

异质谷间转移电子器件的 Monte Carlo 模拟研究*

薛舫时

(半导体超晶格国家重点实验室 北京 100083)
(南京电子器件研究所 南京 210016)

摘要 使用量子阱能带混合隧穿共振理论和 Monte Carlo 模拟计算研究了异质谷间转移电子器件中的双能谷电子注入、两种谷间转移电子的相互作用、有源层电场分布及异质结电压的触发功能。首次发现了 GaAs 器件中的三能谷谷间电子转移。算得的二极管伏安特性和实验测量结果相吻合。用所得的电场结构图和三能谷电子分布图证明强场畴能直接在阴极端触发, 消除了耿氏有源层中的死区。由此说明了器件振荡频率下降和振荡效率升高的特性。

PACC: 6865; EEACC: 2560F

1 引言

半导体异质结构和量子阱物理研究的迅速发展大大推动了微波半导体新器件的研究工作, 涌现出大量性能优异的 HEMT、HBT 等新的异质结器件。这些器件都使用由相同能带结构材料构成的异质结, 即由两种直接带隙材料构成的直接带隙-直接带隙异质结构, 利用异质界面上的势垒来实现器件所需的种种电子功能。近年来许多作者还研究了由不同能带结构材料构成的异质结构, 例如由直接带隙材料和间接带隙材料构成的直接带隙-间接带隙异质结构, 得到了许多新的物理特性。这种异质结构中两种不同能带之间产生了显著的混合, 我们把它称为能带混合量子阱。这种量子阱中的电子状态不能用单一的布洛赫态来描述, 因而大家认为难以用来设计制作新的电子器件。

笔者在研究由 GaAs 和 AlAs 构成的能带混合量子阱时发现了有趣的谷间转移电子效应^[1], 即当 GaAs 层中的 Γ 电子越过 AlAs 势垒进入另一 GaAs 层时, 它可能从外电场中获得能量通过异质结构中的能带混合从 Γ 态转换成 X 态, 从而实现不同能谷之间的转移, 产生有趣的异质谷间转移电子效应。和耿氏效应不同, 这种异质谷间转移电子效应是通过异质结中的状态转换来实现的, 它不依赖于载流子的散射, 没有能量损耗, 因而能够达到更高的射频转换效率。由于异质结构本身很薄, 难以输出大的射频功率, 笔者把它同耿氏有源层结

* 国家自然科学基金资助课题

薛舫时 男, 1939 年出生, 研究员, 从事半导体物理和器件研究
1996-10-29 日收到

合起来,利用两种谷间转移电子效应的相互作用设计出新的高效毫米波振荡器件——异质谷间转移电子器件^[2,3]。在 8mm 波段已获得 340mW 的连续波输出功率,最高效率达 8%。脉冲工作时最大输出功率达 2W,效率大于 10%。此外还测得了许多不同于耿氏器件的新特性,有待于建立新的器件物理模型进行分析和解释,从而进一步优化新器件的工作性能。既然这一新器件是能带混合量子阱与耿氏有源层的有机结合,其工作机理和特性同常规耿氏器件间究竟有哪些差别,成为人们十分关心的问题。

在 GaAs 材料中,导带底位于 Γ 谷,在它上面还 L 谷和 X 谷。由于 X 谷能量较高,通常的 GaAs 耿氏器件中只发生 Γ 谷间的电子转移。而 AlAs 的导带底位于 X 谷,在 GaAs/AlAs 能带混合量子阱中产生很强的 Γ -X 混合。于是隧穿输出电子中可能包含有大量的 X 电子,形成一种新的 X 电子发生器。当异质结构上加有适当的电压时,在异质结构内部产生极强的电场,提高了毗邻的有源层中的场强。在这种强电场作用下注入到有源层中的 X 电子会同有源层中的 Γ 和 L 能谷间发生有趣的三能谷电子转移。此外,为了使异质结构中的强电场同耿氏有源层电场分布很好地衔接,在两者之间设置了特殊的掺杂接口,杂质和载流子的空间电荷控制了有源层中的电场分布,这种电场结构又制约着电子的谷间转移过程。这样在理论模拟中必须把异质结构中的能带混合、X 电子注入、同有源层中的多能谷散射、掺杂接口及载流子的空间电荷效应和多能谷输运过程结合起来,把异质结构中的量子态理论同掺杂接口和有源层中的多能谷输运结合起来建立新的器件模拟理论。为此本文采用多能谷有效质量理论来计算异质结电子隧穿和谷间电子转移,用 Monte Carlo 方法来研究两种谷间转移电子效应间的相互作用和多能谷电子的输运过程,求解泊松方程来计算有源层中的场分布、研究空间电荷效应和讨论电场与谷间转移电子效应间的关联,从而建立起这种新器件的模拟理论。由此来分析和解释器件研究中所观察到的新特性。

