

УДК 621.382.3

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

## Электрические свойства нитрида алюминия в сильном поле

С использованием аналитических выражений для времени релаксации при различных механизмах рассеяния рассмотрены свойства переноса носителей заряда в сильном электрическом поле для нитрида алюминия с решеткой типа «цинковой обманки». Рассчитаны температурная зависимость слабополевой подвижности, поле-скоростная и поле-температурная характеристики и функция заселенности долин в сильном поле.

Using the analytical expressions for relaxation times of different scattering mechanisms properties of charge carriers' transport for zincblende aluminum nitride in the high field region were described. Also temperature dependence of low field mobility, field-velocity and field-temperature characteristics as well as the occupation function of valleys in the high electric field were calculated.

### Введение

Нитридные полупроводники вызывают большой интерес в последние несколько лет благодаря своим исключительным свойствам, которые не были обнаружены в традиционных полупроводниках, таких как кремний и арсенид галлия, запрещенная зона которых недостаточно велика для конструирования оптоэлектронных приборов коротковолнового диапазона спектра. Более того, приборы на основе арсенида галлия не могут быть использованы при высоких температурах. Группа III-нитридов, благодаря широкой запрещенной зоне может быть использована в устройствах фиолетового, синего и зеленого спектров излучения и для высокотемпературных транзисторов [1-3]. Более высокие рабочие значения напряженности электрического поля и повышенная теплопроводность позволяют надеяться на создание широкого спектра СВЧ и КВЧ мощных приборов.

Большинство соединений нитрида алюминия, который в литературе описывается как непалиморфный, кристаллизуются при нормальных условиях в гексагональную структуру кристаллической решетки типа «вюрцит». Но при определенных условиях возможно формирование

метастабильной кубической модификации кристаллической решетки типа цинковой обманки [4]. Из-за химической активности нитрида алюминия для выращивания качественного кристалла требуется материал высокой степени чистоты и бескислородная среда. Поэтому в литературе не были описаны экспериментальные методы выращивания кристалла AlN типа цинковой обманки, а большинство исследований в этой области были сконцентрированы на GaN. Большой интерес нитрид алюминия вызвал недавно благодаря огромному спросу в оптоэлектронных направлениях, таких как коротковолновые светодиоды, полупроводниковые лазеры и оптические детекторы, а также в области высокотемпературных, высокоомощных и высокочастотных приборов [5]. Ввиду этого возникает необходимость более детальных знаний об электрических свойствах и параметрах нитрида алюминия, особенно в условиях сильного поля.

Целью данной работы является исследование на основе анализа механизмов рассеяния и расчета релаксационных параметров электронных свойствах нитрида алюминия в сильном электрическом поле, знание которых необходимо при моделировании электронных компонентов различной сложности.

### Зонная структура и механизмы рассеяния

В данной статье рассматривается кубическая модификация кристаллической решетки нитрида алюминия типа «цинковой обманки» или сфалерита. Следует отметить, что нитрид алюминия считается наиболее широкозонным непрямозонным полупроводником. Рассматриваемая модель включает трехдолинную структуру зоны проводимости в точках симметрии зоны Бриллюэна  $\Gamma$ , L и X (рис. 1). Минимум зоны проводимости находится в точке X со значением энергии запрещенной зоны, равной 4,3 эВ [6], следующей подзоне соответствует центральная  $\Gamma$ -долина (5,4 эВ). По поводу энергетического положения более высоких W- и L-долин в существующей литературе имеются значительные расхождения. Однако их высокое расположение над дном зоны проводимости позволяет предполагать малую вероятность рассеяния в эти долины из  $\Gamma$ - и X-долин.

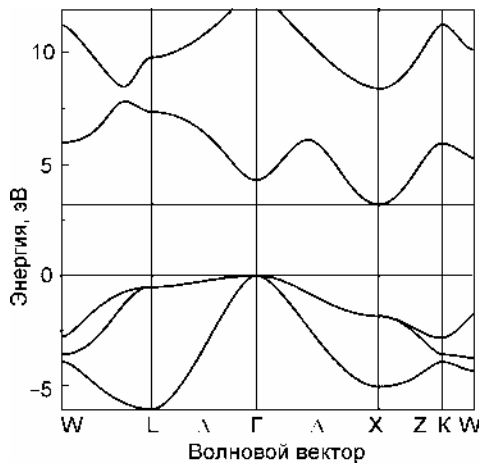


Рис. 1. Дисперсионные кривые для кубического нитрида алюминия

Анализируя теоретические результаты различных источников [7-10], принимаем, что центральной  $\Gamma$ -долине соответствует значение изотропной эффективной массы  $m_{\Gamma}^* = 0,25m$ . Анизотропия эффективной массы в нитриде алюминия соответствует  $m_l^*/m_t^* = 0,53/0,31$ . При этом скалярное значение омической эффективной массы равно  $m_c^* = 3m_t^*m_l^*/(2m_l^* + m_t^*) \approx 0,36m$ , а эффективная масса плотности состояний электронов в зоне проводимости  $m_d^* = 4^{2/3}(m_t^{*2}m_l^*)^{1/3} \approx 0,93m$ .

