

3C-SiC 体特性的 Monte Carlo 模型

张玉明 张义门 崔 杰

(西安电子科技大学微电子研究所, 西安 710071)

罗晋生

(西安交通大学微电子工程系, 西安 710049)

(1997 年 2 月 17 日收到; 1997 年 5 月 4 日收到修改稿)

采用 Monte Carlo 方法模拟了 3C-SiC 材料中电子的静态输运特性. 在细致分析材料的能带结构和主要散射机构, 建立了适于统计模拟的物理模型的基础上, 采用自洽的 SPMC 方法进行模拟, 得出了电子迁移率随温度、电子平均漂移速度随电场的变化规律, 及电子的能量和动量弛豫时间随温度和电场的变化规律. 所得结果与实验符合较好.

PACC: 7210; 0250; 7220H; 7280

1 引 言

碳化硅(SiC)是一种宽禁带间接带隙半导体, 具有高场下电子饱和漂移速度大、击穿电场高、导热系数大、高温时化学性质稳定等特点. SiC 较 Si, GaAs 等材料的优良特性, 使之在航空航天、高温辐射、雷达与通讯、石油勘探、汽车电子化等对器件的温度范围、速度、功率及抗辐射有较高要求的领域, 有着广阔的应用前景^[1,2].

本文建立了 3C-SiC 体材料 Monte Carlo(MC)模拟的物理模型, 即分析了其特定的能带结构及主要的散射机构, 建立了准确的色散关系与主要的散射机构的概率表达式. 系统地模拟了 3C-SiC 材料中的电子输运特性, 得出了电子迁移率随温度、电子平均漂移速度随电场的变化规律, 充分体现了 3C-SiC 的高温与高场特性. 更为重要的是得到了 3C-SiC 的电子能量和动量弛豫时间随温度和电场的变化规律, 为开展 3C-SiC 器件模拟工作提供了重要数据. 所得结果与实验及前人的模拟结果进行了比较.

2 物理模型

2.1 能带结构

3C-SiC 的晶体结构是闪锌矿型, 第一布里渊区的形状是与 Si 相类似的十四面体, 其能带结构也与 Si 类似. 电子回旋共振测量^[3]得出其横向有效质量 m_t 为 $(0.247 \pm 0.11) m_0$, 纵向有效质量 m_l 为 $(0.667 \pm 0.015) m_0$. 这一结果一直被后来的研究者所引用^[5-7]. 同时测得的还有 3C-SiC 中施主 N 元素的电离能为 38 meV. 1993 年 Kono 又对 3C-SiC 作了更

为细致的电子回旋共振测量^[8], 得出的 m_t 和 m_l 的值与 Kaplan 的结果稍有差异 ($0.25 m_0$ 和 $0.67 m_0$), 但测得施主 N 的电离能为 19 meV , 与 Kaplan 的结果差别较大. 这一结果与 Yamanaka 等人^[9]的测量结果 (18 meV) 符合较好. 鉴于 Kono 的工作较为细致, 本文采用他的测量结果进行 MC 模拟. Kono 根据测量中没有观察到体现导带极小值点位于布里渊区沿 X (即 $<100>$) 方向的边界附近时所应出现的骆驼背结构 (camel's-back structure), 从而断定 3C-SiC 的导带极小值点必然恰好位于布里渊区边界处. 另外一些研究者对 3C-SiC 能带结构进行了仔细的理论计算: Hemstreet 和 Fong^[10] 采用经验赝势法 (EPM) 计算, Talwar 和 Feng^[11] 采用经验紧束缚法 (ETB) 计算, Srichaikul 等人^[12] 采用 EPM 和 ETB 相结合的方法计算. 他们得到的能带结构及参数值彼此相差无几, 但与测量值略有差别.

综合测量与计算结果, 3C-SiC 是一种间接带隙半导体, 其导带极小值点布里渊区沿 X 方向的边界处, 具有三个能量极小点. 其价带极大值点位于布里渊区中心.

