

УДК 621.794.61

МОДЕЛИРОВАНИЕ СРЕДНЕЙ ДРЕЙФОВОЙ СКОРОСТИ ЭЛЕКТРОНОВ В АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

В.Н. МИЩЕНКО

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Республика Беларусь

Поступила в редакцию 13 октября 2017

Аннотация. Приведены результаты моделирования средней дрейфовой скорости электронов в одномерной полупроводниковой структуре из арсенида галлия с использованием метода Монте-Карло. Предложен новый набор значений параметров констант моделирования для арсенида галлия, необходимый для реализации метода Монте-Карло, который обеспечивает более высокую точность расчета средней дрейфовой скорости электронов. Результаты моделирования средней дрейфовой скорости электронов с использованием предложенной модели показали хорошее соответствие экспериментальным данным, полученным разными авторами.

Ключевые слова: арсенид галлия, полупроводниковая структура, процессы переноса электронов, метод Монте-Карло.

Abstract. The modeling results of the average electron drift velocity in a one-dimensional semiconductor structure of gallium arsenide using the Monte-Carlo method are presented. A new set of parameters values of the modeling constants for gallium arsenide is proposed for the realization of the Monte-Carlo method, which provides a higher accuracy for calculating the average electron drift velocity. The modeling results of average electron drift velocity using the proposed model showed good agreement with the experimental data obtained by different authors.

Keywords: gallium arsenide, semiconductor structure, electron transport processes, Monte-Carlo method.

Doklady BGUIR. 2018, Vol. 115, No. 5, pp. 5-11
Simulation of the mean drift speed of electrons
in arsenide gallium by the Monte-Carlo method
V.N. Mishchenka

Введение

Исследование процесса переноса электронов для полупроводниковых соединений группы $A^{III}B^V$, и особенно для материала GaAs, является актуальной задачей, которая связана с разработкой быстродействующих приборов диапазонов СВЧ и КВЧ. Наиболее корректным методом для анализа физических процессов в таких структурах считается применение статистического метода Монте-Карло, который позволяет учесть все механизмы рассеяния носителей заряда в полупроводнике и получить зависимости их распределения для стационарных и нестационарных процессов. Электроны в полупроводниках при наличии внешнего электрического поля подчиняются основным уравнениям движения и рассеиваются в случайные моменты времени в соответствии с известными вероятностями рассеивания. Моделирование поведения электронов с применением случайных чисел для розыгрыша процессов рассеяния и времен свободного пробега составляют главную особенность моделирования кинетических явлений с использованием метода Монте-Карло.

Известно, что результаты моделирования с использованием метода Монте-Карло зависят от значений основных электрофизических параметров материала и параметров модели

зоны проводимости. Анализ публикаций [1–12] показал, что до настоящего времени не сложилось единой универсальной модели в виде значений параметров моделирования для материала GaAs, которая была бы принята в качестве основной большинством авторов. В разное время было предложено достаточно большое количество таких моделей с различными значениями основных электрофизических параметров материала и параметров модели зоны проводимости для определения величины средней скорости электронов в одномерных и многомерных структурах из арсенида галлия. Поэтому вызывает большой интерес сравнительный анализ представленных моделей, которые необходимы для расчета величины средней скорости электронов, как одного из основных параметров полупроводниковой структуры, и сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

Метод и особенности моделирования параметров переноса электронов

Определение средней дрейфовой скорости электронов проводилось непосредственно из процедуры метода Монте-Карло посредством учета свободных пролетов электронов в течение разыгрываемого случайным образом интервала времени Δt . Известно, что значение волнового вектора электрона в конце свободного пробега определяется приложенным к структуре электрическим полем E :

$$k_1 = k_0 + \frac{q \cdot E \cdot \Delta t}{\hbar}, \quad (1)$$

где k_0 – начальное значение волнового вектора, q – заряд электрона, \hbar – постоянная Планка [7, 13].

