比的, 所以先利用能带结构数据求出高能区的各能量点态密度(DOS). 用各能量点的态密度对高能区与低能区临界点散射率标度化, 即为该能量点的散射率. 我们还假定高能区的散射为各向同性的, 即当散射终态能量确定后, 就到密集格点的能带结构数据库中查找对应的波矢量, 在同一能量对应多个状态的情况下, 需要用随机数选择其中一个状态.

模拟中主要考虑了声学波声子散射, 光学波声子散射, 极性光学波声子散射, 能带间光学波散射, 声学波压电散射和电离杂质散射等散射机理. 能带间光学波散射即 HH, LH 和 CH 之间的光学声子发射和吸收散射. 前三种散射都包含发射和吸收声子两个过程, 为非弹性散射. 在低能区这些散射是各向异性的, 即散射前后的波矢量是守恒的, 必须根据散射前的波矢量和散射后的能量确定散射后的波矢量. 能带间光学波散射是各向同性的, 即确定最终态时不需要考虑波矢量守恒. 在声学波压电散射和电离杂质散射中, 空穴的能量变化远小于热平衡能量, 因此假定为弹性散射, 即散射前后的空穴能量不变.

计算低能区散射率需要用到纤锌矿 GaN 价带最顶端三个能量子带的有效质量. 各能量子带的有效质量是各向异性的, 本文采用球形等能面有效质量. 第一布里渊区 3 个垂直的主对称方向  $\Gamma-K$ ,  $\Gamma-M$ ,  $\Gamma-A$  的有效质量分别为  $m_K^*$ ,  $m_M^*$ ,  $m_A^*$ , 则球形等能面有效质量为  $m_{\text{sph}}^* = \sqrt[3]{m_K^* m_M^* m_A^*}$ . 表 1 列出了三个能量子带的球形等能面有效质量系数, 其中  $m_0$  是静态电子有效质量. 根据本文所用的能带结构数据求得的有效质量与文献[6]报道的结果是一致的. 如果考虑到自旋轨道耦合作用空穴有效质量会有一些变化, 进而导致散射率的变化, 对空穴的分布也会有一些影响, 更精确地模拟应该考虑自旋

各种散射率的计算方法是, 求出该散射的微扰

轨道耦合,但这将会再增加 3 个能量量子带,使 Monte Carlo 模拟变得十分困难.

表 1 纤锌矿 GaN 的价带有效质量

|                        | 重空穴带(HH) | 轻空穴带(LH) | 晶体场分裂带(CH) |
|------------------------|----------|----------|------------|
| $m_{\text{sph}}^*/m_0$ | 2.530    | 2.410    | 0.180      |

表 2 所示为模拟中所用的 GaN 材料的参数.

表 2 纤锌矿 GaN 的材料参数<sup>[9-12]</sup>

|  |                       |
|--|-----------------------|
| 禁带宽度/eV                                  | 3.5                   |
| 晶格常数 $a/\text{nm}$                       | 0.318                 |
| $c/\text{nm}$                            | 0.5185                |
| 介电常数 $\epsilon_0$                        | 8.9                   |
| $\epsilon_\infty$                        | 5.35                  |
| 质量密度/( $\text{g}/\text{cm}^3$ )          | 6.095                 |
| 声速/( $\text{cm}/\text{s}$ )              | $4.33 \times 10^5$    |
| 极性光学声子能量/eV                              | 0.092                 |
| 声学波形势/eV                                 | 3.8                   |
| 光学波形势参数/( $\text{eV}/\text{cm}$ )        | $1 \times 10^9$       |
| 压电常数/( $\text{C}/\text{m}^2$ )           | 0.375                 |
| 带间形势/eV/cm                               | $1 \times 10^9$       |
| 弹性常数 $C_1$ /( $\text{dyn}/\text{cm}^2$ ) | $2.65 \times 10^{12}$ |
| $C_7$ /( $\text{dyn}/\text{cm}^2$ )      | $4.42 \times 10^{11}$ |

