

# C-BN 电子输运特性的 Monte Carlo 模拟\*

于丽娟<sup>1)2)</sup> 朱长纯<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> 西安建筑科技大学基础课部, 西安 710055)

<sup>2)</sup> 西安交通大学微电子工程系, 西安 710049)

(1999 年 7 月 15 日收到)

根据 C-BN 的能带结构和极性半导体的具体特征, 确立了 C-BN 的主要散射机构, 建立了适于 Monte Carlo 模拟的物理模型, 采用单电子 Monte Carlo 法对 C-BN 体材的稳态电子输运特性进行了模拟, 得出了电子的平均漂移速度、迁移率和电子能量随电场的变化规律, 及电子的能量、动量弛豫时间随电场的变化规律.

PACC: 7210, 7220D, 7220H, 7280E

## 1 引 言

立方氮化硼(C-BN)是一种宽禁带半导体材料, 具有许多独特的性能, 诸如高的热导率、低的介电常数、高的击穿电场. 与金刚石相比, C-BN 的显著特点是高温热稳定性、化学惰性及抗辐射性能, C-BN 是 III-V 族化合物半导体中禁带宽度最大的(6.2 eV), 它既可以掺杂成 p 型半导体又可以掺杂成 n 型半导体, 而金刚石只便于掺杂成 p 型半导体. 这种可掺杂的宽禁带半导体材料更适于做高温发光器件. 利用 C-BN 制成的发光二极管已有报道<sup>[1, 2]</sup>. 由于 C-BN 的优异特性, 使得它有可能成为航空航天、高温辐射、石油探测等恶劣条件下工作的高温电子器件材料. 所以, 对其高温强场下载流子的电子输运特性进行研究极为重要.

C-BN 作为一种超硬材料(其硬度仅次于金刚石)最初被人们认识是作为改性材料开始研究的, 无论从材料的生长还是应用多侧重于它的力学性能和机械性能的研究. 对于 C-BN 半导体特性的研究则起步较晚, 特别是对其电子输运特性的研究, 目前尚无人系统地做过这方面的工作. 本文分析了 C-BN 的能带结构和极性半导体的具体特征, 确立了 C-BN 的主要散射机构, 建立了适于 C-BN 体材料 Monte Carlo (MC) 模拟的物理模型, 采用单电子 Monte Carlo 法对 C-BN 体材的稳态电子输运特性进行了模拟, 得出了电子的平均漂移速度、迁移率、

电子的平均动能随电场的变化规律, 及电子的能量、动量弛豫时间随电场的变化规律. 由于目前还没有相关的实验数据, 所以这些结果无论对于 C-BN 器件的理论模拟还是实验研究都具有非常重要的参考价值.

## 2 物理模型

### 2.1 能带结构及其主要特点

C-BN 结构是一种由两种不同原子组成的面心立方晶格套构而成的复式晶格, 它的布拉菲格子是面心立方晶格, 因而, 第一布里渊区是截角八面体-十四面体. C-BN 虽然 B 原子的价带电子是三个, N 的价电子是五个, 但组成晶体时, N 的一个价电子向 B 转移形成  $B^-N^+$ ,  $B^-$  和  $N^+$  都是四个价电子, 它们在空间按四面体配位构成闪锌矿结构, 因此, C-BN 晶体的结合除了共价键外, 也有了某种程度的离子键成分.

从能带图可以看出: C-BN 是间接跃迁半导体, 它的能带在 X 点发生劈裂, 能量极小值在  $\Delta$  轴方向的边界 X 点, 与能量次低点  $\Gamma_c$  相距约 3 eV, 价带极大值位于布里渊区中心, 与导带最低点 X 相距约 6.9 eV<sup>[3]</sup>. 极值附近能带是非抛物线性的, 引入能带的非抛物线近似<sup>[4]</sup>, 则色散关系表示成

$$\frac{\hbar^2 K^2}{2m_c^*} = r(\epsilon) = \epsilon(1 + \alpha\epsilon), \quad (1)$$

\* 国家自然科学基金(批准号: 69676004)和博士点基金(批准号: 98069828)资助的课题.