Значение скорости электрона v после завершения интервала времени Δt определялось следующим образом [14]:

$$v = \frac{k_1 \cdot \hbar}{m^* \cdot (1 + 2 \cdot \alpha \cdot W)}, \quad (2)$$

где m^* – относительная масса электрона в соответствующей долине, α – коэффициент непараболичности, W – энергия электрона.

При этом непараболичность долин описывалась посредством использования уравнения [13, 14]

$$\frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m^*} = W \cdot (1 + \alpha \cdot W). \quad (3)$$

Определение средней дрейфовой скорости электронов проводилось путем математической обработки массива рассчитанных значений скорости. При этом учитывались все свободные пролеты моделируемой группы электронов в течение задаваемого заранее достаточно длительного интервала по времени при использовании известной методики, представленной в [7, 13].

Для материала GaAs использовалась трехдолинная модель, в которой одной нижней долине Γ (или G) сопутствуют верхние долины L (общее количество – 4 долины) и X (общее количество – 3 долины). Обзор публикаций для материала GaAs позволил обобщить известные параметры моделирования, данные о которых приведены в табл. 1–3 [1–7]. Эти параметры можно условно разделить на две группы. В первую группу входят немногочисленные параметры, значение которых установлено или отличается незначительно и используется практически во всех работах в неизменном виде в течение длительного времени (табл. 1). Ко второй группе относится большинство параметров, значения которых отличаются в различных исследованиях. К таким параметрам относятся, например, величины коэффициентов непараболичности для долин, константы междолинной связи, значения энергии междолинных фононов и ряд других параметров. Исследования показали, что значения этих параметров могут значительно отличаться в разных моделях. Так, например, значение константы междолинной связи из долины $\Gamma(G)$ в долину L в [1] принималось равным $1,0 \cdot 10^9$ эВ/см, а в [2] приводилось другое значение этого параметра – $0,18 \cdot 10^9$ эВ/см. Известны и другие различия этих моделей.

Таблица 1. Значения основных электрофизических параметров материала GaAs

Параметр, размерность	Значение параметра
Плотность, гр/см ³	5,36 (5,37 [2])
Продольная скорость звука, 10 ³ м/с	5,24 (5,2 [2])
Статическая диэлектрическая проницаемость	12,9
Высокочастотная диэлектрическая проницаемость	10,92
Энергия оптического фонона, эВ	0,0343 [5]; 0,0362 [2]; 0,03536 [1, 4]; 0,035 [3]; 0,036 [6]

Анализ известных данных из публикаций [1–6] позволил выделить 6 основных моделей, связанных с набором параметров моделирования, которые представлены в табл. 2 и 3. Величина относительной эффективной массы электрона для долин X и L , представленная в табл. 2 для публикаций [4, 6], указана и использовалась при моделировании только для продольного направления ввиду оговоренной предварительно особенности разработанной программы только для одномерных структур. Анализ этих публикаций и сравнение результатов моделирования средней дрейфовой скорости электронов с экспериментальными данными показал, что не для всех известных моделей наблюдается достаточно высокая степень соответствия теоретических и экспериментальных результатов. Поэтому в ходе выполненных исследований была разработана новая модель в виде набора параметров моделирования для процедуры Монте-Карло, значения которых представлены в табл. 4 и 5.

Таблица 2. Значения параметров моделирования материала GaAs

Параметр	Долина	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]	[6]
Акустический деформационный потенциал, эВ	Γ	7,0	7	8	5	5	7,0
	X	9,27	7	8	5	5	9,7
	L	9,2	7	8	5	5	9,2
Относительная эффективная масса электрона	Γ	0,063	0,063	0,063	0,063	0,0665	0,067
	X	0,58	0,58	0,43	1,987 (прод.)	0,58	0,98 (прод.)
	L	0,222	0,17	0,23	1,538 (прод.)	0,222	0,98 (прод.)
Коэффициент непараболичности, эВ ⁻¹	Γ	0,61	0,62	0,69	1,16	1,16	0,61
	X	0,204	0,3	0,36	0,55	0,55	0,204
	L	0,461	0,5	0,65	0,40	0,40	0,461
Величина междолинного зазора, эВ	$\Gamma-X$	0,522	0,52	0,52	0,747	0,747	0,52
	$\Gamma-L$	0,33	0,33	0,33	0,323	0,323	0,33

