

УДК 621.382.2

ЧАСТОТНЫЕ СВОЙСТВА МЕЖДОЛИННОГО ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В InN

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

Рассматриваются частотные и энергетические характеристики диодов на основе двойного нитридного соединения InN. Частотные свойства InN 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 объемного 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 InN. Частотні властивості InN визначені методом Монте-Карло з урахуванням всіх актуальних механізмів розсіяння електронів в широкому діапазоні частот, в якому справедливе 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 electric and frequency properties of intervalley electrons transfer (IET) are considered in double nitride compound InN. A frequency properties of AlN is determined by ensemble 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

Интерес к азотосодержащим соединениям (GaN, AlN, InN и т.д.) в настоящее время очень велик, о чем свидетельствует рост публикаций посвященный данным полупроводникам. Основная область их применения это многофункциональные приборы высокоомощной электроники и коротковолновые излучатели.

Приборы на основе нитридов способны работать в значительно более широком диапазоне частот и при более высоких температурах, а также с большей выходной мощностью по сравнению с приборами на кремнии, арсениде галлия, карбиде кремния или на любом другом освоенном в производстве полупроводниковом материале.

Большинство нитридов - прямозонные полупроводники, причем эффективная масса электрона в боковых долинах зоны проводимости больше по сравнению с центральной долиной, а минимумы боковых долин достаточно удалены от центральной долины, что приводит к ярко выраженному эффекту междолинного переноса (ЭМП) и возможностью существования отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП). Это обусловило интерес к нитридам как материалам для создания диодов Ганна, работающих вплоть до частот терагерцового диапазона [1]. Интузиазм в этом направлении сдерживался отсутствием убедительных экспериментальных подтверждений такой возможности и вообще отсутствием информации о электрических свойствах нитридов при электрических полях больших порогового поля междолинного переноса.

Исследование данных соединений методами численного моделирования также сопряжено с многими принципиальными вопросами. Так, например, наиболее интересные с точки зрения использования вюртцитные модификации нитридов выделяются большими величинами вектора спонтанной поляризации и пьезоэлектрического тензора, которые приводят к сильным внутренним электрическим полям, оказывающим существенное влияние на электронные и фононные состояния[2]. Таким образом, в отличии от традиционных материалов для приборов с междолинным переносом при численном моделирования нужно учитывать пьезоэлектрические свойства материалов.

В настоящей работе рассматривается нитрид индия. Среди всех нитридных соединений его отличает самая большая величина стационарной дрейфовой скорости ($3-5 \cdot 10^7$ см/с) и самое большое

значение дрейфовой скорости в режиме “overshot” (свыше 10^8 см/с). По сути InN является самым быстродействующим полупроводниковым материалом для приборов, использующих дрейф носителей.

Однако с точки зрения использования в приборах с МПЕ основным лимитирующим фактором, влияющим работу диода в режиме генерации является время междолинных переходов. Известно, что время релаксации энергии при междолинном переходе $\tau \sim (m^*)^{-3/2}$, где m^* эффективная масса долины в которую осуществляется переход. Тогда среди ряда бинарных соединений (AlN, GaN, InN) InN обладает наименьшей массой $0,11m_0$ и следовательно времена переходов с боковых долин в центральную для него наибольшее. На сегодняшний день не существует однозначного мнения относительно возможной предельной частоты генерации прибора на основе InN. Это же касается и более изученных материалов AlN и GaN. Так, например, для GaN известные автору значения предельной частоты генерации (режим с ограничением накопления объемного заряда – ОНОЗ-режим) меняются от 400 ГГц[3] до 2,2 ТГц[4].

Целью настоящей работы является определение частотных зависимостей эффективности генерации двойного соединения нитрида алюминия InN 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 InN проводились с помощью многочастичного метода Монте-Карло [5]. При расчете учитывались три нижайшие долины зоны проводимости- Г-долина и боковые М-L и А - долины. Зонная диаграмма зоны InN(решетка типа вюрцита) показана на рис. 1.

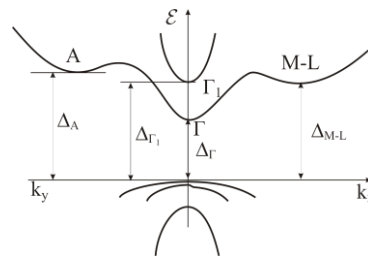


Рис.1. Модель зонной структуры InN, используемая в расчетах [1]

Ширина запрещенной зоны $\Delta_{\Gamma} \sim 1,89$ эВ, энергетические зазоры, отсчитанные от потолка валентной зоны $\Delta_{M-L} \sim 4,09$ эВ, $\Delta_A \sim 4,49$ эВ. Все основные параметры, используемые в расчетах, приведены в таблице 1. Данные взяты из работ [2, 6, 7, 8].