Kono 仔细分析了回旋共振跃迁能量随共振磁场的变化趋势. 测量值对直线的稍稍偏离说明能带的非抛物线特征. 偏离发生在跃迁能量高于 40 meV 时, 说明电子只有在 $0-40 \text{ meV}$ 的能量范围内, 能带采用抛物线近似才比较合适. 高场下电子的能量往往高于 40 meV , 必须考虑能带的非抛物线特征. 引入能带的非抛物线近似^[13], 色散关系的表达式为

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_c} = \gamma(\epsilon) = \epsilon(1 + \alpha\epsilon), \quad (1)$$

其中 $\hbar$ 为普朗克常数, k 为波矢模值, ϵ 为电子能量, m_c 为电导有效质量, α 为非抛物线参数.

2.2 主要的散射结构

SiC 材料中有 7 种散射机构最可能出现: 电离杂质散射、中性杂质散射、压电散射、声学声子散射、谷间散射、极化光学声子散射和共价光学声子散射.

SiC 不像 Si 和金刚石那样是完全共价性的, 它与 GaAs 类似, 表现出很强的离子性^[15]. 这种极性作用在 SiC 的各种类型中都很明显. 因此, SiC 中极化光学声子散射较共价光学声子散射起更重要的作用. 在 3C-SiC 中, C 原子占据正离子的位置. Birman 等人认为纵向声学声子散射主要是高能谷间声子^[16], 这与 Patrick^[17] 得到的结论一致. 根据实验及分析, 压电散射在 SiC 中可以忽略; 当温度范围在 $300-800 \text{ K}$ 时, 谷间散射起主要作用; 低温时可能主要受到电离杂质散射与中性杂质散射; 高温时将受到极化光学声子散射与共价光学声子散射^[17]. 3C-SiC 与其他类型的 SiC 相比, 晶格对称性较好, 使得其零级谷间散射受到严重的“选择规则”的限制^[18]. 仅仅考虑零级谷间散射是不够的, 必须同时考虑一级谷间散射^[5]. 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 Si 进行 MC 模拟, 一般都忽略这种散射机构的影响, 况且 SiC 的优良特性主要表现在高温区域. 本文对 3C-SiC 进行 MC 模拟, 忽略这种散射机构的作用.

假设整个半导体系统是由电子和晶体两个分离的系统构成, 这样除了载流子之间的散射, 其他散射机构均可认为是由声子或杂质引起的微观扰动. 下面逐个讨论各主要散射机构以及散射概率的具体表达式.

1) 声学声子散射

高温和/或高场情形下, 声学声子散射可以被近似看成一个弹性过程^[19]. 由于电子热运动的剧烈程度增加, 考虑电子的分布可能远离导带底, 表现出严重的非抛物线特征. 对于 3C-SiC 而言, 由于导带极小值点位于 X 方向布里渊区边界处, 必须采用椭球等能面近似. 作弹性、非抛物线、椭球等能面近似时, 电子的声学声子散射概率为

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

其中 m_d 为态密度有效质量, u 为声子声速, ρ 为晶体密度, k_B 为玻耳兹曼常数, T_0 为晶格温度, ξ 为电子声学声子形变势, α 为非抛物线参数.

$$\alpha = \frac{1}{2\Delta\epsilon_0} \left(1 - \frac{m_t}{m_0} \right)^2, \quad (3)$$

$$\Delta\epsilon_0 = (\epsilon_{\Delta_{2c}} - \epsilon_{\Delta_{1c}}) = \frac{2\hbar^2 k_0^2}{m_1}, \quad (4)$$

其中 k_0 为波矢沿 X 方向导带底的测量值的模量, m_1 为 X 方向能谷的纵向有效质量, m_t 为 X 方向能谷的横向有效质量, m_0 为自由电子的质量.

2) 极化光学声子散射

这是 3C-SiC 中十分重要的一种散射机构, 对之进行 MC 模拟的人几乎都考虑了这种散射机构对电子输运特性的影响^[5-7]. Fawcett 等人^[13]在对 GaAs 进行 MC 模拟时, 细致地推导了低场情况下, 处于 <000> 能谷或 Γ 能带之中这一散射机构的概率表达式. 这一公式一直被后来的半导体 MC 的模拟者所采用. 严格地讲, 对于不同 GaAs 能带结构的半导体, 应该推导与其能带结构相适应的表达式. 可能是理论的难度, 一直没有人完成这一工作. 我们仍采用这一公式:

$$P_{e,po}(\epsilon) = \frac{q^2 m_d^{1/2} \omega_{pop}}{\sqrt{2} \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \frac{1 + 2\alpha\epsilon'}{\sqrt{\gamma(\epsilon)}} F_0(\epsilon, \epsilon') \begin{cases} N_q & (\text{abs.}), \\ N_{q+1} & (\text{emi.}), \end{cases} \quad (5)$$