Таблица 3. Значения параметров (констант) междолинной связи D и энергии междолинных фононов W_f материала GaAs

Параметр	Переход	[1]	[2]	[3]	[4]	[5]	[6]
$D \cdot 10^9$, эВ/см	$\Gamma-L$	1,0	0,18	1,0	0,525	0,65	1,0
	$\Gamma-X$	1,0	1,0	1,0	0,548	0,548	1,0
	$L-L$	1,0	0,5	1,0	0,594	0,594	1,0
	$L-X$	0,5	0,1	0,9	0,501	0,501	0,5
	$X-X$	0,7	1,0	0,9	0,299	0,299	0,7
W_f , эВ	$\Gamma-L$	0,0278	0,0299	0,026	0,02269	0,02269	0,0278
	$\Gamma-X$	0,0299	0,0299	0,026	0,02345	0,02345	0,0299
	$L-L$	0,0290	0,0299	0,026	0,02497	0,02497	0,0290
	$L-X$	0,0293	0,0299	0,026	0,02185	0,02185	0,0293
	$X-X$	0,0299	0,0299	0,026	0,02431	0,02431	0,0299

Таблица 4. Значения параметров моделирования материала GaAs

Параметр	Долина (зазор между долинами)	Значение параметра
Акустический деформационный потенциал, эВ	Γ	7,0
	L	9,20
	X	9,27
Относительная эффективная масса электрона	Γ	0,063
	L	0,17
	X	0,58
Коэффициент непараболичности, эВ ⁻¹	Γ	0,62
	L	0,5
	X	0,3
Величина междолинного зазора, эВ	$\Gamma-X$	0,522
	$\Gamma-L$	0,33

Таблица 5. Значения параметров (констант) междолинной связи D и энергии междолинных фононов W_f материала GaAs

Параметр	$\Gamma-L$	$\Gamma-X$	$L-L$	$L-X$	$X-X$
$D \cdot 10^9$, эВ/см	0,687	0,3121	1,561	0,0624	0,0624
W_f , эВ	0,0299	0,0299	0,0299	0,0299	0,0299

Для проведения исследований была разработана и использована при моделировании единая программа моделирования процессов переноса электронов с использованием метода Монте-Карло. Однако значения исходных электрофизических параметров материала GaAs и параметров модели зоны проводимости применялись разные, в соответствии с табл. 1–5. В программе были учтены наиболее важные механизмы рассеяния: на полярных оптических фононах, на примесях, на акустических фононах, междолинное рассеяние между эквивалентными и неэквивалентными долинами на основе формул, представленных в [13].

Результаты моделирования

Используя процедуру метода Монте-Карло, были выполнены расчеты средней дрейфовой скорости электронов в одномерной полупроводниковой структуре из GaAs при температуре $T = 300$ К. Количество моделируемых частиц принималось равным 100000, количество элементарных ячеек (шагов) по длине структуры равнялось 100 при общей длине исследуемой структуры $L = 1 \cdot 10^{-2}$ см. Концентрация электронов принималась равной $5 \cdot 10^{15}$ см $^{-3}$. Влияние высоколегированных контактных областей на процессы переноса носителей заряда не рассматривалось.

Экспериментальные зависимости средней скорости электронов V от напряженности электрического поля E представлены кривыми 1 (измерения выполнены вдоль оси [100] материала) [8], 4 (для объемного образца) [9], 8 (при концентрации $1 \cdot 10^{15}$ см $^{-3}$) [10] на рис. 1; кривыми 1 (измерения вдоль кристаллографической оси [100] материала) [8] и 2 (объемный образец) [9] на рис. 2 и кривой 3 [12] на рис. 3.

