

6H-SiC 电子输运的 Monte Carlo 模拟

尚也淳 张义门 张玉明

(西安电子科技大学微电子所, 西安 710071)

(1999 年 12 月 5 日收到 2000 年 2 月 3 日收到修改稿)

从实际测量和单粒子 Monte Carlo 模拟两个方面研究了 6H-SiC 的电子输运规律, 在模拟中考虑了 6H-SiC 主要的散射机理. 模拟的结果体现了 6H-SiC 具有良好的高温和高场特性以及迁移率的各向异性, 其横向迁移率和纵向迁移率相差近 5 倍. 模拟结果和实验数据的对比说明了对 6H-SiC 输运特性的模拟是正确的.

关键词: 6H-SiC, Monte Carlo 模拟, 迁移率, 散射机理

PACC: 7210, 7280, 7220D

1 引 言

SiC 优异的物理特性决定了它必然存在着强大的应用潜力. 最近几年, SiC 单晶生长和薄膜外延技术取得了长足的进步, 高质量的 SiC 芯片和 SiC 器件已经投入使用, 这也促进了 SiC 及其器件理论方面的研究. 在 SiC/SiO₂ 界面上, 6H-SiC 的导带和 SiO₂ 的导带相距较大, 这使 6H-SiC 成为了对高可靠功率 MOSFET 最为重要的一种 SiC 多型体^[2], 再加上 6H-SiC 的单晶质量最好, 所以在所有的 SiC 多型体中 6H-SiC 最能引起人们的关注^[3, 4]. 对一种半导体材料和器件而言, 人们最为关心的应该首先是其载流子的输运问题, 但是和常规半导体材料(如 Si)相比, 6H-SiC 有着特异的性质, 它的迁移率表现为各向异性^[1, 9]. 所以对 6H-SiC 器件模型的建立和电路设计来说研究其载流子迁移率的各向异性是必要的, 这将对通过选择一个合适的晶向来优化器件性能提供理论依据. 当前, 对 SiC 输运特性的理论研究主要集中在 3C 和 4H-SiC 上^[2, 4], 从直接测量和理论模拟两方面针对 6H-SiC 迁移率各向异性的研究还未见报道.

本文通过 SiC 中几种主要的散射机制, 在考虑掺杂浓度对迁移率的影响的条件下, 用 Monte Carlo 方法研究了 6H-SiC 的载流子输运特性, 得出了 6H-SiC 电子迁移率随温度的变化和高场下的输运规律. 结果表明, 6H-SiC 纵向迁移率和横向迁移率相

差近 5 倍, 在高场下漂移速度趋于饱和, 其饱和漂移速度为 2×10^7 cm/s.

2 6H-SiC 的材料特性及散射机制

6H-SiC 的晶体结构是六角密堆积的纤锌矿结构, 第一布里渊区呈六角柱状. 通过对 6H-SiC 能带结构的分析可以看出, 6H-SiC 为间接带隙半导体, 它的导带极小点位于 *M* 能谷和 *L* 能谷的连线上^[5]. 目前 6H-SiC 有效质量的测量和计算有许多报道, 但差异较大, 而电子回旋共振 (ECR) 测量得出的 6H-SiC 横向有效质量 ($0.42 m_0$), 纵向有效质量 ($2.0 m_0$) 能被较多 6H-SiC 材料和器件的研究者所采用. 为了模拟的方便, 本文采用六等效非抛物线能谷模型. 对于高场下运动的电子, 能带非抛物线的影响是不可忽视的, 它可影响态密度. 另外在模拟中作如下假设: 1) 6H-SiC 的电子输运不考虑量子效应. 2) 椭球等能面近似. 那么色散关系为

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

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

对于 6H-SiC 中的散射机制, 主要考虑如下几种.

