

# 6H-SiC 高场输运特性的多粒子蒙特卡罗研究\*

王平<sup>1</sup> 周津慧<sup>1</sup> 杨银堂<sup>1</sup> 屈汉章<sup>2</sup> 杨燕<sup>1</sup> 付俊兴<sup>1</sup>

(1 西安电子科技大学微电子所, 西安 710071)

(2 西安邮电学院信息与控制系, 西安 710061)

**摘要** 采用非抛物性能带模型,对 6H-SiC 高场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:温度为 296 K 时,电子横向漂移速度在电场为  $2.0 \times 10^4$  V/cm 处偏离线性区,  $5.0 \times 10^5$  V/cm 处达到饱和. 由 EMC 方法得到的电子横向饱和漂移速度为  $1.95 \times 10^7$  cm/s,纵向为  $6.0 \times 10^6$  cm/s,各向异性较为显著. 当电场小于  $1.0 \times 10^6$  V/cm 时,碰撞电离效应对高场电子漂移速度影响较小. 另一方面,高场下电子平均能量的各向异性非常明显. 电场大于  $2.0 \times 10^5$  V/cm 时,极化光学声子散射对电子横向能量驰豫时间影响较大. 当电场一定时, *c* 轴方向的电子碰撞电离率随着温度的上升而增大. 对非稳态高场输运特性的分析表明:阶跃电场强度为  $1.0 \times 10^6$  V/cm 时,电子横向瞬态速度峰值接近  $3.0 \times 10^7$  cm/s,反应时间仅为百分之几皮秒量级.

**关键词** 6H-SiC; 多粒子蒙特卡罗研究; 各向异性; 漂移速度; 平均能量; 电子碰撞电离率

**中图分类号** TN304.2      **文献标识码** A

## 0 引言

作为一种新型半导体材料,6H-SiC 以其优良的物理化学特性和电学特性在光电制造领域极具潜力<sup>[1]</sup>. 6H-SiC 属于宽带隙半导体,禁带宽度为 3.0 eV,大约是 Si 的 2 倍多. 以其制成的紫外光电探测器在 200 ~ 400 nm 都有较高的灵敏度和选择性,测量的最大量子效率接近 100%,可以探测红外背景下的紫外信号<sup>[2]</sup>. 同时由于 6H-SiC 的 PN 结和肖特基势垒都具有非常小的暗电流 ( $\leq 10^{-10}$  A/cm<sup>2</sup>) 和噪声,所以在室温条件下的探测率可以达到  $10^{-14}$  ~  $10^{-13}$  W/Hz<sup>1/2</sup>,比硅器件大约 10000 倍. 其它的 6H-SiC 光电器件如蓝光二极管也表现出了良好的性能,早在二十世纪九十年代初就进入了市场,成为第一种大批量商业生产的 SiC 器件<sup>[3]</sup>.

6H-SiC 表现出的良好光电性能,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 6H-SiC 器件而言,准确的材料参数也是必不可少的. 所以有必要对 6H-SiC 中载流子的输运机理进行分析和探讨. 而 6H-SiC 器件主要是应用于极端条件下的,因此对高场条件下 6H-SiC 中载流子的输运特性进行研究就显得更加重要. 目前,有一些相关的研究报道<sup>[4,5]</sup>,但大多主要考虑的是低场时的情况. Mickevicius 等<sup>[6]</sup>虽然对高场条件下 6H-

SiC 中的电子输运进行了理论研究,但过于简单. 此外,随着晶片制造工艺以及实验水平的提高,出现了一些新的实验结果<sup>[7,8]</sup>,也为进一步从理论上系统研究高场条件下 6H-SiC 中的电子输运特性提供了必要条件.

本文采用非抛物性能带模型,用多粒子蒙特卡罗方法对高场条件下 6H-SiC 中电子的输运特性进行了系统分析. 得出了稳态条件下电子平均漂移速度、平均能量、能量驰豫时间、*c* 轴方向碰撞电离率同高电场的关系以及电子横向漂移速度在不同阶跃电场强度下的瞬态变化规律. 并同最新的实验结果进行了对比,符合较好.