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left( 1 - \frac{m_c}{m_0} \right)^2,$$

其中  $\hbar$  为普朗克常数,  $K$  为波矢量,  $\epsilon$  为电子能量,  $m_c^*$  为电导有效质量,  $\alpha$  为非抛物线性参数,  $E_g$  为禁带宽度.

## 2.2 主要的散射机构

C-BN 的电子输运过程中存在七种散射机构: 电离杂质散射, 声学波声子散射, 极性光学波散射, 压电散射, 谷间散射, 非极性光学波散射, 中性杂质散射.

在低温和低场下, 电离杂质散射通常是重要的, 温度升高或电子能量增高, 这种散射的作用将减弱. 在非极性晶体中, 声学波形变势散射应有重要作用, 对极性半导体 C-BN 虽然极性光学波散射通常有更强的作用, 但有时在一定温度范围内计入声学波形变势散射的影响也是必要的, 与声学波形变势相比, 压电散射对低能量的电子有更强的散射作用, 且小角度散射有更高的概率. 等价零级谷间散射也是要考虑的散射结构之一, 从能带结构看, 一级谷和零级谷间的能量差较大 (3 eV), 只有在高场下能量特别大的情况下才发生, 因此一般不考虑非等价谷间的散射, 但对于研究高场下 C-BN 的电子输运特性考虑非等价谷间的散射是非常必要的. 中性杂质散射只有在温度极低的情况下才对半导体中的电子输运产生影响, 即使对 Si 进行 MC 模拟, 一般都忽略这种散射机构的影响, 研究 C-BN 的高温、高场特性显然应该忽略这种散射.

下面逐个讨论各主要的散射机构以及散射概率的表达式.

### 2.2.1 电离杂质散射

对于电离杂质散射最初有两种不同的公式: Conwell-Weisskopf (CW) 近似<sup>[5]</sup>和 Brooks-Herring (BH) 近似<sup>[6]</sup>, CW 近似更加适合于应用在高补偿材料, 而 BH 更适合于电离杂质低复合或高温特性, 我们采用 BH 近似<sup>[2]</sup>.

$$P_{c,i}(\epsilon) = \frac{\sqrt{2} N_1 Z^2 q^4 m^{3/2} \epsilon (1 + \alpha \epsilon)^{1/2}}{\pi \hbar^4 \epsilon_s^2 q_D^2 \left( \frac{8mq}{\hbar^2} \epsilon + q_D^2 \right)} (1 + 2\alpha \epsilon), \quad (2)$$

$$q_D^2 = \frac{q^2 N_1}{\epsilon_s k_B T},$$

$$\alpha = \frac{1}{E_g + E_c} \left( 1 - \frac{m^*}{m_0} \right)^2,$$

$N_1$  为掺杂浓度,  $Z$  为杂质原子的电荷数,  $\epsilon_s$  为材料的静态介电系数,  $m^*$  为有效质量,  $E_c$  为导带低能量值,  $\alpha$  为非抛物线系数.

### 2.2.2 声学波形变势散射

在高温下参与散射的声学波声子能量很小 (meV), 因此声学波形变势散射可以看成准弹性的散射过程<sup>[7]</sup>, 由于剧烈的电子热运动, 考虑电子的波谷可能远离导带底, 表现出严重的非抛物性特征. 对于 C-BN 来说, 由于导带极小值点位于 X 方向布里渊区边界, 必须采用椭球等能面近似. 弹性、非抛物、椭球等能面近似的声学波形变势散射概率为

$$P_{c,ac}(\epsilon) = \frac{\sqrt{2} m_d^{3/2} k_B T_0 \Xi^2 \epsilon^{1/2}}{\pi \hbar^4 u^2 \rho} (1 + \alpha \epsilon)^{1/2} (1 + 2\alpha \epsilon), \quad (3)$$

其中  $m_d$  为状态密度有效质量,  $u$  为纵声学波声速,  $\rho$  为晶体密度,  $k_B$  为玻耳兹曼常数,  $T_0$  为晶格温度,  $\Xi$  为声学波散射形变势,  $\alpha$  为非抛物线系数.

