

УДК 621.382

В.А. Москалюк, канд. техн. наук, М.Г. Овчарук

## Оцінка властивостей тринітридів у сильному електричному полі

В данній статтє сделана попытка систематизировать существующие данные о группе тринитридов и проанализировать их поведение в условиях сильного электрического поля. С помощью аналитических выражений для времени релаксации импульса и энергии при разных механизмах рассеяния проведена оценка динамических свойств тринитридных соединений в сильных электрических полях, а также рассчитаны поле-температурная зависимость, функция заселенности долин и поле-скоростная характеристика для нитридов с разной модификацией кристаллической решетки. Результаты расчетов сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными и с расчетами других авторов.

In this article was made an attempt to systematize the existing information about the group of III-nitrides and to analyze their behavior in a strong electric field. By the agency of analytical expressions for momentum and energy relaxation times of different scattering mechanisms were estimated the dynamic properties of III-Nitrides in high-field as well as the field-temperature dependence, valleys occupation function and field-velocity characteristic for nitrides with different crystal lattice modifications. The calculation results were compared to the existing experimental data and estimation of other authors.

### Вступ

Нітридні з'єднання широко використовуються в різних областях мікроелектроніки завдяки своїм винятковим властивостям, які не були виявлені в таких традиційних напівпровідниках як кремній та арсенід галію. Заборонена зона Si і GaAs недостатньо велика для конструювання оптоелектронних приладів у діапазоні коротких хвиль, більш того, прилади на їх основі не можуть бути використані за високих температур. У свою чергу, група III-нітридів, завдяки широкій забороненій зоні може бути використана в пристроях фіолетового, синього і зеленого спектрів випромінювання, а також для високотемпературних транзисторів [1-3]. Вищі робочі значення напруженості електричного поля і підвищена теплопровідність дозволяють сподіватися на

створення широкого спектру НВЧ і КВЧ потужних приладів.

Не дивлячись на те, що на сьогоднішній день спектр використання нітридів досить широкий, весь потенціал даної групи ще не розкритий. Через малу вивченість електронних властивостей тринітридів та відсутність достовірних експериментальних даних сповільнюється процес їх впровадження в інші області техніки.

Нітрид галію, один з найбільш перспективних матеріалів групи III-нітридів, широко використовується в оптоелектронній промисловості (прилади УФ діапазону, у високопотужній і високочастотній техніці). Через низьку чутливість до іонізації GaN знайшов своє застосування як фоточутливий елемент у супутникових системах. Нітрид алюмінію у свою чергу має великий попит у таких оптоелектронних напрямках, як короткохвильові світлодіоди, напівпровідникові лазери і оптичні детектори, а також в області високотемпературних, високопотужних і високочастотних приладів [4]. Нітрид індію, що має малу ширину забороненої зони, використовується у високошвидкісній електроніці. Величезні зусилля докладаються до створення потрібних з'єднань InGaN, AlGaIn, які дозволяють зайняти нішу люмінесцентних приладів від інфрачервоного до ультрафіолетового діапазонів.

Не дивлячись на те, що експериментальному вивченню нітридів третьої групи приділяється останнім часом велика увага [5], дотепер багато характеристик для найбільш перспективних представників даної групи напівпровідників невідомі. Зважаючи на це, виникає необхідність детальніших знань про електричні властивості і параметри нітридів, особливо за умов сильного електричного поля.

### Зонна структура

Група тринітридів (InN, GaN, AlN) на відміну від більшості з'єднань  $A^{III}B^V$ , може кристалізуватися як у решітку кубічного типу (цинкової обманки або сфалериту), так і в гексагональну структуру (типа вюрциту). Для гранцентованих кубічних решіток типу цинкової обманки перша зона Бріллюена має вигляд октаедра з зіріаними вершинами (рис 1 а) Її симетрія дозволяє задавати закон дисперсії лише в межах 1/64 частини зони Бріллюена

У решітках обох типів кожен атом елементу III групи оточений тетраедром з чотирьох атомів азоту і навпаки. З огляду на те, що структура спалеріту, на відміну від алмазу, не має центру симетрії, ця особливість приводить до відмінності властивостей поверхонь  $[111]$  і  $[110]$ , що по-звісно складаються з різнойменних атомів.