下一节中首先介绍进行模拟的器件结构及模拟计算的模型。第三节描述不同偏压下器件中的电场分布,讨论空间电荷效应、异质结和有源层的降压和伏安特性曲线。第四节介绍有源层中不同能谷间的电子布居,研究三能谷电子转移效应和器件射频工作时的振荡频率和振荡效率。最后通过同耿氏器件的对比来说明异质谷间转移电子器件的特征。

2 器件结构和 Monte Carlo 模拟模型

n^+ GaAs 帽层, $0.5\mu\text{m}$
AlAs 层, 5nm
n^+ GaAs 层, 15nm , $1.6 \times 10^{18}/\text{cm}^3$
GaAs 有源层, $2\mu\text{m}$, $1 \times 10^{16}/\text{cm}^3$
n^+ GaAs 缓冲层
n^+ GaAs 衬底

图 1 异质谷间转移电子器件结构图

图 1 中画出了异质谷间转移电子器件的结构。先在 n^+ GaAs 衬底上生长一层缓冲层,再长厚 $2\mu\text{m}$ 掺杂浓度为 $10^{16}/\text{cm}^3$ 的 GaAs 有源层,然后生长掺杂浓度为 $1.6 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 厚 15nm 的掺杂接口层,顶上盖以 $0.5\mu\text{m}$ 的 GaAs 帽层。

AlAs/GaAs 异质结构在一定偏压下的 Γ 和 X 两种能谷的隧穿电流用多能谷有效质量理论通过两种电子波的波阻抗计算来求得^[4]。考虑到实际器件在工作时往往达到较高的结温,计算温度选定为

500K。有源层中的电子输运过程用 Monte Carlo 方法来计算。根据电场分布结构把有源层划分成宽窄不等的网格,以 2×10^4 个载流子组成一个超粒子,按照不同能谷的有效质量来

计算各能谷超粒子的漂移和散射. 计算中使用了文献[5]中的散射参数

图 2 中画出了 Monte Carlo 器件模拟的计算框图. 首先选取异质结构的降压, 算出异质结中的电场强度、 Γ 和 X 能谷的隧穿电流. 按照有源层的左边界电场及掺杂结构来估算有源层中的初始电场分布 EQ. 然后使用适当的随机数构造出三种能谷超粒子的初始位置和动量分布. 计算时间间隔 Δt 内从异质结构注入的 Γ 和 X 两种超粒子的数目及其动量分布, 用随机散射及漂移模型算出所有超粒子经 Δt 的漂移散射以后所达到的位置和动量. 舍去漂移出有源层之外的超粒子, 由每个网格中的总超粒子数算出该网格中的电荷密度. 求解泊松方程得出新的电场分布 EE. 把电场分布 EE 同 EQ 进行比较. 如果两种电场分布不相同, 则把场分布 EE 送到 EQ 中, 再回到第三步, 重新进行随机漂移和散射模拟计算, 求出新的场分布 EE. 直至两电场分布 EQ 和 EE 吻合以后, 结束 Monte Carlo 迭代计算, 对有源层电场积分求出有源层的电压降, 输出计算结果.

