第 14 卷第 8 期
1993 年 8 月

半 导 体 学 报
CHINESE JOURNAL OF SEMICONDUCTORS

Vol. 14, No. 8
Aug., 1993

GaAs 器件中载流子非稳态输运的蒙特卡罗模拟

王维航　叶润涛　郭妙泉

浙江大学信息与电子工程系，杭州 310008

余志平

清华大学微电子学研究所，北京 100084

（1991 年 8 月 12 日收到；1992 年 12 月 12 日收到修改稿）

本文用多粒子蒙特卡罗方法对 GaAs 器件中的载流子非稳态输运过程进行了模拟，解释了载流子速度过冲效应对亚微米器件性能的影响. 给出了一种由 P 集电区、P^+缓变基区和 AlGaAs/GaAs 异质发射结组成的 N^+P^+PN 新结构，预计将对缩短基区-集电区渡越时间有明显的作用.

PACC：7210，7220D，7220H

一、引　　言

在亚微米器件中，载流子的渡越时间接近于载流子的动量弛豫时间. 当电场改变时，载流子的速度变化不是瞬间完成，载流子速度过冲效应等非稳态现象对器件的工作有重要的影响. 传统的半导体器件模拟方法是对泊松方程和载流子连续性方程的联立求解. 它没有考虑载流子输运的非稳态效应，因此不能胜任亚微米器件的模拟分析.

蒙特卡罗方法（Monte Carlo Method，简称 MC 方法）是进行载流子非稳态效应分析的有效工具. 它实际上是玻尔兹曼方程的一种数值统计解法，在模拟非稳态效应及一些微观物理现象方面有独到之处. 本文采用多粒子的群体 MC 方法（EMC 方法），以 AlGaAs/GaAs 双极晶体管为对象，着重研究了载流子在基区-集电区的速度过冲效应对渡越时间的影响，从理论上提出了一种对渡越时间的缩短有明显作用的晶体管新结构.

二、方法和模拟

在单粒子的 MC 方法中，时间步长就选为自由飞行时间. 但在多粒子的 EMC 方法中，由于要记录某些正在自由飞行中的电子的状态，并能向跟踪下一个电子在此时间步长后的状态，直至下一个时间步长来临时，才能继续这些被中断的自由飞行，这对于多粒子系统处理起来比较麻烦. 我们采用固定的相等时间步长的方法，让所有的电子自由飞行相

同的时间步长 Δt 以后,用下式的碰撞几率 p 来判断有没有发生碰撞:

$$p = 1 - \exp\left[-\int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{\tau(\boldsymbol{k})} dt\right]$$
$$= 1 - \exp(-\Delta t/\tau) \tag{1}$$

其中

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ac}} + \frac{1}{\tau_{op}} + \frac{1}{\tau_{eq}} + \cdots\cdots, \tag{2}$$

$\frac{1}{\tau}$是总的散射几率,$\frac{1}{\tau_{ac}}$、$\frac{1}{\tau_{op}}$、$\frac{1}{\tau_{eq}}$……分别是声学波、光学波、等价谷间散射等机制的散射几率,$\boldsymbol{k}$ 为波矢. 将 p 与随机数 $r_1(0-1)$进行比较,若 $r_1<p$,则发生散射,记下散射后的状态;若 $r_1>p$,则载流子没有发生散射,状态不发生变化. 在作了以上处理后,再进行下一个 Δt 的飞行. 对于发生散射的载流子:

$$\boldsymbol{r}_f = \boldsymbol{r}_i - \frac{1}{h}[\nabla_k E(k)]\Delta t, \tag{3}$$

$$\boldsymbol{k}_f = \boldsymbol{k}_i + q\boldsymbol{E}\Delta t/h, \tag{4}$$

式中,$\boldsymbol{r}_i$、$\boldsymbol{r}_f$、$\boldsymbol{k}_i$、$\boldsymbol{k}_f$ 分别是飞行前后的空间位置和波矢,$E(\boldsymbol{k})$是载流子的能量,$\boldsymbol{E}$ 是电场,q 是电子电荷,h 是谱朗克常数. 这种等时间步长的方法实现了多载流子模拟的同步化. 它尤其适用于准弹道器件等的模拟,因为这时研究电子状态的频度往往高于散射率. 同时也为今后载流子之间的散射提供了方便.

GaAs 的能带结构选用 Γ-L-X 三能谷结构,材料参数及散射模型分别取自文献[1][2],本文不再列出. 0—1 之间均匀分布的 r_2 是对发生散射的载流子进行散射机制选择的随机数. 为了使总的散射几率 Γ 保持常数,引入了自散射. 自散射的引入,虽方便了编程工作,但增加了计算量,特别是能量 E 小时,散射几率小,自散射增多. 我们采用的改善方法是对不同的能量级 $\boldsymbol{E}_i \sim \boldsymbol{E}_i + \Delta\boldsymbol{E}_i$,选择不同的 Γ,使自散射不占高的比例.