### 2.2.3 极性光学波散射

极性光学波散射对于极性晶体 C-BN 来说极其重要, Fawcett 等人<sup>[4]</sup>在对 GaAs 进行模拟时十分细致地推导了 GaAs 低场情况下零级谷或能带之中的这一散射机构的概率表达式. 后来一直被用于半导体的模拟中, 由于 C-BN 材料没有与其能带结构相适应的表达式, 理论推导相当复杂, 所以这里仍然采用这一公式代替 C-BN 的散射概率, 即

$$P_{c,pop}(\epsilon) = \frac{q^2 \omega_0 m^{*1/2} (1 + 2\alpha \epsilon')}{4 \sqrt{2} \pi \epsilon_p \hbar (\epsilon (1 + \alpha \epsilon))^2} F_0(\epsilon, \epsilon') \cdot \left( n_q + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right), \quad (4)$$

$$\epsilon' = (\epsilon + \hbar \omega_{pop})(\epsilon - \hbar \omega_{pop})$$

$$F_0 = \ln \frac{\sqrt{r(\epsilon)} + \sqrt{r(\epsilon')}}{\sqrt{r(\epsilon)} - \sqrt{r(\epsilon')}},$$

$$n_q = \left[ \exp\left(\frac{\hbar \epsilon_{pop}}{k_B T_0}\right) - 1 \right]^{-1}, \quad \frac{1}{\epsilon_p} = \frac{1}{\epsilon_f} - \frac{1}{\epsilon_s},$$

其中  $\omega_{pop}$  为极化光学声子的角频率,  $\epsilon_s$  为静态介电系数,  $\epsilon_f$  为高频介电系数,  $m_q$  极化光学声子的热平衡数目.

### 2.2.4 声学波压电散射

在极性晶体中, 弹性波引起交替变化极化并以其所产生的静电势散射电子. 在 GaAs 中室温下声学波压电散射并不比相应的形变势散射弱很多, 所

以在研究 C-BN 的电子传输特性时,本文考虑了压电散射的影响,但只有在温度和电场非常低的情况下压电散射才起作用.采用动量弛豫代替散射率<sup>[8]</sup>,其散射率的表达式为

$$P_{e, \text{pz}} = \frac{q^2 K_z k_B T m^* \frac{1}{2}}{2\sqrt{2}\pi\hbar^2 \epsilon_s} \epsilon^{-\frac{1}{2}} (1 + \alpha\epsilon)^{-\frac{1}{2}} (1 + 2\alpha\epsilon), \quad (5)$$

$$K_z = \frac{\hbar^2}{\epsilon_s u},$$

其中  $h_{\text{pz}}$  为压电常数,  $m^*$  为有效质量.

### 2.2.5 等价零级谷间散射

和谷内的光学波声子散射相似,谷间散射仍被看作是形变势的相互作用,对谷间散射作各向同性处理,作非抛物、椭球等能面近似时,电子的谷间散射概率为<sup>[7]</sup>

$$P_{e, \text{zoi}}(\epsilon) = \frac{D_{\text{eq}}^2 m_d^{\frac{3}{2}} (Z_f - 1)}{\sqrt{2}\pi\hbar^3 \omega_e} \sqrt{\tau(\epsilon \pm \hbar\omega_e - \Delta\epsilon_{\text{fi}})} \cdot [1 + 2\alpha(\epsilon \pm \hbar\omega_e - \Delta\epsilon_{\text{fi}})] N_e + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}, \quad (6)$$

$$N_e = \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega_e}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1},$$

其中  $D_{\text{eq}}$  为谷间声子散射的形变势常数,  $Z_f$  为等价谷数,  $\omega_e$  为声子角频率,  $N_e$  为热平衡声子数,  $\Delta\epsilon_{\text{fi}}$  表示初态和末态两谷能量差值.

