

Високочастотні властивості GaN, AlN та InN у сильних полях

Куліков^f К. В., ORCID [0000-0001-9743-0047](https://orcid.org/0000-0001-9743-0047)

Москалюк^s В. О., к.т.н. проф., ORCID [0000-0002-2753-0744](https://orcid.org/0000-0002-2753-0744)

Тимофєєв^s В. І., д.т.н. проф., ORCID [0000-0003-0515-1580](https://orcid.org/0000-0003-0515-1580)

Кафедра Електронної Інженерії phbme.kpi.ua

Національний Технічний Університет України

"Київський Політехнічний Інститут імені Ігоря Сікорського" kpi.ua

Київ, Україна

DOI: [10.20535/2523-4455.2019.24.3.178841](https://doi.org/10.20535/2523-4455.2019.24.3.178841)

Анотація—У статті запропоновано метод моделювання і аналізу високочастотних властивостей многодолинних напівпровідників, зокрема GaN, AlN і InN. Модель застосована до надсучасних, перспективних і актуальних матеріалів GaN, AlN і InN, які зараз відомі під узагальнюючою назвою III-нітриди. Метод відрізняється економічним використанням обчислювальних ресурсів без істотних втрат точності і можливістю застосування як для динамічних задач у часі, так і змінних у просторі полів.

Запропонований підхід базується на вирішенні системи диференціальних рівнянь, які відомі як релаксаційні і отримані з кінетичного рівняння Больцмана в наближенні часу релаксації по функції розподілу по k -простору. В англомовній літературі цей метод відомий під назвою «метод моментів». На відміну від традиційної системи рівнянь для концентрації носіїв, їх імпульсу і енергії тут використано замість рівняння релаксації енергії рівняння для електронної температури як міри енергії тільки хаотичного руху. Друга істотна відмінність полягає в тому, що часи релаксації визначаються не як інтегральні значення із статичних характеристик матеріалу, а через усереднення квантовомеханічних швидкостей розсіювання, зазвичай використовуваних у методі Монте-Карло, для окремих видів розсіювання. Усереднення проводилося за максвеллівською функцією розподілу в наближенні електронної температури, в результаті чого враховуються різні механізми розсіювання носіїв через специфічні для них часи релаксації. Оскільки використовувана система рівнянь включає рівняння в частинних похідних за часом і координатами, вона дає можливість досліджувати характерні прояви імпульсних властивостей розглянутих матеріалів, а саме: часовий ефект «сплеску» дрейфової швидкості і просторовий «балістичний транспорт» носіїв.

Вперше розглядається використання перетворення Фур'є імпульсної залежності дрейфової швидкості носіїв для обчислення максимальних властивих напівпровіднику частот. Виявлено зв'язок форми спектральної характеристики швидкості дрейфу з переважаючими в даному електричному полі механізмами розсіювання. Проаналізовано властивості III-нітридів у частотній області в сильному електричному полі і робиться порівняння з існуючими методами оцінки частот відсічення. Показано, що граничні частоти збільшуються з ростом напруженості електричного поля і складають сотні гігагерців, а для нітриду алюмінію перевищують тисячу гігагерців. Це пов'язано, можливо, з найбільшими для нього міждолинними відстанями і відповідно з ослабленим міждолинним розсіюванням. Аналіз просторового прояву ефекту сплеску показує можливість практично без зіткнень, балістичного прольоту електронів у сильному полі на відстанях до сотих і десятих часток мікрометра.

Бібл. 15, рис. 10, табл. 1.

Ключові слова — III-нітриди; нітрид галію; нітрид алюмінію; нітрид індію; механізми розсіювання; міждолинне розсіювання; часи релаксації; сильне електричне поле; балістичний транспорт; динамічні характеристики; гранична частота.

I. ВСТУП

Одним з напрямів підвищення частотних параметрів і швидкодії електронних компонентів є використання нових напівпровідникових матеріалів. За останні роки технологічне освоєння нітриду галію [1] істотно потіснило не тільки кремнієві прилади, що панували на ринку електронної продукції, перш за все в області надвисокочастотних і надшвидкодійних приладів, а вже і прилади базовані на арсеніді галію. Логічним наступним кроком є дослідження інших нітридів з напівпровідниковими властивостями, а саме нітриду алюмінію та нітриду індію. Останнім часом у літературі [2] використовується узагальнена назва усіх трьох матеріалів – «III-нітриди», яка підкреслює

належність як до сполук з азотом, так до загальновідомої напівпровідникової групи $A^{III}B^V$.

Метою роботи є опис методів, моделей та інформаційного забезпечення для дослідження електронних та енергетичних властивостей напівпровідникових матеріалів [3] [4], для опису механізмів розсіювання у сильному електричному полі напівпровідникових сполук для підвищення ефективності їх роботи. Особлива увага приділяється дослідженню частотних характеристик III-нітридів у сильних полях, ефекти розігрівання електронного газу та інші ефекти, що властиві таким матеріалам при досягненні нанорозмірів та порівняння з результатами експериментів та досліджень інших фахівців [5] [6].



Створено фундаментальні фізико-математичні засади для моделювання сучасних напівпровідникових матеріалів. Використано удосконалений метод релаксаційних рівнянь [7], у якому замість рівняння балансу енергії використовується рівняння для електронної температури. Використано часи релаксації імпульсу та енергії електронів для різних механізмів розсіювання. Для III-нітридів міждолинне розсіювання розглянуто через окремі види розсіювання на акустичних та оптичних фононах, оскільки вони відрізняються широкою фононою забороненою зоною. При моделюванні складних сполук можуть бути враховані часи релаксації для розсіювання на сплавному деформаційному потенціалі.

Розглянуто метод аналізу частотних можливостей провідності матеріалу на основі перетворення Фур'є від імпульсної реакції швидкості дрейфу [8]. Також досліджені імпульсні можливості сполук, пов'язані з ефектом «сплеску» дрейфової швидкості електронів у сильному електричному полі. Цей ефект відноситься до так званих квазібалістичних явищ і дозволяє отримувати пікосекундні імпульси струму як реакцію на включення напруги, що створює сильне електричне поле.

Наведені результати моделювання при зміні напруженості електричного поля у часі та просторові зміни у об'ємі напівпровідникового матеріалу. Вперше розглядається використання перетворення Фур'є імпульсної залежності швидкості дрейфу носіїв для обчислення максимальних властивих напівпровіднику частот та робиться порівняння з існуючими методами оцінки частот відсічки.

II. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ

Метод Монте-Карло розв'язку кінетичного рівняння Больцмана є найбільш фундаментальним для дослідження процесів у напівпровідникових матеріалах [9] за субмікронних розмірів компонентів. Для моделювання часто використовують наближення часу релаксації, яке істотно спрощує кінетичне рівняння і полегшує знаходження функції розподілу за відомих механізмів розсіювання й значеннях їхньої швидкості. Але одержувана при цьому інформація часто буває надлишковою, якщо потрібно знати лише деякі усереднені величини або їхні просторові розподіли. Найбільш важливими характеристиками колективу звичайно є концентрація, потік й енергія частинок. Більш просто й ефективно визначати ці величини або їхні просторово-часові функції не через функцію розподілу, а з диференціальних рівнянь для цих величин. Такі рівняння можуть бути отримані безпосередньо з кінетичного рівняння, якщо провести усереднення до його розв'язку. Для цього всі доданки кінетичного рівняння

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial N}{\partial \vec{r}} + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \frac{\partial N}{\partial \vec{k}} = \left[\frac{\partial N}{\partial t} \right]_c, \quad (1)$$

помножуються на відповідну величину, що усереднюється, й інтегруються по області k -простору, що нас цікавить. У результаті отримуємо диференціальні рівняння у частинних похідних для середніх величин, що залежать тільки від координат і часу. У літературі

[10] такі рівняння зустрічаються у різних формах, що відрізняються використанням тих чи інших, часто досить тонких, припущень, зв'язаних в основному з вибором моделі (гідродинамічна, квазігідродинамічна й ін.) колективу частинок. Здебільшого із цієї причини такі рівняння іноді називають *феноменологічними*, а за своєю суттю вони є рівняннями збереження.