其中

$$\epsilon' = \begin{cases} \epsilon + \hbar\omega_{pop} & (\text{abs.}), \\ \epsilon - \hbar\omega_{pop} & (\text{emi.}), \end{cases} \quad (6)$$

$$F_0 = \frac{1}{C} \left(A \cdot \ln \left| \frac{\sqrt{\gamma(\epsilon)} + \sqrt{\gamma(\epsilon')}}{\sqrt{\gamma(\epsilon)} - \sqrt{\gamma(\epsilon')}} \right| + B \right), \quad (7)$$

$$N_q = \left[\exp \left(\frac{\hbar\omega_{pop}}{k_B T_0} \right) - 1 \right]^{-1}, \quad (8)$$

ω_{pop} 为极化光学声子的角频率, ϵ_∞ 为高频介电常数, ϵ_0 为低频介电常数, N_q 为极化光学声子热平衡数目, 常数 A, B, C 的值分别为 4.0, 0.0, 4.0. 对于抛物线型能带, 非抛物线参数 α 为零.

3) 等价零级谷间散射

与 Si 和 GaAs 材料一样, 3C-SiC 中的零级谷间散射理论上受到“选择规则”的限制, 但在实际的散射过程中, 此规则的限制并不能被严格地完成, 这已被 Eaves 等人的磁声实

验^[18]所证实. 零级谷间散射仍不失是一种重要的散射机构. 和谷内的声学声子散射一样, 谷间散射仍被看作是形变势的相互作用. 作非抛物线、椭球等能面近似时, 电子的零级谷间散射概率^[19]为

$$P_{e, \text{zoi}}(\epsilon) = \frac{(D_t K)_i^2 m_d^{3/2} Z_t}{\sqrt{2\pi} \rho \hbar^3 \omega_{zi}} \sqrt{\gamma(\epsilon \pm \hbar\omega_{zi} - \Delta\epsilon_{fi})} [1 + 2\alpha(\epsilon \pm \hbar\omega_{zi} - \Delta\epsilon_{fi})] \begin{cases} N_i & (\text{abs.}), \\ N_{i+1} & (\text{emi.}), \end{cases} \quad (9)$$

$(D_t K)_i$ 为电子谷间声子散射的形变势常数(一个二次耦合常量), Z_t 为可能的末态等价能谷数目, ω_{zi} 为谷间声子的角频率, N_i 为谷间声子热平衡时的数目, $\Delta\epsilon_{fi}$ 为初态和末态能谷底的能量差别值(对于等价能谷为零).

4) 等价一级谷间散射

闪锌矿型半导体的非极化光学声子散射与等价零级谷间散射由于受到“选择规则”的限制变得相对微弱, 一级散射自然变得较重要. Ferry 在零级散射的基础上, 推导了这两种散射的一级概率的表达式^[20]. 本文只选取等价一级谷间散射, 作非抛物线、椭球等能面近似:

$$P_{e, \text{foi}}(\epsilon) = \frac{\sqrt{2} m_d^{3/2} D_1^2}{\pi \rho \omega_{fi} \hbar^5} \begin{cases} N_i \sqrt{(\epsilon + \hbar\omega_{fi})(2\epsilon + \hbar\omega_{fi})} & (\text{abs.}), \\ (N_{i+1}) \sqrt{(\epsilon - \hbar\omega_{fi})(2\epsilon - \hbar\omega_{fi})} & (\text{emi.}) \end{cases} \quad (10)$$

其中 D_1 为一级谷间散射的形变势, ω_{fi} 为一级谷间声子的角频率.

5) 离化杂质散射

对于离化杂质散射的描述最初有两个不同的公式: Conwell 和 Weisskopf 近似(简称 CM)^[21], Brooks 和 Herring 近似(简称 BH)^[22]. CW 适用于有高补偿的材料中, 而当假定每个电离杂质贡献一个自由载流子的低复合情形或高温情形下, BH 更适合^[19].