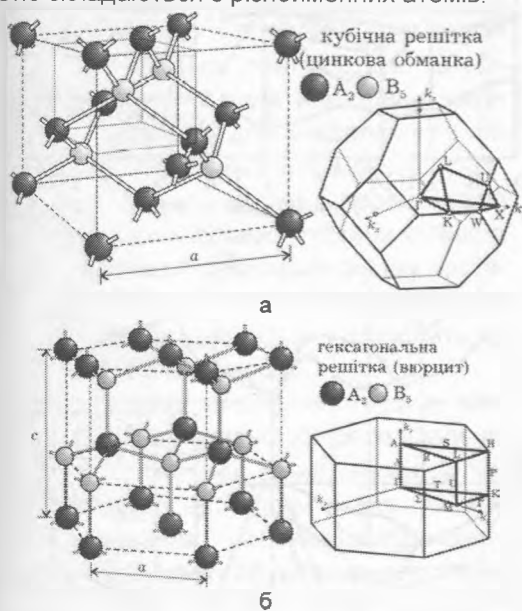


Рис. 1. Структура кубічної (а) і гексагональної (б) кристалічної решітки і форма першої зони Бріллюєна. Виділено мінімальний елемент симетрії

У структурі енергетичних зон тринітридів багато спільного як з атомарними напівпровідниками IV групи (Si, Ge) так і з найбільш популярним представником з'єднань  $A^{III}B^V$  – арсенідом галію. Так, наприклад, характер дисперсійних кривих у валентній зоні тринітридів якісно аналогічний Si, Ge, GaAs. Валентна зона складається з двох підзон, які стикаються при  $k = 0$  і яким відповідають «легкі» і «важкі» дірки, і однієї нижньої зони, утвореної в результаті розщеплення при спінорбітальній взаємодії. Зона провідності як правило складається з декількох підзон з мінімумом в центрі зони Бріллюєна і кристаліграфічних напрямках  $\langle 111 \rangle$ ,  $\langle 100 \rangle$ . Виняток становить кубічний нітрид алюмінію (який є непрямозонним напівпровідником) з мінімумом не в центрі зони Бріллюєна, а в кристаліграфічному напрямі  $\langle 100 \rangle$ , тобто в X – долині [6].

Через погану вивченість тринітридів у науковій літературі немає єдності відносно положення верхніх долин і практично відсутня інформація про значення ефективних мас в деяких модифікаціях матеріалів.

### Результати моделювання

Розглянута в даній статті модель, використовує дводолинне наближення в зоні провідності. Виходячи з того, що у верхніх долинах елект-

ронна температура практично не змінюється і близька до температури кристалічної решітки, а вірогідність міждолинних переходів у верхніх долинах невелика і мало впливає на розраховані характеристики, прийнято спрощення – об'єднання верхніх долин в одну квазідолину, з деякими усередненими параметрами. Дана модель була раніше використана і перевірена на адекватність розрахунків в більш вивчених матеріалах [7].

Для розгляду динамічних властивостей носіїв у тринітридах у сильних електричних полях використано аналітичні вирази для часів релаксації імпульсу і енергії (з урахуванням різних механізмів розсіяння) для нітриду з різними модифікаціями кристалічної решітки. Часи релаксації знаходилися методом усереднення швидкостей розсіювання, тобто як середні для електронного колективу для кожного виду зіткнень [7]. Для даного нітриду характерні домішкові і фононні механізми розсіяння: акустичне, полярне оптичне і міждолинне (причому як між нееквівалентними, так і між еквівалентними долинами). Приклад результатів розрахунку для нітриду алюмінію наведено на рис. 3.

На цих характеристиках виділяються області слабких і сильних полів. Критичним значенням є напруженість поля близько 180 кВ/см (240 кВ/см для гексагонального нітриду алюмінію), за якої стають помітними міждолинні переходи з нижніх долин у верхні. У сильніших полях концентрація електронів у верхніх долинах перевищує концентрацію в нижній через більшу густину станів. Слід зауважити, що заселеність верхніх долин в нітриді алюмінію зростає не так помітно, як в арсеніді галію і нітридах індію і галію. Це пояснюється не такою сильною відмінністю ефективних мас і, відповідно, близькістю значень густини станів у верхніх і нижніх долинах нітриду алюмінію.

Для інших нітридів даної групи картина якісно аналогічна. Відмінність складає менш стрімкий для нітриду алюмінію і більш крутий для нітриду індію характер поле-температурної характеристики. (табл. 1). Для порівняння, в арсеніді галію температура в 4500 К досягається при значенні поля в 100 кВ/см.

