

# 6H-SiC 反型层电子迁移率的 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)

**摘 要:** 用单电子 Monte Carlo 方法对 6H-SiC 反型层的电子迁移率进行了模拟, 在模拟中采用了一种新的综合的库仑散射的模型, 该模型考虑了栅氧化层电荷、界面态电荷、沟道电离杂质电荷的作用以及它们之间的相关性. Monte Carlo 模拟的结果表明, 当表面有效横向电场高于  $1.5 \times 10^5 \text{ V/cm}$  时, 表面粗糙散射在 SiC 反型层中起主要作用, 而当有效横向电场小于该值时, 沟道散射以库仑散射为主.

**关键词:** 6H-SiC; Monte Carlo 模拟; 散射; 库仑电荷

**中图分类号:** TN304.0 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2001) 02-0157-03

## Monte Carlo Study of Electron Transport in Inversion Layer of 6H-SiC MOS Structure

SHANG Ye-chun, ZHANG Yi-men, ZHANG Yu-ming

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

**Abstract:** Monte Carlo analysis of inversion layer mobility in 6H-SiC metal oxide semiconductors is presented under the size quantization. The simulation results fit experimental data very well. A new comprehensive model for Coulomb scattering in inversion layers is developed in this paper. The model takes into account the effect of the fixed charge in insulator, the interface-state charge, the charge of the ionized impurities and their correlation. Interface roughness scattering is shown to play a strong role in the high effective transverse field. On the low effective transverse field side, Coulomb scattering becomes important.

**Key words:** 6H-SiC; monte carlo study; scattering; coulomb charge

### 1 引言

SiC 由于其优异的电特性而一直被认为是一种潜在的高温、大功率、抗辐照的电子材料. 但值得注意的是, 最近几年 SiC 的材料制备及生长低缺陷氧化物的工艺技术虽然发展很快, 但其沟道迁移率的测量结果却并不令人满意. 例如: 和 6H-SiC 体迁移率  $400 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$  相比, 其沟道迁移率的测量值始终很小, 仅为  $40 \sim 70 \text{ cm}^2/\text{V} \cdot \text{s}$ <sup>[1~3]</sup>, 这预示着必有另外的区别于 SiC 体材料散射机制的别的散射机制主导着 SiC 反型层的电子传输过程. 那么为了能更好的对 6H-SiC 的 MOS 结构进行设计和应用, 就有必要对其沟道反型层的输运机理进行仔细地研究. 当前, SiC 反型层电子迁移率的问题已经引起了人们从工艺到理论方面的普遍关注, 但用 Monte Carlo 对 6H-SiC 沟道迁移率的模拟分析却存在着两个缺陷, 一是没有用实验数据进行验证<sup>[3]</sup>; 二是没有考虑引起库仑散射的外部电荷之间的相关性以及它们的位置对散射的影响<sup>[2]</sup>, 这势必会给模拟结果带来偏差. 外部电荷的库仑散射是决定 SiC 反型层迁移率的主要因素之一, 对其散射模型的改进将对正确分析 SiC 反型层电子输运是必不可少的. 本文就是在克服以上两个缺陷的基础上对 6H-SiC 沟道反型层的电子迁移率进行了

Monte Carlo 模拟, 并得出了限制 SiC 沟道迁移率提高的主要原因.

### 2 6H-SiC 反型层特性及散射机制

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. 目前 6H-SiC 有效质量的测量和计算有许多报道, 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 ( $2.0 m_0$ ) 能为较多的 6H-SiC 材料和器件的模拟者所采用.

量子数为  $n$  的二维子带的色散关系为<sup>[4]</sup>:

$$E_K(1 + E_K) = (\hbar^2/2) \left[ (k_x^2/m_x) + (k_y^2/m_y) \right] \quad (1)$$

电子能量  $E = E_n + E_K$ , 其中  $E_n$  为量子化能值,  $E_K$  为沟道电子运动的能量.  $k_x, k_y$  分别为反型层两方向的波矢,  $m_x, m_y$  分别为反型层对应方向的电导有效质量.  $\hbar$  为普朗克常数, 为非抛物线因子. 当只涉及能量最低的少数几个子带时, 非抛物线因子可近似取为 1<sup>[5]</sup>.