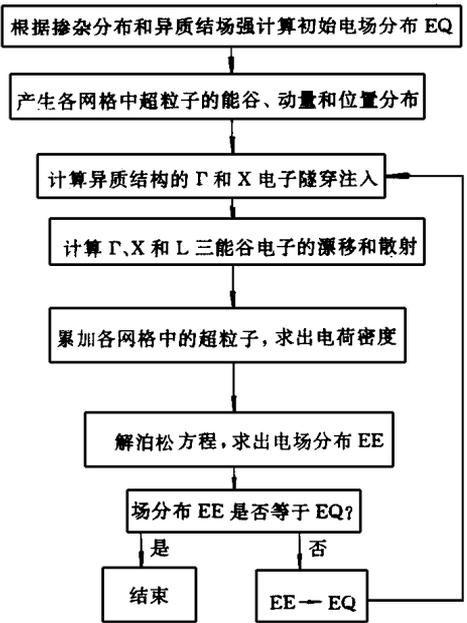


图 2 Monte Carlo 计算框图

3 空间电荷效应和器件的伏安特性

图 3 中的实线和点划线分别画了 0.49V 和 0.415V 异质结降压下有源层中的电场分布. 鉴于电场的变化范围很大, 图中采用对数坐标. 当异质结降压为 0.49V 时, 有源层左端的场强 E_0 较高, 达 $9.8 \times 10^5 \text{V/cm}$. 考虑到重掺杂层中的杂质在材料生长过程中会向外扩散, 计算中假设有源层左端 $0.05 \mu\text{m}$ 为掺杂过渡区, 其掺杂浓度从掺杂尖峰的 1.6×10^{18} 线性下降到有源层的 $1 \times 10^{16} / \text{cm}^3$. 在此区域内电场迅速由 E_0 降至 E_1 . 然后在有源层中电场缓慢地由 E_1 下降到 E_2 . 该区域的大小和电场的变化趋势取决于有源层的掺杂和超粒子的空间电荷效应, 即受超粒子的漂移和散射过程的控制. 这里异质结隧穿过程中注入的 X 电子和耿氏三能谷转移过程结合在一起, 构成两种谷间转移电子效应的相互作用区. 我们把它称为转移电子区. 再往右电场基本上稳定在 E_2 附近, 形成一个低场区. 低场区中的场强很小, 超粒子的空间电荷效应显著影响电场的变化. 由于超粒子的随机运动, 低场区中的电场产生激烈的振

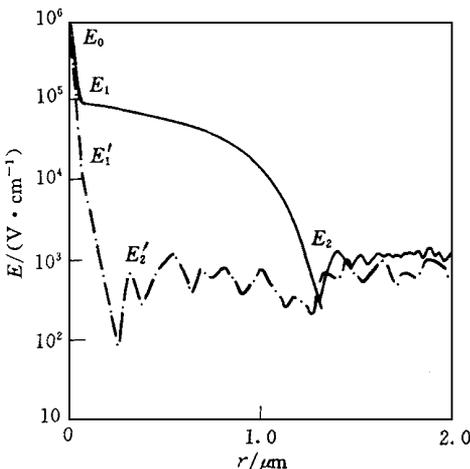


图 3 异质结降压为 0.415V 和 0.49V 时有源层中的电场分布

荡。虚线所画的异质结电压为 0.415V 的场分布则有明显的差别。有源层左边界电场 E_0 降为 $8.3 \times 10^5 \text{V/cm}$, 对应的 E_1 电场降低到 $7.2 \times 10^4 \text{V/cm}$ 。使电场分布曲线向左压, 转移电子区变得很窄, 大部分有源层都成为低场区。有常规耿低器件的有源层中, 阴极端的电场很低, 场分布从阴极到阳极逐渐升高, 在阳极端形成宽的电场高峰。这一阳极电场峰使器件在大偏压下容易击穿, 限制了器件的脉冲输出功率。异质谷间转移电子器件降低了阳极端的电场, 因而能耐受大的脉冲偏压, 输出大的功率。

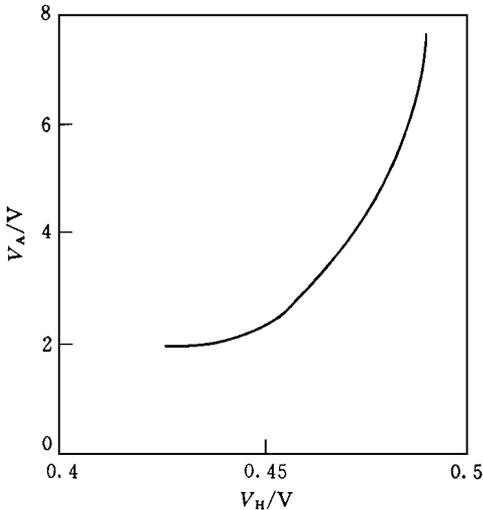


图 4 异质结降压与有源层降压间的关系图。由此容易看出, 较小的异质结电压变化能产生较强的有源层电场调制, 感生有源层电压的显著变化。在射频工作时, 异质结电压的上升使阴极端电场升高, 转移电子区扩大, 谷间转移电子效应显著增强而触发强场畴的生成, 从而有效地控制器件的射频工作。