Середня швидкість електронів знаходилася як сума швидкостей в окремих долинах з ваговими коефіцієнтами, рівними відповідним заселеностям у функції від напруженості поля. Результати розрахунків поле-швидкісної характеристики для температури кристалічної решітки  $T = 300$  К і за відсутності домішки представлені на рис. 4.

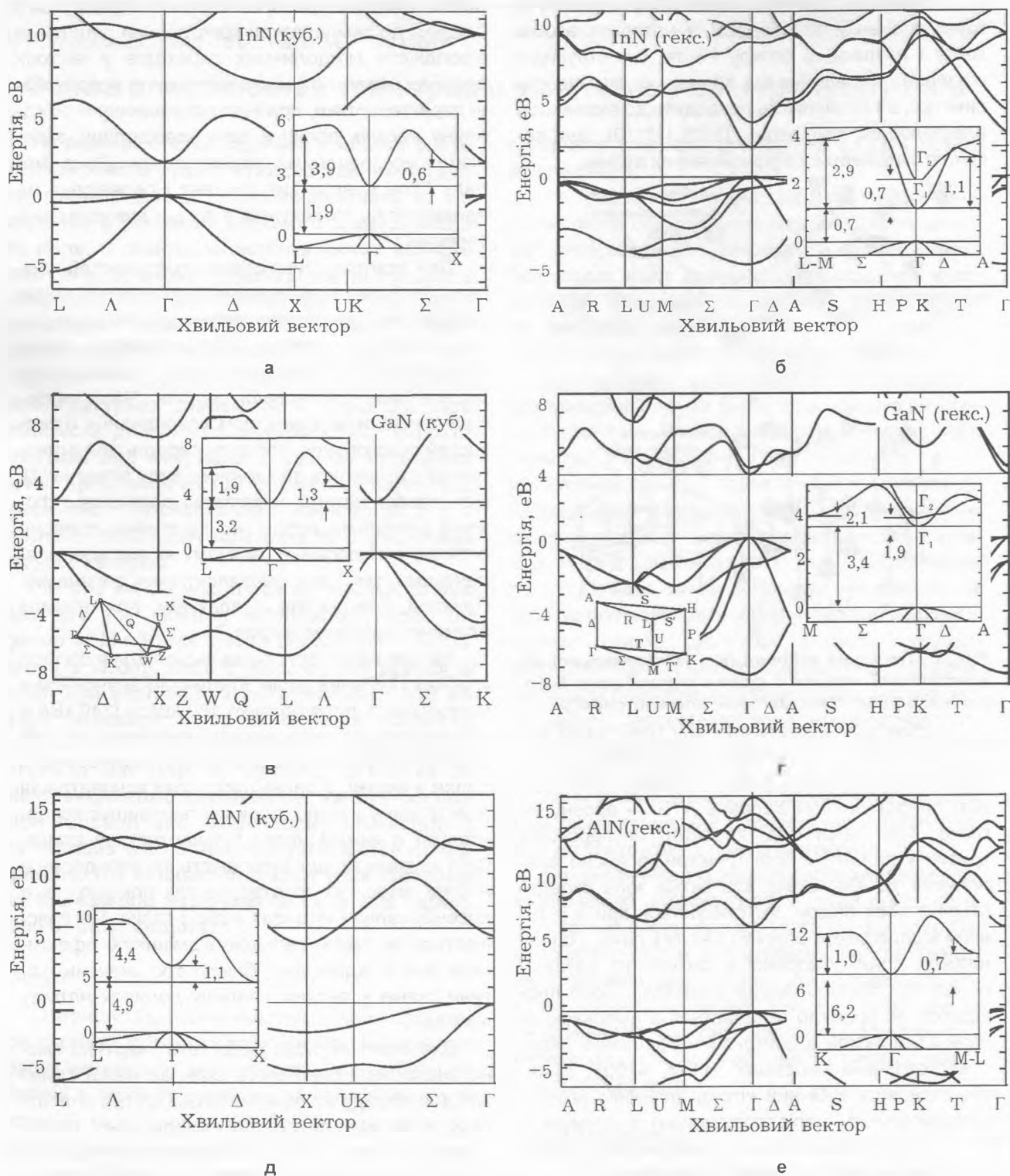


Рис. 2. Фрагменти законів дисперсії для нітриду з кубічною (а, в, д) і гексагональною (б, г, е) структурою кристалічної решітки поблизу краю забороненої зони з використаними розрахунковими параметрами, а також мінімальний елемент симетрії зони Бріллюена з характерними напрямками і точками симетрії