我们采用 3 能谷, 只考虑基带的 6H-SiC 能带模型来进行单电子的 Monte Carlo 模拟. 在 SiC 的反型层中, 各反型层散射矩阵元的计算会涉及到具体的  $z$  向波函数, 我们采用近似的

变分波函数来代替各子带的实际包络函数.

$$\phi_0(z) = \sqrt{(c_0/2)} z \exp\left[-(c_0 z/2)\right] \quad (2)$$

其中  $c_0$  为待定的变分参数.

为和实验取得一致起见, 这里  $c$  轴取和 SiC/SiO<sub>2</sub> 界面垂直的方向. 在模拟中考虑了声学波形势散射, 极化光声子散射, 等价零级谷间散射, 等价一级谷间散射, 库仑散射和表面粗糙散射. 前四种散射的散射几率可参见文献[5], 后两种散射的散射几率模型分别为下面几种模式.

## 2.1 综合的库仑散射模型

在 SiC MOS 反型层中, 引起库仑散射的可以是沟道中的电离杂质, 可以是界面电荷, 也可以是界面附近氧化层中的电荷. 计入屏蔽效应, 在垂直于反型层方向位置为  $z_T$  的电荷层内, 由于单个库仑中心的作用, 从第  $i$  子带到  $j$  子带的库仑散射矩阵元可以表示为<sup>[5]</sup>:

$$M_{ij}(q, z_T) = \frac{e^2}{2} \frac{1}{0A q + SF(q)} e^{-q|z - z_T|} |\phi_i(z)| |\phi_j(z)| dz \\ = \frac{e^2}{2} \frac{F_c(q, z_T)}{0A q + SF(q)} \quad (3)$$

$$F(q) = \iint e^{-q|z - z_T|} |\phi_i(z)|^2 |\phi_j(z)|^2 dz dz \quad (4)$$

SiC 反型层的屏蔽常数  $S = \frac{e^2}{2} \frac{m^*}{0 \hbar} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{n_s}{2 K_B T g_2}\right) \right]$ ,  $m^*$  为平行于界面的电子电导有效质量,  $q$  为散射前后沟道电子波矢的改变量,  $q = 2k \sin(\theta/2)$ ,  $k$  为散射前的波矢,  $\theta$  为散射前后波矢的夹角,  $g_2$  为二维子带的单自旋态密度,  $A$  为反型层的面积,  $n_s$  为反型层电子密度,  $K_B$  为玻尔兹曼常数,  $\phi_i(z)$  为第  $i$  个子带的波函数,  $e$  为单位电荷.

那么对于单个库仑中心, 根据黄金法则, 第  $i$  个子带中波矢为  $k$  的电子散射到第  $j$  子带的散射率为:

$$p_{ij}(k) = \frac{A}{2} \frac{1}{0 \hbar} |M_{ij}(q, z_T)|^2 (E - E') dk \quad (5)$$

$E, E'$  分别为散射前后的能量.

令  $n_T(q, z_T)$  为  $z_T$  电荷层电荷面密度变化的傅利叶变换, 计入多层的库仑散射电荷, 则第  $i$  子带和第  $j$  子带间的总散射率为:

$$P_{ij}(k) = \frac{A^3}{2} \frac{1}{0 \hbar} n_T(q, z_T) n_T^*(q, z_T) |M_{ij}(q, z_T)|^2 [E - E'] dk \\ + \frac{A^3}{2} \frac{1}{0 \hbar} n_T(q, z_T) n_U^*(q, z_U) |M_{ij}(q, z_T) M_{ij}^*(q, z_U)| \\ \cdot (E - E') dk \quad (6)$$