Все остальные кривые, представленные на рис. 1–3, получены путем моделирования зависимости средней скорости электронов V от напряженности электрического поля E по методике, описанной выше. Для кривых, представленных на рис. 1, были использованы при моделировании следующие параметры: для кривой 2 – из [5], для кривой 3 – из [4, 11], для кривой 5 – из [1], для кривой 6 – из [2, 7], для кривой 7 – из [6]. Кривая 9 на рис. 1 получена впервые с использованием параметров, представленных в табл. 4, 5. На рис. 2 представлены рассчитанные кривые: 4 – при использовании параметров из [1], 5 – из [5], 6 – из [3]. Кривая 3 на рис. 2 является продолжением кривой 9 на рис. 1 и получена с использованием параметров, представленных в табл. 4, 5. На рис. 3 представлены рассчитанные кривые: 1 – параметры взяты из [3], 2 – из [1], 4 и 5 – из [5]. Кривая 6 на рис. 3 является продолжением кривой 9 на рис. 1 и кривой 3 на рис. 2 и получена с использованием параметров, представленных в табл. 4, 5. Кривые 4 и 5 на рис. 3 получены с использованием и без использования, соответственно, специального корректирующего коэффициента F , ввод которого, по мнению авторов статьи [5], должен обеспечить лучшее соответствие экспериментальным данным, полученным в [12].

В области значений напряженности электрического поля, лежащих в диапазоне от 2 до 8 кВ/см, для известных из литературы моделей (рис. 1) наименьшее расхождение с экспериментальными данными наблюдается для модели из [1] (кривая 5 на рис. 1). Для моделей, взятых из [5], [4, 11], [2, 7] и [6] (кривые 2, 3, 6, 7 на рис. 1 соответственно), соответствие экспериментальным данным (кривые 1, 4, 8 на рис. 1) хуже и уступает по точности модели из [1]. Расчетная кривая, полученная с использованием данных из [3], на рис. 1 не представлена, хотя по полученным значениям близка к кривой 5, однако все же уступает ей по точности в сравнении с экспериментальными данными. Использование новой модели в виде набора данных, представленных в табл. 4, 5 и показанной кривой 9 на рис. 1, позволяет в области значений напряженности электрического поля, лежащих в диапазоне значений от 2 до 8 кВ/см, получить лучшее соответствие экспериментальным данным по сравнению с другими моделями. Аналогичный вывод можно сделать и для значений напряженности электрического поля, лежащих в диапазоне значений от 8 до 20 кВ/см (рис. 2) и от 20 до 80 кВ/см (рис. 3). Это подтверждает анализ поведения кривой 3 на рис. 2 и кривой 6 на рис. 3.

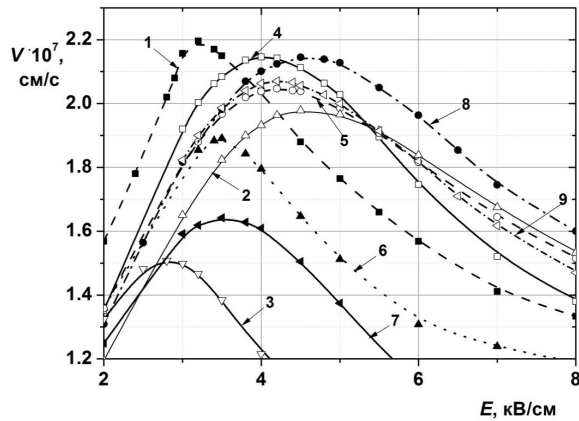


Рис. 1. Зависимость средней скорости электронов от напряженности электрического поля

