С.А.ЗУЕВ, канд. техн. наук

УЧЕТ НЕПАРАБОЛИЧНОСТИ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ GaAs ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СТРУКТУРЫ

При моделировании полупроводниковых приборов и структур точность описания физических процессов в кристалле в значительной степени зависит от качества модели. В кинетическом приближении возможности модели полупроводниковой структуры (ППС) определяются уравнением Больцмана, которое при решении его методом крупных частиц обычно интерпретируется в виде уравнений переноса для системы свободных носителей [1 – 3]. Для уравнений движения необходимо определять силы, действующей на носитель со стороны внешних и внутренних полей в структуре, кроме того, необходимо учитывать перераспределения тепла в кристалле полупроводника, т.е. приходится решать совместно уравнения Больцмана, Пуассона и теплопроводности. Интеграл столкновений в правой части уравнения Больцмана представляется через частоты рассеяний на различных центрах. В процессе моделирования, для каждого свободного носителя, исходя из его энергии и параметров окружающей его решетки, вычисляется матрица частот рассеяния (МЧР), методом Монте-Карло выбирается вероятный механизм рассеяния (MP) и проводится соответствующая процедура рассеяния. Затем МР корректируется, так как при рассеянии может измениться энергия носителя, и из нее определяется время свободного пролета до следующего акта рассеяния. Точность описания механизмов рассеяния во многом определяет дальнейший процесс моделирования.

В работах [3, 4] проведены исследования процессов рассеяния в GaAs, однако они требуют доработки, в том числе частоты рассеяния исследовались в предположении параболичности долин, что не соответствует действительности, особенно при моделировании ППС под воздействием сильных внешних полей. Критерием точности описания процессов рассеяния может являться экспериментально измеренные при различных параметрах зависимости дрейфовой скорости электронов от напряженности внешнего электрического поля [5, 6].

Цель данной работы – анализ влияния МР на дрейф носителей и определение рабочих выражений для частот рассеяния, используемых при моделировании процессов токопереноса в GaAs ППС методом частиц.

Исходные положения

Для GaAs характерна сложная зонная структура, состоящая из трех типов долин (одна Γ , восемь L и шесть X долин) с возможностью переходов электронов как между разными, так и одинаковыми долинами [7].

Эффективные массы электронов в Г, L и X долинах соответственно примем равными $m_{\tilde{A}} = 0,067 \cdot m_0$, $m_L = 0,555 \cdot m_0$, $m_X = 0,851 \cdot m_0$. Энергия с учетом непараболичности долин выражается как $(E \cdot (1 + \alpha E))$, где коэффициент непараболичности в зависимости от долины равен $\alpha_{\Gamma} = 0,655$ эВ⁻¹, $\alpha_L = 0,26$ эВ⁻¹, $\alpha_X = 0,078$ эВ⁻¹. Долины от потолка запрещенной зоны располагаются на уровне $E_g = 1,422$ эВ, $E_L = 1,707$ эВ, $E_X = 1,899$ эВ.

Температурный уход дна долин определяется соотношением $E_g = \alpha - \frac{\beta \cdot T^2}{T + \gamma}$, где: α , β , γ – константы, характерные для GaAs, которые в случае Г-долины принимают следующие

значения: $\alpha = 1.519$, $\beta = 5.405 \cdot 10^{-4}$ и $\gamma = 204$.

Характерные для арсенида галлия механизмы рассеяния представлены на рис.1.



Рис.1

Непосредственно процесс рассеяния заключается в изменении квазиимпульса носителя заряда в результате столкновения с соответствующим рассеивающим центром. В общем виде изменение описывается соответствующим потенциалом рассеяния и зависит от типа рассеивающего центра. Выбор нового квазиимпульса включает расчет его новой величины и вычисление угла рассеяния θ согласно вероятности $p_i(\theta)$ для выбранного процесса рассеяния. Зная $p_i(\theta)$, можно выбрать θ , для этого используется случайная величина r, равномерно распределенная в интервале [0..1). Угол θ находится решением уравнения: $\begin{pmatrix} \theta \\ 0 \end{pmatrix} d\phi = r \cdot \int_{0}^{\pi} P(\phi) d\phi$.

