

Monte Carlo 微粒模拟法 研究 GaAs 的 NDM

赵 鸿 麟

(天津大学电子工程系, 天津)

1987年4月3日收到

本文用 Monte Carlo 微粒模拟法 (Particle Simulation) 研究了 GaAs 中导带电子的负微分迁移率 NDM (Negative Differential Mobility)。电子的起始状态假设按照麦克斯韦律分布在 Γ 带中。电子作漂移运动时考虑了极性光学波和声学波的谷内、谷间散射。散射后假定定向速度消失, 简化了计算。结果表明和实验值符合良好。也和前人计算结果进行了比较。

主题词: 半导体器件, 器件模拟

一、引言

Monte Carlo 微粒模拟法是跟随每一载流子的行踪, 以大量载流子行踪的平均值求材料或器件的电性能。它以半导体内的实际物理过程为依据, 能设计任何器件。它有和器件维数无关等优点, 尤其适用于小尺寸器件。

GaAs 有 Γ 、 L 、 X 三条导带。研究其负阻特性有两种方法。一种认为电子在三条能带间跃迁^[1], 另一种只考虑 Γ 、 X 带间的跃迁^[2]。本文用的是第二种方法。

X 带的极小值比 Γ 带高 0.36 eV, 有效质量 m^* 则大 $0.35/0.067$ 倍。当电场强度足够大, Γ 带中的电子跃迁到 X 带并且迁移率下降, 出现了 NDM 特性。

本研究假设: (1) 起始时所有电子在 Γ 带中服从麦克斯韦分布律。(2) 主要散射机构是声学波及极性光学波, 电离杂质、中性杂质及电子间的散射可以忽略。(3) 每次散射后电子的定向速度消失。

二、MC 主要步骤

电子起始时服从

$$\frac{\Delta n}{n} = \frac{2}{\sqrt{\pi} (KT)^4 \cdot 3/2} \cdot e^{-\frac{E}{KT}} \cdot \sqrt{E} \cdot \Delta E \quad (1)$$

这是麦克斯韦分布。 K 是玻尔兹曼常数, E 是电子能量, $T = 300K$ 。

如果有 N 种散射机构, 散射率分别为 $\lambda_i(E)$ ($i = 1, \dots, N$), 则因 E 是时间 t 的函数, $\Gamma(E) = \sum \lambda_i(E)$ 也随 t 而变。为此引入虚设的自散射率 λ_0 , 则

$$\sum_{i=0}^N \lambda_i(E) = \Gamma_0 = \text{常数} \quad (2)$$

如果某电子在 $t = 0$ 遭受散射, 则在 t 时刻再次受散射的几率为

$$P(t) = \Gamma_0 \cdot \exp(-\Gamma_0 \cdot t) \quad (3)$$

因 $0 \leq P(t) \leq 1$ 且电子的散射是随机的, 产生 $(0, 1)$ 中均匀分布的随机数 r_1 代替 $P(t)/\Gamma_0$, 则^[3]

$$t = -\ln(r_1)/\Gamma_0 \quad (4)$$

t 通常称为自由飞行时间。

计算出 $\lambda_i (i = 0, \dots, N)$ 后^[2, 3], 令^[4]

$$P_0 = \frac{\lambda_0}{\Gamma_0}, \quad P_1 = \frac{\lambda_0 + \lambda_1}{\Gamma_0}, \quad \dots, \quad P_N = \frac{\lambda_0 + \dots + \lambda_N}{\Gamma_0} \quad (5)$$

因电子遭受那种机构的散射也是随机的, 再产生随机数 r_2 , 如果 $P_i \leq r_2 < P_{i+1}$, 则电子遭受第 $i+1$ 种散射机构的散射。

