

掺氮 4H-SiC 电子输运特性的多粒子蒙特卡罗研究

王 平¹, 杨 燕¹, 杨银堂¹, 屈汉章², 崔占东³, 付俊兴¹

(1. 西安电子科技大学微电子学院, 陕西西安 710071; 2. 西安邮电学院信控系, 陕西西安 710061;
3. 中国电子科技集团公司第 13 研究所, 河北石家庄 050051)

摘 要: 在最新能带结构计算的基础之上, 采用非抛物性能带模型对掺氮 4H-SiC 电子输运特性进行了多粒子蒙特卡罗 (Ensemble Monte Carlo) 研究. 研究表明, 低场下, 掺杂浓度较低时, 氮杂质不完全电离导致的中性杂质散射对 4H-SiC 横向电子迁移率影响较小. 随着掺杂浓度的增加, 中性杂质散射作用增强. 掺杂浓度较高时, 随着温度的增加, 中性杂质散射的影响逐步减弱. 4H-SiC 电子迁移率较高且各向异性较小, 温度为 296K 时得到的横向电子饱和漂移速度为 2.18×10^7 cm/s; 阶跃电场强度为 1000 KV/cm 时, 横向瞬态速度峰值接近 3.3×10^7 cm/s, 反应时间仅为百分之几皮秒量级. 模拟结果同已有的测试结果较为一致.

关键词: 4H-SiC; 蒙特卡罗研究; 中性杂质散射; 饱和漂移速度

中图分类号: TN304.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 0372-2112 (2005) 08-1512-04

An Ensemble Monte Carlo Study of Electron Transport in Nitrogen-Doped 4H-SiC

WANG Ping¹, YANG Yan¹, YANG Yin-tang¹, QU Han-zhang², CUI Zhan-dong³, FU Jun-xing¹

(1. School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an, Shaanxi 710071, China;

2. Dept. of Information and control, Xi'an Institute of Posts and Telecommunications, Xi'an, Shaanxi 710061, China;

3. The 13th Research Institute, CETC, Shijiazhuang, Hebei 050051, China)

Abstract: Based on a recent band structure calculation, the electron transport properties in Nitrogen-doped 4H-SiC were investigated by an ensemble Monte Carlo technique with a single nonparabolic band model. The results show that at lower doping concentration, neutral impurity scattering has little influence on the electron mobility perpendicular to the principal c axis. With increasing doping concentration, the impact of neutral impurity scattering becomes more significant. However the contribution of neutral impurity scattering to the total mobility is becoming smaller with increasing temperature at higher doping concentration. 4H-SiC has a higher electron mobility with much less pronounced anisotropy. At 296 K, the saturation velocity for transport perpendicular to the c axis given by the model is 2.18×10^7 cm/s. The peak transient velocity at high step electric field such as 1000 KV/cm is 3.3×10^7 cm/s when the electric field E is applied perpendicular to the c axis. The response time is only in deep subpicoseconds. The simulation results are in excellent agreement with physical measurements.

Key words: 4H-SiC; Monte Carlo study; neutral impurity scattering; saturation velocity

1 引言

作为一种新型半导体材料, 4H-SiC 具有优良的物理化学和电学特性, 在微波器件制造领域极具潜力. 4H-SiC 具有比 6H-SiC 更宽的带隙和更高的电子迁移率, 以其制成的大功率微波放大器可以在 1 ~ 10GHz 的频率范围内工作; 短沟道 MESFET 的特征频率也已经达到 22GHz, 最高振荡频率则可以达到 50GHz^[1].

4H-SiC 在微波应用中所表现出的良好性能, 引起了人们对其基础材料特性的广泛关注. 另一方面, 对于设计和制造

4H-SiC 器件而言, 准确的材料参数也是必不可少的, 因而对 4H-SiC 中载流子的输运机理进行分析和探讨就显得非常重要. 蒙特卡罗方法 (Monte Carlo) 正是处理这一问题非常有效的手段. 目前, 有相关的研究报道^[2], 但在其研究过程中没有考虑低温和高掺杂条件下杂质部分电离的影响, 假定杂质是全部电离的, 这样的处理势必会造成模拟的偏差. 文献[3]的研究中虽然考虑了中性杂质散射, 但过于简单, 没有对 4H-SiC 中自由电子浓度随温度的变化关系进行分析, 也没有对中性杂质散射对于低场下电子迁移率的影响进行深入的研究. 本文考虑了两种氮施主杂质能级的影响, 由准中性条件

收稿日期: 2003-05-08; 修回日期: 2005-03-24

基金项目: 教育部重点资助项目 (No. 02074); 国防科技预研基金 (No. 51408010601DZ1032)

给出了 4H-SiC 中自由电子浓度随温度的变化. 并在此基础上, 由 Ensemble Monte Carlo 法分析了低场下中性杂质散射对横向电子迁移率变化的影响, 同时还对高场下电子漂移速度同电场的关系以及横向电子漂移速度在不同阶跃电场下的瞬态变化规律进行了研究.