散射前后的波矢 $\boldsymbol{k}_i$、$\boldsymbol{k}_f$ 的夹角 β 和 φ 也是由各自的随机数抽样获得,以此来选定散射后的载流子状态.

载流子的初始态分布对瞬态模拟是很重要的[3]. 对于 x 方向,我们只考虑进入半导体的情况,故服从半 Maxwell 分布. 然后对 x 方向的速度 V_x 进行随机抽样,就得到载流子的初始速度.

EMC 方法以时间步长对抽样载流子进行跟踪,每一时间步长上,电子在实空间和 k 空间的状态被记录下来,然后其传输量 Q 用下式进行统计平均:

$$\langle Q(x_i,t_j)\rangle = \frac{1}{N}\sum_m^N Q_m(x_i,t_j), \tag{5}$$

下标 i,j 代表空间和时间坐标,N 为模拟的粒子数.

我们根据以上的方法开发了模拟程序(C 语言). 该程序中的电场分布可以由互相连接的器件模拟器 SEDAN 的结果直接提供,也可以由用户设置. 计算结果可打印或图形输出. 输出内容包括载流子漂移速度随时间的变化;载流子在各能谷中分布比例随时间的变化;指定时刻波矢 $|k_x|$,$|k_y|$ 的分布;载流子在各栅点处的平均漂移速度;载流子的平均能量;Γ 谷中载流子的温度 T_e 随时间的变化等. 本文只讨论 GaAs 器件中的 MC 模拟结果.

三、双极型GaAs器件的MC模拟

载流子在基区和集电区的渡越时间是决定晶体管截止频率和开关速度的主要因素. 为了获得高的频率和速度，器件的结构设计和参数优化多围绕如何减小载流子的渡越时间和减小基区电阻进行. 在GaAs器件中，利用其载流子显著的速度过冲效应来缩短载流子在基区和集电区的渡越时间，并以此为目标进行器件结构和参数优化的研究将是很有意义的工作.

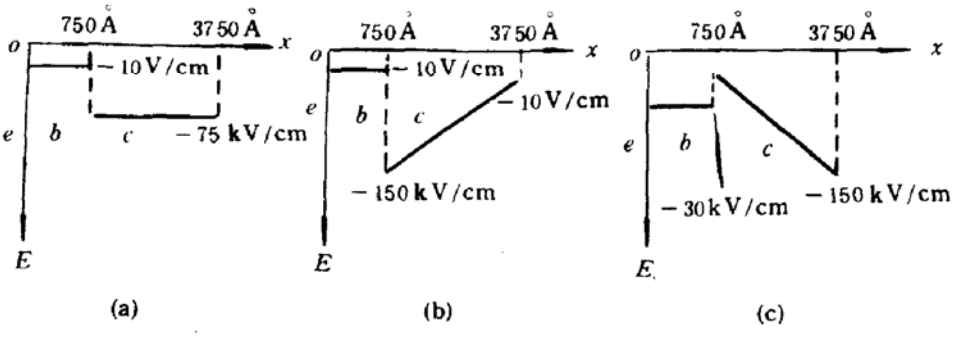

图1 各种电场分布的结构

首先，我们采用Maziar等人[4]提供的电场分布结构(图1(a),(b))，对其进行了载流子速度过冲效应的MC模拟. 栅格长度为50Å，时间步长为2fs. 图2的曲线a、b分别是a、b两种电场分布条件下载流子的速度分布曲线. 横坐标是栅格点数，从35到50相当于750Å宽度的基区. 电场分布为b的结构在物理上对应的器件结构为Maziar等人提出的P^+PN^+基区-集电区结构. 我们的模拟结果证实了这种结构的载流子速度过冲效应及其在缩短波越时间方面的有效性. 但这种有效性尚不理想，它之所以只有较短的过冲区域是因为正向分布的线性电场，一开始就很强的电场使载流子很快得到加速而跃入重能谷，以致过冲现象在较短的距离和时间内结束. 对于电场分布为a的结构，载流子有一段速度过冲区域，虽然峰值小于b分布结构的值，但过冲区域有所延长，这将有助于缩短集电区的渡越时间.

根据上述分析，可以进而考虑一种如图1(c)所示的电场分布结构. 可以预计，这种负向线性分布的电场，在集电区由弱逐渐增强，其速度过冲区域将得到延长. 另外，在a,b结构中，基区-集电区相邻处的电场较弱，将有部分载流子在集电区发生反向散射后又回到基区，这将使基区载流子平均速度下降，增加基区渡越时间. 我们考虑在基区能有一加速电场，它可以起到抑制载流子从集电区反向散射回基区的作用. 因此，在基区设置了−30kV/cm而不是−10kV/cm的电场.