电子沿着电场方向 z 的漂移速度 V 为

$$V = \frac{1}{mK_z} \sum (E_f - E_i) \quad (6)$$

式中 E_i 及 E_f 为每次自由飞行始末的电子能量, K_z 是波矢量的总增值。

三、结果与讨论

本文参与散射的电子数是二千个。每个电子要历经数百次的散射。

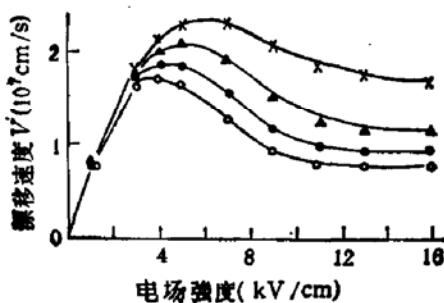


图 1 NDM 特性

- × IDP = 2×10^9 eV/cm
- △ 1.0×10^9
- 0.5×10^9
- 0.3×10^9

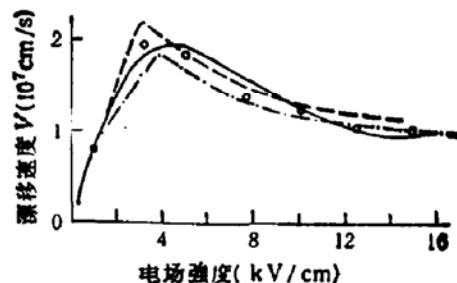


图 2 理论与实验结果比较

- 本文结果 ($IDP = 0.5 \times 10^9 \frac{eV}{cm}$)
- - - Ruch & Kino^[6]
- · - Braslau & Haug^[7]
- Fawcett et al.^[8]

NDM 如图 1 所示。由图可以看出, 当电场强度小于 2 kV/cm 时, v 随电场强度线性增加。当场强进一步增加, 由于愈来愈多的电子跃迁到 X 带形成了 GaAs 的负阻特性。曲线亦表明谷间形变势 IDP 愈小, 负阻特性愈易形成。

图 2 是本文结果和其它工作结果的比较。实线是本文 $IDP = 0.5 \times 10^9 \text{ eV/cm}$ 时的结果。另二曲线是实验结果^[2, 6]。未连成线的“。”也是理论计算结果^[2]。

从图上看本文结果和 Fawcett 的结果几乎重合。实际上用的 IDP 不一样。他用的是 $1.0 \times 10^9 \text{ eV/cm}$ 。引起上述理论实验之间及理论之间的差别可能有多种原因。忽略一些散射机构尤其是电离杂质的散射会是原因之一。再者, 至今为止 GaAs 的能带参数仍未有定论。

结论: 仅考虑声学波及光学波的散射, 用 Monte Carlo 方法能成功地模拟 GaAs 的负阻特性。

参 考 文 献

- [1] S. Kratzer, et al., *J. Appl. Phys.*, 49, 4064—68 (1978).
- [2] W. Fawcett et al., *Phys. Chem. Solids.*, 31, 1963—90 (1970).
- [3] C. Manglesture, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 30, 173—208 (1982).
- [4] A. A. Quaranta et al., *Rivista del Nuovo Cimento*, 1, 445—95 (1971).
- [5] E. M. Conwell, *Solid-State Phys. Suppl.* 9, 105—59 (1967).
- [6] J. G. Russ & G. S. Kino, *Phys. Rev.*, 174, 921—31 (1968).

Monte Carlo Particle Simulation for NDM of GaAs

Zhao Honglin

(Electronic Engineering Dept., Tianjin University, Tianjin)

Abstract

Monte Carlo particle simulation method has been used to study the negative differential mobility of electrons in the GaAs conduction energy band. The initial states of electrons are proposed to be located in the Γ band according to Maxwell distribution. Electrons drifted along the electric field are encountered polar optical or acoustic phonon scatterings among valleys or within valley. It is supposed that the directional velocity of electrons after scattering is eliminated. The computing has been simplified with that. Results show coincident with experimental data. Comparison with earlier authors' work have also been done.

KEY WORDS: Semiconductor device, Device modelling