2 模型的描述

2.1 能带模型

4H-SiC 属于 -SiC, 是六角结构和立方结构 (比例为 1:1) 的混合体. 根据最新能带结构研究的结果^[4], 4H-SiC 导带极小值位于 M 能谷, 并具有 C_{2v} 对称性. 由于其能带结构的复杂性, 并考虑到高场下, 能带非抛物性对于载流子输运性质有很大影响, 本文采用了非抛物性等效能谷模型. 其表达式为

$$\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_l} + \frac{k_y^2 + k_z^2}{m_t} \right) = (E) \quad (1)$$

$$(E) = E(1 + \beta E) \quad (2)$$

其中, \hbar 为普朗克常数, k_x, k_y, k_z 分别为不同方向的波矢分量, E 为电子能量, m_l 为纵向电子有效质量, m_t 为横向电子有效质量, β 为非抛物线因子.

2.2 散射率模型

对于 4H-SiC 中的散射机制, 主要考虑了对其输运性质有着重要影响的声学声子形变势散射、极化光学声子散射、电离杂质散射、等价零级谷间散射、等价一级谷间散射以及碰撞电离的作用 (本文采用了 Keldysh^[5] 碰撞电离散射率公式). 除此以外, 还考虑了中性杂质散射, 这是由于在 4H-SiC 中, 氮施主杂质的电离能通常相对较大, 导致即使室温条件下, 也有相当部分的杂质没有离化, 呈中性状态, 再加上掺杂浓度的影响, 使得中性杂质散射在相当温度和掺杂范围内十分重要, 因此必须考虑其影响. 其散射率公式^[6]为

$$P_{e, ni}(E) = \frac{80 n_{neu}(T) \hbar^3}{e^2 m_d^2} \quad (3)$$

其中 n_{neu} 是中性杂质浓度, ϵ_0 是真空介电常数, ϵ_s 是静态相对介电常数, e 是电子电荷, m_d 是电子态密度有效质量.

在掺氮 4H-SiC 中, 若只考虑立方位和六角位两个施主杂质能级, 由准中性条件可得到自由电子浓度同掺杂浓度及温度的关系为

$$n(T) + N_A = \frac{N(h)}{1 + (gn(T)/N_c) \exp[-E(h)/k_B T]} + \frac{N(k)}{1 + (gn(T)/N_c) \exp[-E(k)/k_B T]} \quad (4)$$

$$N_c = 2M_c \left(\frac{m_t k_B T}{2 \hbar^2} \right)^{3/2}, n_{neu} = N_D - N_A - n(T)$$

式中 $n(T)$ 是自由电子浓度, N_c 是导带状态密度, N_A 是受主杂质浓度 (即补偿浓度), N_D 是施主杂质浓度, M_c 是等价导带极小值数, $N(h)$ 和 $N(k)$ 分别是六角位和立方位的氮施主浓度, $E(h)$ 和 $E(k)$ 分别是这两个施主能级的电离能 (文中 $E(h) = 0.058\text{eV}$, $E(k) = 0.095\text{eV}$)^[7], g 是简并因子, n_{neu} 是中性杂质浓度.

基于上述关系, 图 1 给出了不同施主和补偿条件下, 4H-SiC 自由电子浓度随温度的变化规律. 需要说明的是: 本文主

要考虑的是低补偿时的情况 (补偿率 N_A/N_D 近似为 0), 因此在分析中, 对其影响忽略不计. 可以看出, 温度较低时, 两种不同掺杂样品中氮杂质离化程度都相应较低. 即使在室温条件下, 也都没有全部电离. 这与硅和砷化镓在室温时杂质就已经全部电离形成了鲜明的对比. 随着温度的升高, 样品 1 和 2 中杂质的离化率随之增加, 直至分别达到一定的温度全部离化 (此时离化率为 100%). 其中掺杂浓度越高, 达到全部电离所需的温度也就越高. 随后, 当温度继续升高时, 自由电子浓度保持不变. 需要注意的是: 当温度一定 (如 100K 时), 从计算过程来看, 掺杂浓度较高的样品 1 中电离施主杂质的实际浓度和自由电子的浓度虽都比掺杂浓度较低的样品 2 中的高, 但离化率却比其要小. 因此, 在系统研究掺氮 4H-SiC 中载流子的输运机理时, 必须考虑并认真分析温度较低以及高掺杂浓度时杂质不完全电离的影响, 否则必然会导致模拟结果和测量值的偏差.