模拟 3C-SiC 的高温特性, 采用 BH 近似公式, 同样作非抛物线、椭球等能面近似:

$$P_{e, \text{I}}^{\text{BH}}(\epsilon) = \frac{2^{5/2} \pi n_i Z^2 q^4}{\kappa^2 \epsilon_\beta^{1/2} m_d^{1/2}} \gamma^{1/2}(\epsilon) \frac{1 + 2\alpha\epsilon}{1 + \frac{\gamma(\epsilon)}{\epsilon_\beta}}, \quad (11)$$

其中

$$\epsilon_\beta = \frac{\hbar^2 \beta_s^2}{2 m^*}, \quad (12)$$

$$\epsilon'_\beta = \frac{\hbar^2 \beta_s^2}{2 m_d}, \quad (13)$$

$$\beta_s = \sqrt{\frac{4\pi q^2 n_0}{\kappa k_B T_0}}, \quad (14)$$

n_i 为掺杂杂质浓度, Z 为单位杂质中心的电荷数, κ 为材料的介电常数, β_s 为屏蔽常数, m^* 为有效质量, n_0 为实际平均载流子浓度.

3 MC 模拟

在模拟 3C-SiC 材料的静态电子输运特性时, 假定材料的电子输运是各向同性的, 这

样就变为一个与时间和空间无关的单一均匀稳态问题.采用改进后的自洽 SPMC 方法进行模拟.表 1 列出本文 MC 模拟时所用的主要参数值.3C-SiC 作为半导体研究的新材料,这些参数的测量工作很不完善.本文细致地查找并分析了对这些参数的测量结果^[3,4,7-9].对于某一参数的测量,若有多种测量结果,选取与更多的测量结果相符合的测量值.若这样还不能决定选哪一种测量值,则以各种结果中时间上最新的一种为准.小部分没有测量结果的参数,如零级一级谷间散射的声子形变势,则采用经验值.

表 1 MC 模拟中的主要参数值

参数名称	参数值	参数名称	参数值
晶体密度 ρ	$3.21\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	电子纵向有效质量 m_l	$0.67\ m_0$
纵向声子声速 u	$1.0\times 10^6\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$	电子横向有效质量 m_t	$0.25\ m_0$
低频介电常数 ϵ_0	9.52	电导有效质量 m_c	$0.313\ m_0$
高频介电常数 ϵ_∞	6.38	声学声子形变势 ξ	22 eV
禁带宽度(RT)	2.3 eV	极化光声子角频率 ω_{pop}	$2.383\times 10^{13}\text{s}^{-1}$
禁带宽度的温度系数	-5.8×10^{-4}	零级谷间散射形变势($D_i\text{K}$) _i	$1.0\times 10^8\text{eV}\cdot\text{cm}^{-1}$
掺杂杂质浓度 n_{I}	$5\times 10^{16}\text{cm}^{-3}$	一级谷间散射形变势 D_1	5.6 eV
载流子浓度 n_0	$5\times 10^{16}\text{cm}^{-3}$		

4 模拟结果与讨论

本文的 MC 模拟统计出了人们对 3C-SiC 材料最为关心的高温和高场下电子的输运特性.图 1 为低场电子迁移率随温度变化的规律.模拟结果与实验结果^[9]符合较好.MC 模拟曲线在高温区域比实验值高.原因之一是本文仅仅考虑了 3C-SiC 材料中主要的散射机构,而共价光学声子散射在 3C-SiC 材料中虽然不如极化光学声子散射那样重要,但在高温下仍有一定影响.原因之二可能是模拟采用的部分参数属于经验值.另外,由于目前较纯材料生长较困难,不纯材料中缺陷或杂质影响了迁移率测量值不如模拟值大.

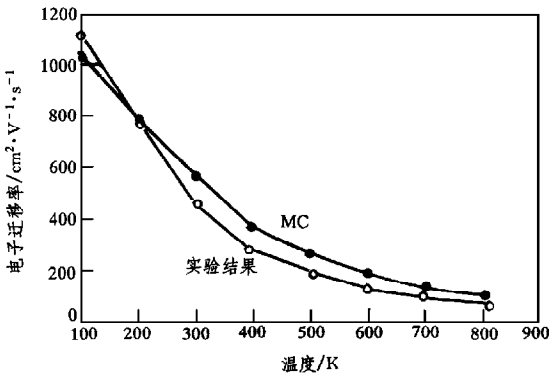


图 1 电子迁移率随温度的变化

图 2 为 300 K 时电子平均漂移速度随电场变化的规律,模拟结果与实验结果^[14]进行了比较,也基本相符.3C-SiC 材料电子饱和临界电场约为 $(2-5)\times 10^5\text{V/cm}$,饱和漂移速度较高.当电场大于 $5\times 10^5\text{V/cm}$ 时,漂移速度没有很好饱和,这是因

为没有考虑碰撞电离的缘故.

