

SiC/SiO₂ 界面粗糙散射对沟道迁移率影响的 Monte Carlo 研究

尚也淳 张义门 张玉明

(西安电子科技大学微电子研究所, 西安 710071)
(2000 年 4 月 10 日收到, 2001 年 2 月 19 日收到修改稿)

提出了一种 SiC 反型层表面粗糙散射的指数模型, 并对 6H-SiC 反型层迁移率进行了单电子的 Monte Carlo 模拟. 模拟中考虑了沟道区的量子化效应. 模拟结果表明, 采用表面粗糙散射的指数模型能够使 SiC 反型层迁移率的模拟结果和实验值符合得更好. 模拟结果还反映出有效横向电场较高时表面粗糙散射的作用会变得更显著, 电子的屏蔽效应降低了粗糙散射对沟道迁移率的影响, 温度升高会引起沟道迁移率降低.

关键词: 6H-SiC, 反型层迁移率, 表面粗糙散射, 指数模型

PACC: 7210, 7220D, 7280

1 引 言

SiC 是目前引人瞩目的宽禁带半导体材料之一, 其优异的物理特性使其具备了可制作成高温、高频、抗辐照、高功率和发蓝光器件的能力. 和别的化合物半导体材料相比, SiC 的最大优点在于可以在其上直接热生长氧化物. 但由于工艺等原因, SiC 的表面质量问题却没有得到很好解决, 这将会直接影响到 SiC/SiO₂ 界面的特性. 当前在 SiC 表面生长的 GaN 薄膜质量低于在蓝宝石上生长的 GaN 薄膜, Ramachandran^[1]就认为这是由于 SiC 表面不平整而引起了缺陷向外延层中的延伸. 商用 SiC 衬底上一般都会发现有由于抛光而引起的划痕. 另外 SiC 生长过程中的微管缺陷也会引起 SiC 表面的粗糙度加大. 当前 6H-SiC 绝缘栅场效应管的沟道迁移率比人们预期的值低得多, 实验测量值仅为 40—50cm²/Vs. 分析认为, 当有效横向电场较强时, 主要是由于 SiC 过强的表面粗糙散射限制着 SiC 反型层迁移率的提高. Joshi^[2]曾用 Monte Carlo 方法对 6H-SiC 的反型层电子迁移率进行了模拟. 对于表面粗糙散射采用了传统的高斯模型, 为了和实验值相符, 他取拟合的相关长度 $L = 2.2\text{nm}$, 均方根高度 $\Delta = 0.75\text{nm}$. 但依据当前对 SiC 表面所作的原子力显微镜分析^[1], 均方根高度高达 1.5 nm. 本文的模拟结果显示这时高斯模型已经不能很好地用来对 SiC 反型层的表面粗糙

散射进行描述.

本文采用指数形式的自协方差函数来对 SiC/SiO₂ 的界面粗糙进行表述, 并由此得出了一种新的表面粗糙散射模型. 采用这个模型对 6H-SiC 的反型层电子迁移率进行了 Monte Carlo 模拟, 在模拟过程中考虑了电子屏蔽效应对表面粗糙散射的影响. 结果表明, 本文得出的指数模型能更好地反映 SiC/SiO₂ 的表面粗糙散射.

2 SiC/SiO₂ 界面粗糙散射的指数模型

限制在很窄的沟道中运动的载流子将和氧化物半导体界面发生频繁的碰撞, 碰撞后载流子在沟道平面内的运动方向发生改变, 从而导致动量弛豫, 尤其在沟道载流子浓度较高时, 这种表面散射作用更加明显.

设 x 代表沟道平面内的位置, 用 SiC/SiO₂ 界面沿垂直于沟道方向的位移 $Z(x)$ 来描述表面粗糙状况, 将 $Z(x)$ 作傅里叶展开

$$Z(x) = \sum_q Z_q e^{iqx}, \quad (1)$$

其中 Z_q 为 $Z(x)$ 的傅里叶系数, q 为散射前后波矢的变化. SiC/SiO₂ 界面的不平整会引起势的波动

$$V[z + Z(x)] = V(z) + Z(x) \frac{\partial V(z)}{\partial z}, \quad (2)$$

其中 $V(z)$ 为垂直于 SiC/SiO₂ 界面 z 方向的势. 那么由 k 状态到 k' 状态的散射矩阵元可表示为^[3]