## 1 能带模型及散射机制

6H-SiC 和 4H-SiC 同属于  $\alpha$ -SiC,都是六方结构和立方结构的混合体,但有很大的不同. 在 4H-SiC 中两种结构所占的比例是 1:1. 而在 6H-SiC 中则是 1:2. 根据最新能带结构计算的结果<sup>[9]</sup>,6H-SiC 的第一布里渊区为六角柱状结构. 导带极小值位于 M 能谷和 L 能谷连线上的 44% 位置处,并具有  $C_{2v}$  对称性.

由于其能带结构的复杂性,考虑到高场下,能带的非抛物性对于载流子输运性质有很大的影响. 本文采用了非抛物性等效能谷模型<sup>[10]</sup>.

对于 6H-SiC 中的散射机制,本文主要考虑了对其高场输运性质有重要影响的声学波形变势散射,极化光学声子散射,等价零级谷间散射,等价一级谷间散射以及电离杂质散射<sup>[5,6]</sup>. 除此以外,还考虑了碰撞电离的作用. 本文模拟中采用了 Keldysh 碰撞

\*教育部重点资助项目(02074)和国防科技预研基金资助(批准号:51408010601DZ1032)项目  
Tel: 029-8207717  
收稿日期:2003-04-21

电离散射率公式<sup>[10]</sup>.

## 2 6H-SiC 的 EMC 模拟方法

本文模拟中,假定初始电子遵循麦克斯韦分布率,其能量连续地分布在导带底上. 对于电子飞行时间的确定,采用了阶梯  $T$  值的自散射方法<sup>[10]</sup>. 此外,由于 6H-SiC 电子有效质量具有各向异性,笔者作了 Herring-Vogt 变换<sup>[10]</sup>. 对于散射后电子飞行方向的确定,需要在不同散射机制角分布函数的基础上求解散射后的散射角余弦,本文中为了方便计算并提高模拟的收敛速度,将每次散射后的散射角余弦用它的数学期望  $\overline{\cos\theta}$  代替<sup>[10]</sup>. 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  $\overline{\cos\theta} = 0$ . 对电离杂质散射和极化光学声子散射而言,其角分布函数和散射角余弦的数学期望请参见文献<sup>[10]</sup>.

## 3 模拟结果与讨论

本文采用多粒子蒙特卡罗方法(EMC)研究了人们对于 6H-SiC 最为关心的高场电子输运特性. 模拟中用到的主要参数详见文献<sup>[6]</sup>和<sup>[8]</sup>. 图 1 是对三种不同温度条件下,6H-SiC 电子横向漂移速度随电场变化的模拟结果同最新实验结果<sup>[7]</sup>的比较.

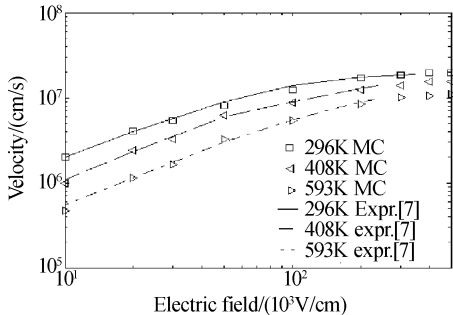


图 1 不同温度下,电子横向漂移速度随电场的变化  
Fig. 1 Electron drift velocity for  $E \perp c$  as a function of the electric field in 6H-SiC at different temperatures

显然,电子漂移速度与电场的关系起初是线性的,随着电场进一步增加,漂移速度的增加减慢,当电场足够强时,漂移速度趋于一个饱和值. 由本文计算知道,温度为 296 K 时,电子漂移速度大约在电场为  $2.0 \times 10^4$  V/cm 处偏离线性区, $5.0 \times 10^5$  V/cm 处达到饱和. 电子平均能量的计算也表明当电场为  $2.0 \times 10^4$  V/cm 时,电子得到了明显的加热(参见图 3),此后,随着电场的不断增大,电子从电场获得的能量越来越多,其平均能量将显著高于热平衡值,而当电场增加到极化光学声子散射开始作用明显时,电子得到的大部分能量将通过这种方式损失掉,电子平均漂移速度也逐渐趋向饱和.