2.1 电离杂质散射

电离杂质以其库仑势散射载流子, 库仑势使载

流子的运动轨道发生偏折. Brooks 和 Herring 近似 (BH) 可以用来很好描述电离杂质的散射, 在这种模型中采用了 Born 近似和散射势屏蔽因子 $\exp(-\beta r)^{10]$ 其中 $1/\beta$ 为屏蔽长度, r 为距离. 如果作非抛物线和椭球等能面近似, 那么电离杂质散射率为^[6]

$$P_I = \frac{\sqrt{2}\pi e^4 N_I}{(4\pi\epsilon_0\epsilon)^2 m_d^{1/2} \epsilon^{-3/2}} \frac{1 + 2\alpha\epsilon}{(1 + \alpha\epsilon)^{3/2}} \frac{1}{4b^*(1 + b^*)}, \quad (2)$$

其中 $b^* = \frac{\epsilon_\beta}{4\epsilon} \frac{1}{1 + \alpha\epsilon}$, $\epsilon_\beta = \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_d}$, $\beta^2 = \frac{e^2 n}{\epsilon_0 \epsilon k_B T}$, n 为电离杂质浓度, e 为电子电荷, ϵ_0 为真空介电常数, ϵ 为材料的相对介电常数, m_d 为态密度有效质量, n 为载流子浓度, k_B 为玻耳兹曼常数, T 为温度.

2.2 声学波形变势散射

纵声学波会引起晶体体积周期性的膨胀和压缩, 从而导致带边周期性的移动, 产生形变势, 引起声学声子的弹性散射, 其散射率可表示为^[6]

$$P_{ac} = \frac{\sqrt{2} m_d^{3/2} \Xi^2 k_B T}{\pi \hbar^4 \rho v_s^2} \cdot \frac{\epsilon^{1/2} (1 + \alpha\epsilon)^{1/2} [(1 + \alpha\epsilon)^2 + (\alpha\epsilon)^2/3]}{1 + 2\alpha\epsilon}, \quad (3)$$

其中 ρ 为晶体密度, v_s 为声速, Ξ 为声学声子形变势.

2.3 极化光声子散射

在 6H-SiC 这种极性晶体中, 由于不同极性的原子作相对运动产生极化, 长光学纵波就可以通过极化势引起散射, 计入能带的非抛物线性和椭球等能面近似, 那么极化光声子散射率为^[6]

$$P_{pop} = \frac{e^2 m_d^{1/2} \omega_{pop}}{4\sqrt{2}\pi \hbar \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon} \right) \left(\frac{1 + 2\alpha\epsilon'}{\gamma^{1/2}(\epsilon)} \right) \cdot \left[\left(A \ln \frac{u}{v} + B \right) / C \right] \begin{cases} N_q, & \text{abs} \\ N_q + 1, & \text{emi} \end{cases} \quad (4)$$

其中 ω_{pop} 为极化光声子的角频率, ϵ_∞ 为高频介电常数, ϵ 为低频介电常数, N_q 为极化光声子热平衡数目.

$$A = \left[(1 + \alpha\epsilon) (1 + \alpha\epsilon') + \frac{\alpha}{2} [\chi(\epsilon) + \chi(\epsilon')] \right]^2,$$

$$C = \chi(1 + \alpha\epsilon) \chi(1 + \alpha\epsilon') \chi(1 + 2\alpha\epsilon) \chi(1 + 2\alpha\epsilon'),$$

$$B = -\alpha \gamma^{1/2}(\epsilon) \gamma^{1/2}(\epsilon') \chi(1 + \alpha\epsilon) \chi(1 + \alpha\epsilon') + \alpha [\chi(\epsilon) + \chi(\epsilon')],$$

$$u = [\gamma^{1/2}(\epsilon) + \gamma^{1/2}(\epsilon')]^2,$$

$$v = [\gamma^{1/2}(\epsilon) - \gamma^{1/2}(\epsilon')]^2,$$

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

2.4 等价零级谷间散射

格波可以引起电子由一个能谷到另一能谷的散射, 散射可以发生在等价的能谷之间也可以发生在不等价的能谷之间. 6H-SiC 的能带结构可看作包含着六个能谷, 为了研究方便, 认为它们都是等价的. 虽然参与谷间散射的声子种类决定于选择定则, 但它们的能量变化通常较小, 因此可将其视为固定. 等价零级谷间散射的散射率为^[5]

$$P_{zi} = \frac{(D_i K) \chi_i m_d^{3/2} Z_i}{\sqrt{2}\pi \rho \hbar^3 \omega_{zi}} \cdot \begin{cases} \sqrt{\chi(\epsilon + \hbar\omega_{zi})} [1 + 2\alpha(\epsilon + \hbar\omega_{zi})] N_i, & \text{abs} \\ \sqrt{\chi(\epsilon - \hbar\omega_{zi})} [1 + 2\alpha(\epsilon - \hbar\omega_{zi})] (N_i + 1), & \text{emi} \end{cases} \quad (5)$$

其中 $(D_i K) \chi_i$ 为谷间声子散射的形变势常数, Z_i 为末态等价能谷数目, ω_{zi} 为谷间声子的角频率, N_i 为谷间声子热平衡的数目.