Проведення процедур усереднення правої частини кінетичного рівняння дає швидкості зміни за рахунок зіткнень відповідно концентрації – $(dn/dt)_c$, сумарного значення хвильового вектору – $(d\vec{k}_\Sigma/dt)_c$. У підсумку отримуємо відповідні рівняння збереження для концентрації

$$dn/dt = (dn/dt)_c, \quad (2)$$

середнього значення хвильового вектору

$$d(n\vec{k})/dt - n\vec{F}/\hbar = (d\vec{k}_\Sigma/dt)_c \quad (3)$$

і середньої енергії

$$d(nE)/dt - n\vec{F}\vec{v} = (dE_\Sigma/dt)_c \quad (4)$$

Передостанне рівняння, маючи на увазі рівність $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, звичайно записують як рівняння збереження імпульсу

$$d(n\vec{p})/dt - n\vec{F} = (d\vec{p}_\Sigma/dt)_c \quad (5)$$

Використовуючи для кінетичного рівняння наближення часу релаксації (τ), праві частини (2), (4) і (5) можна подати у формі

$$\left(\frac{dn}{dt} \right)_c = - \int_{V_k} \frac{(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{\Delta n}{\tau_n}, \quad (6)$$

$$\left(\frac{d\vec{p}_\Sigma}{dt} \right)_c = - \hbar \int_{V_k} \frac{\vec{k}(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{n\vec{p}}{\tau_p}, \quad (7)$$

$$\left(\frac{dE_\Sigma}{dt} \right)_c = - \int_{V_k} \frac{E(N - N_0)}{\tau} d\vec{k} = - \frac{n(E - E_0)}{\tau_E} \quad (8)$$

Подібно до того, як у правій частині кінетичного рівняння стоїть нерівноважна добавка до функції розподілу $\Delta N = N - N_0 = g(k)\Delta f$, так і у чисельнику правих частин стоять відхилення від рівноважних значень для концентрації $\Delta n = n - n_0$, середнього імпульсу ($\vec{p}_{cp0} = 0$) та середньої енергії ($E_0 = 3k_B T / 2$). Величини у знаменниках зуться відповідно часом релаксації концентрації (τ_n), імпульсу (τ_p) та енергії (τ_E).

Для **однодолинної** моделі зони провідності рівняння (5) при збереженні загальної кількості часток у зоні ($dn/dt = 0$) може бути записано у формі рівняння збереження для середнього дрейфового значення імпульсу $\vec{p}(\vec{r}, t)$

$$d\vec{p}/dt - \vec{F} = - \vec{p}/\tau_p, \quad (9)$$



або для дрейфової швидкості

$$d\vec{v}/dt - \vec{F}/m^* = -\vec{v}/\tau_p, \quad (10)$$

яке має простий фізичний смисл: швидкість напрямленого руху збільшується під дією сили електричного поля, як і для вільних часток, і зменшується за рахунок розсіювання носіїв, або «сили тертя» $-\vec{v}/\tau_p$.

У статичному електричному полі ці сили врівноважуються і

$$\vec{v} = -(e\tau_p/m^*)\vec{E} = -\mu\vec{E}, \quad (11)$$

тобто рухливість визначається середнім часом релаксації імпульсу. Відповідно до (7) цей час знаходиться через усереднення оберненого часу релаксації $1/\tau = \lambda_\Sigma = \sum_i \lambda_i$, помноженого на хвильовий вектор, за функцією розподілу

$$\frac{\vec{p}}{\tau_p} = \frac{\hbar}{n} \int \vec{k} \lambda_\Sigma N(\vec{k}) d\vec{k} \quad (12)$$

Наявність тут сумарної швидкості розсіювання, яка включає всі механізми, притаманні даному матеріалу, означає, що всяке розсіювання, пружне чи непружне, з поглинанням фонона чи його збудженням, приводить у тій чи іншій мірі до втрати напрямленого імпульсу і хаотизації руху.

Подібні міркування можна провести у зв'язку з рівнянням збереження енергії. За незмінної загальної кількості частинок у зоні рівняння (4) для середньої енергії у наближенні часу релаксації приймає вигляд

$$dE/dt - \vec{F}\vec{v} = -(E - E_0)/\tau_E. \quad (13)$$

Для знаходження часу релаксації енергії τ_E використовується усереднення за функцією розподілу (8) швидкості розсіювання, помноженою на енергію,

$$\frac{E}{\tau_E} = \frac{1}{n} \int E(\vec{k}) \lambda_\Sigma N(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (14)$$

причому λ_Σ включає всі механізми розсіювання, крім пружних.

Слід відзначити деяке протиріччя між виразами (7), (8) з одного боку та (12), (14) з іншого. Однак ця відмінність незначна за самою суттю наближення часу релаксації, коли відхилення від рівноважного стану незначне, а час релаксації τ є сталою величиною.

У багатодолинних напівпровідниках електрони займають нижні стани долин і утворюють відносно уособлені колективи із своїми характерними параметрами. Тому усереднення кінетичного рівняння можна проводити за об'ємами k -простору, що включають окремі долини. У такому разі, якщо навіть загальна кількість електронів у зоні залишається постійною, то так зване міждолинне розсіювання може приводити до перерозподілу електронів між окремими долинами і відповідно до зміни середніх значень імпульсу та енергії у цих долинах.

Для **дводолінної моделі** зонної структури використовують рівняння збереження для концентрації електронів у i -долині

$$dn_i/dt = -n_i/\tau_{nij} + n_j/\tau_{nji} \quad (15)$$

і аналогічне рівняння для j -долини

$$dn_j/dt = -n_j/\tau_{nji} + n_i/\tau_{nij} \quad (16)$$

Ці рівняння являють собою систему рівнянь і природньо, що праві частини у них відрізняються тільки знаком, бо загальна кількість часток у зоні залишається незмінною

$$d(n_i + n_j)/dt = 0 \quad (17)$$

Тут τ_{nij} – час міждолинної релаксації концентрації, усереднений за функцією розподілу тільки i -долини:

$$1/\tau_{nij} = \int_{V_k} \lambda_{ij} N(k) dV_k / \int_{V_k} N(k) dV_k, \quad (18)$$

який характеризує швидкість покидання електронами станів i -долини у результаті міждолинного розсіювання.

Другий доданок у (15), що характеризує перехід електронів до i -долини, включає τ_{nji} – концентраційний час міждолинної релаксації електронів з j -долини до i -ї, але усереднений за функцією розподілу j -долини:

$$1/\tau_{nji} = \int_{V_{k'}} \lambda_{ji} N(k') dV_{k'} / \int_{V_{k'}} N(k') dV_{k'}. \quad (19)$$

Корисно також відзначити, що у стаціонарному стані ($dn_i/dt = dn_j/dt = 0$) міждолинні переходи взаємно врівноважуються і з використанням рівноважної статистики [11]

$$\frac{\tau_{nij}}{\tau_{nji}} = \frac{n_i}{n_j} = \left(\frac{m_{di}^*}{m_{dj}^*} \right)^{3/2} \exp(-\Delta_{ij}/k_B T_e). \quad (20)$$

Подібні міркування можна провести також для рівняння збереження імпульсу (хвильового вектора) і отримати

$$d(n_i \vec{p}_i)/dt - n_i \vec{F} = -n_i \vec{p}_i / \tau_{pi}, \quad (21)$$

де в τ_{pi} необхідно включити як внутрішньодолинні переходи, так і міждолинні

$$1/\tau_{pi} = 1/\tau_{pii} + 1/\tau_{pij}. \quad (22)$$

Для j -долини рівняння збереження імпульсу аналогічне (21) з відповідною заміною індексів:

$$d(n_j \vec{p}_j)/dt - n_j \vec{F} = -n_j \vec{p}_j / \tau_{pj} \quad (23)$$

з часом релаксації імпульсу, що враховує як внутрішні так і міждолинні переходи з j -долини в i -у

$$1/\tau_{pj} = 1/\tau_{pjj} + 1/\tau_{pji} \quad (24)$$



Рівняння (21) і (23) є системою рівнянь, яку треба розв'язувати сумісно з системою (15) і (16), що характеризує заселеність долин.

Релаксацийним рівнянням для енергії можна надати різні форми в залежності від деталізації особливостей фізичних процесів та обраних припущень. Використовуючи прийнятний метод усереднення кінетичного рівняння для енергії, можна провести перетворення інтегралу зіткнень для енергії і отримати рівняння збереження енергії для i -долини. За виглядом воно буде співпадати з (4) з правою частиною у формі (8) з часом релаксації енергії τ_{Eii} , що враховує тільки внутрішньодолинні механізми розсіювання. Міждолинне розсіювання приводить до появи у правій частині додаткових членів, один з яких $(-n_i E_i / \tau_{Eij})$ характеризує зменшення сумарної енергії електронів у i -долині за одиницю часу при їх переході у j -долину і зв'язаний з міждолинним часом релаксації енергії τ_{Eii} , який визначається співвідношенням

$$\tau_{Eii} = \frac{\int_{V_k} \lambda_{ij} E(k) N(k) dV_k}{\int_{V_k} E(k) N(k) dV_k}. \quad (25)$$

При зворотних переходах електрони з j -долини в i -у приносять енергію, яку зручно подати доданком у правій частині рівняння балансу енергії, а саме $(n_j E_0 / \tau_{Eji})$, який пропорційний концентрації n_j і рівноважній енергії E_0 , бо електрони приходять до i -ї долини безпосередньо у результаті релаксуючих зіткнень. Час релаксації τ_{Eji} визначається подібно до (25), але усереднення проводиться для швидкості розсіювання λ_{ji} по станах j -долини.