Для такой зонной структуры характерны фоновые механизмы рассеяния: акустическое и полярное оптическое, а также междолинное рассеивание между неэквивалентными  $\Gamma$ - и  $X$ -долинами и рассеивание между эквивалентными  $X$ -долинами. Время релаксации импульса при различных видах рассеяния рассчитывалось по методике, описанной в [11, 12]. Время релаксации энергии находилось через коэффициент упругости соударений с участием оптических и междолинных фононов.

Примесное рассеяние, являясь упругим, не изменяет энергии электронов, а следовательно не участвует в междолинных переходах и релаксации энергии. При этом, эффективно хаотизируя движение носителей, оно вносит существенный (особенно при низких температурах, когда роль фононов невелика) вклад в релаксацию импульса. Кроме того, в сильном поле примесное рассеяние становится несущественным. Для акустического рассеяния характерна практически линейная зависимость скорости рассеяния от температуры решетки, но, тем не менее, оно преобладает при низких температурах, малых концентрациях примеси и в слабых полях, когда другие виды несущественны. Акусти-

ческое рассеяние является практически упругим и его вклад в релаксацию энергии нужно учитывать лишь при отсутствии конкурирующих видов.

Полярное оптическое и неэквивалентное междолинное рассеяния являются существенно неупругими, поскольку в каждом акте рассеяния поглощается или возбуждается оптический или междолинный фонон с энергией, близкой к энергии оптических фононов. Расчет времени релаксации импульса между эквивалентными долинами производится так же, как и для рассеяния на оптическом деформационном потенциале [12], с соответствующей заменой обозначений.

Междолинное рассеяние, проявляющее себя в сильном электрическом поле, приводит к перераспределению электронов между долинами. Степень заселенности долин определяются через концентрационное время релаксации, равное времени релаксации импульса при неэквивалентном междолинном рассеянии.

При этих расчетах необходимо учитывать, что в выражения для времен релаксации входит эффективная масса плотности состояний. Для расчета подвижности  $\mu = e\tau_p/m_c^*$  необходимо использовать омическую эффективную массу. Результирующее время релаксации в каждой долине может быть найдено через суммирование соответствующих обратных времен для каждого вида рассеяния, а среднее по долинам – таким же образом, но с весовыми коэффициентами, равными заселенностям [12].

## Результаты моделирования

Результаты расчета по указанным соотношениям температурной зависимости подвижности в слабом электрическом поле ( $T = T_e$ ) при разных значениях концентрации примеси приведены на рис. 2.

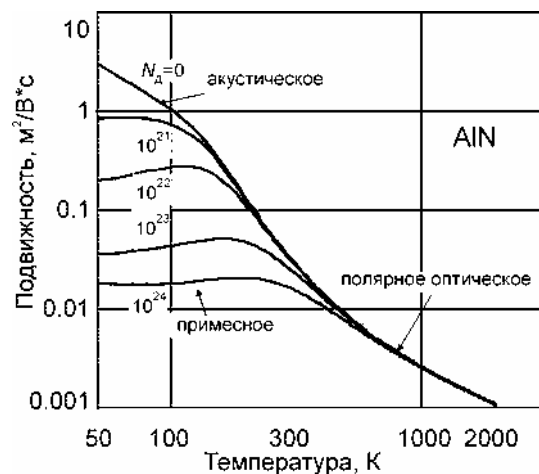


Рис. 2. Температурная зависимость подвижности в слабом поле для разных значений концентраций примеси

При низких температурах преобладающим механизмом рассеяния является примесное, а при отсутствии примеси – рассеяние на акустических фононах. При повышении температуры увеличивается роль полярного оптического рассеяния (спадающая ветвь на рис. 2), а междолинное в рассматриваемом температурном диапазоне практически не проявляется.

Подтверждением правомочности и пригодности используемых аналитических соотношений могут служить результаты расчетов в сильном электрическом поле. Времена релаксации рассчитываются в функции от задаваемой электронной температуры. Для пересчета их в зависимости от электрического поля служит поле-температурная характеристика, учитывающая разогревные механизмы рассеяния и являющаяся одной из важнейших для характеристики свойств материала в сильном электрическом поле. Результаты ее расчета приведены на рис. 3.