设  $N$  为产生库仑散射的总的电荷数,  $P(r_1, r_2, \dots, r_N)$  是第一个电荷中心位于  $r_1$ , 第二个电荷中心位于  $r_2, \dots, r_N$  个电荷中心位于  $r_N$  的概率. 那么, 第  $i$  个子带的电子散射到第  $j$  个子带平均的散射几率为:

$$p_{ij}(k) = P_{ij}(k)_{avg} = P_{ij}(k) P(r_1, r_2, \dots, r_N) dr_1 dr_2 \dots dr_N \quad (7)$$

把式(6)代入式(7), 则:

$$p_{ij}(k) = \frac{A^3}{2} \frac{1}{0 \hbar} n_T(q, z_T) n_T^*(q, z_T)_{avg} |M_{ij}(q, z_T)|^2 [E - E'] dk$$

$$+ \frac{A^3}{2} \frac{1}{0 \hbar} n_T(q, z_T) n_U^*(q, z_U)_{avg} |M_{ij}(q, z_T) M_{ij}^*(q, z_U)| [E - E'] dk \quad (8)$$

$n_T(q, z_T) n_U^*(q, z_U)_{avg}$  是  $z_T$  和  $z_U$  电荷层的电荷面密度的相关函数, 假设处于不同电荷层的电荷间相互无关, 那么当  $T \rightarrow 0$  时,  $n_T(q, z_T) n_U^*(q, z_U)_{avg} = 0$ . 又因为当  $i \neq j$  时,  $i$  子带和  $j$  子带间的库仑散射率很小, 那么库仑散射将主要发生在同一子带间. 再假设在同一电荷层半径为  $R_T$  的园面积内, 不可能同时找到两个电荷, 那么电荷层的电荷密度相关函数为<sup>[6]</sup>:

$$n_T(q, z_T) n_T^*(q, z_T)_{avg} = \frac{N_T}{A} \left( 1 - \frac{2C_T J_1(qR_T)}{qR_T} \right) \quad (9)$$

$N_T$  是  $z_T$  电荷层的平均电荷面密度,  $J_1(x)$  是一阶 Bessel 函数,  $C_T = R_T N_T$  是表示相关程度的一个参数,  $C_T = 0$  表示电荷是完全的随机分布,  $C_T = 1$  表示电荷是均匀分布. 则:

$$i = \frac{N_T e^4 m^*}{r 4} \frac{2}{0 \hbar} \left( 1 - \frac{2C_T J_1(qR_T)}{qR_T} \right) \frac{|F_c(q, z_T)|^2}{[q + SF(q)]^2} d \quad (10)$$

## 2.2 表面粗糙散射

由于 SiC 反型层的限制作用, 在很窄的沟道中运动的载流子将和 SiC/SiO<sub>2</sub> 界面发生频繁碰撞. 利用高斯自相关函数, 表面粗糙散射几率可被表示为<sup>[5]</sup>:

$$= \frac{m^* e^2 E_{eff}^2 L^2}{2 \hbar} \int_0^L (1 - \cos(qz)) \exp(-q^2 L/4) dz \quad (11)$$

其中:  $E_{eff}$  为有效横向电场 (与反型层表面垂直方向的电场), 代表表面起伏的平均值,  $L$  为相关长度.

在对 SiC 反型层迁移率的 Monte Carlo 模拟中, 本文采用的参数来自于一些对 6H-SiC 模拟和测量的结果<sup>[2,7]</sup>, (表 1) 列出了本文用于模拟的 6H-SiC 的主要参数. 对于 Monte Carlo 模拟的具体方法和过程, 可参阅有关文献[5]. 对于电子飞行时间的确定, 本文采用了可变的方案. 为了提高模拟的收敛速度, 本文用平均散射角近似来确定散射终态, 即把每次散射后的散射角余弦用它的数学期望来代替.