У результаті система рівнянь, що описує релаксацію енергії у дводолинній моделі, може бути подана у вигляді:

$$\frac{d(n_i E_i)}{dt} - n_i \bar{v}_i \bar{F} = -\frac{n_i (E_i - E_0)}{\tau_{Ei}}, \quad (26)$$

$$\frac{d(n_j E_j)}{dt} - n_j \bar{v}_j \bar{F} = -\frac{n_j (E_j - E_0)}{\tau_{Ej}}. \quad (27)$$

Тут часи релаксації τ_{Ei} і τ_{Ej} включають як внутрішньо-, так і міждолинні механізми розсіювання:

$$\frac{1}{\tau_{Ei}} = \frac{1}{\tau_{Eii}} + \frac{1}{\tau_{Eij}}, \quad (28)$$

$$\frac{1}{\tau_{Ej}} = \frac{1}{\tau_{Ejj}} + \frac{1}{\tau_{Eji}}$$

Якщо скласти рівняння (26) та (27), і розділити їх на сумарну концентрацію $n = n_i + n_j$, а також ввести середні по долинах значення енергії $E = (n_i E_i + n_j E_j) / n$, швидкості дрейфу $\bar{v} = (n_i \bar{v}_i + n_j \bar{v}_j) / n$ і часу релаксації енергії $1 / \tau_E = [n_i (E_i - E_0) / \tau_{Ei} + n_j (E_j - E_0) / \tau_{Ej}] / n$, то

можна отримати рівняння збереження енергії електрона, середньої для двох долин,

$$\frac{dE}{dt} - \bar{v} \bar{F} = -\frac{E - E_0}{\tau_E}. \quad (29)$$

Крім того можна загальний середній час релаксації енергії визначити як

$$\frac{1}{\tau_E} = \frac{n_i / \tau_{Ei} + n_j / \tau_{Ej}}{n}, \quad (30)$$

де ваговими коефіцієнтами є тільки концентрації. Це цілком узгоджується з наближенням часу релаксації, де час τ може бути знайдений за рівноважною функцією розподілу.

Дводолинне наближення зазвичай використовують для напівпровідників, які мають чітко визначену пріоритетну долину (нижчу), параметри якої в основному визначають властивості напівпровідника у слабкому полі. Всі інші долини, міждолинна відстань до яких достатньо велика порівняно з енергією оптичних фононів, можна розглядати як одну вищу з деякими усередненими параметрами, які забезпечують адекватні результати моделювання.

Ми зупинимося на дводолинному наближенні, оскільки предметом вивчення є порівняння частотних властивостей різних III-нітридів за однаковою моделлю.

Суттєва особливість розв'язку системи релаксацийних рівнянь пов'язана з тим, що часи релаксації знаходяться як середні значення від швидкостей розсіювання, і усереднення проводиться за функцією розподілу. Ця функція за формою обирається максвелівською, але її нерівноважність враховується через електронну температуру. Тобто часи релаксації визначаються як функції електронної температури, а її значення залежать від ступеня розігрівання електронного колективу електричним полем.

Для кількісного аналізу розігрівання електронів необхідно з рівнянь балансу повної енергії та енергії дрейфового руху отримати рівняння балансу енергії тільки для хаотичного руху. У рівнянні балансу повної енергії (13) доданок $e \bar{v} \bar{E}$ характеризує енергію, набуту від поля за одиницю часу, а доданок $(E - E_0) / \tau_E$ - втрачену в результаті зіткнень за той самий час. Щоб отримати рівняння балансу енергії дрейфового руху помножимо всі доданки рівняння (10) скалярно на \bar{v} і отримаємо

$$dE_d / dt - e \bar{v} \bar{E} = -2E_d / \tau_p. \quad (31)$$

Тут права частина - це енергія дрейфу, яка втрачається за 1 с, а $\tau_p / 2$ - час її релаксації. Віднімаючи останнє рівняння від (13), отримуємо рівняння балансу тільки хаотичної (теплової) енергії, яке й визначає динаміку зміни електронної температури:



$$\begin{aligned} \frac{dE_T}{dt} &= -\frac{E_T - E_0}{\tau_E} - \frac{E_d}{\tau_E} + \frac{2E_d}{\tau_p} = \\ &= -\frac{E_T - E_0}{\tau_E} + \frac{E_d}{\tau_E} \left(\frac{2\tau_E}{\tau_p} - 1 \right) \end{aligned} \quad (32)$$

Доданок $2E_d / \tau_p$ дорівнює енергії дрейфу, яка за 1 с перетворюється безпосередньо в теплову, але її частина, рівна E_d / τ_E , за той самий час релаксує і переходить до кристалічної решітки. У підсумку збільшення теплової енергії за рахунок дрейфової за 1 с відображено у другому доданку перетвореного виразу (32). Відношення $2\tau_E / \tau_p \equiv \gamma$ є параметром, який характеризує ефективність переходу енергії дрейфу в теплову і визначає ступінь непружності співударянь щодо напрямленої енергії. Тому розігрівання електронного газу можливе тільки за умови, що швидкість розсіювання імпульсу перевищує швидкість розсіювання енергії, тобто коли $\tau_E > \tau_p / 2$. І тільки за рахунок перевищення електронної температури над рівноважною ($E_0 = 3k_B T / 2$), що дорівнює температурі кристалічної решітки. Можливий стаціонарний стан, за якого віддана та отримана електронами енергії врівноважують одна одну. Це відбувається, коли електронна температура встановлюється на рівні, який відповідає рівності

$$E_T = E_0 + E_d(\gamma - 1). \quad (33)$$

Беручи до уваги, що в стаціонарному стані з огляду на (11) швидкість дрейфу $v = e\tau_p \mathbf{E} / m^* = \mu \mathbf{E}$, де $\mu = e\tau_p / m^*$ – рухливість, отримаємо для електронної температури вираз

$$T_e = T + \frac{m^2 \mathbf{E}^2 m^* (\gamma - 1)}{3k_B}. \quad (34)$$

Тут потрібно врахувати, що часи релаксації для різних механізмів розсіювання залежать від електронної температури досить складно. У літературі, наприклад, [7] відома залежність $T_e(\mathbf{E})$, отримана в припущенні про переважання тільки одного виду розсіювання (зазвичай акустичного), що не враховує доданка E_d / τ_E у (32). Але питома вага різних механізмів суттєво змінюється у процесі розігрівання. У сильних електричних полях переважають механізми за участю оптичних фононів. Тому в загальному випадку отримання залежності $T_e(\mathbf{E})$ у явному вигляді практично неможливе і її зручніше знаходити як обернену до $\mathbf{E}(T_e)$

$$\mathbf{E} = \sqrt{\frac{3k_B(T_e - T)}{m^* \mu^2 (\gamma - 1)}} = \frac{v_T}{\mu} \sqrt{\frac{T_e / T - 1}{\gamma - 1}}, \quad (35)$$

або з чисельного розв'язку рівняння (35), розглядаючи його як трансцендентне. Ця залежність, так звана поле-температурна характеристика, дозволяє подавати результати моделювання у вигляді залежностей від напруженості електричного поля.

Питання динамічних, зокрема високочастотних, властивостей напівпровідників виникає під час конструювання багатьох електронних компонентів. Свідомий вибір конкретного матеріалу для інженерних цілей спирається на порівнянню та технічно важливу характеристику. Постійне збільшення вимог до швидкості пристроїв органічно призводить до того, що такою характеристикою стає частотна характеристика матеріалів.

Оцінка граничних частотних можливостей може бути проведена на основі різних методів та за різними критеріями. Наприклад, у [12] чисельним моделюванням методом Монте-Карло для змінного електричного поля визначається гранична частота за критерієм досягнення максимуму ККД на першій гармоніці струму.