$$M(k, k') = \frac{1}{A} \iint \phi^*(z) Z(x) \frac{dV(z)}{dz} \phi(z) e^{(k-k')x} dx dz$$

$$= eE_{\text{eff}} Z_q, \quad (3)$$

其中 A 为所涉及的沟道面积, $\phi(z)$ 为波函数, e 为电子电量, E_{eff} 为沟道中沿 z 方向的电场, 称有效横向电场, E_{eff} 由两部分构成, 一部分来自于耗尽层电荷, 另一部分来自于沟道中的载流子^[4],

$$E_{\text{eff}} = \frac{e}{\epsilon\epsilon_0} (N_s/2 + N_{\text{depl}}), \quad (4)$$

其中 N_s 为沟道载流子的面密度, N_{depl} 为耗尽层中电荷中心的面密度. $\epsilon\epsilon_0$ 为 SiC 的介电常量.

假设 SiC/SiO₂ 界面粗糙由指数型自协方差函数来描述,

$$\langle Z(x)Z(x') \rangle = \Delta^2 \exp\left[-\frac{|x-x'|}{L}\right], \quad (5)$$

Δ 为均方根高度, L 为相关长度, 自协方差函数 $\langle Z(x)Z(x') \rangle$ 为距离为 $|x-x'|$ 的任意两点 x 和 x' 的界面位移乘积的平均值, $\langle Z(x)Z(x') \rangle$ 的傅里叶系数为 $|Z_q|^2$ ^[3].

$$|Z_q|^2 = \frac{\pi\Delta^2 L^2}{A} \frac{1}{1+L^2 q^2/2}. \quad (6)$$

将 (6) 和 (4) 式代入 (3) 式, 可得到

$$|M(k, k')|^2 = \frac{\pi\Delta^2 L^2}{A} \left(\frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0}\right)^2 \left(\frac{N_s}{2} + N_{\text{depl}}\right)^2$$

$$\cdot \frac{1}{1+L^2 q^2/2}. \quad (7)$$

SiC 反型层中界面粗糙散射率可表示为

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{A}{4\pi^2} \int |M(k, k')|^2$$

$$\cdot (1 - \cos\theta) \delta(E_k - E_{k'}) dk'. \quad (8)$$

将 (8) 式代入 (7) 式, 则指数型表面粗糙散射率可化为

$$\Gamma = \frac{m_d e^2 E_{\text{eff}}^2 \Delta^2 L^2}{2\hbar^3} \int_0^{2\pi} \frac{1}{1+L^2 q^2/2} (1 - \cos\theta) d\theta, \quad (9)$$

其中 $q^2 = 2k^2(1 - \cos\theta)$, m_d 为态密度有效质量. 考虑到沟道中电子的屏蔽效应, 实际散射矩阵元的平方为^[5]

$$|M'(k, k')|^2 = |M(k, k')|^2 / \epsilon^2(q), \quad (10)$$

$\epsilon(q)$ 为介电函数.

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{e^2}{2\epsilon\epsilon_0} \frac{1}{q} \frac{m_d}{\pi\hbar^2} F(q) [1 - \theta(q - 2k_F)]$$

$$\cdot [1 - (2k_F/q)^2]^{-2}, \quad (11)$$

其中 $F(q) = \iint e^{-q|z-z'|} |\phi(z)|^2 |\phi(z')|^2 dz dz', \hbar$

为普朗克常数, k_F 为费米波矢, $k_F = (2\pi N_s)^{1/2}$, $\theta(x)$ 为单位阶跃函数, 那么包括载流子屏蔽效应的表面粗糙散射率可通过相似方法求得.