图 2 所示的是纤锌矿相 GaN 材料中空穴总散射率与能量的关系曲线. 图中垂直虚线将曲线分为两个部分,以 1eV 的能量为分界点. 能量小于 1eV 的部分有 3 条曲线,分别为 HH, LH 和 CH 带的总散射率,其中 HH, LH 曲线基本是重合的,图中较短的曲线为 CH 带的总散射率. 大于 1eV 部分的曲线只有一条,即用态密度标度化后的总散射率. 可以看出最大散射率约为  $1 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ,比 GaN 电子总散射率大得多,原因之一是因为重空穴有效质量比电子有效质量大,原因之二是考虑了非极性光学波形势散射,而在电子特性模拟中是不考虑的. 图 2 可见在能量超过 7eV 时,散射率迅速降为 0. 这是因为能量在 7.0eV 到大约 12.4eV 之间的态密度为 0. 图中省略了 12.4eV 以上的散射率,在所研究电场强度下,不会有空穴跃迁到这个能量段,即第 7,8 个能量量子带不会起作用. 低能区的每个能量量子带的总散射率中包含了带间散射,比如 HH 带的散射率包括了空穴从 HH 带散射到 LH 和 CL 子带上的散射率.

模拟的空穴数为 20000 个,模拟开始时根据麦克斯韦分布率对空穴进行初始化,即确定空穴的初

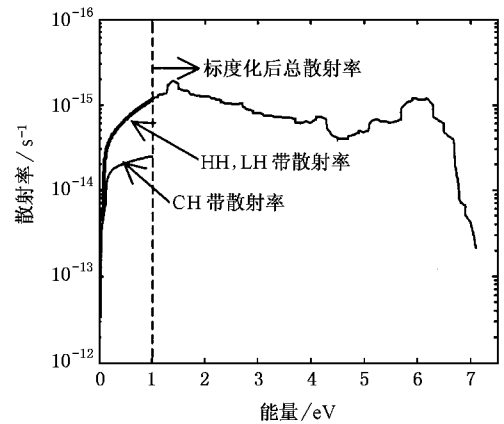


图 2 总散射率

始波矢量和能量,空穴位置坐标都初始化为 0,模拟中记录位置的变化,以便计算空穴的迁移率. 根据能量和随机数确定每个空穴在初始时所在的能带,模拟中由空穴通过带间散射,可以跃迁到其他能带. 对每个给定的电场值,进行 4000 个时间步的模拟,其中每个时间步长为  $1.5 \times 10^{-15} \text{ s}$ .

### 3. 模拟结果

图 3 给出了在温度为 300K,电离杂质浓度为  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  条件下,模拟得到电场分别沿  $\Gamma-M$ ,  $\Gamma-K$  和  $\Gamma-A$  方向的空穴平均漂移速度与电场强度关系曲线. 从平均漂移速度的模拟结果可以看出: 1) 漂移速度曲线可以分为两个区域,第一个区域是在电场强度较低时,漂移速度随电场增加而线性地增加. 在此区域,空穴能量较低,空穴的温度与晶格温度处于热平衡状态,空穴从电场中获得的能量,与散射损失的能量基本相同. 极性光学声子发射的散射率很小,电离杂质散射和声学声子散射是主要的散射机理(当电离杂质浓度很低时压电效应散射也将起作用). 随着电场强度进一步增加,空穴能量也随之增加,进入曲线的第二个区域,在此区域,空穴的平均漂移速度随电场增加逐渐趋于饱和,由于空穴能量大于热平衡能量,即空穴的平均温度大于晶格的温度,极性光学声子的散射逐渐成为主要的散射机理,空穴在电场中获得的能量,受到极性光学声子散射的作用而损失掉,空穴的平均自由程减小,从而使平均漂移速度随电场增加趋于饱和. 2) 空穴平均漂移速度比较低. 300K 下,电场达到 1000kV/cm 时,平均速率只有  $6 \times 10^6 \text{ cm}/\text{s}$ ,而 GaN 中的电子

在大约  $170\text{kV/cm}$  时即可达到  $2.9 \times 10^7\text{cm/s}$  的峰值漂移速度. 因为在价带顶附近的 HH, LH 带非常平缓, 即空穴有效质量很大, 故空穴的加速度很小. 3) 电场沿 3 个主要方向的平均漂移速度相差较小, 即各向异性的特性不十分明显. 3 条曲线之间的差异主要是沿不同方向的能带结构的差异造成的.