Большинство процессов рассеяния таковы, что все направления равновероятны для окончательного квазиимпульса. Поэтому нет необходимости при определении окончательного направления учитывать направление вектора k до рассеяния, как это обычно делается при определении угла рассеяния. В качестве базы можно взять любое направление, и если выбирается окончательное направление в полярных координатах относительно оси z, то можно получить, что θ и ϕ могут выбираться с помощью двух случайных чисел, равномерно распределенных на интервале [0..1]: $\cos\theta = 1 - r''$ и $\phi = 2\pi r'''$. Тогда, компоненты вектора \vec{k} примут вид: $k'_z = k' \cos\theta$; $k'_x = k' \sqrt{1 - \cos^2 \theta} \cos\phi$; $k'_y = k' \sqrt{1 - \cos^2 \theta} \sin \phi$.

Для процессов, в которых после рассеяния направление импульса не является равновероятным, направление должно быть определено относительно падающего *k*-вектора.

Рассмотрим более подробно механизмы рассеяния. Рассеяния на дефектах кристаллической решетки являются упругими и изотропными. К таким рассеяниям можно отнести рассеяние на нейтральных атомах примеси, точечные дефекты и дислокации.

Вероятность рассеяния на произвольных дислокациях в предположении малости их размеров относительно размеров всей рассматриваемой структуры, дается следующим выражением [7]:

$$\lambda(E) = \frac{\Xi_d e^2}{4\pi\hbar^3 \varepsilon \varepsilon_0} \cdot N_{ds} \cdot \frac{1}{\left(2m^* E^3\right)^{1/2}},$$

где N_{ds} – концентрация дислокаций в объеме.

В общем случае дислокация является анизотропным рассеивателем, однако в случае достаточно большого числа дислокаций в кристалле, учитывая их произвольную ориентацию, можно считать, что на случайно ориентированной дислокации электрон будет рассеиваться на произвольный угол и вероятность рассеяния не зависит от направления его движения.

Рассеяние на нейтральных примесях имеет резонансный характер. Частота рассеяния может быть описано формулой Скляра [8]:

$$\lambda(E) = \frac{2^{\frac{2}{2}} \cdot \pi \cdot \Xi_d^2 \cdot N_n}{m^{*\frac{3}{2}} \sqrt{E}} \cdot \left(\frac{E_r E}{E_r^2 + E^2 - E_r \cdot E}\right)$$

Другим типом дефектов являются ионизированные атомы примеси. Частоты рассеяния на ионах примеси при температуре свыше 270 К и концентрации свыше 10²¹*м*⁻³ вычисляются в приближении Конуэлла и Вайскопфа по формуле [7]:

$$\lambda(E) = \left(\frac{Z \cdot e^2}{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_{low} \cdot \varepsilon_0}\right)^2 \cdot \frac{\pi \cdot N_d}{\sqrt{2 \cdot m^* E^3}} \cdot \ln \left[1 + \frac{4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_{low} \cdot \varepsilon_0 \cdot E}{N_d^{\frac{1}{3}} \cdot Z \cdot e^2}\right]$$

На рис.2 показаны зависимости частот рассеяния на ионизированных атомах примеси с концентрацией от $10^{21} m^{-3}$ до $10^{23} m^{-3}$ с учетом (пунктирные кривые 2, 4, 6) и без учета (сплошные кривые 1, 3, 5) непараболичности, рассчитанные для Г долины.

В результате рассеяния на дефектах меняется направление движение, рассеяние является анизотропным, то есть электрон после рассеяния отклоняется на случайный угол относительно своего первоначального движения, определяемый следующим соотношением: $\cos\theta = 1 - \frac{2r}{4k^2L_D^2(1-r)}$, где k – квазиимпульс носителя заряда, L_D – длина экранирования

Дебая. Энергия, импульс и, следовательно, МЧР не меняются в результате такого рассеяния.