尽管 C-BN 的最低能谷和次低谷之间的能量差非常大(3 eV),但由于在高场下电子能量很高,就必须考虑非等价谷之间的散射.

## 3 Monte-Carlo 方法

在模拟 C-BN 材料的稳态电子输运特性时,假定 C-BN 材料的电子输运是各向同性的,这样问题就变成一个与时间和空间无关的单一均匀稳态问题,可采用单电子 Monte Carlo (SPMC) 方法进行模拟.若模拟时间足够长,可消除初态的选择对结果的影响.它的基本思想是:对于大量粒子就某一变量进行平均和一个粒子在足够长的时间内就该变量进行的平均结果相同.

在模拟前首先要确定模型中各个参数的取值,作为新型宽禁带半导体材料有关参量的测量工作很不完善.本文细致地查找并对这些特性参量的实验值和理论值<sup>[3,9-11]</sup>进行了分析,对某一参数的测

量,若有多个测量结果,选取与更多的测量结果相符合的测量值,若结果无法比较,则以最新的测量为准,少部分没有测量结果的以理论计算值为准,还有个别参量既没有实验测量结果也没有理论计算结果,则参照金刚石的参数采用经验值(比如说形变势常数),表 1 详细列出了本文 MC 模拟时所用的主要参数.

表 1 MC 模拟的主要参数

参数名称	参数值	参数名称	参数值
晶格常数(A)	3.6157	纵极化光学波声子角频率/Hz	$40.1 \times 10^{12}$
晶体密度/ $\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	3.487	横极化光学波声子角频率/Hz	$31.9 \times 10^{12}$
纵向声子速度/ $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	14140	零级谷间形变势/ $\text{eV}\cdot\text{m}^{-1}$	$7.5 \times 10^{10}$
纵弹性模量/ $\text{dyn}\cdot\text{cm}^{-2}$	$7.12 \times 10^{12}$	长声学波形变势/eV	9
低频介电系数	7.1	电子有效质量	$0.752 m_e$
高频介电系数	4.5	静态电子质量/kg	$9.1 \times 10^{-31} \cdot \text{m}^{-3}$
禁带宽度/eV	6.2	声学波压电系数/ $\text{A}\cdot\text{S}\cdot\text{m}^{-2}$	0.843

## 4 C-BN 稳态特性的 SPMC 模拟结果

本文采用 SPMC 法模拟统计得出了 C-BN 的稳态输运特性:电子平均漂移速度、电子的迁移率和电子能量随电场的变化规律,及电子能量弛豫、动量弛豫随电场的变化规律.图 1 为 300 K 时,电子平均漂移速度随电场的变化规律.图中可以看到,在  $E < 10 \text{ V}/\mu\text{m}$  时,曲线基本呈直线,符合欧姆定律,而当  $E > 10 \text{ V}/\mu\text{m}$  时,电子平均漂移速度随电场的变化开始变缓,非等价谷之间的散射使电子平均漂移速度趋于饱和,速度达  $8.5 \times 10^4 \text{ m/s}$ .图 2 为电子能量随电场的变化规律.横坐标表示电场,纵坐标表示电子的平均能量.曲线可分三部分, $E < 10 \text{ V}/\mu\text{m}$  时,电子能量变化很小,当  $10 \text{ V}/\mu\text{m} < E < 40 \text{ V}/\mu\text{m}$  时,电子能量随着电场的增加开始缓慢上升, $E > 40 \text{ V}/\mu\text{m}$  时,电子能量剧烈增加,当  $E = 100 \text{ V}/\mu\text{m}$  时,电子能量达 0.95 eV.表现出强场下,电子从电场获得的能量明显高于传递给晶格的能量,电子被显著加热,而成为热电子.图 3 为 300 K 条件下,电子的迁移率随电场的变化规律.从图中可以看到,电子迁移率随着电场的增加而下降,其物理机制是:强场下载