Критерії вибору частотних властивостей матеріалу можуть бути різними. Одним з можливих підходів є оцінка частоти існування від'ємної динамічної провідності [10], де проведено аналітичні розрахунки частотної характеристики комплексної провідності. У наближенні малого сигналу отримано вираз для високочастотної електропровідності електронів i -долини

$$\begin{aligned} \sigma_{\omega i} &= \sigma_{0i} \left[\frac{\tau_{p\omega i} - v_{0i} \cdot \tau_{E\omega i}}{\tau_{p0i} - v_{0i} \cdot \tau_{E0i}} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(\frac{\tau_{p\omega i}}{\tau_{p0i}} + \frac{b_{i0} b_{j0}}{1 + i\omega\tau_m} \cdot \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right) \right] \equiv \\ &\equiv en_{0i} \mu_{0i} F_i(\omega) \end{aligned} \quad (36)$$

Тут введено поняття загального часу міждолинної релаксації через обернені часи релаксації між окремими долинами

$$\tau_m = (1/\tau_{ij0} + 1/\tau_{ji0})^{-1}, \quad (37)$$

У дводолинному наближенні зонної структури для верхньої долини можна провести подібний аналіз і отримати:

$$\begin{aligned} \sigma_{\omega j} &= \sigma_{0j} \left[\frac{\tau_{p\omega j} - v_{0j} \cdot \tau_{E\omega j}}{\tau_{p0j} - v_{0j} \cdot \tau_{E0j}} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(\frac{\tau_{p\omega j}}{\tau_{p0j}} - \frac{b_{i0} b_{j0}}{1 + i\omega\tau_m} \cdot \frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e} \right) \right] \equiv \\ &\equiv en_{0j} \mu_{0j} F_j(\omega) \end{aligned} \quad (38)$$

Результуюча високочастотна провідність, нормована на її статичне значення, може бути знайдена усередненням

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma_0} = \frac{b_{0i} \mu_{0i} F_i(\omega) + b_{0j} \mu_{0j} F_j(\omega)}{b_{0i} \mu_{0i} + b_{0j} \mu_{0j}}. \quad (39)$$

За необхідності використання тридолинної моделі зонної структури усереднення проводиться по всіх долинах

$$\frac{\sigma_{\omega}}{\sigma_0} = \sum_{i=\Gamma, L, X} b_{0i} \mu_{0i} F_i(\omega) / \sum_{i=\Gamma, L, X} b_{0i} \mu_{0i}. \quad (40)$$



Функції $F_i(\omega)$ у такому випадку мають включати доданки, які враховують міждолинні переходи ще в одну долину.

В останніх виразах введено високочастотні часи релаксації імпульсу $\tau_{p\omega} = \tau_{p0} / (1 + i\omega\tau_{p0})$ та енергії $\tau_{E\omega} = \tau_{E0} / (1 + i\omega\tau_{E0})$. Саме вони разом з часом міждолинної релаксації визначають комплексний характер провідності, що проявляється на високих частотах. Частотна залежність σ_ω визначається множниками типу $(1 + i\omega\tau)^{-1}$, що включають три часові константи τ_p, τ_E, τ_M .

Подальший аналіз можна спростити, обираючи деякі припущення. По-перше, буває доцільним обрати пріоритетну долину, зазвичай, нижчу, яка за слабого електричного поля найбільш заселена електронами. По-друге, можна обмежитись режимом насичення дрейфової швидкості у цій долині, бо саме для такого режиму актуальні частотні властивості напівпровідника. Аналіз значно спрощується, якщо обмежитись найбільш повільним релаксаційним процесом. Знехтувавши інерційністю міждолинних переходів ($\omega\tau_M \ll 1$) та запізнюванням зіткнень ($\omega\tau_p \ll 1$), оскільки з усіх часів релаксації найчастіше найбільше значення має час релаксації енергії τ_E .

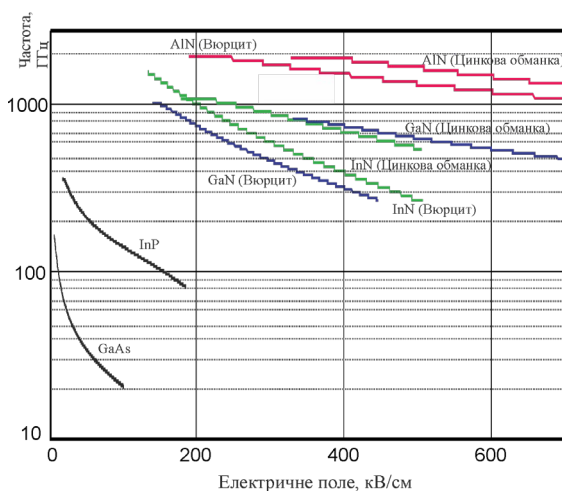


Рис 1. Межа існування від'ємної динамічної провідності для III-нітридів GaN, InN та AlN. Класичні GaAs та InP наведені для порівняння.

За таких припущень з умови $\text{Re}(\sigma_\omega) = 0$, яка і відповідає граничній частоті, для якої зникає від'ємна динамічна провідність, легко одержати

$$\omega_m \tau_{E0} = \sqrt{b_{i0} b_{j0} \Delta_{ji} / k_B T_e}. \quad (41)$$

За напруженості поля, коли заселеності верхньої і нижньої долини однакові й значення від'ємної динамічної провідності максимальне, останній вираз спрощується і межа існування ВДП

$$f_m = \frac{1}{4\pi\tau_{E0}} \sqrt{\frac{\Delta_{ji}}{k_B T_e}} \quad (42)$$

визначається часом релаксації енергії і відносною міждолинною відстанню.

На рис 1 подано отримані залежності відсічки від'ємної динамічної провідності для III-нітридів GaN, InN та AlN [4]. Класичні GaAs та InP наведені для порівняння.

Найбільш цікавими для аналізу частоти відсічки від'ємної динамічної провідності для III нітридів є три результати:

- GaN з гексагональною структурою решітки демонструє граничні частоти нижче InN з меншою шириною забороненої зони;
- в області полів порядку 200 кВ/см обидва типи кристалів нітриду індію мають порівнянні частоти відсічки;
- нітрид алюмінію по всьому діапазону сильних полів демонструє значення частоти відсічення, що перевищує інші матеріали в найбільш сприятливих умовах.

Підтримуючи практичну застосовність наведеного вище підходу [13], ми пропонуємо розглянути додатковий підхід [8].

Зроблені припущення можуть бути не зовсім коректними для деяких напівпровідників, у тому числі з невеликою міждолинною відстанню. Частотні властивості матеріалу можуть бути визначені через реакцію дрейфової швидкості носіїв на імпульсну дію електричного поля. Метод базується на вирішенні системи диференціальних рівнянь, що складаються з рівнянь релаксації для збереження імпульсу, енергії та концентрації носіїв на основі часів релаксації для різних типів розсіювання [14]. На відміну від традиційного використання рівняння загального енергетичного балансу, тут використовується рівняння електронної температури, яке отримано внаслідок розділу сумарної енергії на дрейфові та хаотичні компоненти.

Запропонований новий метод полягає в аналізі Фур'є-спектру імпульсної реакції швидкості дрейфу носіїв у напівпровіднику, оцінці частотної межі і порівнянні з межами існування від'ємної динамічної провідності [13]. Строго кажучи, тестовим імпульсом має бути δ -подібний імпульс напруженості електричного поля, але для визначення граничних верхніх частот ситуація спрощується. Враховуючи явище сплеску швидкості дрейфу, найбільш високочастотні Фур'є-компоненти проявляються на передньому фронті перехідного процесу.

Аналіз поведінки електронного колективу в імпульсному електричному полі проведено на основі розв'язку системи релаксаційних рівнянь для імпульсу

$$d(n_i \vec{p}_i) / dt + en_i \vec{\mathcal{E}} = -n_i \vec{p}_i / \tau_p, \quad (43)$$

що з логічним продовженням (21); енергії

$$d(n_i E_i) / dt - en_i \vec{v}_i \vec{\mathcal{E}} = n_i (E - E_0) / \tau_E \quad (44)$$

яке отримано з (29), концентрації

$$\frac{dn_i}{dt} = -\frac{n_i}{\tau_{ij}} + \frac{n_j}{\tau_{ji}} \quad (45)$$

та електронної температури

$$\frac{dT_e}{dt} = -\frac{T_e - T_0}{\tau_E(T_e)} + \frac{m^* \mu^2(T_e) \mathcal{E}^2}{\tau_E(T_e) 3k_B} \left(\frac{2\tau_E(T_e)}{\tau_p(T_e)} - 1 \right). \quad (46)$$

Часи релаксації визначались з аналітичних співвідношень для різних видів розсіювання через електронну температуру з (34)