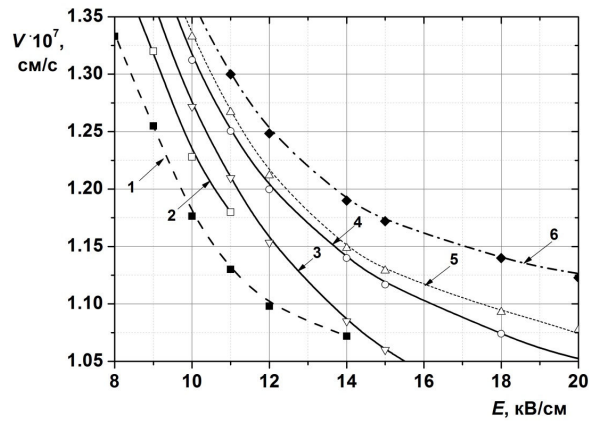


Рис. 2. Зависимость средней скорости электронов от напряженности электрического поля

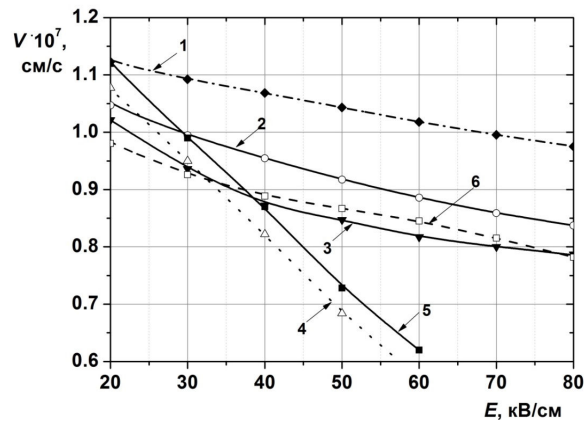


Рис. 3. Зависимость средней скорости электронов от напряженности электрического поля

В целом для всего исследованного диапазона изменения значений напряженности электрического поля (от 2 до 80 кВ/см) лучшее соответствие экспериментальным зависимостям обеспечивают значения параметров и констант моделирования для арсенида галлия, предложенные в данной статье, что позволяет рекомендовать ее для моделирования процессов переноса носителей заряда в материале GaAs и сложных структурах на основе этого материала.

Заключение

Выполнено моделирование средней дрейфовой скорости электронов в одномерной структуре из арсенида галлия. Предложены новые значения параметров и констант моделирования при использовании метода Монте-Карло для арсенида галлия, которые обеспечивают более высокую точность расчета средней дрейфовой скорости электронов. Результаты моделирования средней дрейфовой скорости электронов с использованием

предложенной модели показали хорошее соответствие экспериментальным исследованиям, выполненным разными авторами. Полученные данные могут быть использованы для моделирования полупроводниковых структур, использующих материал GaAs, в диапазонах СВЧ и КВЧ.

Список литературы

1. Littlejohn M.A., Hauser J.R., Glisson T.H. Velocity-field characteristics of GaAs with $G^6_c-L^6_c-X^6_c$ conduction-band ordering // *J. of Applied Physics*. 1977. Vol. 48, № 1. P. 4587–4590.
2. Pozela J., Reklaitis A. Electron transport properties in GaAs at high electric fields // *Sol. St. Comm.* 1980. Vol. 23, № 9. P. 927–933.
3. Brennan K.F., Hess K. High field transport in GaAs, InP and InAs // *Solid –State Electronics*. 1984. Vol. 27, № 4. P. 347–356.
4. Fischetti M. Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures – part I: homogeneous transport // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1991. Vol. ED-38, № 3. P. 634–649.
5. Scaling of pseudomorphic high electron mobility transistors to decanano dimension / K. Kalna [et al.] // *Solid-State Electronics*. 2002. Vol. 46. P. 631–638.
6. David J.K., Register L.F., Banerjee S.K. 3D-Monte Carlo study of short channel tri-gate nanowire MOSFETs // *Solid-State Electronics*. 2011. Vol. 61. P. 7–12.
7. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия. М.: Мир, 1991. 632 с.
8. Ruch J.G., Kino G.S. Transport Properties of GaAs // *Physical Review*. 1968. Vol. 174, № 3. P. 921–931.
9. Braslau N., Hauge P. S. Microwave Measurement of the Velocity-Field Characteristic of GaAs // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1980. Vol. ED-17, № 8. P. 616–622.
10. Masselink W.T., Kuech T.F. Velocity-field characteristics of electron in doped GaAs // *J. of Electronic Materials*. 1989. Vol. 18, № 5. P. 579–584.
11. Fischetti M., Laux S. E. Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects // *Physical Review B*. 1988. Vol. 38, № 14. P. 9721–9745.
12. Houston P.A., Evans A.G. Electron drift velocity in n-GaAs at high electric fields // *Solid-State Electronics*. 1977. Vol. 20. P. 197–204.
13. Fawcett W., Boardman D.A., Swain S. Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide // *J. of Physical Chemistry Solids*. 1970. Vol. 31. P. 1963–1990.
14. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. М.: Мир, 1987. 640 с.