流子被显著加热,与平衡时相比,载流子的平均动能显著增加,在较强电场下,晶格散射为主要的散射机制,载流子的动能愈高遭受散射愈频繁,从而引起迁移率降低.图4是在相同温度下得到的电子动量弛豫和能量弛豫随着电场的变化规律.图中看到,电子的能量弛豫时间大于动量弛豫时间,动量弛豫随着电场的变化规律符合半导体输运特性的一般规

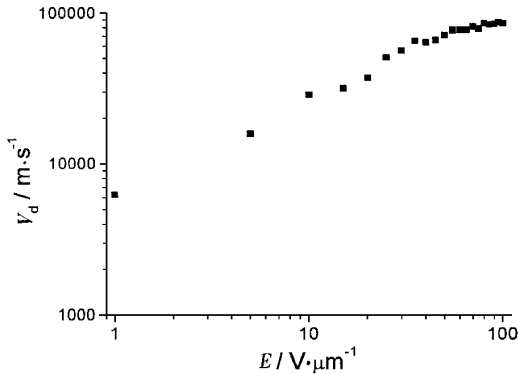


图1 电子平均漂移速度与电场之间的关系

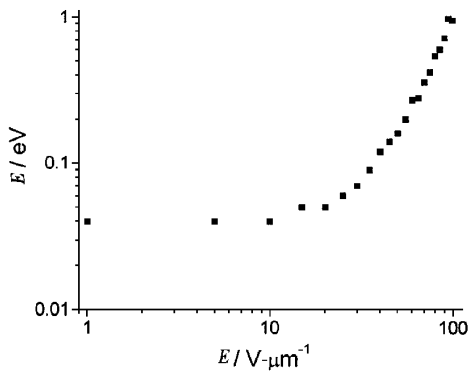


图2 电子能量与电场之间的关系

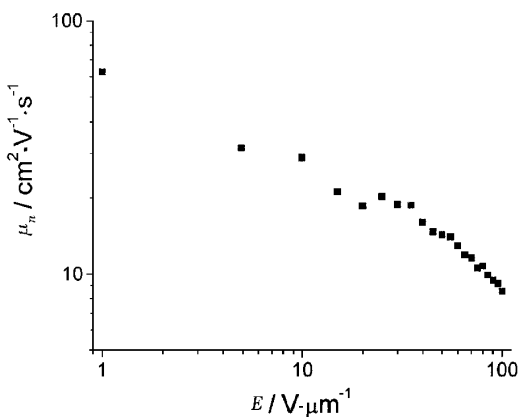


图3 电子迁移率与电场之间的关系

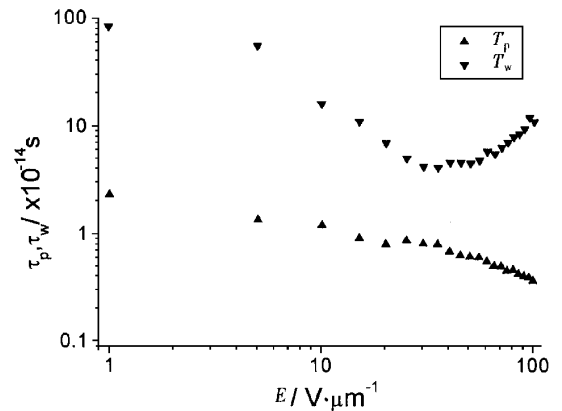


图4 电子的能量弛豫时间和动量弛豫时间与电场之间的关系

律,当  $E < 40 \text{ V}/\mu\text{m}$  时,能量弛豫时间随着电场的增加呈下降的趋势,而当电场大于  $40 \text{ V}/\mu\text{m}$  时曲线开始上翘,原因尚不清楚,很可能是某种晶格散射突然减小造成的.从物理机制上看,高场下电子能量急剧增加,极性光学波散射减小,但是非极性光学波散射概率却加速上升,电离杂质散射明显减小.电子的平均漂移速度增加缓慢,而能量增加确很快,因此使得能量弛豫时间随着电场的增加而增加.