Таблиця 1

	InN		GaN		AlN	
	куб.	гекс.	куб.	гекс.	куб.	гекс.
Напруженість електричного поля, при якій досягається температура 4500 К, кВ/см	220	240	160	210	485	520
Напруженість початку перерозподілу заселенності долин, кВ/см	~85	~150	~130	~210	~145	~280

У слабких електричних полях, коли електрони знаходяться в долині низьких енергій, зростання поле-швидкісної залежності супроводжується падінням рухливості через зростаючу роль полярного оптичного розсіювання. Маючи малу ефективну масу і низьку швидкість розсіювання, електрони легко розігріваються зовнішнім електричним полем, що призводить до швидкого зростання електронної температури. Із збільшенням електричного поля електрони набувають енергії, достатньої для міждолинного переходу. Відбувається збільшення імовірності заповнення станів верхніх долин і перерозподіл електронів за рахунок більшої густини станів в них. Стаючи важчими і втрачаючи велику частину своєї кінетичної енергії, електрони вимушені рухатися з малою швидкістю, що призводить до зниження дрейфової швидкості.

В області сильних електричних полів спостерігається ефект негативної диференціальної рухливості. При досягненні електричним полем критичного значення електрони зазнають міждолинного розсіювання і переважно заселяють верхні долини. Цей ефект обумовлює зростання енергетичних втрат в електронів, що призводить до повільного зростання енергії електронів у цьому діапазоні величин електричного поля. В області сильних полів електрони погано піддаються розігріванню з причини великої ефективної маси і великої енергії, і відбувається насичення швидкості.

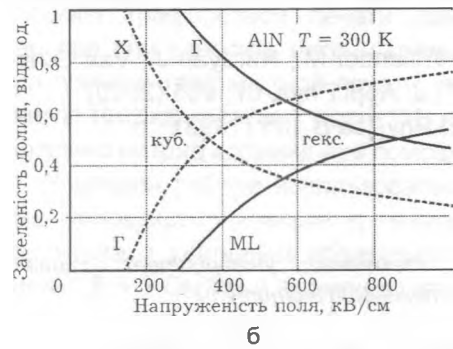
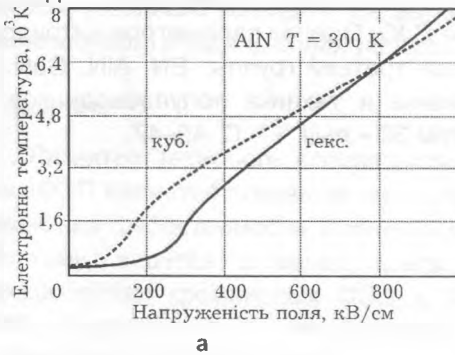


Рис. 3. Поле-температурна характеристика та перерозподіл електронів по долинах для кубічного (штрихова) і гексагонального (суцільна) нітриду алюмінію залежно від електричного поля

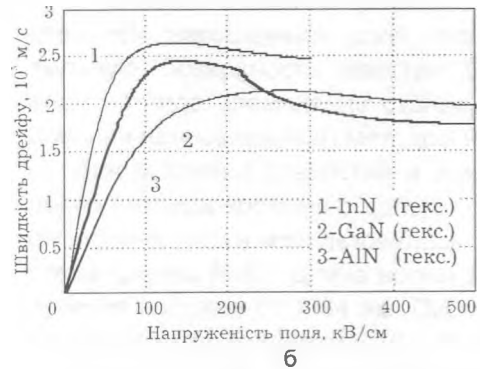
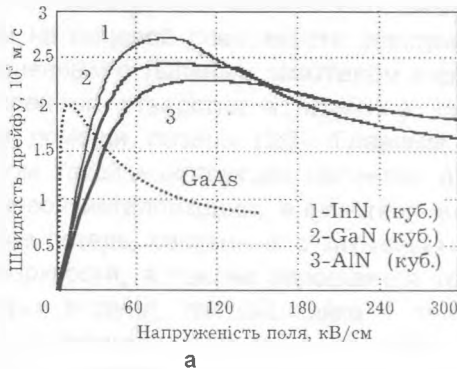