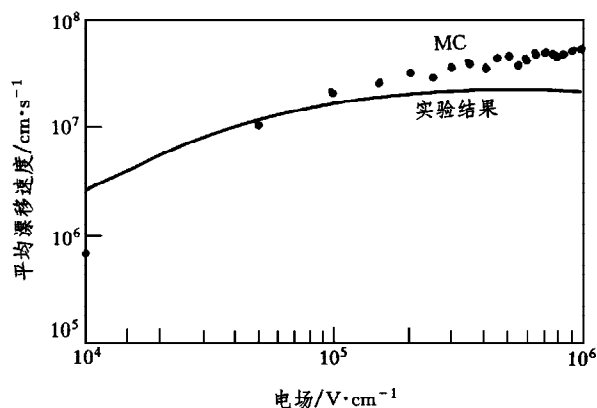


图 2 电子平均漂移速度随电场的变化

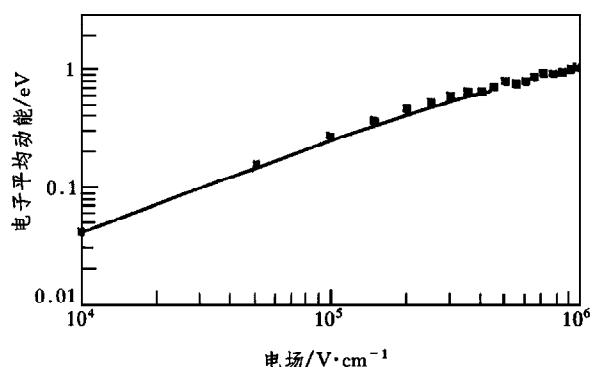


图 3 电子平均动能随电场的变化

图 3 为电子的平均动能随电场变化的规律. 从图 3 可看出, 随电场的增强, 电子的平均动能逐渐增大. 在低场 ($1.0 \times 10^4 \text{ V/cm}$) 时, 为 0.04 eV 左右, 对应室温 300 K 左右, 近似等于晶格温度. 当电场高达 $1.0 \times 10^6 \text{ V/cm}$ 时, 电子平均能量增至 1.0 eV 左右. 散射概率的计算说明^[5]极化光学声子散射在能量小于 2.0 eV 时起决定作用, 因此, 图 2 中漂移速度不饱和受极性剧增的影响.

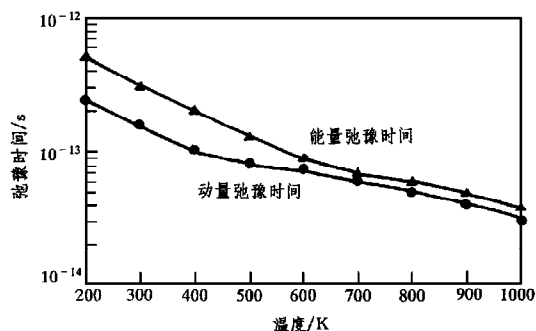


图 4 电子的能量和动量弛豫时间随温度的变化

图 4 为电子的能量和动量弛豫时间随温度变化的规律. 图 5 为它们随电场变化的规律. 两者随温度、电场的增大都逐渐减小, 其物理机理是一致的: 随着能量的增大, 谷间声子耗能愈来愈多. 电子从电场中获得的能量逐渐更多地转化为热能, 表现为电子无规则运动剧烈程度的加剧, 迁移率的降低, 以及平均漂移速度的饱和, 电子系统也以更快的速度达到热平衡. 从图中还可

看到, 随温度的增大, 能量和动量弛豫时间的差距逐渐缩小, 这是因为高温时光声子散射

占主导地位,淹没了所有弹性声子散射的作用.另外,弹性离子杂质散射随温度增大也相应减小.