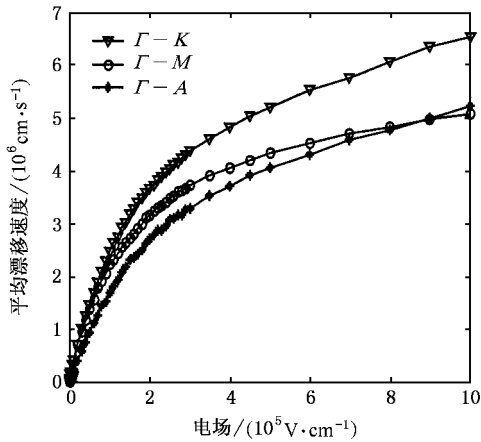


图 3 空穴平均漂移速度与电场关系曲线(温度为 300K, 电离杂质浓度  $1 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ )

图 4 所示的是相同条件下电场沿 3 个方向上的空穴平均能量与电场强度的关系曲线. 由图 4 可见, 在未加电场时, 空穴的平均能量为热平衡能量, 在电场较低时, 空穴的能量随电场增加很小, 基本等于热平衡能量. 随着电场的增加, 空穴的平均能量缓慢上升, 在外加电场为  $1000\text{kV/cm}$  时, 能量接近  $0.12\text{eV}$ . 从平均能量随电场增加的变化趋势看, 平均能量随电场增加的非常缓慢. 这是因为在价带顶端的两条能带即 HH, LH 带的能量随波矢量的变化非常平缓, 空穴在电场的作用下, 波矢量从布里渊区中心迁移到沿电场方向的其他位置时, 空穴的能量变化很小. 也可以通过简单的色散关系来理解, 即  $E = (\hbar^2 k^2) / (2m^*)$ , 在电场作用下波矢量  $k$  增加, 因为有效质量  $m^*$  很大, 故能量  $E$  增加很小. 从图中也可以看出, 电场沿  $\Gamma-A$  方向时, 比在另外两个方向上加电场时的平均能量稍小些. 但空穴平均能量相差比较小, 各向异性不太明显.

空穴迁移率是材料的一个重要参数. 目前研究较多的是 Mg 掺杂的 p 型 GaN 样品, 由于样品制备工艺及水平不同, 所以迁移率的数值也不相同. 室温下 p 型样品空穴的浓度一般为  $1 \times 10^{17} - 4 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ , 低场迁移率在  $10 - 30\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  范围. 需要注意的是实际的 p 型样品存在高浓度的补偿杂质, Mg

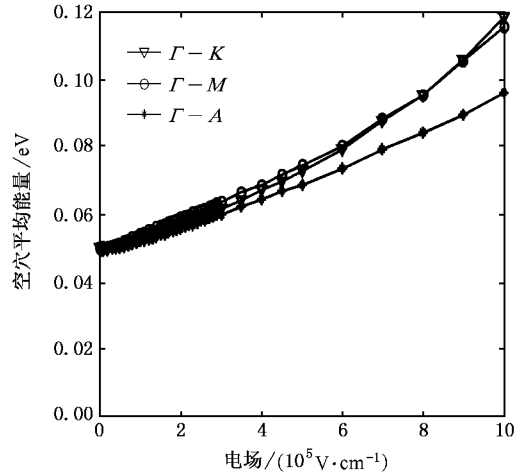


图 4 空穴平均能量与电场关系曲线(温度为 300K, 电离杂质浓度  $1 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ )

浓度约为  $1 \times 10^{20}\text{cm}^{-3}$ .