Другим типом рассеяния является электрон-электронное рассеяние или рассеяние частица-частица. В общем случае взаимодействие между электронами определяется кулоновскими силами. Данный тип взаимодействия учитывается в ходе вычисления поля при решении уравнения Пуассона. Однако данный механизм рассеяния необходимо вводить в качестве фактора, ограничивающий время свободного пролета в результате столкновений электронов внутри зоны, ограниченной длиной экранирования Дебая. Такое рассеяние можно рассматривать как рассеяние отдельного электрона на общем электронном газе. Частота электрон-электронного рассеяния определяется следующим соотношением [7]:

$$\lambda(E) = \frac{n \cdot e^4}{2^{\frac{3}{2}} \cdot \pi \cdot (\varepsilon_{low} \cdot \varepsilon_0)^2 \sqrt{m^*} E^{\frac{3}{2}} \cdot L(E),$$

rge $L(E) = \ln(1 + 4m^* \frac{E}{\hbar^2 q_D^2}) - \frac{1}{1 + \frac{\hbar^2 q_D^2}{4m^* E}} - \frac{\pi}{2} \left\{ 1 - \frac{\frac{\hbar^2 q_D^2}{m^* E} \cdot \left(1 + \frac{\hbar^2 q_D^2}{4m^* E}\right)}{1 + \frac{\hbar^2 q_D^2}{m^* E} \cdot \left(1 + \frac{\hbar^2 q_D^2}{4m^* E}\right)} \right\}.$

На рис. 2 приведена зависимость частоты электрон-электронного рассеяния от энергии для нескольких уровней концентрации (кривые 7, 8, 9). Для данного вида рассеяния непараболичность долин не имеет существенного значения. Такое рассеяние анизотропное. Основную роль играют акты рассеяния на малые углы, когда передача импульса и энергии от одного электрона другому малы. Подобное рассеяние, происходящее внутри ансамбля свободных носителей, приводит к стабилизации их функции распределения в импульсном пространстве, т.е. если электрон обладает энергией большей чем средняя энергия ансамбля, то он отдает часть этой энергии, и наоборот, если его энергия меньше средней по ансамблю – он ее получает. Суммарный импульс сохраняется, так что электрон-электронные столкновения не могут обеспечить релаксации импульса, приобретенного под влиянием внешних полей, однако они приводят к хаотизации распределения по импульсам и ослабляют интенсивность относительного движения. После акта рассеяния энергия электрона может отличаться от исходной и для него требуется коррекция МЧР.



Наибольший вклад в физику процессов, происходящих в ППС, вносят процессы рассеяния на фононах кристаллической решетки. Они определяют обмен энергией между электронным газом и решеткой, играя роль источников тепловыделения, на них также происходит процесс перехода, а точнее туннелирования, электронов между долинами.

Рассмотрим газ фононов в рамках фермиевской теории, это справедливо при $k_F \ll q_T$, где $k_F = \frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar}$ – квазиимпульс Ферми, ε_F – уровень Ферми в GaAs, и $q_T = \frac{T}{\hbar s}$, v_s – скорость распространения звука в кристалле. Кинематика рассеяния электрона на акустических фононах определяется из сравнения трех импульсов: k_F , q_T и $q_e = \frac{|\varepsilon - \varepsilon_F|}{\hbar s}$.

При температуре кристалла 300 К, полупроводники вне зависимости от энергии электронов оказываются в области высоких температур, где фактически взаимодействие идет с фононами с импульсом $q \approx k_F$, так как их числа заполнения $N_q = \frac{q_T}{k_F} >> 1$. Доля энергии, которую приобретает, либо теряет электрон в результате столкновения с фононом $\Delta \varepsilon = \hbar k_F s \ll \varepsilon$, угол рассеяния произвольный, следовательно, направленный импульс теряется за одно – два столкновения, а энергия – за гораздо большее число столкновений (время релаксации энергии много больше времени релаксации импульса). Рассеяние возможно как с поляризационным, так и с деформационным потенциалом взаимодействия. Суммарная частота рассеяния с поглощением и излучением фононов определяется следующим соотношением [7]:

$$\lambda(E) = \frac{\Xi_d^2 \cdot k_b \cdot T \cdot \left(2m^*\right)^3/2}{2 \cdot \pi \cdot \hbar^4 \cdot \rho \cdot c_L^2} \cdot \sqrt{E \cdot (1 + \alpha E)} \cdot (1 + 2\alpha E),$$

где ρ – плотность кристалла, c_L – скорость звука в кристалле GaAs.