Рис. 4. Поле-швидкісні характеристики для кубічної (а) і гексагональної (б) модифікації кристалічної решітки нітридів. Штрихована лінія – залежність для GaAs, узята з [7]

Для порівняння на рис. 4 представлені результати моделювання для нітриду і арсеніду галію. Нахил залежності, що визначається рухливістю, для GaAs більший, зважаючи на менше значення ефективної маси в нижній долині, але при цьому для нітридів швидкість досягає більшого максимального значення, через більшу енергетичну відстань до верхніх долин, відповідно при більшому значенні критичної напруженості поля. Найбільш істотною відмінністю поле-швидкісної характеристики для нітридів є перехід в режим насичення при значно більших значеннях напруженості електричного поля, що говорить про перевагу використання нітридів у приладах підвищеної потужності. Для наочності основні результати розрахунків характеристик у сильному полі зведені в таблицю 2.

Значення вихідних параметрів матеріалів узяті переважно з [8-11]. Але через їх неоднозначність для моделювання узяті параметри, отримані в результаті підбору для забезпечення задовільної адекватності моделювання.

Слід зазначити, що в довідковій літературі часто зустрічається істотна невизначеність в значеннях деяких констант. Це відноситься перш за все до міждолинних відстаней, акустичного і оптичного деформаційних потенціалів, констант міждолинного зв'язку, а також значень ефективних мас. Тому можна чекати, що при використанні інших значень параметрів результати розрахунків краще збігатимуться з експериментальними.

Таблиця 2

	InN		GaN		AlN	
	куб.	гекс.	куб.	гекс.	куб.	гекс.
Максимальна швидкість, $\cdot 10^5$ м/с	2,72	2,62	2,50	2,55	2,27	2,20
при напруженості електричного поля, кВ/см	82	139	100	120	110	265
Швидкість насичення, $\cdot 10^5$ м/с	1,85	2,44	1,55	1,76	1,62	2,03
при напруженості електричного поля, кВ/см	300	300	400	400	500	500
Максимальна рухливість, м <sup>2</sup> /В с	0,080	0,049	0,072	0,024	0,046	0,022

## Висновки

У даній роботі показана можливість моделювання електричних властивостей нітридів з різними модифікаціями кристалічної решітки за умов сильних електричних полів і визначено набір вихідних параметрів, що забезпечують адекватність моделювання. Розглянуті властивості перенесення носіїв в сильних електричних полях для нітридних з'єднань і проведений порівняльний аналіз різних модифікацій кристалічної решітки тринітридів, а також з найбільш відомим представників даного класу арсенідом галію. Отримані результати дають можливість проаналізувати особливості і дати оцінку використанню нітридів у різних галузях електроніки.

## Література

1. *Orton W., Foxon C.T.*, Rep. Prog. Phys. 61, (1998).
2. *Ponce F.A., Bour D.P.*, Nature. London 386, (1998).
3. *Jain S.C., Willander M., Narayan J., Van Overstraeten R.*, J. Appl. Phys. 87, 965 (2000).
4. *Davis R.F.*, Physica B 185 (1993).
5. Proc. 7th Int. Conf. Silicon Carbide, III-Nitrides and Related Materials (Stockholm, 1997), ed. by G. Pensl, H. Morkoc, B. Monemar and E. Janzen (Trans. Tech., Switzerland, 1998).
6. *Прохоров Э.Д., Белецкий Н.И.* Полупроводниковые материалы для приборов с междолинным переносом электронов. – Харьков.: Вища школа, изд. при Харьк. ун-те, 1982. – 144 с.
7. *Москалюк В.А.* Физика электронных процессов. Часть II. Динамические процессы: Учеб. пособие. – К.: Аверс, 2004. – 186с.
8. *Vurgaftman, I.* Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys/ I. Vurgaftman., J.R Meyer // J. Appl. Phys. – 2001. – Vol. 89, №11. – P. 5815 – 5862.
9. *Vurgaftman, I.* Band parameters for nitrogen-containing semiconductors/ I. Vurgaftman., J.R Meyer // J. Appl. Phys. – 2003. – Vol. 94, №4. P. 3675–3691.
10. Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской Академии Наук, URL: <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/>
11. *Давыдов С.Ю.* Оценки параметров нитридов элементов третьей группы: BN, AlN, GaN и InN// Физика и техника полупроводников – 2002 – том 36 – вып. 1.– С. 45–47.