References

1. Littlejohn M.A., Hauser J.R., Glisson T.H. Velocity-field characteristics of GaAs with $G^6_c-L^6_c-X^6_c$ conduction-band ordering // *J. of Applied Physics*. 1977. Vol. 48, № 1. P. 4587–4590.
2. Pozela J., Reklaitis A. Electron transport properties in GaAs at high electric fields // *Sol. St. Comm.* 1980. Vol. 23, № 9. P. 927–933.
3. Brennan K.F., Hess K. High field transport in GaAs, InP and InAs // *Solid –State Electronics*. 1984. Vol. 27, № 4. P. 347–356.
4. Fischetti M. Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures – part I: homogeneous transport // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1991. Vol. ED-38, № 3. P. 634–649.
5. Scaling of pseudomorphic high electron mobility transistors to decanano dimension / K. Kalna [et al.] // *Solid-State Electronics*. 2002. Vol. 46. P. 631–638.
6. David J.K., Register L.F., Banerjee S.K. 3D-Monte Carlo study of short channel tri-gate nanowire MOSFETs // *Solid-State Electronics*. 2011. Vol. 61. P. 7–12.
7. Shur M. *Sovremennye pribory na osnove arsenida gallija*. M.: Mir, 1991. 632 s. (in Russ.)
8. Ruch J.G., Kino G.S. Transport Properties of GaAs // *Physical Review*. 1968. Vol. 174, № 3. P. 921–931.
9. Braslau N., Hauge P. S. Microwave Measurement of the Velocity-Field Characteristic of GaAs // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 1980. Vol. ED-17, № 8. P. 616–622.
10. Masselink W.T., Kuech T.F. Velocity-field characteristics of electron in doped GaAs // *J. of Electronic Materials*. 1989. Vol. 18, № 5. P. 579–584.
11. Fischetti M., Laux S. E. Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects // *Physical Review B*. 1988. Vol. 38, № 14. P. 9721–9745.
12. Houston P.A., Evans A.G. Electron drift velocity in n-GaAs at high electric fields // *Solid-State Electronics*. 1977. Vol. 20. P. 197–204.

13. Fawcett W., Boardman D.A., Swain S. Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide // *J. of Physical Chemistry Solids*. 1970. Vol. 31. P. 1963–1990.
14. Hokni R., Istvud Dzh. Chislennoe modelirovanie metodom chastic. M.: Mir, 1987. 640 s. (in Russ.)

Сведения об авторе

Мищенко В.Н., к.т.н., доцент, доцент кафедры инфокоммуникационных технологий Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники.

Адрес для корреспонденции

220013, Республика Беларусь,
г. Минск, ул. П. Бровка, 6,
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники
тел. +375-17-293-80-70;
e-mail: mishchenko@bsuir.by
Мищенко Валерий Николаевич

Information about the author

Mishchenka V.N., PhD, associate professor, associate professor of department of infocommunication technologies of Belarusian state university of informatics and radio electronics.

Address for correspondence

220013, Republic of Belarus,
Minsk, P. Brovka st., 6,
Belarusian state university
of informatics and radioelectronics
tel. +375-17-293-80-70;
e-mail: mishchenko@bsuir.by
Mishchenka Valery Nikolaevich