ISSN 0485-8972 Радиотехника. 2013. Вып. 174

На рис.3 представлены зависимости частот рассеяния на акустических фононах с учетом (пунктирные) и без учета (сплошные кривые) непараболичности в Г (кривые 7), L (кривые 8) и X (кривые 9) долинах. Как видно из рисунка вклад непараболичности в частоты рассеяния различен для разных долин.

Для оптических фононов закон дисперсии в общем виде: $\omega_q = \omega_0 - \beta q^2$, где q – квазиимпульс фонона, и $\beta q^2 << \omega_0$, поэтому принято считать $\omega = const$, причем для GaAs $\hbar \omega_0 = 421 K$. Вероятность рассеяния на оптических фононах с деформационным потенциалом взаимодействия:

$$\lambda(E) = \frac{\pi \Xi^2}{\rho \omega_0} \cdot \{n(\omega_0)N(E_k + \hbar \omega_0) + [n(\omega_0) + 1]N(E_k - \hbar \omega_0)\},\$$

где Ξ – потенциал деформации кристалла, для параболической зоны $N(E) = \frac{(2m^*)^3/2E^{1/2}}{4\pi^2\hbar^3}$,

 $n(\omega_0) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{k_bT}\right) - 1}$. Здесь первое слагаемое описывает процесс поглощения фонона, а

второе – процесс его испускания электроном. Поглощение возможно для электронов с любой энергией, а излучение – только для тех, энергия которых превышает энергию оптического фонона.

Вероятность рассеяния на полярных оптических фононах:

$$\lambda(E) = \frac{\sqrt{m^* \cdot e^2 \cdot \omega_0}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar \cdot \varepsilon_p \cdot \varepsilon_0} \cdot \frac{1 + 2\alpha \cdot (E + \hbar \omega_0)}{\sqrt{E \cdot (1 + \alpha E)}} \cdot \ln\left(\left|\frac{\sqrt{E \cdot (1 + \alpha E)} + \sqrt{(E + \hbar \omega_0)} \cdot (1 + \alpha \cdot (E + \hbar \omega_0))}{\sqrt{E \cdot (1 + \alpha E)} - \sqrt{(E + \hbar \omega_0)} \cdot (1 + \alpha \cdot (E + \hbar \omega_0))}\right|\right)$$

Вероятности рассеяния на оптических фононах с деформационным (кривые 1-2) и поляризационным потенциалом (кривые 3-6) взаимодействия с учетом непараболичности долин (пунктирные кривые) и без учета (сплошные кривые) представлены на (рис.3). Соответственно на рисунке кривые 1, 3 и 5 описывают частоты рассеяния с поглощением фонона, кривые 2, 4, 6 - c излучением; кривые 1 - 5 рассчитаны для Γ долины, кривые 6 - для L долины.



ISSN 0485-8972 Радиотехника. 2013. Вып. 174

Рассеяние на оптических фононах анизотропное. Новое направление квазиимпульса, полученное в результате столкновения с поглощением или излучением оптического фонона, определяется углом рассеяния, который является случайной величиной с плотностью вероятности [2]:

$$P(\theta) = \frac{kk'\sin\theta}{k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\theta},$$

где k и $k' = k \pm \Delta k$ – квазиимпульс электрона до и после рассеяния.

Новое направление квазиимпульса после рассеяния на оптическом фононе можно найти с помощью случайного числа *r*, равномерно распределенного в интервале [0..1).