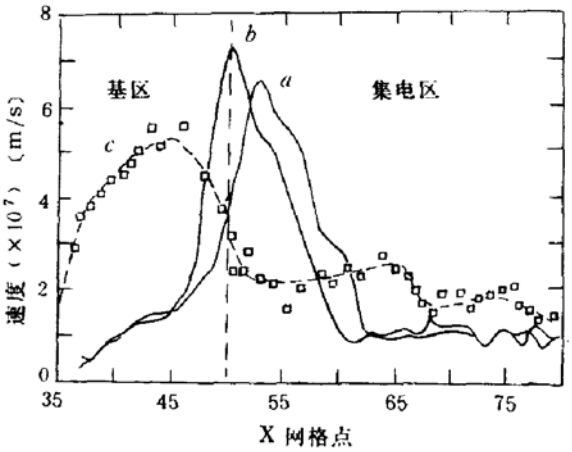

图2 三种电场分布下的载流子速度分布

对电场分布为 c 的结构进行 MC 模拟,得到如图 2 中曲线 c 的结果. 载流子在基区的平均漂移速度为 3.7×10^7cm/s,大大越过曲线 b 的 1.4×10^7cm/s. 曲线 c 在集电区虽不存在峰值(而曲线 b 的峰值高达 6.8×10^7cm/s),但载流子的过冲区域延续得很长,在第 80 格点(即集电区中心 $x=2\ 250$ Å)处仍高达1.4×10^7cm/s. 由此我们可以看到,集电区反向电场分布结合基区施加加速电场的器件结构对载流子渡越时间的改进是显著的. 它提高了载流子在基区的速度,使载流子在基区就得到加速而进入过冲区域,并在集电区维持相当一段过冲区域,避免了缩短基区渡越时间和缩短集电区渡越时间的矛盾.

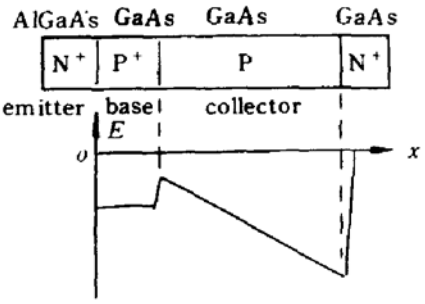

图 3　$N^+P^+PN^+$的 AlGaAs/GaAs 结构

根据以上的结果,可设计一种与图 1(c)电场分布相对应的器件结构,即在集电区有反向线性分布的电场,在基区存在加速电场. 其对应的 AlGaAs/GaAs $N^+P^+PN^+$结构如图 3 所示,预期这种器件结构可以有更高的截止频率.

四、结　　论

通过对 GaAs 器件中载流子非稳态运动的 MC 模拟,证实并解释了载流子的速度过冲效应对器件尤其是对亚微米器件高频高速特性的重要影响. 模拟结果表明,本文提出的 $N^+P^+PN^+$ GaAs 器件结构对缩短基区-集电区渡越时间有明显的作用,这对设计和开发异质 GaAs 高频高速器件提供了新思路.

参　考　文　献

[1] M. A. Littlejohn, J. R. Hauster and T. H. Glisson, *J. Appl. Phys.*, **48**, 1282(1977).

[2] W. Fawcett, A. D. Boardman and S. Swain, *J. Phys. Chem. Solids*, **31**, 1963(1970).

[3] P. T. Nguyen, D. H. Navon and T. W. Tang, *IEEE Trans. Electron Devices*, **ED-32**, 783(1985).

[4] C. M. Maziar, M. E. Klausmeier-Brown and Mark S. Lundstron, *IEEE Electron Device Lett.*, **EDL-7**, 483 (1986).

Monte Carlo Simulation of Carrier Nonsteady-State Transport in GaAs Device

Wang Weihang Ye Runtao and Guo Miaoquan
Department of Electronic & Information Engineering, Zhejiang University
Yu Zhiping
Institute of Microelectronics, Tsinghua University

(Received 12 Augest 1991; revised manuscript received 12 December 1992)

Abstract

The nonsteady-state transport of the carriers in GaAs device is simulated by using the multiparticle Monte Carlo method. The results can explain the action of velocity overshoot effect of carriers for performance of the submicro devices, A new $N^+P^+PN^+$ structure consisting of a P-collector, a P^+-base and a AlGaAs/GaAs heterojunction emitter is supposed to obviously reduce the carrier transit time in the base and collector region.

PACC: 7210, 7220D, 7220H