Таблица 1 Параметры InN

Параметр	Значение	Параметр	Значение
Плотность (г/см^3)	6,81	Скорость звука (10^5см/с)	6,238
Константа электромеханической связи K_v^2	0,255343	Оптическая диэлектрическая постоянная	8,4
		Статическая диэлектрическая постоянная	15,3
Параметр	Г	М-L	А
Акустический деформационный потенциал (эВ)	7,1	7,1	7,1
Эффективная масса (m^*/m_0)	0,11	1,0	1,0
Непараболичность (эВ^{-1})	0,419	0	0
Энергетический зазор (эВ)	1,89	4,09	4,49
Междолинный деформационный потенциал (10^9 эВ/см)	1	1	1
Междолинная энергия фононов (эВ)	0,0726	0,0726	0,0726
Количество эквивалентных долин	1	2	2

Закон дисперсии для электронов выбран в виде [6]:

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

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

Электроны при разогреве электрическим полем переносятся из Γ -долины, расположенной в центре зоны Бриллюэна (рис.1) в боковые М-L и А долины. В расчетах учитывались все существенные механизмы рассеяния электронов: акустическое (АК), полярное оптическое (ПО), примесное, пьезоэлектрическое (ПА), междолинное рассеяние между эквивалентными (АА) и неэквивалентными (АВ) долинами. Вероятности рассеяния для электрона, находящегося в Γ -долине зоны проводимости и зависимости $v(E)$ при различных температурах кристаллической решетки показаны на рис. 2.

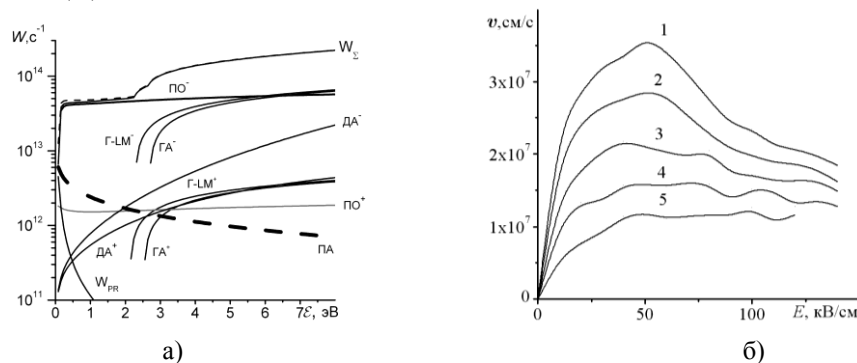


Рис. 2. Зависимость частот рассеяния и суммарной частоты от энергии для электронов в Γ (а) и зависимость $v(E)$ (б) для разных температур решетки: 1- 200 К; 2-300 К; 3- 400 К; 4- 500 К; 5- 600 К.

Из полученных зависимостей видно, что при малых энергиях преобладает рассеяние электронов при взаимодействии ПО и ПА рассеяние, при больших энергиях - междолинное рассеяние.

Сильное влияние пьезоэлектрического рассеяния в InN на электронный транспорт является особенностью данного материала. На рис. 3 показано влияние этого механизма на зависимость $v(E)$.

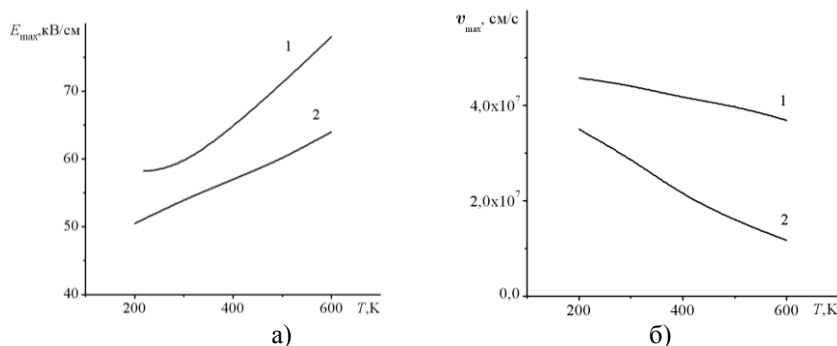


Рис. 3. Зависимость относительной заполненности долин ($T = 300$ К) - а) и дрейфовой скорости б) от электрического поля (1- $T = 77$ К; 2- $T = 300$ К; 3- $T = 500$ К) .

Зависимости, полученные с учетом ПА - рассеяния близки к экспериментальным[2]. Поскольку интенсивность ПА рассеяния уменьшается с ростом энергии электрона, то среди бинарных соединений действие этого механизма в InN проявляется наиболее сильно.