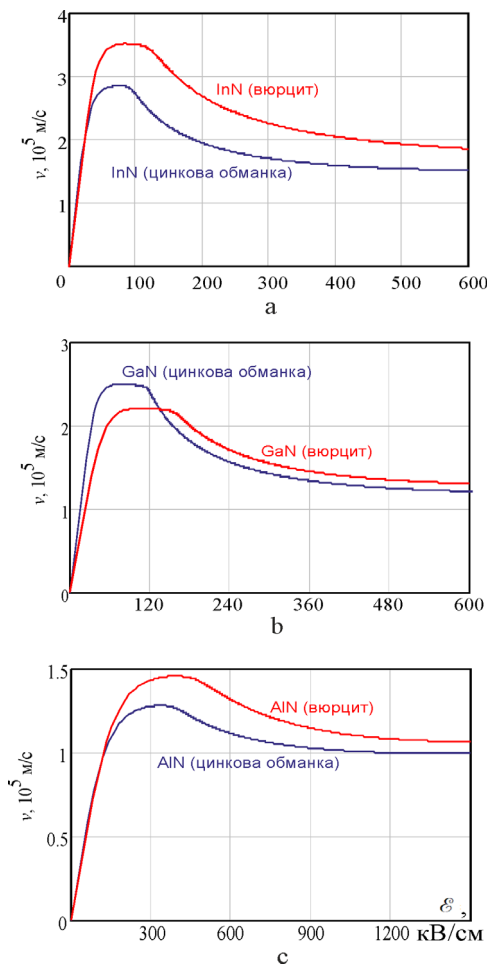


Рис 2. Поле-швидкісні характеристики III-нітрідів InN (а), GaN (б) та AlN (в) з кристалічними структурами типу вюрцити чи цинкової обманки.

За потреби моделювання імпульсних характеристик і відповідне знаходження Фур'є-спектру можна провести і на основі тридолинної моделі.

III. ПАРАМЕТРИ МОДЕЛЮВАННЯ

Для вибору найбільш характерних і значущих напруженостей електричного поля використовуємо аналіз поле-швидкісних характеристик (рис 2) у порядку збільшення ширини забороненої зони.

Має сенс визначити імпульсну характеристику швидкості дрейфу носіїв в III-нітридах не для великої кількості різних полів, а для найбільш типових і особливих за фізичними процесами в матеріалі. Головними є області стрімкого зростання швидкості дрейфу і моменти включення механізмів окремих механізмів розсіювання, зокрема міждолинного.

У рамках поточних досліджень і масштабів моделювання, ми обмежилися розглядом до шести різних значень полів для кожного матеріалу, що достатньо для виявлення тенденцій без надмірного перевантаження відображення результатів та складності розрахунків. Однак необхідно враховувати, що всі три III-нітриди мають дві форми структури решітки, такі як кубічна (цинкова обманка) та гексагональна (вюрцит). Структура решітки значно впливає на частотні властивості. Це вимагає окремого моделювання для кожного типу кристалів. Зазначимо, що гіпотеза про відмінності частот відсічки різних форм структурної решітки була успішно підтверджена далі.

Аналіз поле-швидкісних характеристик для нітриду галію та нітриду індію як гексагонального (вюрцит), так і кубічного (цинкова обманка) дозволяє зупинитися на напруженнях електричного поля 20, 50, 150, 300, 500 і 600 кВ/см.

Однак поле-швидкісна характеристика для нітриду алюмінію переконливо демонструє нам значно більші поля, які можна вважати сильними для цього напівпровідника. Ми пропонуємо для моделювання імпульсних напруженостей електричні поля 150, 300, 500, 600, 1000 і 1500 кВ/см.

Однотимчасне використання чотирьох ідентичних значень (150, 300, 500, 600 кВ/см) дозволить більш релевантно порівнювати результати для всіх III-нітрідів.

IV. МОДЕЛЮВАННЯ

Необхідно зазначити, що в загальному випадку рівняння збереження містять повну похідну за часом від функцій координат і часу $d/dt = \partial/\partial t + \vec{v}\partial/\partial \vec{r}$, яка включає як частинну похідну за часом, так і координатну частинну похідну. Це дозволяє розглядати, як крайні, два типи задач моделювання. По-перше, динамічний аналіз дрейфових процесів у полі, змінному в часі, але просторово однорідному $d/dt = \partial/\partial t$. По-друге, аналіз дрейфу у статичному полі, але просторово неоднорідному, у такому разі у вихідних рівняннях треба обирати $d/dt = \vec{v}\partial/\partial \vec{r}$. У першому випадку можна досліджувати імпульсні характеристики, пов'язані зі «сплеском» швидкості, другий дозволяє аналізувати «балістичний» рух електронів.

Для доведення можливості використання моделі достатньо розглянути «одновимірний» випадок, коли електрони у матеріалі під час дрейфу вздовж координати x потрапляють у точці $x=0$ у сильне статичне поле.



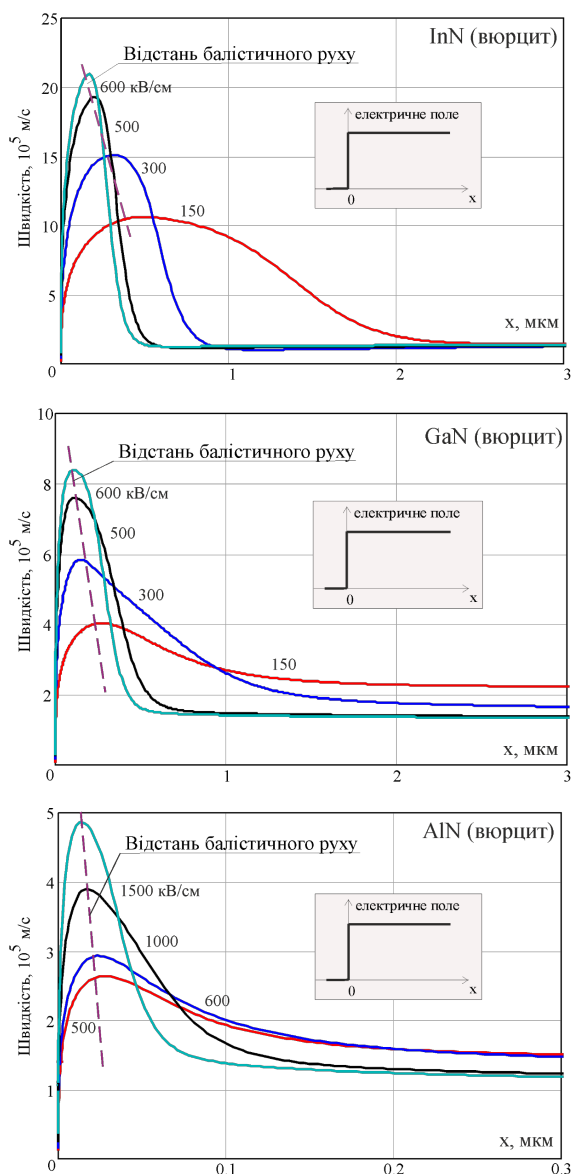


Рис 3. Відстань балістичного руху у просторово змінному імпульсному електричному полі

Розрахуємо поведінку InN, GaN та AlN з кристалом типу вюрцит за напруженості електричного поля (150, 300, 500, 600) для перших двох та (500, 600, 1000, 1500) кВ/см для нітриду алюмінію.

Результати наведено на рис. 3. Із графіків видно, що після вльоту електрона у простір сильного поля спостерігається балістичний рух, тобто рух без розсіювання, подібний до руху у вакуумі. Він триває порядку 0,1 пс, за цей час електрон встигає пролетіти відстань у десяті долі мікрметра (близько довжини вільного пробігу) і прискоритися до 10^5 м/с. Після цього, як і в динамічному випадку, в результаті зіткнень, що починаються, підвищується електронна температура та відбуваються переходи до верхньої долини. Характерний час релаксації зменшується на порядок і швидкість релаксує до значень, що відповідають рухливості у сильному полі.

Пряма пропорційність густини струму швидкості дрейфу $j = env$ дозволяє вважати, що отримані Фур'є-спектри для імпульсних реакцій швидкості у відносних одиницях відповідають спектральній густині струму, а їх частотна залежність дозволяє знайти граничні частоти, за яких «зникає» провідність матеріалу, для різних умов моделювання.

Заселеність носіями долин дає змогу усереднювати часи релаксації енергії та імпульсу електронів, а також їх ефективну масу по кожній долині. Залежність заселення від часу враховується через часи релаксації міждолинних переходів [14].

Система диференціальних рівнянь (43), (44) та популяції долин у дводинному наближенні отримана так само, як і в [8].

Система диференціальних рівнянь була вирішена методом Рунге-Кутти четвертого порядку.

Випробувальний імпульс має бути δ -подібним імпульсом напруженості електричного поля, але ситуація спрощується для визначення верхньої межі частоти. Найбільш високочастотні компоненти Фур'є визначаються переднім фронтом перехідного процесу через явище перевищення швидкості дрейфу («сплеск», *overshoot*) [15].