在模拟中, 我们分别计算了载流子的扩散迁移率和漂移迁移率.

扩散迁移率的求法为, 假设从时间为 0 时刻开始计算粒子的位移, 模拟中只是在一个方向上记录电子的运动, 所有粒子的初始位置均为 0, 在  $t$  时刻第  $i$  个粒子的位移为  $x_i$ ,  $\bar{x}$  是粒子位移的平均值,  $\overline{x^2}$  是空穴的位移方均值, 扩散系数是一个标量, 表示为<sup>[13]</sup>

$$D = \frac{\overline{x^2} - \bar{x}^2}{\left(1 + \frac{n}{N_V}\right) \Delta t}, \quad (1)$$

其中,  $n$  是自由空穴浓度,  $N_V$  是价带态密度,  $\Delta t$  是模拟的时间间隔. 则扩散迁移率为

$$\mu_{\text{diff}} = \frac{qD}{k_B T_e}, \quad (2)$$

这种方法可以在零电场下计算空穴迁移率.

漂移迁移率的计算公式为

$$\mu_{\text{drift}} = \frac{x}{\Delta t E}, \quad (3)$$

$\Delta t$  为时间间隔,  $x$  为在电场方向上的平均位移,  $E$  为电场强度.

由上述两种方法, 计算了在室温, 不同电离杂质浓度下的空穴迁移率. 低场下 ( $< 1 \times 10^4\text{V/cm}$ , 计算漂移迁移率时, 电场不能为 0), 上述两种方法得到的迁移率值差别不是很大, 故下面只给出零电场下, 扩散迁移率的模拟结果. 图 5 给出了扩散迁移率随电离杂质浓度变化的关系曲线, 迁移率的值是三个主对称方向平均的结果. 可以看出当浓度为

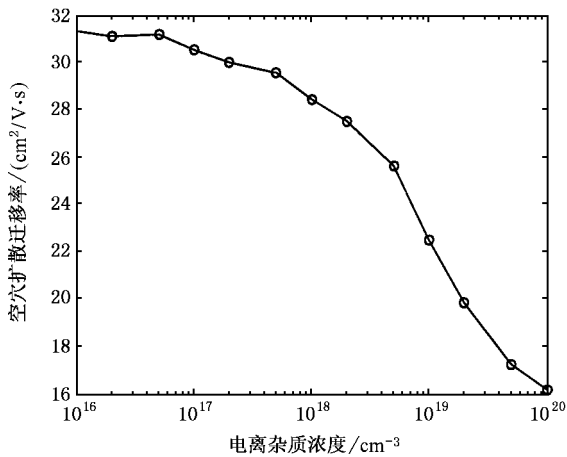


图5 零电场下空穴扩散迁移率与电离杂质浓度的关系曲线

$1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  以上时, 迁移率随电离杂质浓度增加迅速减小, 这是因为电离杂质散射作用增强. 当电离杂质浓度为  $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  时, 扩散迁移率约为  $16 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ . 实际 p 型半导体的空穴迁移率与制造工艺及工艺水平有关, 因为用不同工艺制备的 p 型材料, 位错线等缺陷密度不同. 一般的报道, 室温下空穴迁移率都是  $10 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  附近. 如文献 [4] 报道了用金

属有机物化学气相淀积制备的 p 型 GaN 外延层的实验结果, 空穴霍尔浓度为  $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , 霍尔迁移率为  $14.3 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ . 与实验结果相比, 考虑到各种因素, 模拟得到的结果在合理的范围.

由模拟结果可以看出, 与 GaN 电子迁移率  $1000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$  相比<sup>[14]</sup>, 其空穴迁移率要小得多. 空穴的迁移率与  $\Gamma$  能谷的有效质量有关. 而  $\Gamma$  能谷重空穴带有效质量比导带  $\Gamma$  能谷电子有效质量大得多, 因此使得 GaN 的空穴迁移率比电子迁移率低很多.