В режиме генерации в одноконтурном резонаторе в диоде действует напряженность электрического поля $E(t) = E_0 + E_1 \sin \omega t$. Эффективность генерации (КПД) определялась аналогично [6] и для каждого значения постоянной составляющей поля E_0 оптимизировалась по амплитуде E_1 для получения максимального значения. Таким образом, определяется максимальная эффективность генерации для заданной частоты f .

Зависимость эффективности генерации от частоты для InN показана на рис. 4. Видно, на частотах примерно до 70 ГГц КПД изменяется примерно на 0,5%, что означает, что на частотах ни ниже 70 ГГц инерционность перераспределения электронов между долинами зоны проводимости можно не учитывать. Значительное уменьшение КПД происходит на частотах 600...700 ГГц, вплоть до нуля при 650 ГГц. Эту частоту можно считать частотным пределом режима однородного поля в InN.

Таким образом, полученные зависимости $v(E)$ близки как к экспериментальным, так и расчетным характеристикам, полученным другими авторами [1,3,6], что подтверждает адекватность проведенных вычислений. Частота междолинных переходов для переходов в М-L долины и А - долины соизмеримы и в широком диапазоне энергий составляет примерно $(1-3) \times 10^{13} \text{ c}^{-1}$.

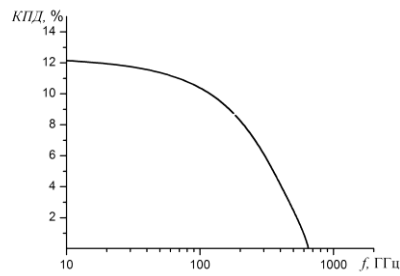


Рис. 4. Эффективность генерации диодов на основе InN, работающих в режиме однородного поля

Частота переходов из боковых M-L и A долин в центральную Γ -долину составляют величины порядка $(0,4-1) \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$, что и определяет частотные возможности исследуемого материала.

Оценки низкочастотных значений эффективности генерации для приведенных зависимостей дают значения порядка 12% и хорошо соответствуют низкочастотным значениям полученным ранее [10]. Для зависимостей $v(E)$ полученных без учета ПА – рассеяния получаются значения практически в 2 раза выше.

Следует заметить, что в виду близости величины энергетического зазора между центральной и боковыми долинами к ширине запрещенной зоны работа диода на InN может быть ограничена ударной ионизацией, даже при полях близких к пороговому.

ВЫВОДЫ

На основе проведенных исследований можно сделать следующие выводы:

- теоретический предел генерация диодами с междолинным переносом электронов в режиме однородного поля на основе InN ограничен частотами порядка ~ 600 ГГц;
- инерционность перераспределения электронов между долинами зоны проводимости слабо сказывается на эффективности генерации в режиме однородного поля для InN на частотах до ~ 70 ГГц.

Значение ширины запрещенной зоны InN составляют по разным данным от 1,9 – 2,05 эВ, а расстояние от валентной зоны до ближайших A долин 2,6 – 4,7 эВ. Таким образом, вопрос о принципиальной возможности использования данного материала лежит в плоскости определения температурных характеристик и параметров процессов связанных с ударной ионизацией и требуют отдельного рассмотрения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Aleskseev E. and Pavlidis D. Microwave potential for GaN-based Gunn devices// Electronic Letters.-2000. – Vol.36, N.2.– P.176-178 .
2. Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, URL, <http://www.ioffe.rssi.ru>, Semiconductor.
3. К.В.Куликов, В.А.Москалюк. Высокочастотные параметры нитрида галлия. Техника и приборы СВЧ.– 2008.– № 2.– С. 48-52.
4. E. A. Barry, V. N. Sokolov, K. W. Kim, and R. J. Trew, Terahertz generation in GaN diodes in the limited space-charge accumulation mode//J. Appl. Phys.– 2008.– Vol. 103, No. 12.– P. 126-131.
5. Maziar Farahmand, Carlo Garetto, Enrico Bellotti, Kevin Brennan, Michele Ghioano, 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, No.3.– P.535-542.
6. Иващенко В. М., Митин В. В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте – Карло.- К: Наукова думка, 1990, 192 с.
7. 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.
8. Christensen, N.E., Gorczyca I., Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure// Phys. Rev. B.– 1994.– Vol 50 .– P.4397-4415.
9. 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.-1996.-Vol. 68.-N.18.- P. 2541-2543.
10. Прохоров Э.Д., Боцула О.В., Забажан Е.Н., Эффективность генерации диодов с МПЭ на основе нитридов// Вестник ХНУ, Радиофизика и электроника.- 2009.- № 853.- вып.14.- С.15-20.