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	极化光声子能量 (eV)	119.8
高频介电常数	6.62	低频介电常数	9.66
声子速度 (106cm/s)	1.373	声学形变势 (eV)	17.3
零级谷间耦合常数 (eV/cm)	$8 \times 10^8$	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

## 3 模拟结果及分析

图 1 是 6H-SiC 沟道迁移率与有效横向电场关系模拟结果和测量值<sup>[1]</sup>的比较. 在模拟中, 依据实验结果<sup>[1]</sup>取  $N_{ox} = 2.3 \times 10^{12}/cm^2$ ,  $N_{it} = 10^{12}/cm^2$ . 取  $L = 2.2nm$ ,  $\sigma = 0.75nm$ ,  $C_T = 1$ , 栅氧化物电荷中心距 SiC/SiO<sub>2</sub> 界面距离近似取为 20nm. 由图中可以看出, 模拟值和实验值符合的很好, 这说明我们的模拟过程能反映 6H-SiC 反型层电子的运输机制.

图 2 比较了当分别降低界面态电荷、栅氧化物电荷和表

面粗糙度后 SiC 反型层的迁移率变化。由图中可以看出,在有效横向电场高于  $1.5 \times 10^5 \text{ V/cm}$  的情况下,表面粗糙散射支配着 SiC 反型层的电子输运,而当有效横向电场小于这个临界值时, SiC 反型层电子的散射方式基本为库仑散射。在表面有效横向电场变强时,界面电子浓度变大,波函数的分布更靠近界面,因而界面粗糙散射对电子的作用愈强,而界面电子浓度增大会使库仑散射的屏蔽效应增强,从而降低库仑电荷对散射的影响。当表面电场减弱时,库仑散射的作用会因屏蔽减弱而增强。图 2 还可以反映出当前限制 SiC 沟道迁移率提高的主要原因就是界面的影响和氧化物电荷、界面电荷的影响。

由图 3 可以看出,当反型层电子面密度达到一定值时,沟道迁移率的值会出现一个高峰,在 Katsunori Ueno 等<sup>[3]</sup>的

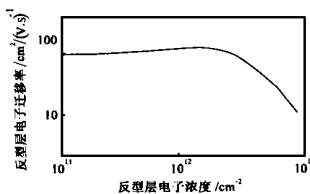


图 3 反型层电子浓度对沟道迁移率的影响

分析中也存在这种现象。这归咎于当反型层电子浓度高于一定值时,界面粗糙散射增大,引起沟道迁移率下降,而当反型层浓度低于这个值时,库仑散射显著增强也会导致沟道迁移率降低。在我们的模拟中还发现,当反型层电子浓度较低时,虽然库仑散射在电子散射中占主导地位,但沟道迁移率不会降低太多,这是由于在反型层低电子浓度的情况下,库仑散射多为小角散射,从图 3 中也可看到这种现象。

图 4 分析了在不同温度下 6H-SiC 反型层电子迁移率与表面有效横向电场的关系。在模拟中,栅氧化物电荷、界面电荷等都取为当前的测定值,由图中可以看出,在当前工艺水平条件下,高温 SiC MOS 器件的沟道迁移率将变得很低。

