

УДК 621.382.2

ЧАСТОТНЫЕ СВОЙСТВА МЕЖДОЛИННОГО ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В ALN

О. В. Боцула

Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина,
4, пл. Свободы, Харьков, 61077, Украина, Тел.(0572) 7051262

Поступила в редакцию 20 ноября 2010 г.

Рассматриваются частотные свойства междолинного переноса электронов (МПЭ) двойного нитридного соединения ALN. Частотные свойства ALN определяются методом Монте-Карло с учетом всех актуальных механизмов рассеяния электронов в широком диапазоне частот, в котором справедливо выполнение условий для реализации режима с ограничением накопления объёмного заряда (ОНОЗ). Приводятся результаты расчета статических характеристик и расчеты эффективности генерации. Определены частотные пределы эффективности генерации рассматриваемого соединения. Определен диапазон частот, при работе в котором инерционностью перераспределения носителей заряда можно пренебречь.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: нитриды, междолинный перенос электронов метод Монте-Карло, режим однородного поля

Розглядаються частотні властивості міждолинного перенесення електронів (МПЕ) подвійної нітридної сполуки ALN. Частотні властивості ALN визначені методом Монте-Карло з урахуванням всіх актуальних механізмів розсіяння електронів в широкому діапазоні частот, в якому справедливо виконання умов для реалізації режиму з обмеженням накопичення об'ємного заряду (ОНОЗ). Приводяться результати розрахунків статичних характеристик та ефективності генерації. Визначені частотні межі ефективності генерації сполуки, що розглядалася. Визначений діапазон частот, при роботі в якому інерційністю перерозподілу носіїв заряду можна знехтувати.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: нітриди, міждолинне перенесення електронів, метод Монте-Карло, режим однорідного поля.

A frequency properties of intervalley electrons transfer (IET) are considered in double nitride compound ALN. A frequency properties of ALN is determined by Monte Carlo method taking into account of all actual scattering mechanisms of electrons in the wide frequencies range to be corresponded to realization of limited space charge accumulation mode (LSA). The results of calculation of static characteristics and oscillation efficiency are presented. A frequency limits of oscillation efficiency of considered compound are defined. A region corresponding to neglecting of charge carriers distribution inertia have been determined.

KEYWORD: nitrides, intervalley electron transfer, Monte Carlo method, homogeneous field mode.

ВВЕДЕНИЕ

Нитриды (GaN, AlN, InN) и их соединения в настоящее время широко используются в различных твердотельных приборах, в том числе и сверхвысокочастотных (СВЧ) [1,2]. Нитриды при высоких напряженностях электрического поля обладают отрицательной дифференциальной проводимостью (ОДП). В GaN ОДП возникает при напряженностях электрического поля $E \geq 200$ кВ/см, в InN ОДП возникает при $E \geq 70$ кВ/см, в AlN ОДП возникает при $E \geq 400$ кВ/см [3]. В работе [3] с помощью метода Монте-Карло определены статические зависимости дрейфовой скорости электронов от напряженности электрического поля $v(E)$ для нитридов и их соединений в широком диапазоне напряженностей электрических полей. С увеличением частоты начинает проявляться инерционность перераспределения электронов между долинами зоны проводимости этих соединений, которая приводит к гистерезисным зависимостям $v(E)$ и сдвигу по фазе между скоростью электронов и напряженностью электрического поля. В результате эффективность генерации соединения уменьшается и на определенных частотах может стать равной нулю [4, 5, 6].

Целью настоящей работы является определение частотных зависимостей эффективности генерации двойного соединения нитрида алюминия AlN и максимальных частот генерации диодов на его основе в режиме однородного электрического поля.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Исследования зависимости функции распределения электронов от напряженности электрического поля, зависимостей дрейфовой скорости электронов от напряженности электрического поля $v(E)$, эффективности генерации в режиме однородного поля для AlN проводились с помощью многочастичного метода Монте-Карло [7]. При расчете учитывались три нижайшие долины зоны проводимости- Г-долина и боковые М-L и К - долины. Зонная диаграмма зоны AlAs (решетка типа вюрцита) показана на рис. 1. Ширина запрещенной зоны $\Delta_{\Gamma} \sim 6,2$ эВ, энергетические зазоры, отсчитанные от потолка валентной зоны $\Delta_{M-L} \sim 6,9$ эВ, $\Delta_{K} \sim 7,2$ эВ. Все основные параметры, используемые в расчетах, приведены в таблице 1. Данные взяты из работ [1, 10, 11, 12].