2.5 等价一级谷间散射

当由于对称选择规则而使等价零级谷间散射受到限制时, 一级谷间声子散射在谷间散射中就会占主导地位, 其散射率为^[8]

$$P_{fi} = \frac{\sqrt{2} m_d^{3/2} D_1^2}{\pi \rho \omega_{fi} \hbar^5} \cdot \begin{cases} N_i \sqrt{\epsilon + \hbar\omega_{fi}} (2\epsilon + \hbar\omega_{fi}), & \text{abs} \\ (N_i + 1) \sqrt{\epsilon - \hbar\omega_{fi}} (2\epsilon - \hbar\omega_{fi}), & \text{emi} \end{cases} \quad (6)$$

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.

3 6H-SiC Monte Carlo 模拟的方法

3.1 可变的 Γ 方案

在 Monte Carlo 方法作粒子输运的模拟中, 散射率 $P(e)$ 对电子能量 e 的复杂依赖关系使自由飞行时间 t_f 的解析值不可能得到, 于是包括自散射的恒定散射率 Γ 就必须引入. 但在高场情况下, 电子能量的变化很大, 如果 Γ 在模拟过程中始终不变,

就会使自散射的机会明显增大. 为了克服这种情况, 我们使 Γ 随着电子的能量而变化^[7].

设 $\{t_1, t_2, \dots, t_n\}$ 是电子自由飞行的一个时间序列 (如果 $j > i$ 则 $t_j > t_i$), $\{\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_n\}$ 是和这个时间序列相对应的 Γ 的序列, 其中 Γ_i 是 (t_{i-1}, t_i) 之间的恒定散射率. 则在 $t=0$ 时刻受到散射的电子在 $t \rightarrow t+dt$ 时间内受到散射的概率为

$$f(t)dt = \Gamma_i \exp[-(t - t_{i-1})\Gamma_i - \sum_{j=1}^{i-1} (t_j - t_{j-1})\Gamma_j] dt, \quad (7)$$

$f(t)$ 为在 t 之前发生散射的概率密度, 其中 $t_{i-1} < t < t_i$, 则由 (7) 式可得

$$\frac{d(f(t))}{dt} = -\Gamma_i f(t). \quad (8)$$

因为 $f(0) \forall \Gamma_i = 1$ 并且 $f(t) \forall \Gamma_i$ 连续, 则

$$\int_0^t f(t) dt = 1 - \frac{1}{\Gamma_i} f(t). \quad (9)$$

(9) 式表示在时刻 t 之前发生散射的概率, 应取值为 $[0, 1]$ 之间的均匀随机数 r^* , 结合 (7) 式可得

$$\exp[-(t - t_{i-1})\Gamma_i - \sum_{j=1}^{i-1} (t_j - t_{j-1})\Gamma_j] = 1 - r^* = r, \quad (10)$$

r 为 $[0, 1]$ 之间的均匀随机数, 则电子的自由飞行时间为

$$t_i = t_{i-1} + \frac{1}{\Gamma_i} [-\ln(r) - \sum_{j=1}^{i-1} (t_j - t_{j-1})\Gamma_j]. \quad (11)$$

3.2 Herring-Vogt 变换

6H-SiC 由于有效质量的各向异性, 这使得自由飞行和散射的处理变得复杂, Herring-Vogt 变换可以将等能面为椭球的 K 空间变为等能面为球形的令一个 K^* 空间^[6, 10], 即 H-V 空间. 变换矩阵为

$$T = \begin{bmatrix} \left(\frac{m_0}{m_l}\right)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \left(\frac{m_0}{m_t}\right)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \left(\frac{m_0}{m_t}\right)^{1/2} \end{bmatrix}. \quad (12)$$

在 H-V 空间中, 电场变为 $E^* = TE$, 电子的位移变换为 $X^* = T^{-1}X$, 速度变为 $V^* = T^{-1}V$.