3 6H-SiC 反型层迁移率的 Monte Carlo 模拟

为和实验取得一致起见, 在模拟中取 SiC/SiO₂ 界面垂直于 c 轴, 在 6H-SiC MOS 结构中, 由于存在垂直于 SiC/SiO₂ 界面的电场, 从而在界面上引起能带弯曲, 并形成势阱. 6H-SiC 反型层中的电子就被限制在这个势阱中, 它们在垂直于界面方向上的运动是量子化的. 我们采用 6 能谷只考虑基带的能带模型来对 6H-SiC 反型层迁移率进行单电子的 Monte Carlo 模拟. 由于模拟过程中所涉及的电子都处于能量最低的子带上, 能带的非抛物线因子不大, 所以可以采用抛物线能带近视. 处于基带上电子的能量为

$$E = E_0 + E_k = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x} + \frac{k_y^2}{m_y} \right), \quad (12)$$

其中 E_0 为量子化能值, E_k 为沟道电子运动的能量, k_x, k_y 分别为反型层两垂直方向的波矢, m_x, m_y 分别为反型层对应方向的有效质量.

反型层电子散射矩阵元的计算涉及到具体的 z 向波函数, 本文采用近似的变分波函数代替各子带的实际包络函数.

$$\phi_0(z) = \sqrt{\frac{c_0^3}{2}} z \exp\left(-\frac{c_0 z}{2}\right), \quad (13)$$

其中 c_0 为待定的变分参数.

在对 6H-SiC 反型层电子输运进行 Monte Carlo 模拟过程中, 本文采用了所导出的指数型表面粗糙散射的模型, 另外在模拟中还包括了沟道中的库仑散射、声学波形势散射、极化光声子散射、等价零级谷间散射、等价一级谷间散射, 其中库仑散射计入了库仑电荷中心的相关性^[6].

4 模拟结果与分析

根据 Lipkin^[7]对一种改进工艺的 SiC/SiO₂ 界面的测量结果, 在以下的模拟分析中分别取 $N_{\text{ox}} = 2.3 \times 10^{12}/\text{cm}^2$, $N_{\text{it}} = 10^{12}/\text{cm}^2$. 衡量 SiC/SiO₂ 界面粗糙度的均方根高度 Δ 和相关长度 L 还没有看到过直接的测量结果. 文献[1]曾用氢刻蚀法首先对 6H-SiC 进行了表面处理, 然后对处理后的 SiC 表面进行了

原子力显微镜分析,分析结果表明 $\Delta = 1.5\text{nm}$. 可以肯定在当前工艺水平条件下, SiC/SiO₂ 界面的 Δ 应不低于 1.5nm. 一般相关长度的测量结果相差很大, 因为测量结果往往和所观察测量的表面面积大小有关. 对 Si/SiO₂ 界面所作的原子力显微镜分析表明^[8], 当相关长度为 15nm 时, 描述 Si/SiO₂ 界面的指数模型和原子力显微镜观察结果符合较好, 因此在本文中近似取 $L = 15\text{nm}$. 模拟中用到其他的 6H-SiC 的一些参数来源于以往的文献报道^[2,9,10].

图 1 示出 6H-SiC 反型层迁移率的模拟结果与实验值的比较, 其中在模拟中分别采用了描述 SiC/SiO₂ 界面粗糙散射的高斯模型和指数模型. 在高斯模型中取 $\Delta = 1.5\text{nm}$, $L = 10\text{nm}$, 这是因为当相关长度 L 取 10nm 时, 表面粗糙散射取高斯模型后的 Monte Carlo 模拟结果和实验值最接近. 由图 1 可以看出, 当 SiC/SiO₂ 界面粗糙散射采用指数模型时, 模拟结果和实验测量符合很好, 这说明指数模型比高斯模型能更好地描述 6H-SiC 反型层中 SiC/SiO₂ 的界面粗糙散射.