## 5 结 论

本文采用单电子 MC 方法研究了 C-BN 的稳态电子输运特性,模拟得出了电子的迁移率、电子平均漂移速度、电子能量随电场的变化规律,及电子能量弛豫、动量弛豫随电场的变化规律.同时计算结果表明,在  $1 \text{ V}/\mu\text{m}$  的电场下没有发现压电散射,在温度  $100 \text{ K}$  时,也没有发现压电散射,说明,在我们模拟的温度和电场条件下,可以不考虑压电散射的影响.另外,在大于  $80 \text{ V}/\mu\text{m}$  的高场下确实发现了非等价谷间的散射.模拟结果表明,在杂质浓度为  $10^{22}/\text{cm}^2$  时, C-BN 高场下的电子迁移率并不高 ( $8.5\text{--}62.6 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ),所以用掺杂的 C-BN 做高温器件并不理想.高场下 C-BN 的电子能量较高(在电场  $100 \text{ V}/\mu\text{m}$  时,电子的平均能量达  $0.95 \text{ eV}$ ),而且 C-BN 具有负电子亲和势,所以 C-BN 材料可能更适合于做场发射器件.关于 C-BN 的场发射由于目前还没有相应的实验数据,所以我们所得的这些模拟结果对 C-BN 器件的理论模拟与实验研究工作都是很有意义的.

- [ 1 ] L. Vel. G. Demazeau , J. Etowoneau , *Mater. Sci. Eng.* , **B10** ( 1991 ) , 149.
- [ 2 ] O. Mishima *et al.* , *Appl. Phys. Lett.* , **53**( 1988 ) , 962.
- [ 3 ] M. Huang *et al.* , *J. Phys. Chem. Solids* **46**( 1985 ) , 977.
- [ 4 ] W. Fawcett *et al.* , *J. Phys. Chem. Solids* **31**( 1970 ) , 1963.
- [ 5 ] E. M. Conwell *et al.* , *Phys. Rev.* , **77**( 1950 ) , 388.
- [ 6 ] H. Brooks , C. Herring , *Phys. Rev.* , **83**( 1951 ) , 879.
- [ 7 ] C. Jacoboni *et al.* , *Rev. Mod. Phys.* , **55**( 3 ) ( 1983 ) , 645.
- [ 8 ] T. Kurosawa , *Kyoto. J. Phys. Soc. Japan. Suppl.* , **24**( 1996 ) , 424.
- [ 9 ] M. Nell , *Handbook of Electronic Materials. Vol 2 : III—V Semiconductor Compounds.*
- [ 10 ] T. Soma *et al.* , *Mater. Res. Bull.* **9**( 1974 ) , 755.
- [ 11 ] P. J. Gielisse *et al.* , *Phys. Rev.* , **155**( 1967 ) , 1039.

## MONTE CARLO SIMULATION OF C-BN ELECTRONICS TRANSPORT CHARACTERISTICS\*

YU LI-JUAN<sup>1,2)</sup> ZHU CHANG-CHUN<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> *Department of basic courses , Xi 'an Construction and Technology University , Xi 'an 710055 , China )*

<sup>2)</sup> *Department of Micro-electronic Engineering , Xi 'an Jiaotong University , Xi 'an 710049 , China )*

( Received 15 July 1999 )

### ABSTRACT

In the paper , according to the energy-band structure of C-BN and specific characteristics of polar semiconductor , the main scattering mechanism of C-BN is built , and the physical model applicable to Monte Carlo ( MC ) simulation is set up. It is the first time that the stable-state electronics transport characteristics of bulk C-BN is simulated by single electronics MC method. The variation laws of mean drift velocity , mobility as well as electronic energy with electrical field are obtained respectively. Also , the variation laws of electronic energy relaxation time and momentum relaxation time with electrical field are obtained respectively.

**PACC** : 7210 ; 7220D ; 7220H ; 7280E

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 69676004 ).