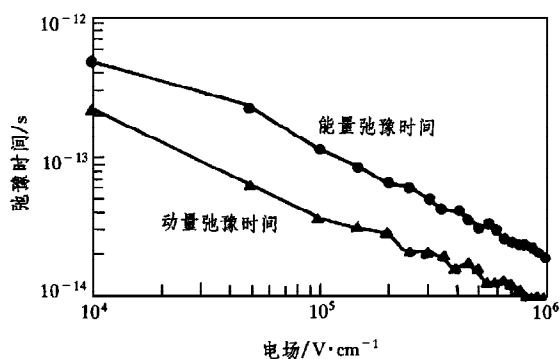


图5 电子的能量和动量弛豫时间随电场的变化

5 结 语

本文分析了 3C-SiC 特定的能带结构及主要的散射机构,建立了准确的色散关系与主要的散射机构的概率表达式.系统地模拟了 3C-SiC 材料中的电子输运特性,得出了电子迁移率随温度、电子平均漂移速度随电场的变化规律,充分体现了 3C-SiC 的高温与高场特性.更为重要的是得到了 3C-SiC 的电子能量和动量弛豫时间随温度和电场的变化规律,为开展 3C-SiC 器件模拟工作提供了重要数据.所得结果与实验及前人的模拟结果进行了比较.

- [1] P.G.Neudeck, D.J.Larkin, J.E.Starr *et al.*, *IEEE Trans. Electron. Devices*, **41**(1994), 826.
- [2] 张义门、张玉明, *电子科学技术评论*, **2**(1996), 18.
- [3] R.Kaplan and R.J.Wagner, *Solid State Commun.*, **55**(1985), 67.
- [4] H.Yugami, S.Nakashima and A.Mitsnishi, *J. Appl. Phys.*, **61**(1987), 354.
- [5] K.Tsukioka, D.Vasieska and D.K.Ferry, *Physica*, **B85**(1993), 466.
- [6] R.P.Joshi and D.K.Ferry, *Solid State Electronics*, **38**(1995), 1911.
- [7] Jing-rong Zhou, D.Vasieska and D.K.Ferry, *Solid State Electronics*, **36**(1993), 1289.
- [8] J.Kono, S.Takeyama, H.Yokoi *et al.*, *Phys. Rev.*, **B48**(1993), 10909.
- [9] M.Yamanaka, H.Daimon, E.Sakuma *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **61**(1987), 599.
- [10] L.A.Hemstreet and C.Y.Fong, *Solid State Commun.*, **9**(1971), 643.
- [11] D.N.Talwar and Z.C.Feng, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 3191.
- [12] P.Srichaikul, A.B.Chen and W.J.Choyke, *Springer Proceedings in Physics*, **71**(1992), 170.
- [13] W.Fawcett, A.D.Boardman and S.Swain, *J. Phys. Chem. Solids*, **31**(1970), 1963.
- [14] H.Morkoc, S.Strite, G.B.Gao *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **76**(1994), 1363.
- [15] D.K.Ferry, *Phys. Rev.*, **B12**(1975), 2361.
- [16] J.L.Birman, M.Lax and R.Loudor, *Phys. Rev.*, **145**(1966), 620.
- [17] L.Patrick, *J. Appl. Phys.*, **37**(1966), 4991.

- [18] Eaves *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **151**(1980),1065.
- [19] C. Jacoboni and L. L. Reggiani, *Rev. Mod. Phys.*, **55**(1983), 654.
- [20] D. K. Ferry, *Phys. Rev.*, **B14**(1976), 1605.
- [21] E. M. Conwell and V. F. Weisskopf, *Phys. Rev.*, **77**(1950), 388.
- [22] H. Brooks and C. Herring, *Phys. Rev.*, **83**(1951), 879.

MONTE CARLO MODEL FOR ELECTRON TRANSPORT IN THE MATERIAL 3C-SiC

ZHANG YU-MING ZHANG YI-MEN CUI JIE

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

LUO JIN-SHENG

(Department of Microelectronics Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

(Received 17 February 1997; revised manuscript received 4 May 1997)

ABSTRACT

Static electron transport in the material 3C-SiC is analyzed by using single-particle Monte Carlo method at high field and high temperature. The physical model used in the simulation is developed by considering the energy gap structures and the main scattering mechanisms in details. The results show the excellent high-field and high-temperature properties of the material. The scattering mechanisms at high temperature and high field are discussed by analysing the results.

PACC: 7210; 0250; 7220H; 7280