Электроны при разогреве электрическим полем переносятся из Γ -долины, расположенной в центре зоны Бриллюэна (рис.1) в боковые долины М-L и К долины. [1,2, 3]. Все переносы электронов между долинами учтены при расчете частотных зависимостей эффективности генерации нитридов в диапазоне частот. В расчетах учитывались все существенные механизмы рассеяния электронов: акустическое, полярное оптическое, примесное, пьезоэлектрическое, междолинное и эквивалентное междолинное. Пьезоэлектрическое рассеяние в нитридах [9] оказывает существенное влияние на зависимости скорость-поле при постоянной напряженности электрического поля и, естественно, будет влиять и на частотную зависимость эффективности генерации приборов на их основе. Однако действие этого механизма в AlN слабее, чем в бинарных соединениях InN и GaN. Непараболичность нижней долины зоны проводимости учитывалась в виде [9]:

$$E(1 + \alpha E) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (1)$$

где α - коэффициент непараболичности, k - волновое число, m - эффективная масса, соответствующей долины.

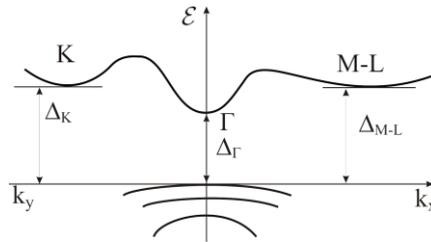


Рис.1. Модель зонной структуры AlN, используемая в расчетах [1]

Параметры материала, используемые при расчетах, приведены в таблице 1.

Таблица 1 Параметры ALN

Параметр	Значение	Параметр	Значение
Плотность (г/см ³)	3,230	Скорость звука(10 ⁵ см/с)	9,06
Пьезоэлектрическая постоянная(С/м ²)	0,1	Оптическая диэлектрическая постоянная	4,77
		Статическая диэлектрическая постоянная	8,5
Долинная зависимость параметров материала		Проводимость долин	
Параметр	Г	М-L	К
Акустический деформационный потенциал (10 ⁹ эВ)	9,5	9,5	9,5
Эффективная масса (m*/m ₀)	0,3266	1,0	1,0
Непараболичность (эВ ⁻¹)	0,044	0	0
Энергетический зазор (эВ)	6,2	6,9	7,2
Энергия оптического фонона (эВ)	0,0343
Междолинный деформационный потенциал (10 ⁹ эВ/см)			
Г	0	1	1
М-L	1	1	1
К	1	1	1
Междолинная энергия фононов (эВ)			
Г	0	0,07575549	0,07575549
М-L	0,07575549	0,07575549	0,07575549
К	0,07575549	0,07575549	0,07575549
Количество эквивалентных долин	1	6	2

В режиме генерации в одноконтурном резонаторе в диоде действует напряженность электрического поля $E(t) = E_0 + E_1 \sin \omega t$ при $E_0 > E_1$ при соотношении амплитуд $E_0 - E_1 \gg 0$. Рабочая точка в течение периода колебаний перемещается по гистерезисной зависимости $v(E)$, вид которой определяется частотой $f = 2\pi\omega$. Ток через диод определяется в виде: $I(t) = env(E(t))$. Для определения эффективности генерации определяется постоянная составляющая тока $I(E_0)$ и амплитуда первой гармоники I_1 , величина которой

оптимизируется по амплитуде E_1 для получения максимального значения эффективности генерации для задаваемого поля E_0 . Коэффициент полезного действия определяется в виде [6]:

$$КПД = \frac{1}{2} \frac{I_1 E_1}{I(E_0) E_0} \cdot 100\% \quad (2)$$

Таким образом, определяется максимальная эффективность генерации для заданной частоты f .

Частоты рассеяния для всех учитываемых механизмов рассеяния для Γ -долины и L-M долин показаны на рис. 2.