#### 4 结束语

本文在考虑尺寸量化的条件下,采用变分波函数近似,提出了一种综合的 SiC 反型层库仑散射的模型。在该模型中,考虑了到界面态电荷、栅氧化物电荷和沟道电离杂质对反型

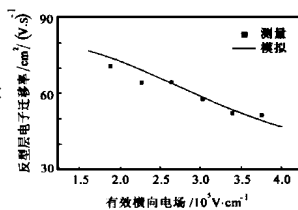


图 1 沟道迁移率随表面电场的变化

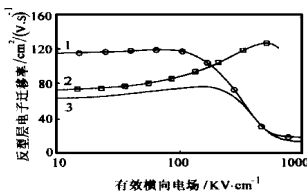


图 2 不同散射条件下表面电场和沟道迁移率的关系

(1:  $N_{ox} = 0.8 \times 10^{11} / \text{cm}^2$ ,  $N_{it} = 10^{11} / \text{cm}^2$ ,  $\lambda = 0.75 \text{ nm}$ . 2:  $N_{ox} = 2.3 \times 10^{12} / \text{cm}^2$ ,  $N_{it} = 10^{12} / \text{cm}^2$ ,  $\lambda = 0.02 \text{ nm}$ . 3:  $N_{ox} = 2.3 \times 10^{12} / \text{cm}^2$ ,  $N_{it} = 10^{12} / \text{cm}^2$ ,  $\lambda = 0.75 \text{ nm}$ .)

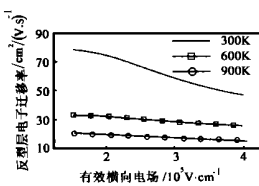


图 4 不同温度下反型层迁移率与表面电场的关系

层电子输运的影响,该模型的优点在于包括了库仑散射电荷之间的相关性,从而更精确地反映了库仑势对 SiC 沟道的作用。在采用这个综合的电荷库仑散射模型的基础上,本文对 6H-SiC 反型层迁移率进行了单电子的 Monte Carlo 模拟,在模拟中还考虑了极化光声子散射,声学波形势散射,表面粗糙散射,等价一级谷间散射和等价零级谷间散射。模拟结果和实验值的相符说明了整个模拟过程正确,反映了 6H-SiC 反型层电子的输运机理。模拟分析的结果反映了在 6H-SiC 反型层电子输运过程中,库仑散射和表面粗糙散射主要决定了沟道迁移率的大小,在表面有效电场高于  $1.5 \times 10^5 \text{ V/cm}$  的条件下,表面粗糙散射占主导地位,而当有效横向电场小于该值时, SiC 反型层电子散射主要以库仑散射为主。对 6H-SiC 反型层电子迁移率的 Monte Carlo 分析还表明,降低栅氧化物电荷、界面态电荷密度和 SiC/SiO<sub>2</sub> 界面粗糙度将是提高 SiC 反型层电子迁移率的主要途径。

#### 参考文献:

- [1] L. A. Lipkin J. W. Palmour. Improved oxidation procedures for reduced SiO<sub>2</sub>/SiC defects [J]. J. Electronic material. 1996, 25(5): 909.
- [2] R. P. Joshi. Simulations of quantized inversion layer electron transport in 6H-Silicon carbide metal oxide semiconductor structures [J]. Applied Physics Letters. 1998, 72(17): 2156.
- [3] Katsunori Ueno, Yasukazu Seki. Investigation of the inversion layer electron mobility in  $\alpha$ -SiC [J]. Applied Physics Letters. 1997, 70(5): 625.
- [4] F. Gamiz, J. B. Roldan. A Monte Carlo study on electron mobility in quantized cubic silicon carbide inversion layers [J]. J. Applied Physics. 1997, 81(10): 6857.
- [5] 叶良修. 小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟 [M]. 科学出版社, 1997.
- [6] F. Gamiz, J. A. Lopez-Villanueva. A comprehensive model for Coulomb scattering in inversion layers [J]. J. Applied Physics. 1994, 75(2): 924.
- [7] Rimvydas Mickevicius, Jian H. Zhao. Monte Carlo study of electron transport in SiC [J]. J. Applied Physics. 1998, 83(6): 3161.

#### 作者简介:



尚也淳 1997 年获西安电子科技大学微电子学硕士,现为西安电子科技大学微电子所博士研究生。研究方向为 SiC 材料和器件的特性,半导体器件的辐照响应等。

张义门 教授,博士生导师,IEEE 高级会员,中国电子学会高级会员。一直从事 VLSI 器件模型和仿真,VLSI 计算机辅助设计,量子阱器件及电路,宽带半导体高温微电子学等方面的研究。