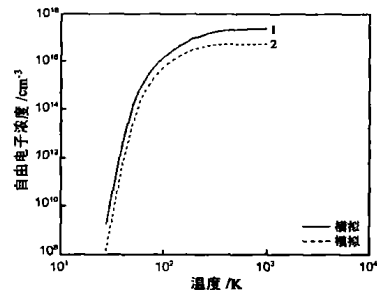


图 1 自由电子浓度随温度的变化 (1: $N_D=2.2 \times 10^{17}/\text{cm}^3, N_A=6.0 \times 10^{16}/\text{cm}^3$; 2: $N_D=5.2 \times 10^{16}/\text{cm}^3, N_A=3.8 \times 10^{16}/\text{cm}^3$)

要考虑到的是低补偿时的情况 (补偿率 N_A/N_D 近似为 0), 因此在分析中, 对其影响忽略不计. 可以看出, 温度较低时, 两种不同掺杂样品中氮杂质离化程度都相应较低. 即使在室温条件下, 也都没有全部电离. 这与硅和砷化镓在室温时杂质就已经全部电离形成了鲜明的对比. 随着温度的升高, 样品 1 和 2 中杂质的离化率随之增加, 直至分别达到一定的温度全部离化 (此时离化率为 100%). 其中掺杂浓度越高, 达到全部电离所需的温度也就越高. 随后, 当温度继续升高时, 自由电子浓度保持不变. 需要注意的是: 当温度一定 (如 100K 时), 从计算过程来看, 掺杂浓度较高的样品 1 中电离施主杂质的实际浓度和自由电子的浓度虽都比掺杂浓度较低的样品 2 中的高, 但离化率却比其要小. 因此, 在系统研究掺氮 4H-SiC 中载流子的输运机理时, 必须考虑并认真分析温度较低以及高掺杂浓度时杂质不完全电离的影响, 否则必然会导致模拟结果和测量值的偏差.

3 4H-SiC 的 Ensemble Monte Carlo 模拟方法

本文模拟中, 跟踪了 10000 个电子的运动, 并且假定初始电子遵循麦克斯韦分布率, 其能量连续的分布在导带底上面. 对于自由飞行时间的确定, 采用了阶梯值的自散射方法.

4H-SiC 作为一种新型半导体材料, 其材料参数的测量工作目前还不很完善, 本文计算中用到的参数主要来自一些模拟和测量的结果^[2,3,6,7], (表 1) 列出了本文用于模拟的主要参数.

表 1 4H-SiC 模型参数

参数名称	参数值	参数名称	参数值
非抛物线因子	0.323	一级谷间散射形变势 (eV)	5.2
静态相对介电常数	9.66	一级谷间声子能量 (eV)	0.035
声学形变势 (eV)	14.0	零级谷间耦合常数 (10^{11}eV/m)	0.8
横向有效质量 (m_0)	0.42	零级谷间声子能量 (eV)	0.085
纵向有效质量 (m_0)	0.28	等价导带极小值数	3
极化光学声子能量 (eV)	0.12	简并因子	2

4 模拟结果及分析

4.1 4H-SiC 的低场电子输运特性

在 4H-SiC 的低场电子输运中, 主要分析了人们对其最为关心的温度特性. 模拟中电场为 $4.0 \times 10^3\text{V/cm}$. 图 2 是对图 1 两种不同掺杂条件下, 4H-SiC 横向电子迁移率随温度变化的模拟结果同实验值^[7]的比较. 可以看出, 模拟结果同实验值符合较好, 这说明了能带模型、散射机制及模型参数选择的

正确性.此外,图 2 反映出了这样一个事实:低温区,随着掺杂浓度的增加,横向电子迁移率降低很快.而随着温度的增加,掺杂浓度对电子迁移率的影响变弱.从模拟过程来看这主要是由于温度较低时,杂质离化程度也相应较低,中性杂质散射决定电子迁移率的变化,因而随着施主杂质浓度的增加,引起了中性杂质散射的迅速增加,导致电子迁移率下降很快.而在中等温度区,施主杂质大部分已经电离,中性杂质散射作用较小,电子迁移率主要受声学声子散射和电离杂质散射控制;当温度较高时,中性杂质散射作用极小,电子迁移率的变化主要是由能量较大的谷间声子散射和极化光学声子散射决定的,掺杂浓度的变化对其影响可忽略不计.