图 5 中用实线画出了模拟计算所得到的二极管伏安特性。二极管的电流受异质结隧穿电流的控制。器件偏压低于 2V 时, 异质结上的降压较小, 隧穿电流很小, 器件电流很低。当电压超过 2V 以后, 隧穿电流迅速增大, 达到峰值。对于单垒 GaAs/AlAs 异质结构来说, Γ 谷的势垒高度高达 1.04eV , 隧穿电流主要是通过 Γ - X 耦合机制来产生的。当隧穿输出电子的能量高于 GaAs 层中 X 谷的能量时, AlAs 势垒中的 X 波得以直接向 GaAs 层输出 X 谷电流, 使隧穿电流显著增大。由于 X 谷的有效质量比较大, 异质结构中所形成的 X 能级相互比较靠近, 形成一个比较平缓的隧穿电流峰, 而不产生一般量子阱 Γ - Γ 隧穿电流中的尖锐的电流峰。此外, 考虑到器件工作时有较高的结温, 本文使用了 500K 的计算温度, 高温下隧穿入射电子有较大的几率占据较高能量状态, 使电流峰被进一步拉宽。再加上前述的异质结电场调制效应, 较小的异质结降

图 4 中画出了异质结降压 V_H 与有源层降压 V_A 间的关系。有源层中低场区的电场一般都很低, 其降压很小。在低异质结电压下, 有源层左端的电场较小, 在掺杂尖峰中杂质电荷的作用下电场强度很快地下降到低场区, 转移电子区很窄, 有源层降压就比较低。因而当异质结降压低于 0.45V 时, 有源层降压保持在 2V 左右。随着异质结降压的升高, 异质结中的场强增高, 经过重掺杂区的电场下降以后还能保持较高的场强, 使注入的高能 Γ 和 X 电子参与很强的三能谷散射, 产生显著的谷间电子转移效应, 形成较宽的转移电子区。该区仍保持较高的场强, 从而产生较高的降压, 使有源层的降压显著升高。当异质结降压超过 0.485V 以后, 有源层降压猛升, 曲线陡直上升。

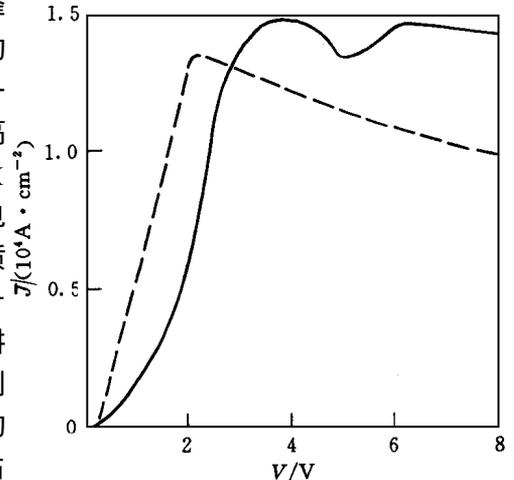


图 5 二极管的伏安特性图

压变化能产生很大的二极管电压调制 使电压高于 2.5V 以后, 电流随电压的变化比较小, 不象耿氏器件那样产生明显的负阻区 图中的虚线画出了实际器件的伏安特性曲线 器件的实际结面积与计算中假设的面积有差异, 电流的大小有所不同, 但其变化趋势同计算结果基本吻合 由于 GaAs/AlAs 异质界面不是完全突变的, 存在有一定的渐变过渡区, 使低电压下的隧穿电流增大 这样低电压下的实测电流就比计算电流要大一些 器件工作时偏压加在 4.5V 左右, 由此伏安特性容易看出, 在较大的电压摆动下, 电流的变化比较小, 器件具有较高的动态阻抗 虽然图中所示的直流负阻不明显, 但射频工作时阴极端触发强场畴后将感生出强的交流负阻而产生有效的射频振荡