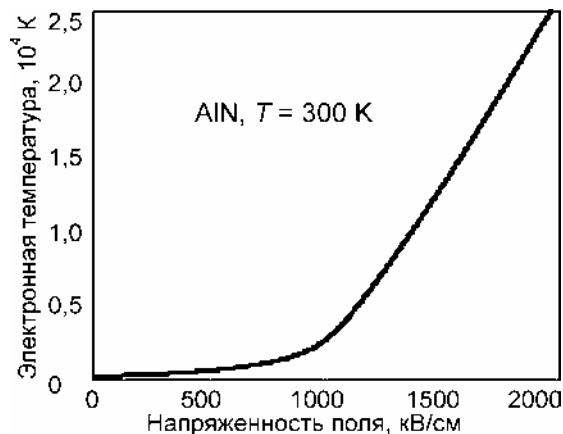


Рис. 3. Поле-температурная характеристика нитрида алюминия

Связь напряженности поля и электронной температуры позволяет найти степень заселенности долин в зависимости от напряженности (рис. 4). Критическим значением является напряженность поля около  $1000$  кВ/см, при которой становятся заметными междолинные переходы из X- в Г- долину. Следует заметить, что заселенность верхней долины возрастает не так заметно, как в арсениде и нитриде галлия. Это объясняется не таким сильным различием эффективных масс и, соответственно, близостью значений плотности состояний в X- и Г-долинах нитрида алюминия.

Одной из наиболее информативных считается так называемая поле-скоростная характеристика. Среднее значение дрейфовой скорости и подвижности находится суммированием соответствующих величин в отдельных долинах с весовыми коэффициентами, равными заселенностям долин. Результаты таких расчетов для

температуры решетки  $T = 300$  К и нулевой концентрации примеси представлены на рис. 5.

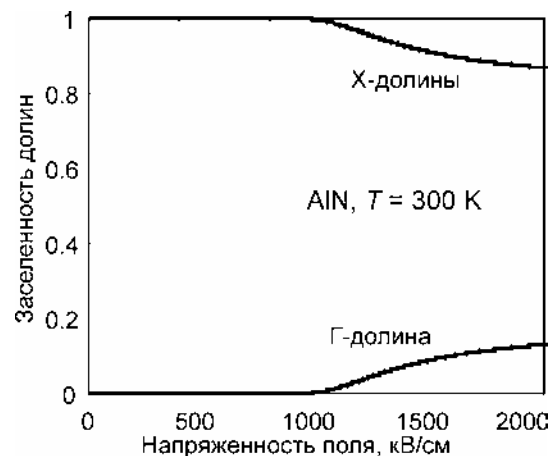


Рис. 4. Характеристика заселенности X- и Г-долин

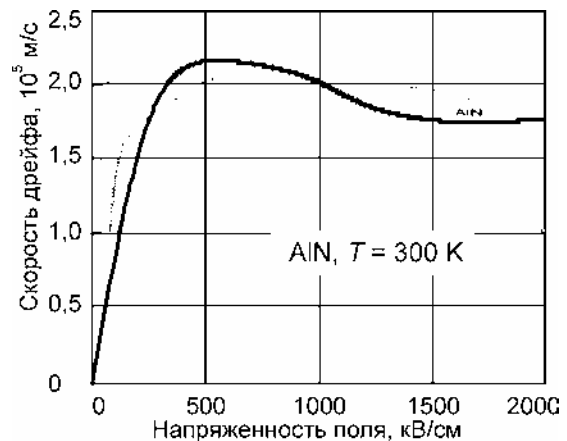


Рис. 5. Расчетная поле-скоростная характеристика (сплошная). Там же приведены результаты моделирования, взятые из [13]

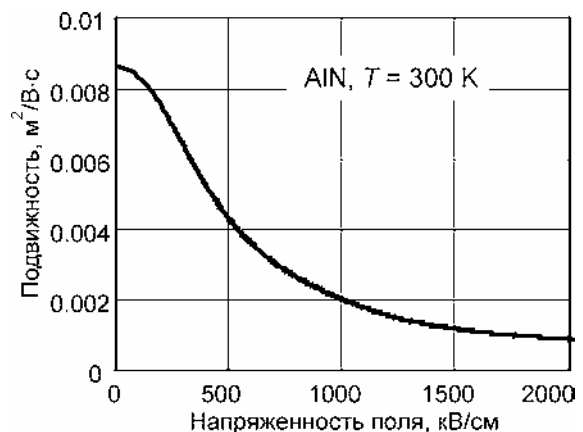


Рис. 6. Зависимость подвижности от напряженности поля

Подвижность (рис. 6) даже в относительно слабом электрическом поле спадает из-за возрастающей роли полярного оптического рассеяния. В результате наблюдается насыщение поле-скоростной характеристики, максимального значения, равного  $2,2 \cdot 10^5$  м/с, скорость достигает при значении напряженности электриче-

ского поля около 500 кВ/см. Затем вследствие изменения преобладающего вида рассеивания с полярного оптического на междолинное спадает и достигает  $1,7 \cdot 10^5$  м/с. С наступлением междолинных переходов средняя дрейфовая скорость уменьшается, прежде всего за счет меньшей энергии междолинных фононов и соответственно вызываемой ими меньшей скорости насыщения.