Плотность вероятности для азимутального угла рассеяния:

$$P(\theta) = \frac{1}{2} \cdot \frac{\sin \theta}{\frac{k^2 + k'^2}{2kk'} - \cos \theta}, \text{ обозначив: } c = \frac{k^2 + k'^2}{2kk'}, \text{ получим уравнение:}$$
$$\int_{0}^{\theta} \frac{\sin \alpha}{c - \cos \alpha} d\alpha = r \cdot \int_{0}^{\pi} \frac{\sin \alpha}{c - \cos \alpha} d\alpha .$$

Вычислив интегралы, получим:

$$\ln \frac{c - \cos \theta}{c - 1} = r \cdot \ln \frac{c + 1}{c - 1}, \text{ откуда следует: } \cos \theta = c - \left(\frac{c + 1}{c - 1}\right)^r \cdot c + \left(\frac{c + 1}{c - 1}\right)^r.$$

Радиальный угол ϕ , определяется из соотношения $\phi = 2\pi r'$, где r' – такое же случайное число.

В результате рассеяния на оптическом фононе электрон получает либо отдает энергию, равную энергии фонона $\hbar\omega_q$. Эта энергия отдается кристаллической решетке либо теряется ею. В результате такого обмена происходит обмен энергией между газом свободных носителей и решеткой кристалла. Процесс распределения тепла в решетке в общем случае описывается уравнением теплопроводности.

Рассеяние может происходить как на фононах с деформационным потенциалом, так и на фононах с поляризационным потенциалом взаимодействия. При этом полярные фононы, если энергия электрона позволяет, могут играть роль междолинных фононов. То есть такое рассеяние происходит с изменением долины и, соответственно, массы электрона. Различают рассеяния между неэквивалентными ($\Gamma \rightarrow L$, $\Gamma \rightarrow X$, $L \rightarrow X$, $L \rightarrow \Gamma$, $X \rightarrow L$) и эквивалентными долинами ($L \rightarrow L$, $X \rightarrow X$). Последние полностью описывается в рамках обычной процедуры рассеяния на фононах. При рассмотрении рассеяния между неэквивалентными долинами необходимо принимать во внимание то, что такое рассеяние происходит с поглощением либо излучением междолинного фонона и рассеяние возможно только если энергия носителя после взаимодействия с фононом превышает энергию дна той долины, куда происходит переход.

Частоты рассеяния определяются следующим соотношением

$$\lambda(k) = \frac{\Xi_1^2 \left(2m^*\right)^{\frac{1}{2}} E_k}{4\pi\rho\hbar^5 \omega_1} \cdot \left\{ n(\omega_1) \cdot \left(E_k + \hbar\omega_1\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(2 + \frac{\hbar\omega_1}{E_k}\right) + \left[n(\omega_1) + 1\right] \cdot \left(E_k - \hbar\omega_1\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(2 - \frac{\hbar\omega_1}{E_k}\right) \right\}$$

Частоты рассеяния между неэквивалентными и эквивалентными долинами с поглощением (сплошные кривые) и излучением (пунктирные кривые) междолинного фонона в приближении непараболических долин приведены на рис.4.

В результате проведенного анализа получены зависимости частот рассеяния на отдельных механизмах и как итог суммарная частота рассеяния электрона. На рис.5 представлены зависимости отдельных частот рассеяния и суммарная частота от энергии электрона, вычисленные для Г-долины: 1 – рассеяние на нейтральных примесях, 2 – на ионах донорной при-

меси, 3 – электрон-электронное, 4 и 5 – переход из Г долины в L с поглощением междолинного фонона, 6 – то же с излучением, 7, 8 – переход из Г долины в X с поглощением и излучением междолинного фонона соответственно, 9 – рассеяние на акустических фононах, 10 и 11 – рассеяние на оптических фононах с поглощением и излучением фонона, 12 – суммарная частота рассеяния.



Результаты численного моделирования

На основе полученных частот рассеяния был разработан пакет программ моделирования методом крупных частиц процессов дрейфа в полупроводниковой структуре с заданными параметрами. С его помощью проведен численный эксперимент по исследованию зависимостей дрейфовых характеристик GaAs от различных параметров. В ходе моделирования получены зависимости скорости электронов в GaAs от времени при различных значениях напряженности прикладываемого поля. Концентрация донорной примеси в структуре задавалась равной $N_d = 10^{20} \text{ м}^{-3}$, начальная температура кристалла T = 300K. Результаты исследований представлены на рис. 6 и 7.