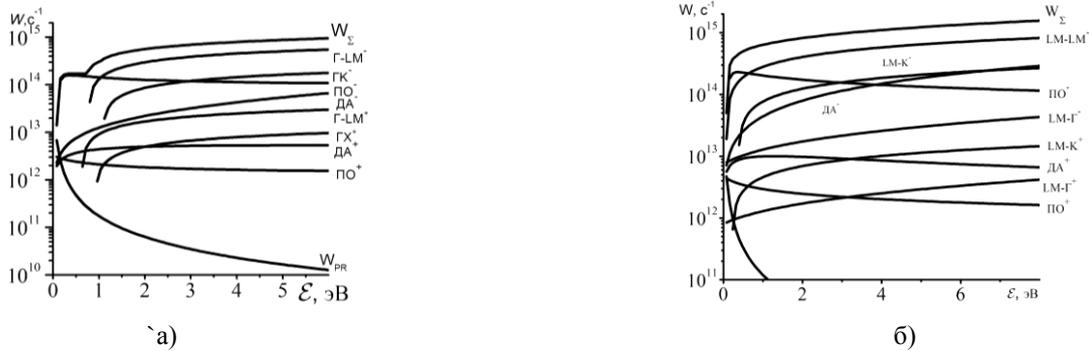


Рис. 2. Зависимость частот рассеяния для отдельных механизмов и суммарной частоты от энергии для электронов в Γ (а) и L – M (б) долинах.

Из анализа зависимостей на рис.2 можно сделать следующие выводы:

1. Для междолинного переноса электронов в боковые долины в AlN необходима значительно меньшая энергия по сравнению GaN (менее 0,7 эВ), частота полярного оптического рассеяния составляет $W \approx 1,5...1,8 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$ и намного больше чем в GaN. Это и определяет более низкое значение низкополевой подвижности в AlN ($\sim 650 \text{ cm}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$) для концентрации 10^{16} cm^{-3} .

2. Частота междолинных переходов максимальна для переходов в M-L долины и в широком диапазоне энергий составляет примерно $2...3 \cdot 10^{14} \text{ c}^{-1}$. Частота междолинных переходов в K-долины меньше и составляет $\sim 10^{14} \text{ c}^{-1}$, однако в суммарную частоту рассеяния вносит вклад.

3. В боковых долинах основной вклад в общую частоту рассеяния вносят полярное и междолинное рассеяния. Частота переходов из боковых M-L и K долин в центральную Γ -долину составляют величины порядка $2...2,5 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$, что и определяет частотные возможности исследуемого материала.

На рис. 3. показаны зависимости относительного заполнения долин рис. 1 а) и дрейфовой скорости от электрического поля рис. 1 б) при трех значениях температуры кристаллической решетки.

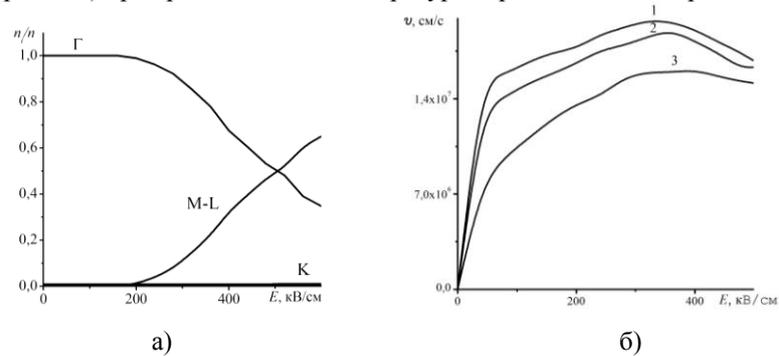


Рис. 3. Зависимость относительной заполненности долин ($T = 300 \text{ K}$) - а) и дрейфовой скорости б) от электрического поля (1- $T = 77 \text{ K}$; 2- $T = 300 \text{ K}$; 3- $T = 500 \text{ K}$).

Как следует из полученных зависимостей в сильных электрических полях происходит опустошение Γ -долины и заполнение боковых L- M и K долин. Однако, основная масса электронов сначала переходят из Γ в L - M – долины. Это свидетельствует о сильной связи Γ и L-M - долин и правомочности использования заданной модели проводимости в противовес использованию более сложных моделей, основанных на детальном расчете зонной структуры, например, с помощью метода псевдопотенциала [3]. С другой стороны это является подтверждением того, что именно времена прямых и обратных переходов между этими долинами будут определять частотных свойства исследуемого материала.

Полученная зависимость $v(E)$ близка к характеристикам, полученным другими авторами, как по величине максимальной дрейфовой скорости электронов, так и по величине пороговой напряженности электрического поля [1, 3,13].

Оценки низкочастотных значений эффективности генерации для приведенных зависимостей дают значения порядка 3% и хорошо соответствуют низкочастотным значениям полученным ранее [13].