Це дозволяє використовувати прямокутний імпульс.

Рішення системи для різних значень квадратного імпульсу напруженості електричного поля показано на Рис 4, Рис 6 і Рис 8.

У проведеному аналізі перевищення швидкості дрейфу спостерігалось протягом тривалості імпульсів до 0,2 пікосекунд. Гарне узгодження з [5], [8] спостерігалось на характеристиках імпульсної швидкості, як для гексагональних (вюрцит), так і для кубічних (цинкова обманка) решіток III-нітридів.

Швидке перетворення Фур'є з 2048 точками відбору проводилося з отриманими вище імпульсними відгуками.

Спектри імпульсу швидкості показані на Рис 5 для гексагональних (вюрцит), так і для кубічних (цинкова обманка) решіток нітриду індію.

Відповідно, Рис 7 і Рис 9 демонструють спектри імпульсів швидкості для гексагональних (вюрцит), так і для кубічних (цинкова обманка) решіток нітриду галію і нітриду алюмінію.

Ми пропонуємо провести якісний аналіз графіків спектральної густини в декількох напрямках.

Спостереження та висновки про криві спектральної густини порівняно з [8] можуть бути додатково узагальнені та запропоновано новий підхід до вибору критерію обмеження спектру. Узагальнення стає можливим завдяки одночасному спостереженню всіх III-нітридів одним методом за єдиною моделлю.

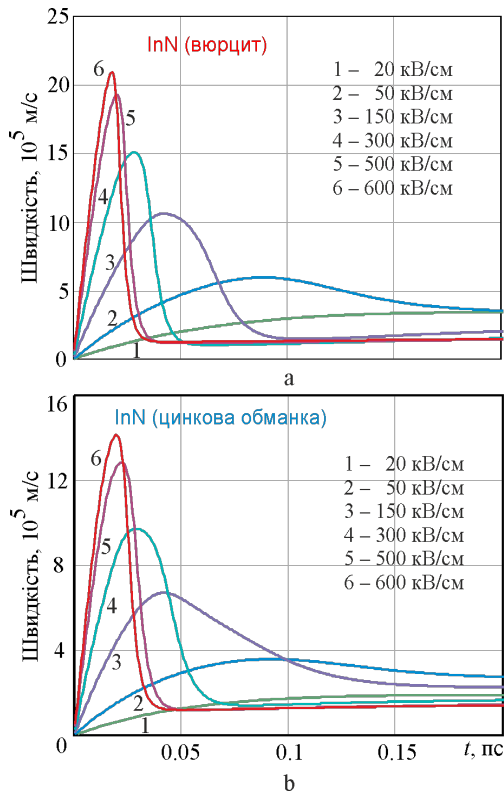


Рис 4 Імпульсні реакції швидкості дрейфу у сполуках InN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (b).

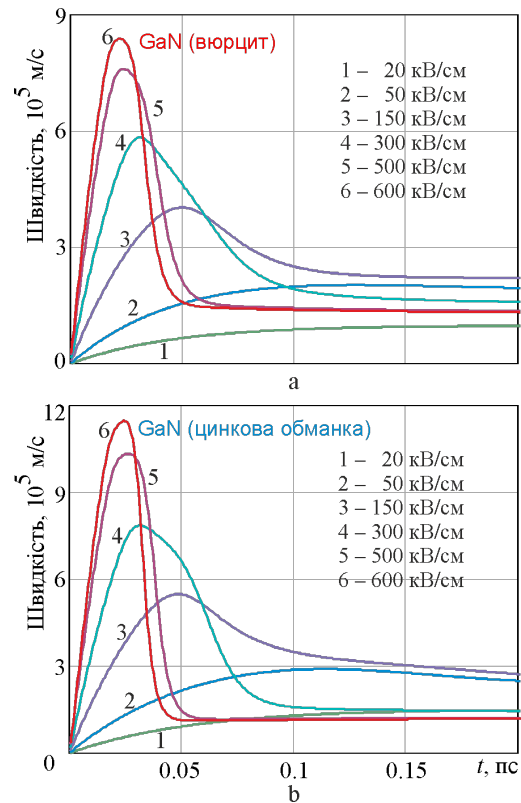


Рис 6. Імпульсні реакції швидкості дрейфу у сполуках GaN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (b).

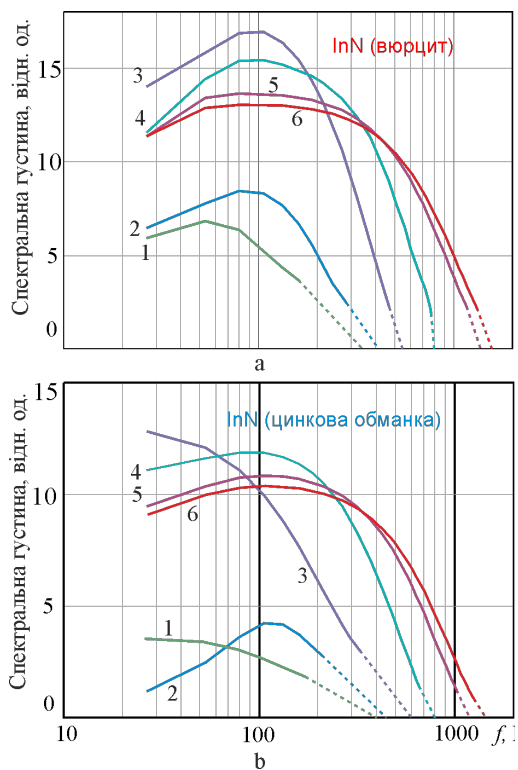


Рис 5 Спектральні характеристики швидкості дрейфу у сполуках InN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (b).

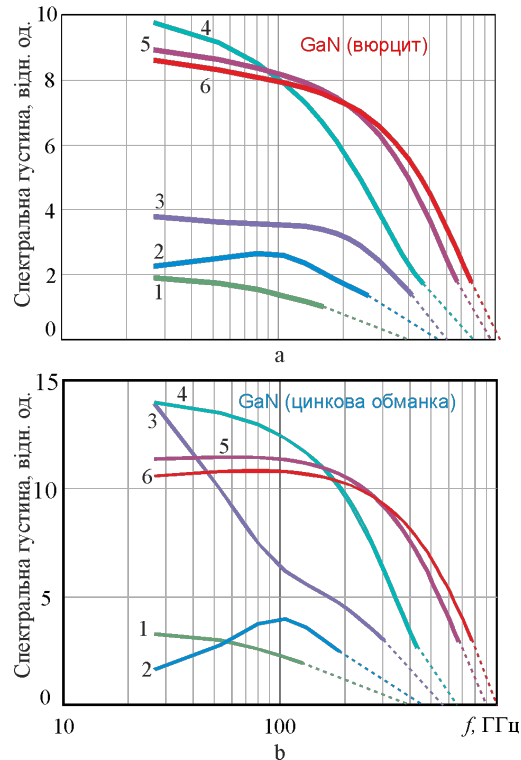


Рис 7. Спектральні характеристики швидкості дрейфу у сполуках GaN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (b).

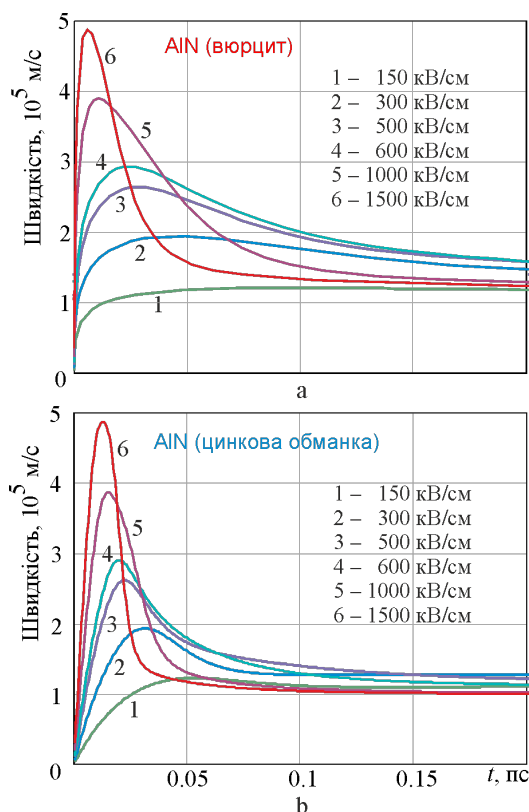


Рис 8. Імпульсні реакції швидкості дрейфу у сполуках AlN. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (б).