На рис.6 показана динамика роста дрейфовой скорости со временем для различных напряженностей электрического поля. Виден резкий спад направленной скорости на временах, соответствующих частотам рассеяния. Результаты, представленные на данном рисунке, хорошо согласуются с результатами из [3].



На рис.7 представлена скорость-полевая характеристика носителей заряда в GaAs n. Сплошные кривые – результаты моделирования дрейфовой скорости на разработанном пакете программ (кривая 2 – с учетом непараболичности, кривая 1 – без), пунктирные кривые – результаты, приведенные в работе [6] и экспериментально снятые характеристики [5]. Как видно из рисунка, полученные в ходе исследований характеристики совпадают с аналогичными характеристиками, представленными в литературе. Исследовалась зависимость заселенности долин в GaAs от величины напряженности электрического поля (под L подразумевались все верхние долины). Результаты исследований представлены на рис.7 кривыми из точек.



Из анализа полученных характеристик можно сделать вывод, что резкий спад дрейфовой скорости в арсениде галлия с увеличением напряженности электрического поля обуслов-

лен переходом электронов в верхние долины, сопровождаемым увеличением эффективной массы.

Пакет программ позволяет исследовать вклад каждого механизма рассеяния или их совокупности в характеристики ППС. В частности, проведен анализ влияния механизмов рассеяния на процесс формирования дрейфовой скорости. Программно выключались механизмы рассеяния и анализировалась динамика изменения дрейфовой скорости при постоянном поле. Результаты численных экспериментов приведены на рис. 8. Кривая 1 соответствует всем включенным механизмам рассеяния, кривая 2 – включено только рассеяние на оптических, кривая 3 – только на акустических фононах, кривая 4 – только на дефектах решетки.

Как видно из рис.8, рассеяния на всех видах дефектов решетки оказывает влияние только в начальный момент времени и определяет высоту «полочки» скорости дрейфа. Рассеяние на акустических фононах вносит существенный вклад при высоких энергиях электронов и не может быстро ограничивать их скорость. Существенную роль играют рассеяния на оптических фононах, которые обеспечивают ограничение скорости дрейфа и выход ее на стационарный участок, однако дальнейший спад дрейфовой скорости обусловлен междолинными переходами, что подтверждают и результаты, представленные на рис.7.



Выводы

В результате анализа механизмов рассеяния в GaAs получены рабочие выражения для частот рассеяния в приближении параболических и непараболических долин, которые позволяют адекватно описывать процессы токопереноса в нем и анализировать дрейфовые характеристики ППС. Анализ влияния коэффициента непараболичности зон на частоты рассеяния показал необходимость его учета при дальнейшем моделировании полупроводниковой плазмы, в особенности, в напряженных режимах.

Список литературы: 1. Зуев С.А., Шадрин А.А., Старостенко В.В. Модель расчета полевых транзисторов на GaAs субмикронных размеров // Радиотехника. – 2001. – Вып.121. – С.146–152. 2. Реклайтис А.С., Мицкявичус Р.В. Новое в жизни, науке, технике: Метод Монте-Карло в физике полупроводников. – Москва : Знание, 1988. – 38 с. 3 Dragica Vasileska, Katerina Raleva and Stephen M. Goodnick (2011). Monte Carlo Device Simulations, Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering, Prof. Shaul Mordechai (Ed.), InTech, DOI: 10.5772/16190. 4. Зуев С.А. Оценка границы баллистического переноса носителей в приборах субмикронных размеров на GaAs // Вісник XHУ ім. В.Н. Каразіна. – 2002. – Вип.1, № 544. – С.148-152. 5. Blakemore, J. S., J. Appl. Phys. 53, 10 (1982) R123-R181. 6. Pozhela, J. and A. Reklaitis. Solid State Electron. 23, 9 (1980) 927-933. 7. Гантмахер В.Ф. Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. – Москва : Наука, 1975. – 399 с. 8. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. – Москва : Мир, 1986. – 304 с. 9. Асанов Э.Э., Зуев С. А., Килесса Г. В., Слипченко Н. И. Численная модель контакта металл-полупроводник // Радиотехника. – 2012. – Вып.170. – С.32-40.

Таврический национальный университет им. В.И.Вернадского

Поступила в редколлегию 17.06.2013