3.3 平均散射角近似

为了提高模拟的收敛速度, 可以将每次散射后

的散射角余弦用它的数学期望 $\overline{\cos\theta}$ 代替^[6]. 在 H-V 空间中, 谷间散射和声学波形变势散射属于各向同性的, 因此可取 $\overline{\cos\theta} = 0$. 对于电离杂质散射, 由其散射角的分布函数可求得

$$\overline{\cos\theta} = 1 - 2b^* \left[(1 + b^*) \ln \frac{1 + b^*}{b^*} - 1 \right]. \quad (13)$$

当 $b^* \gg 1$ 即屏蔽很强时以及电子能量很低时, 电离杂质散射趋向于各向同性, 而当电子能量较大时, 决大部分电离杂质散射是小角度散射. 在极化光声子散射中

$$\overline{\cos\theta} = \frac{\chi(\epsilon) + \chi(\epsilon')}{2[\chi(\epsilon)\chi(\epsilon')]^{1/2}} - \frac{D}{A \ln \frac{u}{v} + B}, \quad (14)$$

其中 $D = \chi(1 + \alpha\epsilon)\chi(1 + \alpha\epsilon')^2 + \frac{2}{3}\alpha^2\epsilon\epsilon'(1 + \alpha\epsilon)\chi(1 + \alpha\epsilon')$. 可以看出电子能量愈高, 中小角度散射愈占有优势.

4 模拟结果和讨论

大多数 6H-SiC 的材料参数至今没有细致统一的测量和研究的结果, 在我们的 Monte Carlo 模拟中, 所采用的参数来自于一些对 6H-SiC 模拟和测量的结果^[2-5, 9]. 表 1 列出了本文用于模拟的 6H-SiC 的主要参数.

表 1 6H-SiC 模型参数

参数名称	参数值	参数名称	参数值
横向有效质量 m_0	0.42	纵向有效质量 m_0	2.0
密度/g/cm ³	3.166	非抛物线因子/eV ⁻¹	0.323
高频介电常数	6.62	低频介电常数	9.66
声子速度/10 ⁶ cm/s	1.373	声学形变势/eV	17.3
零级谷间耦合常数/eV/cm	8×10^8	一级谷间散射形变势/eV	5.6
零级谷间散射声子能量/eV	79.7	一级谷间散射声子能量/eV	40.0
极化光声子能量/eV	119.8		

4.1 6H-SiC 的低场迁移率

在 6H-SiC 的低场电子输运中, 本文主要分析了人们对 SiC 最关心的温度特性. 由于考虑的是低场输运, 在模拟中取电场为 3.0 kV/cm. 图 1 是一组对 6H-SiC Hall 迁移率的测量结果和模拟值的比较. 图中测量的是 6H-SiC 的纵向电子迁移率. 为了从试

验上获得 6H-SiC 材料电学特性随温度的变化关系, 我们使用了变温测量系统来对样品的迁移率进行测量. 测量温度为 77 K—800 K, n 型 6H-SiC 样品来自美国 Cree 公司, 在测量中取 Hall 系数 r_H 为常数 1. 从图 1 中可以看出测量值和模拟值基本相符, 说明了我们的模拟过程反映了 6H-SiC 微观粒子运输的机制.

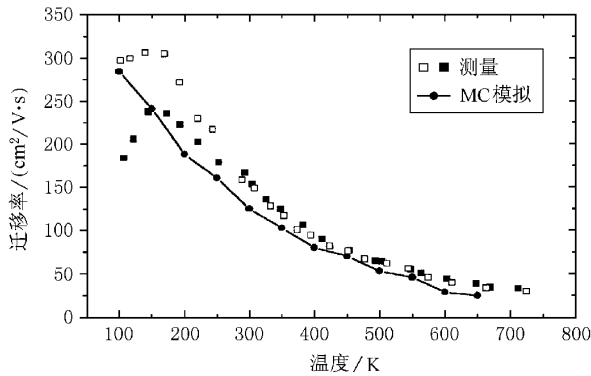


图 1 6H-SiC 纵向迁移率和温度的关系

图 2 是 6H-SiC 的纵向迁移率和横向迁移率随温度的变化. 从图中可以看出 6H-SiC 迁移率与温度之间基本体现了文献所报道的 T^{-2} 的关系^[1,2]. 图中模拟值和测量结果^[1]相符. 6H-SiC 的纵向迁移率和横向迁移率之间相差近 5 倍, 这说明了在 6H-SiC 材料和器件的分析研究中, 不注明晶向而笼统地用 Caughey-Thomas 方程来表述 6H-SiC 的电子迁移率势必会造成结果的偏差.