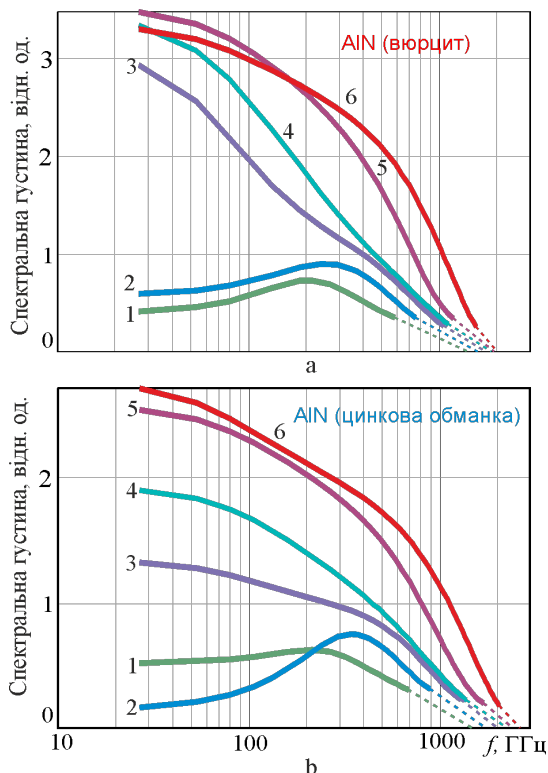


Рис 9. Спектральні характеристики швидкості дрейфу у сполуках AlN для різних значень амплітуди електричного поля. Кристалічні структури типу вюрцит (а) та цинкова обманка (б).

По-перше, порівнюючи результати моделювання за різних значень напруженості електричного поля, можна побачити кореляцію між відповідною ділянкою на поле-швидкісній характеристиці та формою графіка спектральної густини. Ділянки з прямо пропорційною (омічною) залежністю швидкості дрейфу від поля характеризуються кривими спектральної густини з сильно вираженими максимумами. Відповідно для спадної ділянки характерне монотонне зростання спектральної густини зі зменшенням частоти. Це явище неоднаково виражене для різних матеріалів у полях різної напруженості. Для InN практично для всіх кривих існує максимум, але криві для кубічних і для гексагональних кристалів для значень, більших 100 кВ/см, помітно різняться за формою. Однак для GaN явище спостерігається до 100 кВ/см для кубічних і, практично, до 150 кВ/см для кристалів типу вюрцит. Відповідно, для AlN це до 500 кВ/см і до 600 кВ/см.

Оскільки різним ділянкам поле-швидкісної характеристики властиве різне переважання тих чи інших видів розсіювання, то на перший погляд здається дивним вплив механізму розсіювання на спектральні властивості. Але, зважаючи на те, що кожен вид розсіювання має свій час релаксації і відповідно свою частоту зіткнень, неважко зрозуміти, що така кореляція можлива.

По-друге, типовою формою цих кривих для сильних полів є практично постійні спектральні щільності в низькочастотній частині і її нахил для високих частот. Для визначення граничних частот у цих умовах необхідно вибрати додаткові критерії або методи спрощення для обмеження спектру. Запропоновано використовувати лінійну апроксимацію нахилу у високочастотній області. Точку перетину апроксимуючої частини з віссю абсцис можна розглядати як оцінку нижньої частоти межі матеріалу для вибраних значень полів. Така оцінка здається нам доцільним спрощенням, і на відміну від нашого підходу [8], не вимагає порівняння з максимальною амплітудою спектральної щільності. Тобто цей критерій застосуємо до всіх спектральних характеристик, як з максимумами, так і з відносно постійними спектрами.

Ці лінійні наближення наведено штриховими лініями на рис 5, рис 7 та рис 9. Значення, на яких ми отримали перетин з віссю частот, зібрані разом і показані в Табл. 1

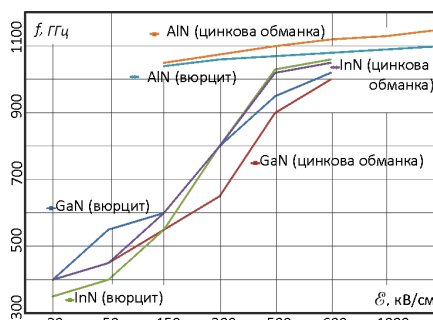


Рис 10. Максимальні частоти GaN, AlN та InN.

ТАБЛ. 1. МАКСИМАЛЬНІ ЧАСТОТИ ІІІ-НІТРИДІВ ЗА РІЗНИХ ЗНАЧЕННЯХ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ.

f, ГГц						E, кВ/см
InN (цo)	InN (вю)	GaN (цo)	GaN (вю)	AlN (цo)	AlN (вю)	
400	350	400	400			20
450	400	450	550			50
600	550	550	600	1050	1040	150
800	800	650	800	1075	1060	300
1020	1030	900	950	1100	1070	500
1050	1060	1000	1020	1120	1080	600
				1130	1090	1000
				1150	1100	1500

Однак для більш прямого та зрозумілого порівняння з рис 1, а саме з частотою існування від'ємної динамічної провідності, пропонується розглянути Рис 10.

ВИСНОВКИ

Запропонований удосконалений метод [8] для оцінки частотних граничних властивостей дозволяє забезпечити якісне порівняння різних багатодолинних напівпровідникових матеріалів. Це також можливо для частот, які набагато нижчі за граничні для існування від'ємної динамічної провідності. Метод найкраще працює, коли спостерігається перевищення швидкості дрейфу. На прикладі ІІІ-нітридів ефективність методу продемонстрована для різної ширини забороненої зони, типів кристалів і широкого спектра полів.

Оптимізація і прискорення попереднього відбору матеріалу за заданими параметрами можлива завдяки аналітичності та відносної дешевизни способу. Альтернативою є виконання розрахунків на основі методу Монте-Карло з надмірними даними або дорогими та екологічно небезпечними експериментами на місці на початковому етапі проектування реальних напівпровідникових приладів.

Для всього діапазону полів, найвищі значення частот відсічки продемонстровано AlN, і ми рекомендуємо зосередитися на подальших дослідженнях та практичній реалізації пристроїв, що використовують цей матеріал.

Запропонована й розглянута аналітична модель може служити підтвердженням перспектив подальших досліджень і використання ІІІ нітридів з розрахунковим відсічки у височастотній області близько тисячі гігерц.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- [1] B. E. Foutz, S. K. O'Leary, M. S. Shur, L.F. Eastman, "Transient electron transport in wurtzite GaN, InN, and AlN," *J. of Appl. Phys.*, vol. 85, no. 11, pp. 7727-7734, 1999. DOI: [10.1109/T-ED.1970.16921](https://doi.org/10.1109/T-ED.1970.16921)
- [2] Zhe Chuan Feng, *III-Nitride Semiconductor Materials*, Imperial College Press and distributed by World Scientific Publishing Co., 2006. DOI: [10.1142/p437](https://doi.org/10.1142/p437)
- [3] R. Khokni ta D. Istvud, *Chislennoye modelirovaniye metodom chastits [Particle Numerical Modeling]*, M.: Mir, 1987, p. 640.
- [4] V. Moskaliuk, V. Timofeev and A. Feday, *Ultra-high-speed electronic devices*, Saarbrucken, Germany: LAP LAMBERT Academic Publishing, 2014.
- [5] Sadao Adachi, *Properties of Semiconductor Alloys: Group -IV, III - V, II - VI Semiconductors*, West Sussex, United Kingdom: John Wiley & Sons Ltd, 2009, p. 400. DOI: [10.1002/9780470744383](https://doi.org/10.1002/9780470744383)
- [6] O. Bokula i E. Prokhorov, «*Chastotnyye svoystva mezhdolinnogo perenosu v nitride galliya [Frequency properties of intervalley transport in gallium nitride]*», *Tekhnika i pribory SVCH*, № 1, pp. 24-28, 2011. URL: http://www.tkea.com.ua/svc/2011/1_2011/st_07.htm
- [7] K. Zeyeger, *Fizika poluprovodnikov [Semiconductor Physics]*: Per. s angl. R. Brezisa, A. Matulenisa, A. Tetervova, M.: Mir, 1977, p. 616.
- [8] K. Kulikov, I. Baida, V. Moskaliuk and V. Timofeyev, "Conductance Cutoff of A3B5 Nitrides at High-Frequency Region," in *2018 IEEE 38th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO)*, pp. 101-105., 2018. DOI: [10.1109/ELNANO.2018.8477497](https://doi.org/10.1109/ELNANO.2018.8477497)
- [9] V. M. Ivashchenko ta V. V. Mitin, *Modelirovaniye kineticheskikh yavleniy v poluprovodnikakh. Metod Monte-Karlo [Modeling of kinetic phenomena in semiconductors. Monte Carlo Method]*, Kiyev: Naukova dumka, 1990, p. 192.
- [10] M. S. Shur, *GaAs devices and circuits*, New York, NY: Springer Science & Business Media, 1987. DOI: [10.1007/978-1-4899-1989-2](https://doi.org/10.1007/978-1-4899-1989-2)
- [11] V. Moskalyuk, YU. Sinekop ta R. Kassing, *Fizika elektronnykh protsessov. Chast' I. Elektronnyye sostoyaniya: Uchebnoye posobiye [Physics of electronic processes. Part I. Electronic states: Textbook]*, Kiyev: UkrINTEI, 2001, p. 148.
- [12] E. D. Prokhorov, N. I. Beletskiy, *Poluprovodnikovyye materialy dlya priborov s mezhdolinnym perenosom elektronov [Semiconductor materials for devices with inter-valley electron transfer]*, Khar'kov: Vysshaya shkola, 1982, p. 144.
- [13] V. A. Moskalyuk ta K. V. Kulykov, «*Chastotnye parametry nytryda halliya v syl'nykh polyakh [Frequency parameters of gallium nitride in strong fields]*» Kyiv: Visnyk Derzhavnoho universytetu informatsiyno-komunikatsiynykh tekhnolohiy, t. 7, № 3, pp. 306-309, 2009.
- [14] K. V. Kulikov ta V. A. Moskalyuk, «*Vsplek dreifovoy skorosti v nitride galliya [Burst of Drift Speed in Gallium Nitride]*» Kiyev: Elektronika i svyaz', t. 4-5, pp. 28-31, 2009. URL: http://journals.kpi.ua/publications/text/2009_2_28_31.pdf
- [15] K. Blotekjaer, «Transport equations for two-valley semiconductors,» *IEEE Trans. Electron Devices*, т. ED-17(1), pp. 38-47, 1970. DOI: [10.1109/T-ED.1970.16921](https://doi.org/10.1109/T-ED.1970.16921)