4 两种谷间转移电子效应的相互作用

图 6 中画出了异质结降压为 0.49V 时有源层中三能谷超粒子数的分布, 实线、虚线和点划线分别示出 Γ 、X 和 L 三个能谷的超粒子数 在有源层左端异质结构向有源层隧穿注入 Γ 电子和 X 电子 因为 0.49V 的异质结电压已高于异质结构中的 X 能级和 GaAs 层中的 X 能谷, 许多入射的 Γ 电子能通过异质结构中的 Γ -X 混合, 从电场中吸收足够的能量 \approx 转换成 X 电子输出, 产生较强的 X 谷电流 这就使有源层左端的 X 谷超粒子数远高于 Γ 谷超粒子数 此外, 异质结构中存在着很强的电场, 使得与之毗邻的有源层左端也处在强电场作用下 因而产生了很强的耿氏谷间转移电子效应 GaAs 材料中 X 能谷比 L 能谷高, 于是许多注入的 X 电子能够通过谷间散射转移到 L 能谷中去 在直流稳态条件下, 左边界的 L 谷和 X 谷超粒子数近乎相等 离开左边界以后, 强电场下的耿氏效应使更多的 X 谷超粒子被转移到 L 能谷中去, L 谷超粒子数上升且稳定在 100 左右 X 谷的能量高, 在向右漂移运动中将不断转移到 L 和 Γ 能谷中去, 使得 X 谷超粒子数下降, 而 Γ 谷超粒子数则渐渐上升 在模拟计算中联立求解了三能谷的漂移散射方程和泊松方程, 发现超粒子的漂移和散射过程强烈地依赖于电场, 而超粒子的空间电荷效应又直接制约着电场的变化 因此上述转移电子区的大小和三能谷超粒子数的分布结构是由多能谷载流子注入、杂质和载流子的空间电荷效应及其电场分布和耿氏谷间转移电子效应所决定的 图 6 中左半部分三条曲线形象地描绘出从多能谷载流子注入到耿氏谷间转移电子区的过渡、异质谷间转移电子效应与耿氏效应的相互作用及三能谷转移电子效应, 这是在 GaAs 器件中首次得到的三能谷电子转移 当 r 大于 $1\mu\text{m}$ 以后, 由于电场下降, 能量最高的 X 能谷的超粒子数趋于零, L 能谷的粒子数也很快下降, Γ 谷超粒子数显著上升, 产生相应的低场电流, 使整个有源层的电流保持连续

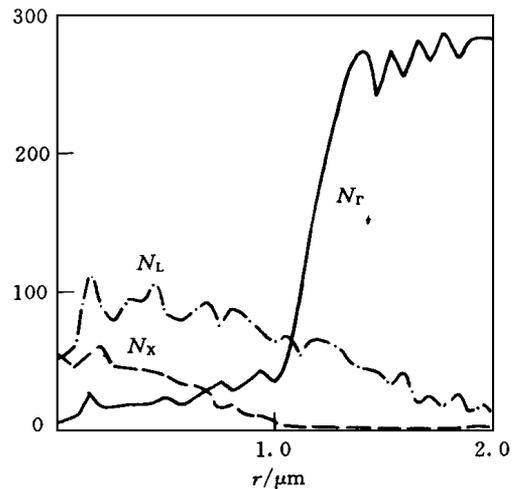


图 6 异质结降压为 0.49V 时有源层中三能谷超粒子数的分布图

图 6 所示的三能谷载流子布居结构正好同常规耿氏器件中相反 在耿氏器件中有源层

阴极端电场很低, 阴极注入的电子都是低能 Γ 电子, 必须经过近 $1\mu\text{m}$ 左右的电场加速以后才能积聚足够的能量转移到 L 能谷中去. 因此有源层左半部都是 Γ 电子, 不能产生谷间转移电子效应. 当器件在射频工作时, 这一纯 Γ 电子区域就对射频输出没有贡献, 成为一个死区. 它使器件的有效渡越区缩短, 振荡频率升高, 射频转换效率下降. 在渐变能隙异质结耿氏器件中, 异质结阴极向有源层注入高能 Γ 电子. 但是有源层阴极端的电场比较低, 注入电子在强极性光学模散射下很快丧失能量, 而难以直接转移到较高的能谷中去, 死区仍然没有彻底消除. 因此其振荡频率就接近于相应于有源层宽度下的耿氏器件, 射频振荡特性的改善不大^[6]. 异质谷间转移电子器件通过 X 电子注入, 在有源层的左边界处就产生了三能谷的电子转移, 象图 6 所示那样真正消除了死区. 我们研制的异质谷间转移电子器件使用 $2.1\mu\text{m}$ 宽的有源层, 相应的耿氏振荡频率在 60GHz 以上, 而实测的振荡频率在 30 至 35GHz 范围内, 同本文的模拟结果相吻合. 与此同时, 振荡效率也因死区消除而明显提高, 最高的连续波振荡效率达 8% , 脉冲振荡时已超过了 10% . 这些实验结果都可由本文的 Monte Carlo 计算结果中得到解释.