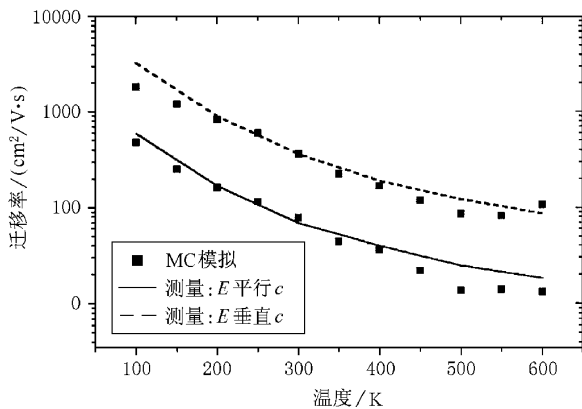


图 2 6H-SiC 迁移率随温度的变化

为了更进一步地分析 6H-SiC 迁移率的各向异性, 图 3 显示了 6H-SiC 横向迁移率和纵向迁移率比值的模拟结果和测量值^[1]. 从图中可以看出, 在温

度低于 200 K 时, 模拟值和测量值有一定的偏差, 这归因于一些与晶向有关的散射, 如空间电荷散射、缺陷散射等, 在文中没有考虑其晶向因素. 另一个原因是有效质量与温度的关系在本文的模拟中没有体现出来.

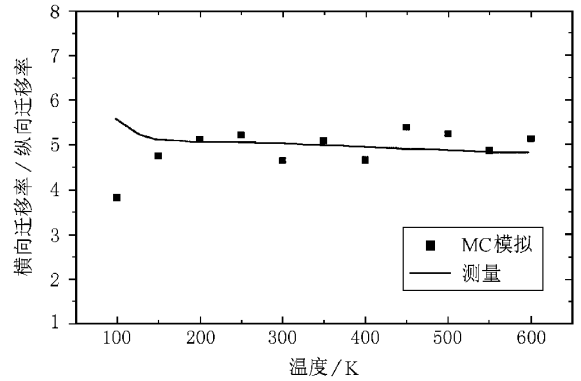


图 3 横向迁移率与纵向迁移率比率的温度变化

图 4 是在不同的掺杂情况下 6H-SiC 的横向迁移率随温度的变化, 由图中可以看出, 迁移率随掺杂浓度的增加而降低, 这是由于掺杂浓度的提高引起了电离杂质散射的增强. 当掺杂浓度为 $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 和 $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时, 迁移率的模拟结果和测量值^[2]相一致. 在掺杂浓度高达 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 时, 模拟的结果高于测量值, 这归因于由于掺杂浓度过高而形成了杂质带, 从而导致了复杂的电子运输机理. 根据文献^[11], 6H-SiC 在掺杂浓度为 10^{19} cm^{-3} 这个数量级时可以形成杂质带, 而本文的模拟没有涉及这种情况.

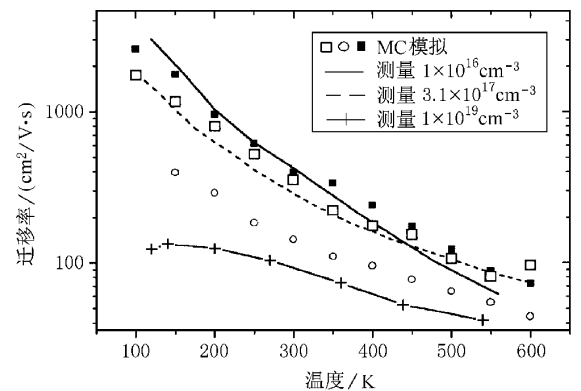


图 4 不同掺杂对迁移率温度关系的影响

4.2 6H-SiC 的高场特性

6H-SiC 高场特性的模拟使用了表 1 的参数, 图

5 是 300 K 时 6H-SiC 电子横向平均漂移速度随电场的变化规律,图中模拟结果和测量结果^[2]相符.由图中可以看出,6H-SiC 的电子饱和的临界电场较大,饱和漂移速度较高,为 2×10^7 cm/s,这和许多文献的报道都相一致^[2,5].