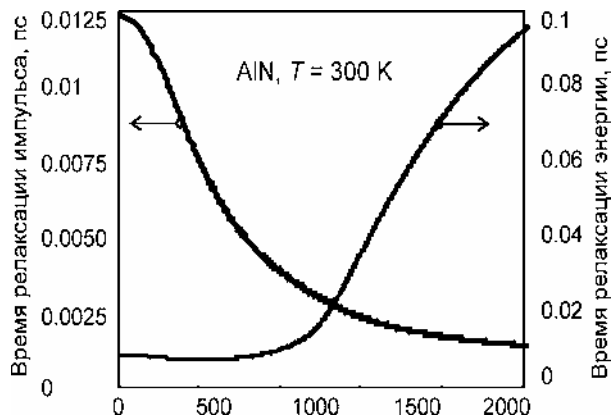


Рис. 7. Зависимости времени релаксации импульса и энергии от напряженности поля

Полезную информацию для анализа быстрого действия содержат представленные на рис. 7 результаты расчетов времен релаксации импульса и энергии. С ростом напряженности электрического поля неупругость рассеяния, определяемая отношением времен релаксации энергии и импульса, увеличивается, что говорит о возрастании роли фононных механизмов. Общий ход зависимостей и значения времен релаксации приближенно соответствуют результатам моделирования [13] методом Монте-Карло. Следует отметить, что эти значения заметно меньше, чем для нитрида галлия, и тем более арсенида галлия. Это позволяет прогнозировать улучшение частотных свойств приборов на нитриде алюминия.

Приведенные характеристики и параметры получены для следующих исходных данных (кроме приведенных выше параметров зонной структуры и эффективных масс):

- диэлектрическая проницаемость статическая и высокочастотная – 8,35 и 4,46 соответственно;
- плотность –  $3,26 \text{ г/см}^3$ ;
- скорость звука –  $6,56 \cdot 10^3 \text{ м/с}$ ;
- акустический деформационный потенциал – 9,4 эВ;
- константа междолинной связи –  $11 \cdot 10^{10} \text{ эВ/см}$ ;
- энергия оптических фононов – 0,0827 эВ;
- энергия междолинных фононов – 0,05 эВ;

Данный набор параметров получен в результате компромисса между неоднозначными, а зачастую и противоречивыми сведениями, имеющимися в литературе, для получения правдоподобных результатов.

## Выводы

Предложенная модель, доказавшая свою пригодность для других материалов, позволяет моделировать электрические свойства нитрида алюминия с кубической модификацией кристаллической решетки типа «цинковой обманки». Полученные результаты могут быть использованы в качестве предварительных исходных данных для моделирования полупроводниковых компонентов, работающих в условиях сильного электрического поля. Адекватность моделирования может быть повышена после появления более достоверных исходных данных и надежных экспериментальных результатов.

## Литература

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. Petrov I., Mojab E., Powell R.C., Greene J.E., Hultman L., Sundgren J.-E., Appl. Phys. Lett. 60 (1992) 1491.
5. Davis R.F., Physica B, 185 (1993).
6. Vurgaftmana I., Meyer J.R., J. Appl. Phys. 94, 3675 (2003).
7. Fan W.J., Li M.F., Chong T.C., Xia J.B., J. Appl. Phys. 79, 188 (1996).
8. Pugh S.K., Dugdale D.J., Brand S., Abram R.A., Semicond. Sci. Technol. 14, 23 (1999).
9. Suzuki M., Uenoyama T., Appl. Phys. Lett. 69, 3378 (1996).
10. Menev A.T., O'Reilly E.P., Adams A.R., Semicond. Sci. Technol. 897 (1996).
11. Куликов К.В., Москалюк В.А. Высокочастотные параметры нитрида галлия, Техника и приборы СВЧ, № 2, 2008. с. 48.
12. Москалюк В.А. Физика электронных процессов. Часть II. Динамические процессы: Учеб. пособие. – К.: Аверс, 2004. – 186с.
13. Bulutay C., Ridley B.K., Zakhleniuk N.A., Electron momentum and energy relaxation rates in GaN and AlN in the high-field transport regime. Physical Review B 68, 115205 (2003).