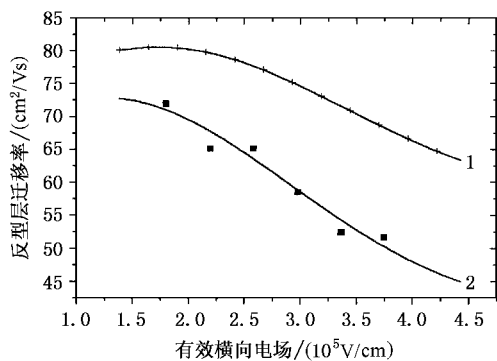


图 1 6H-SiC 反型层迁移率随有效横向电场的变化 ■ 为测量值, 曲线 1 为高斯模型模拟值, 曲线 2 为指数模型模拟值

图 2 示出 SiC/SiO₂ 界面粗糙度对反型层电子迁移率的影响, 图中取 $L = 15\text{nm}$. 由图 2 可以看出, 表面粗糙散射的减弱会引起反型层迁移率增大. 可见通过进一步改进工艺条件提高 SiC/SiO₂ 界面的平整度将有利于 SiC 反型层迁移率的提高. 由图 2 还可以看出, 当有效横向电场变强时, 界面粗糙散射的作用将变得更加明显, 这是因为当表面有效横向电场升高时, 反型层电子浓度变大, 和对界面粗糙散射的屏蔽作用相比, 电子对库仑散射的屏蔽作用变得更强, 降低了库仑电荷对散射的影响, 从而使界面粗糙散射的作用变得显著.

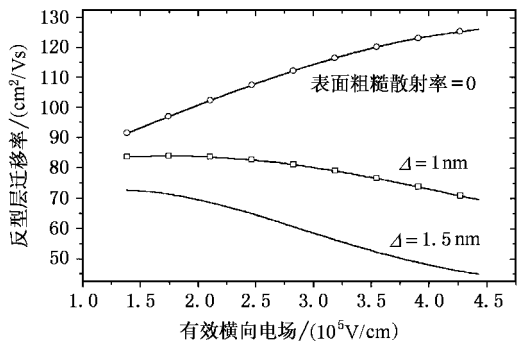


图 2 不同表面粗糙散射对反型层迁移率的影响

图 3 示出不同粗糙表面条件下 6H-SiC 反型层迁移率与温度的关系(有效横向电场为 $2.477 \times 10^5\text{V/cm}$, $L = 15\text{nm}$). 由图 3 可以看出, 随着温度的升高, SiC 反型层迁移率降低, 这是因为在高温下光学声子和声学声子晶格散射的作用增强, 引起反型层中的电子散射作用整体加大, 而这时表明粗糙散射在总散射份额中所占的比例变小, 因此它的作用不再明显. 从图 3 还可以看出, 在当前的工艺水平条件下, 6H-SiC 反型层电子迁移率在 800K 时的预测值为 20—30cm²/Vs.

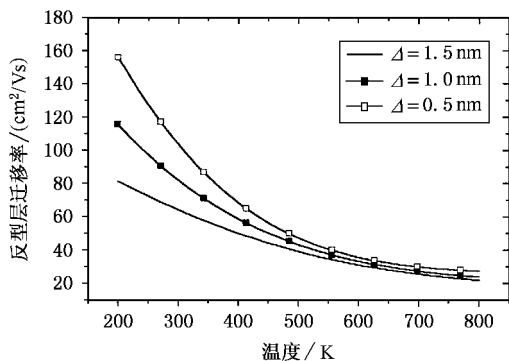


图 3 温度对 SiC 反型层迁移率的影响

当反型层电子浓度升高时, 电子对表面粗糙散射的屏蔽作用将不容忽视. 图 4 示出表面粗糙散射分别计入屏蔽效应和不计入屏蔽效应条件下(库仑散射已经计入了屏蔽效应), 库仑散射率和表面粗糙散射率在总散射率中所占份额随有效横向电场的变化. 由图 4 可以看出, 在有效横向电场较高时, 电子屏蔽作用大大降低了表面粗糙散射的散射率. 图 4 还示出有效横向电场较低时, 库仑散射在 6H-SiC 反型层电子散射中起主要作用, 而当有效横向电场升高时, 表面粗糙散射作用变得更加显著.

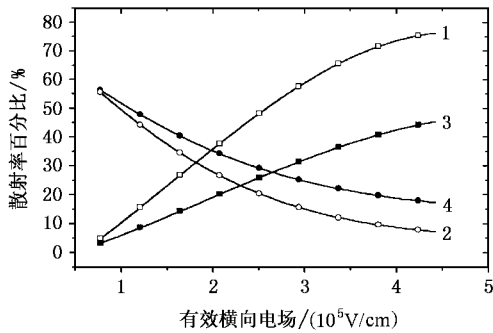


图4 反型层电子屏蔽效应对散射率各份额的影响 曲线1为表面粗糙散射,不计入粗糙散射的屏蔽效应,曲线2为库仑散射,不计入粗糙散射的屏蔽效应,曲线3为表面粗糙散射,计入粗糙散射的屏蔽效应,曲线4为库仑散射,计入粗糙散射的屏蔽效应