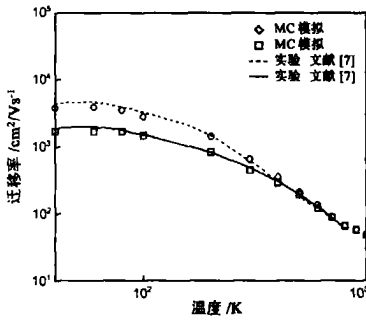


图 2 不同掺杂浓度下,横向电子迁移率随温度的变化

图 3 是不同温度条件下,4H-SiC 横向电子迁移率随掺杂浓度的变化规律.为了更清楚的说明问题,图中还分别给出了三种温度下不考虑中性杂质散射时迁移率的变化.可以看出,掺杂浓度较低时,杂质不完全电离引起的中性杂质散射对于三种温度条件下电子迁移率的影响都很小,而随着掺杂浓度的增加,中性杂质散射的作用逐步增大,尤其是温度为 77K 时,最为明显.另一方面,掺杂程度较高如 $N_D = 2.2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时,随着温度的增加,中性杂质散射的作用随之迅速减弱,从计算过程分析,此时

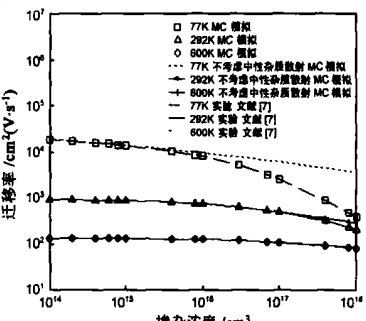


图 3 不同温度时,横向电子迁移率随掺杂浓度的变化

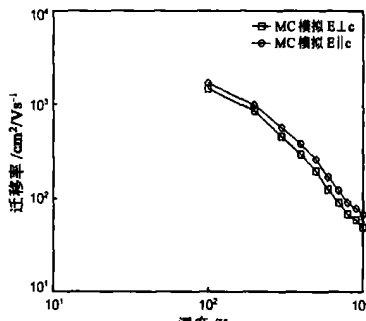


图 4 电子迁移率随温度的变化

电离杂质散射和声学声子散射等其他散射机制逐渐代替了中性杂质散射而成为决定电子迁移率变化的主要因素,这同图 2 中的分析都是一致的.图 4 是施主浓度为 $2.2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$,受主浓度为 $6.0 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 时 4H-SiC 纵向和横向电子迁移率随温度的变化.可以看出,在所研究的温度范围内,4H-SiC 电子迁移率较高且各向异性较小.

4.2 4H-SiC 的高场电子输运特性

在对高场输运特性进行研究时,考虑到热电离以及场致电离的双重作用,并结合节 2.2 和 4.1 中的分析,假定在所研究的电场范围内,氮杂质是全部电离的.图 5

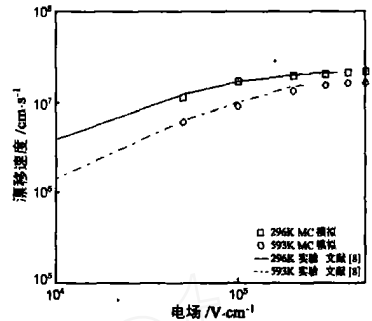


图 5 不同温度下,横向电子漂移速度随电场的变化

是两种不同温度条件下,4H-SiC 横向电子漂移速度随电场变化的模拟结果同实验结果^[8]的比较.可以看出,模拟同实测值较为符合,这说明本文模拟正确反映了高场下电子的输运机理.此外,在电场相对较低时,不同温度下的电子漂移速度相差较大,而随着电场的增加,差别明显减小.当电场达到 $5.0 \times 10^5 \text{ V/cm}$ 时,两种温度下的电子漂移速度数值比较接近.这可能是由于在电场较低时,声子散射受温度的影响很大,而当电场较大时,电子已经很“热”了,即达到了能量很高的情况,晶格温度的变化对其影响逐渐变弱的原因.最后,笔者对 4H-SiC 中电子的速度过冲效应进行了模拟.阶跃电场强度分别为 100、500 和 1000KV/cm.由图 6 可以看出,在电子漂移速度达到稳定之前,明显出现了过冲现象.阶跃电场强度为 1000KV/cm 时,电子横向瞬态速度峰值接近 $3.3 \times 10^7 \text{ cm/s}$,大大高于稳态时的饱和速度,反应时间大约只有百分之几皮秒量级.