5 讨论

本文通过 Monte Carlo 模拟计算研究了异质谷间转移电子器件中的双能谷电子注入、有源层的电场分布和载流子的空间电荷效应、两种谷间转移电子效应的相互作用以及 Γ 、L 和 X 三能谷谷间转移电子过程. 计算出的伏安特性同实验测得的结果相吻合. 电场结构图和三能谷超粒子数分布图证明谷间转移电子效应直接发生在有源层的阴极端, 从而彻底消除了耿氏器件中的死区. 这一结论说明了异质谷间转移电子器件中振荡频率下降和振荡效率升高的特性. 从异质结降压与有源层降压的比较中, 进一步揭示出异质结构对强场畴的触发和器件的射频工作有很强控制功能. 说明能带混合量子隧穿理论和 Monte Carlo 计算能较好地模拟异质谷间转移电子器件的工作状态, 并进一步应用于该器件的优化设计中.

从有源层的掺杂结构来看, 异质谷间转移电子器件同肖特基势垒双区阴极接触耿氏二极管^[7]有些相似, 但是异质结构的能带、势垒高度和宽度可以方便地调节, 克服了难以选择合适的 GaAs 肖特基势垒的问题. 本文的研究结果进一步指出, 异质谷间转移电子器件还有许多不同于耿氏器件的特性, 主要有:

1. 能带混合量子阱向有源层注入 X 电子, 在有源层中形成了有趣的 Γ 、L 和 X 三能谷谷间转移电子过程. X 电子注入和强电场下的耿氏谷间电子转移导致新的两种谷间转移电子效应间的相互作用.
2. 异质结构中的强电场和与它毗邻的掺杂接口在有源层阴极端产生一个电场尖峰. 载流子的空间电荷效应使强场区得以向外延伸, 在那里多能谷谷间转移电子过程和强电场的相互作用形成一个电子转移区.
3. 改变异质结上的降压能诱生很强的电场变化, 从而使有源层中的电场分布产生较强的调制. 这种能带混合量子阱构成一种新的限流接触, 它与有源层电场调制效应一起产生新的隧穿伏安特性. 这样异质结降压的改变能灵敏地控制器件的工作, 具有很强的触发功能.
4. 阴极端的电场尖峰和转移电子区使强场畴能直接在阴极处触发, 从而彻底消除了耿氏器件中阴极端的死区. 它显著地改变了器件的射频工作特性, 使得器件的振荡频率下降,

振荡效率升高

5. 除了阴极端极窄的电场尖峰以外, 电场的分布比较均匀 不象耿氏器件那样在阳极端形成宽的强场区, 在大偏压下容易产生击穿 这样器件就能在大偏压下 工作, 输出大的脉冲功率

6. 两种谷间转移电子效应的相互作用是同有源层的电场分布直接关联的 因此异质结构与掺杂尖峰的结构必须相互配合, 才能产生所需的有源层电场分布和有效的电子谷间转移, 触发强场畴和实现高效的射频振荡

参 考 文 献

- [1] 薛舫时, 物理学报, 1990, **39**: 984
- [2] 薛舫时, 邓衍茂, 张崇仁, 等, 固态电子学研究进展, 1993, **13**: 1.
- [3] Xue Fangshi, Deng Yanmao and Zhang Chongren, Chinese J. Electronics, 1995, **4**: 15.
- [4] 薛舫时, 电子学报, 1992, **11**: 25.
- [5] M. A. Little John, J. R. Hauser and T. H. Glisson, J. Appl Phys , 1977, **48**: 4587.
- [6] N. R. Couch, M. J. Kelly, H. Spooner, *et al* , Solid-State electronics, 1989, **32**: 1685.
- [7] K. W. Gray, J. E. Pattison, J. E. Riss *et al* , Electron Lett , 1974, **10**: 221.

Monte Carlo Simulation of Heterostructure Intervalley Transferred Devices

Xue Fangshi

(National Laboratory for Superlattices Microstructures, Beijing 100083)

(Nanjing Electronic Devices Institute, Nanjing 210016)

Received 29 October 1996

Abstract By using band mixing tunneling resonant theory for quantum well and the Monte Carlo devices simulation, the double-valley electrons injection, the interaction of two sorts of intervalley transferred electron effect, the electric field profile in active layer and the trigger function of heterostructure voltage in heterostructure intervalley transferred devices are investigated. The transferred electron effect among Γ , L, and X valleys in GaAs is first found. The calculated device $V-I$ characteristic agrees with experimental measurement. A population diagram for three valleys and the electric field profile prove that the strong field domain is triggered at the cathode exactly and the dead zone in Gunn active layer disappears. The device performance about the oscillation frequency reduction and efficiency improvement is explained by this simulation.

PACC: 6865; EEACC: 2560F