Зависимость эффективности генерации (КПД) от частоты для AlN показана на рис. 4. Видно, на частотах примерно до 150 ГГц КПД изменяется примерно на 0,5%, это означает, что на частотах до 150 ГГц инерционность перераспределения электронов между долинами зоны проводимости проявляется слабо. Значительное уменьшение КПД происходит на частотах 800...1000 ГГц, вплоть до нуля при 1000 ГГц. Эту частоту можно считать частотным пределом режима однородного поля в AlN.

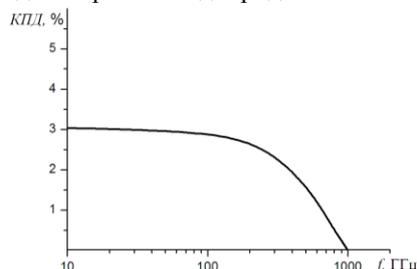


Рис. 4. Эффективность генерации диодов на основе AlN, работающих в режиме однородного поля

Эффективность генерации на первой гармонике может быть ограничена ударной ионизацией, которая может проявляться при напряженностях электрического поля свыше 1000 кВ/см. В настоящих расчетах она не учитывается.

ВЫВОДЫ

На основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

- возможна генерация диодами с междолинным переносом электронов в режиме однородного поля на основе AlN до частот порядка ~ 1000 ГГц;
- инерционность перераспределения электронов между долинами зоны проводимости слабо сказывается на эффективности генерации в режиме однородного поля для AlN на частотах до ~ 150 ГГц. Это означает, что в диапазоне до указанной частоты, можно пользоваться при расчетах генераторов, усилителей, умножителей аппроксимациями зависимостей $v(E)$.

Следует отметить, что в реальных диодах в присутствии неоднородностей поля и концентрации, когда в них распространяются домены сильного поля или заряженные слои, предельные частоты генерации будут отличны от приведенных выше значений для AlN и вопрос о предельных частотах работы таких полупроводниковых диодов на требуют отдельного рассмотрения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, URL, <http://www.ioffe.rssi.ru>, Semiconductor
2. Романова И. Обзор по конференции «Пульсар-2007», Электроника (наука, технология, бизнес), Роспром.- 2007, № 3.- С. 116-123.
3. Maziar Farahmand, Carlo Garetto, Enrico Belloti, Kevin Brennan, Michele Ghosno, Enrico Ghillino, Giovanni Ghione, John Albrecht, Paul Ruden// Monte Carlo Simulation of Electron Transport in the III-nitride wurtzite phase materials system: binaries and ternaries// IEEE Transaction on Electron Devices.- 2001.-Vol.48, N.3.- P.535-542.
4. Зи С. Физика полупроводниковых приборов: в 2 т.- М.: Мир, 1984.
5. Кэррол Дж. СВЧ генераторы на горячих электронах.- М: Мир, 1972.
6. Прохоров Э.Д., Белецкий Н.И. Полупроводниковые материалы для приборов с междолинным переносом электронов, Харьков, Вища школа, 1982.
7. Иващенко В. М., Митин В. В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте – Карло.- К: Наукова думка, 1990, 192 с.
8. Б. Ридли, Квантовые процессы в полупроводниках. - М: Мир.- 1986.
9. J. C. Cao, X.L. Lei Nonparabolic multivalley balance – equation approach to impact ionization: Application to wurtzite GaN// The European Physical Journal B.- 1999.- Vol.7.- P.79-83.
10. Boguslawski, P., Briggs, E.L., Bernholc, Amphoteric properties of substitutional carbon impurity in GaN and AlN// J. Appl. Phys. Lett.- 1996.- Vol. 69.- No 2 .- P. 233-235.
11. Christensen, N.E., Gorczyca I., Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure// Phys. Rev.- B.- 1994.- Vol 50 .- P.4397-4415.
12. Martin, G., Botchkarev A., Rockett A., Morkoc H., Valence-band discontinuities of wurtzite GaN, AlN, and InN heterojunctions measured by x-ray photoemission spectroscopy// Appl. Phys. Lett.- 68, 18 (1996), P. 2541-2543.
13. Прохоров Э.Д., Боцула О.В., Забазан Е.Н., Эффективность генерации диодов с МПЭ на основе нитридов// Вестник ХНУ, Радиофизика и электроника.- 2009.- № 853.- вып. 14, С.15-20.