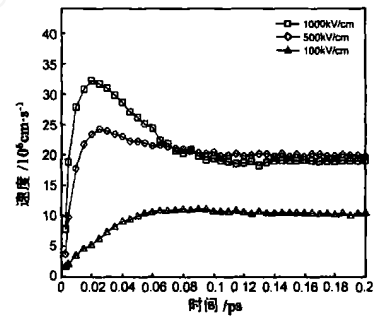


图 6 300K 时,横向电子漂移速度随不同阶跃电场的瞬变

了,即达到了能量很高的情况,晶格温度的变化对其影响逐渐变弱的原因.最后,笔者对 4H-SiC 中电子的速度过冲效应进行了模拟.阶跃电场强度分别为 100、500 和 1000KV/cm.由图 6 可以看出,在电子漂移速度达到稳定之前,明显出现了过冲现象.阶跃电场强度为 1000KV/cm 时,电子横向瞬态速度峰值接近 $3.3 \times 10^7 \text{ cm/s}$,大大高于稳态时的饱和速度,反应时间大约只有百分之几皮秒量级.

5 结论

本文在分析了 4H-SiC 能带结构以及主要散射机制的基础之上,建立了非抛物性能带模型,对掺氮 4H-SiC 静态和瞬态电子输运特性进行了 Ensemble Monte Carlo 模拟.研究表明,低温高掺杂时,中性杂质散射对于 4H-SiC 电子输运性质影响较大;4H-SiC 电子迁移率各向异性较小;阶跃电场强度为 1000KV/cm 时,模拟获得的横向瞬态速度峰值接近 $3.3 \times 10^7 \text{ cm/s}$,反应时间仅为百分之几皮秒量级,表明 4H-SiC 在高频应用中具有很大的潜力.

参考文献:

[1] R R Sergiej, C R Clark, S Sriram. Advances in SiC materials and devices: an industrial point of view[J]. Material Science and Engineering B, 1999, 61 - 62 (30) : 1 - 8.
 [2] R P Joshi. Monte Carlo calculation of the temperature and field-dependent electron transport parameters for 4H-SiC[J]. J Appl Phys, 1995, 78 (9) : 5518 - 5521.

- [3] P Mickevicius, J H Zhao. Monte Carlo study of electron transport in SiC [J]. J Appl Phys, 1998, 83(6) :3161 - 3167.
- [4] C Persson, U Lindefelt. Relativistic band structure calculation of cubic and hexagonal SiC polytypes[J]. J Appl Phys, 1997, 82(11) :5496 - 5507.
- [5] L V Keldysh. Theory of impact ionization in semiconductors[J]. Sov Phys JETP, 1965, 21(6) :1135 - 1150.
- [6] H Iwata, K M Itoh. Donor and acceptor concentration dependence of the electron Hall mobility and the Hall scattering factor in n-type 4H and 6H-SiC[J]. J Appl Phys, 2001, 89(11) :6228 - 6234.
- [7] J Perot, W. Zawadzki, S. Contretas. Electrical transport in n-type 4H silicon carbide[J]. J Appl Phys, 2001, 90(4) :1869 - 1878.
- [8] I A Khan, J A Cooper. Measurement of high-field electron transport in SiC[J]. IEEE Trans on Electron Device, 2000, 47(2) :269 - 273.

作者简介:



王 平 男, 1977 年出生于陕西西安, 博士研究生, 主要从事宽带隙半导体材料、器件建模等方面的研究. E-mail: pingwxidian@163.com.



杨 燕 女, 1979 年出生于陕西华阴, 博士研究生, 主要从事宽带隙半导体器件建模等方面的研究.

杨银堂 男, 1962 年出生于河北邯郸, 教授, 博士生导师, 主要从事新型半导体材料与器件等方面的研究.