Надійшла до редакції 25 травня 2019 р.



УДК 621.382

Высокочастотные свойства GaN, AlN и InN в сильных полях

Куликов^f К. В., ORCID [0000-0001-9743-0047](https://orcid.org/0000-0001-9743-0047)Москалюк^g В. О., к.т.н. проф., ORCID [0000-0002-2753-0744](https://orcid.org/0000-0002-2753-0744)Тимофеев^h В. И., д.т.н. проф., ORCID [0000-0003-0515-1580](https://orcid.org/0000-0003-0515-1580)Кафедра Электронной Инженерии phbme.kpi.ua

Национальный технический университет Украины

"Киевский политехнический институт им. Игоря Сикорского" kpi.ua

Киев, Украина

DOI: [10.20535/2523-4455.2019.24.3.178841](https://doi.org/10.20535/2523-4455.2019.24.3.178841)

Аннотация—В статье предложен метод моделирования и анализа высокочастотных свойств многодолинных полупроводников, в частности GaN, AlN и InN. Модель применена к сверхсовременным, перспективным и актуальным материалам GaN, AlN и InN, которые сейчас известны под обобщающим названием III-нитриды. Метод отличается экономным использованием вычислительных ресурсов без существенных потерь точности и возможностью применения как для динамических задач по времени, так и переменных в пространстве полей.

Предложенный подход базируется на решении системы дифференциальных уравнений, которые известны как релаксационные и получены из кинетического уравнения Больцмана в приближении времени релаксации усреднением по k -пространству. В англоязычной литературе этот метод известен под названием «метод моментов». В отличие от традиционной системы уравнений для концентрации носителей, их импульса и энергии здесь использовано вместо уравнения релаксации энергии уравнение для электронной температуры как меры энергии только хаотического движения. Второе существенное отличие состоит в том, что времена релаксации определяются не как интегральные значения из статических характеристик материала, а через усреднение квантовомеханических скоростей рассеяния, обычно используемых в методе Монте-Карло, для отдельных видов рассеяния. Усреднение производилось по максвелловской функции распределения в приближении электронной температуры, в результате чего учитываются различные механизмы рассеяния носителей через специфические для них времена релаксации. Поскольку используемая система уравнений включает уравнения в частных производных по времени и координатам, она дает возможность исследовать характерные проявления импульсных свойств рассматриваемых материалов, а именно: временной эффект «всплеска» дрейфовой скорости и пространственный «баллистический транспорт» носителей.

Впервые рассматривается использование преобразования Фурье импульсной зависимости дрейфовой скорости носителей для вычисления максимальных присущих полупроводнику частот. Обнаружена связь формы спектральной характеристики скорости дрейфа с преобладающими в данном электрическом поле механизмами рассеяния. Проанализированы свойства III-нитридов в частотной области в сильном электрическом поле и делается сравнение с существующими методами оценки частот отсечки. Показано, что предельные частоты увеличиваются с ростом напряженности электрического поля и составляют сотни гигагерц, а для нитрида алюминия превышают тысячу гигагерц. Это связано, по-видимому, с наибольшими для него междолинными расстояниями и соответственно с ослабленным междолинным рассеянием. Анализ пространственного проявления эффекта всплеска показывает возможность практически бесстолкновительного, баллистического пролета электронов в сильном поле на расстояниях до сотых и десятых долей микрометра.

Библ. 15, рис. 10, табл. 1.

Ключевые слова — III-нитриды; нитрид галлия; нитрид алюминия; нитрид индия; механизмы рассеяния; междолинное рассеяние; времена релаксации; сильное электрическое поле; баллистический транспорт; динамические характеристики; граничная частота



High-Frequency Properties of GaN, AlN and InN in Strong Fields

K. V. Kulikov^f, ORCID [0000-0001-9743-0047](https://orcid.org/0000-0001-9743-0047)

V. O. Moskaliuk^s, PhD Prof., ORCID [0000-0002-2753-0744](https://orcid.org/0000-0002-2753-0744)

V. I. Tymofieiev^s, Dr.Sc.(Eng.) Prof., ORCID [0000-0003-0515-1580](https://orcid.org/0000-0003-0515-1580)

Department of Electronic Engineering phbme.kpi.ua

National Technical University of Ukraine “Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute” kpi.ua

Kyiv, Ukraine

Abstract—The article proposed a method for modeling and analyzing the high-frequency properties of multi-valley semiconductors, in particular, GaN, AlN and InN. The model is applied to state-of-the-art, promising and relevant materials GaN, AlN and InN, which are now known under the generic name III-nitrides. The method is distinguished by the economical use of computational resources without significant loss of accuracy and the possibility of using both for dynamic tasks over time and variables in the space of fields.

The proposed approach is based on solving a system of differential equations, which are known as relaxation equations and are derived from the Boltzmann kinetic equation in the relaxation time approximation by averaging over k-space. In English literature, this method is known as the "method of moments." In contrast to the traditional system of equations for the concentration of carriers, their momentum and energy, here, instead of the energy relaxation equation, the equation for electron temperature is used as a measure of the energy of only chaotic motion. The second significant difference is that the relaxation times are not determined as integral values from the static characteristics of the material, but through averaging the quantum-mechanical scattering rates commonly used in the Monte Carlo method for certain types of scattering. The averaging was performed over the Maxwell distribution function in the electron temperature approximation, as a result of which various mechanisms of carrier scattering through their specific relaxation times are taken into account. Since the system of equations used includes equations in partial derivatives with respect to time and coordinates, it makes it possible to investigate the characteristic manifestations of the impulse properties of the materials under consideration, namely, the time effect of the “overshoot” of drift velocity and the spatial “ballistic transport” of carriers.

For the first time, the use of the Fourier transformation of the impulse dependence of the carrier drift velocity to calculate the maximum frequencies inherent in a semiconductor is considered. A connection was found between the shape of the spectral characteristic of the drift velocity and the scattering mechanisms that prevail in a given electric field. The properties of III-nitrides in the frequency domain in a strong electric field are analyzed and compared with existing methods for estimating cut-off frequencies. It is shown that the limiting frequencies increase with increasing electric field strength and amount to hundreds of gigahertz, and for aluminum nitride it exceeds one thousand gigahertz. This is due, apparently, to the greatest for him inter-valley distances and, accordingly, with a weakened inter-valley scattering. The analysis of the spatial manifestation of the splash effect shows the possibility of an almost collisionless, ballistic flight of electrons in a strong field at distances up to hundredths and tenths of a micrometer.

Ref. 15, fig. 10, tabl. 1.

Keywords — III-nitrides; gallium nitride; aluminum nitride; indium nitride; scattering mechanisms; inter-valley scattering; relaxation times; strong electric field; ballistic transport; dynamic performance; cutoff frequency.