## 4. 结 论

本文使用全带多粒子 Monte Carlo 模拟方法, 研究了纤锌矿相 GaN 空穴的输运特性. 模拟中包含了输运特性有较大影响的各种散射机理. 得到了平均能量、平均漂移速度与电场强度的关系曲线. 还给出了扩散迁移率与电离杂质浓度的关系. 并对结果进行了分析, 结果表明在较低电场 ( $< 1000 \text{ kV}/\text{cm}$ ) 情况下, 空穴平均能量随电场的增加比较缓慢. 另外纤锌矿 GaN 的空穴迁移率比电子迁移率小得多. 这些结果与其他文献的结果相比还是比较符合的.

- [1] Pearton S J, Ren F, Zhang A P, Lee K 2000 *Materials Science and Engineering* **30** 55
- [2] Kong Y C, Zheng Y D, Chu R M, Gu S L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1757 (in Chinese) [孔月婵、郑有、储荣明、顾书林 2003 物理学报 **52** 1757]
- [3] Chi G C, Kuo C H, Sheu J K, Pan C J 2000 *Materials Science and Engineering B* **75** 210
- [4] Kim S, Cheong M G, Hong C H 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 1149
- [5] Albercht J D, Ruden R P 2002 *J. Appl. Phys.* **92** 3802
- [6] Oguzman I H, Kolnik J, Brennan K F, Wang R, Fang T N, Ruden P P 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 4429
- [7] Oguzman I H, Kolnik J, Brennan K F, Wang R P P 1996 *Material*

*Research Society Symposium Proceedings* **395** 479

- [8] Yeo Y C, Chong T C, Li M F 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 1430
- [9] Lancefield D, Eshghi H 2001 *J. Phys.: Condens. Matter* **13** 8939
- [10] Kolnik J, Oguzman I H, Brennan K F, Wang R P, Ruden P P 1995 *J. Appl. Phys.* **78** 1033
- [11] Bhapkar U V, Shur M S 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 1649
- [12] O'Leary S K, Foutz B E, Shur M S, Bhapkar U V, Eastman L F 1998 *Solid State Communications* **105** 621
- [13] Bhapkar U V, Shur M S 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 1649
- [14] Guo B Z, Ravaioli U 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2344 (in Chinese) [郭宝增、Ravaioli U 2002 物理学报 **51** 2344]



# Monte Carlo simulation of the hole transport properties for wurtzite GaN<sup>\*</sup>

Guo Bao-Zeng<sup>†</sup> Gong Na Shi Jian-Ying Wang Zhi-Yu

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

( Received 30 July 2005 ; revised manuscript received 31 October 2005 )

## Abstract

The simulation of the hole transport properties of wurtzite phase GaN are performed by the full band ensemble Monte Carlo approach. The band structure data of GaN used in the simulation are obtained by the empirical pseudopotential method. The scattering mechanisms included in the simulation are acoustic phonon scattering , optical phonon scattering , polar optical phonon scattering , piezoelectric scattering , ionized impurity scattering , as well as the intervalley scattering. The dependence of the hole average drift velocity and average energy in three main symmetry directions for wurtzite GaN on the electric field are obtained. At room temperature , the velocity-field relation shows the non-saturated characteristics. The maximum drift velocity is about  $6 \times 10^6 \text{ cm s}^{-1}$  , and the maximum average energy is 0.12 eV in the range of the field of this work. These values are much smaller than the corresponding parameters of the electrons in GaN. Furthermore , the dependence of the diffusion mobility on the impurity density is reported.

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

**PACC :** 7280E , 7115Q , 7210

---

<sup>\*</sup> Project supported by the Foundation of Hebei Education Department ( Grant No. 2003130 ).

<sup>†</sup> E-mail : guobaozeng@yahoo.com.cn