5 结 论

本文提出一种指数型的 SiC 反型层表面粗糙散射的模型,并在此模型中包括了反型层电子的屏蔽效应对表面粗糙散射的影响.该模型区别于传统的

高斯模型在于它用了指数型的自协方差函数来对 SiC/SiO₂ 界面进行描述.基于这种指数型的表面粗糙散射模型,本文对 6H-SiC 反型层的电子迁移率进行了单电子的 Monte Carlo 模拟,在模拟中考虑了沟道反型层的量子化,并采用了 6 能谷只考虑基带的 6H-SiC 反型层能带模型以及变分波函数近似.对于 SiC 反型层中电子的散射,模拟中包括了库仑散射、表明粗糙散射、声学波形势散射、极化光声子散射、等价零级谷间散射、等价一级谷间散射,其中库仑散射计入了库仑电荷中心的相关性.

模拟结果表明,当 SiC/SiO₂ 表面粗糙散射采用指数模型时能够使最终的 6H-SiC 反型层电子迁移率的模拟结果和实验值符合得更好.对 6H-SiC 反型层迁移率的分析还表明,当有效横向电场较低时,库仑散射在 SiC 反型层的电子输运中起主要散射作用,而当有效横向电场升高时,表面粗糙散射的作用会变得越来越显著.温度是影响 SiC 反型层迁移率的重要因素,在当前工艺条件下,温度为 800K 时,6H-SiC 反型层的电子迁移率将降低到 20—30 cm²/Vs.

- [1] V. Ramachandran, M. F. Brady, *J. Electronic Materials* **27**(1998), 308.
- [2] R. P. Joshi, *Appl. Phys. Lett.* **72**(1998) 2156.
- [3] L. X. Ye, Monte Carlo Simulation of Small Size Semiconductor Device (Science Press, Beijing, 1997) [in Chinese] [叶良修,小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟(科学出版社,北京,1997)].
- [4] S. Yamakawa, H. Ueno, *J. Appl. Phys.* **79**(1996) 911.
- [5] B. R. Nag et al., *J. Appl. Phys.* **86**(1999) 459.
- [6] Y. C. Shang, Y. M. Zhang, Y. M. Zhang, *Acta Electronica Sinica* **29**

- (2)(2001), 13 [in Chinese] [尚也淳,张义门,张玉明,电子学报 **29**(2)(2001), 13].
- [7] L. A. Lipkin, J. W. Palmour, *J. Electronic Materials*, **25**(1996), 909.
- [8] T. Yoshinobu, A. Iwamoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**(1994) 383.
- [9] Y. M. Zhang et al., *Acta Physica Sinica* **46**(1997) 2215 [in Chinese] [张玉明等,物理学报 **46**(1997) 2215].
- [10] Y. C. Shang et al., *Acta Physica Sinica* **49**(2000) 1786 [in Chinese] [尚也淳等,物理学报 **49**(2000) 1786].

MONTE CARLO STUDY ON INTERFACE ROUGHNESS DEPENDENCE OF ELECTRON MOBILITY IN 6H-SiC INVERSION LAYERS

SHANG YE-CHUN ZHANG YI-MEN ZHANG YU-MING

(*Microelectronics Institute ,Xidian University ,Xi 'an 710071 ,China*)

(Received 10 April 2000 ; revised manuscript received 19 February 2001)

ABSTRACT

A new interface roughness scattering model is developed using exponential autocovariance functions. The electron mobility in 6H-SiC inversion layers is studied by single-electron Monte Carlo approach that takes into account the size quantization and the main scattering mechanisms in SiC inversion layers. The simulation results show that the electron mobility calculated using the exponential model presented in this paper are in good agreement with the experimental data. Interface roughness scattering is shown to play a strong role in the high effective transverse field. The electron mobility falls as the temperature increases. The roughness scattering under higher effective fields is reduced significantly by screening effects.

Keywords : 6H-SiC , mobility in inversion layers , interface roughness scattering , exponential model

PACC : 7210 , 7220D , 7280