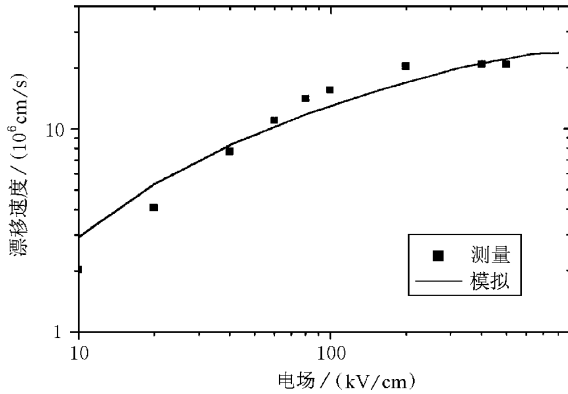


图 5 6H-SiC 饱和漂移速度与高场的关系

5 结 论

本文在理论上分析了 6H-SiC 能带结构的特点,在能带的非抛物线近似和椭球等能面近似的基础上,给出 6H-SiC 中主要散射机制的散射率,其中包括电离杂质散射,极化光声子散射,声学形变势散射,等价零级谷间散射和等价一级谷间散射.在六等效非抛物线能谷的假设下,用单粒子的 Monte Carlo 方法模拟了人们对 6H-SiC 最为关心的迁移率的温度特性,模拟的结果体现了 6H-SiC 迁移率的各向异

性,其横向迁移率和纵向迁移率的比率接近 5.对 6H-SiC 高场特性的模拟表明了 6H-SiC 有着高的饱和临界电场和高的饱和漂移速度.在 Monte Carlo 模拟过程中,采用了可变的 Γ 方案以确定电子的飞行时间,并针对 6H-SiC 有效质量各向异性的特性,对 6H-SiC 的 K 空间进行了 Herring-Vogt 变换.

在实验上,完成了对 n 型 6H-SiC 材料的高温 Hall 测量,得出了 77—800 K 之间 6H-SiC Hall 迁移率随温度的变化.和实验测量数据对比说明,本文模拟结果在 200—800 K 范围内正确地反映了电子在 6H-SiC 中的输运规律,与实验值符合相当好.

- [1] W. J. Schaffer, G. H. Negley, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, **339** (1994) 595.
- [2] P. Mickevicius, Jian H. Zhao, *J. Appl. Phys.*, **83** (1998), 3161.
- [3] R. P. Joshi, *Appl. Phys. Letter.*, **72** (1998) 2156.
- [4] R. P. Joshi, *J. Appl. Phys.*, **78** (1995) 5518.
- [5] Yu-ming Zhang, Yi-men Zhang, Jin-sheng Luo, *Acta Physica Sinica*, **46** (1997), 2215 (in Chinese) [张玉明, 张义门, 罗晋生, *物理学报* **46** (1997) 2215.]
- [6] Liang-xiu Ye, Monte Carlo simulation of small size semiconductor device (Science Press, 1997) p. 318—402 (in Chinese) [叶良修, 小尺寸半导体器件的 Monte Carlo 模拟 (科学出版社, 1997) p. 318—402.]
- [7] E. Sangiorgi, B. Ricco, *IEEE trans. CAD*, **7** (1988) 259.
- [8] D. K. Ferry, *Phys. Rev.*, **B14** (1976) 1605.
- [9] M. Schadt, G. Pensl, *Appl. Phys. Lett.*, **65** (1994) 3120.
- [10] C. Jacoboni, L. Reggiani, *Rev. Mod. Phys.*, **55** (1983) 645.
- [11] S. Karmann, W. Suttrop, *J. Appl. Phys.*, **72** (1992) 5437.

MONTE CARLO SIMULATION OF ELECTRON TRANSPORT IN 6H-SiC

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

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

(Received 5 December 1999 ; revised manuscript received 3 February 2000)

ABSTRACT

Temperature-and electric field-dependent electron transport in 6H-SiC has been studied by single-particle Monte Carlo technique and the Hall electron mobility in 6H-SiC has been measured over the temperature range $77\text{ K} < T < 700\text{ K}$. The physical model used in the simulation is developed considering the main scattering mechanisms in details. The results show the excellent high-temperature and high field properties as well as anisotropy of mobility. The ratio $\mu_{\parallel c}/\mu_{\perp c}$ in 6H-SiC is nearly 5 and the saturation velocity v_s is $2 \times 10^7\text{ cm/s}$. The simulated results are in good agreement with measured data in a wide range of temperature and electric field.

Keywords : 6H-SiC , Monte Carlo study , mobility , electron scattering

PACC : 7210 , 7280 , 7220D