Irana 等人的实验表明<sup>[7]</sup>:温度为 296 K 时,6H-SiC 电子横向饱和和漂移速度约为  $1.9 \times 10^7$  cm/s. 408 K 和 593 K 时分别近似为  $1.4 \times 10^7$  cm/s 和  $1.0 \times 10^7$  cm/s. 从图 1 中可以看出,模拟结果同实验结果符合相当好,这说明本文能带模型,散射机制及模型参数选择的正确性. 此外,实验结果和模拟结果还反映出了这样一个事实:电场相对较低时,三种不同温度下的电子横向漂移速度相差较大,随着电场的增加,这种差别逐步减少. 当电场达到  $5.0 \times 10^5$  V/cm 时,三种电子横向漂移速度相差最小. 从计算过程来看,这是由于当电场较低时,声子散射受温度的影响很大,电场较高时,电子能量也相对较高,晶格温度的变化对其影响变弱的原因. 图 2 是 296 K 时,6H-SiC 电子漂移速度随电场的变化规律. 从图中可以看出,电子横向和纵向漂移速度存在显著的各向异性,电子横向饱和和漂移速度大约是纵向的 3 倍多. 这种情况主要是由 6H-SiC 中电子横向有效质量较小( $0.40 m_0$ )而纵向有效质量较大( $2.20 m_0$ )造成的.

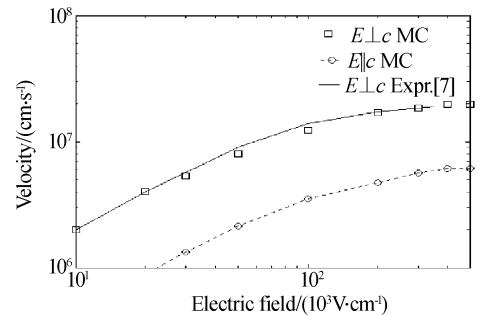


图 2 296 K 时,电子漂移速度随电场的变化

Fig. 2 Electron drift velocity as a function of the electric field in 6H-SiC at 296 K

需要说明的是:从计算过程来看,即使电场达到  $1.0 \times 10^6$  V/cm,碰撞电离过程的影响也始终较小. 一方面,这与电子平均能量相对较小有关;另一方面,与 6H-SiC 禁带宽度较大也有很大的关系. 而对于禁带宽度相对较窄的 3C-SiC ( $2.36$  eV),Mickevicius 等人<sup>[6]</sup>的研究表明,当电场达到  $6.0 \times 10^5$  V/cm 时,碰撞电离过程对于其高场输运的影响比较明显.

图 3 是 6H-SiC 电子平均能量随电场的变化规律. 从图中可以看出,随着电场的增加,电子平均能量逐渐增大. 电场越强,横向和纵向电子平均能量相差越大,各向异性越显著. 当电场为  $1.0 \times 10^6$  V/cm 时,6H-SiC 电子横向平均能量比纵向大约一个数量级. 从计算过程来看,这种情况也与电子有效质量强的各向异性有很大关系. 从图中还可以看出,这几种  $\alpha$ -SiC 的横向电子平均能量比较接近,纵向电子平均能量差异较大,其中 2H-SiC 的纵向电子平均

能量最高,依次为 4H-SiC 和 6H-SiC,由此可以推测,在 C 轴方向,6H 的产生率比 4H 和 2H 的都低,2H 的最高.

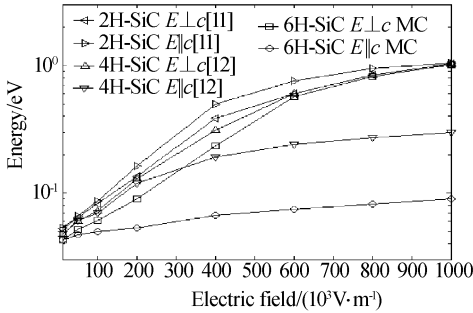


图3 6H-SiC 电子平均能量同电场的关系  
Fig. 3 Electron mean energy as a function of the electric field in 6H-SiC at 296 K

图4 是电子横向和纵向能量弛豫时间在高场下的变化. 从图中可以看出,高场条件下, $\tau$  的各向异性非常明显,这与前面 EMC 模拟得到的结论都是一致的. 对于电子横向能量弛豫时间而言,当电场相对较低时, $\tau$  随电场的增加而降低,直至达到一个最小值. 此后,随着电场的增加, $\tau$  增加较快. 这种变化趋势反映出了本文 EMC 模拟中的物理过程: 首先,随着电场的增强,电子能量的增大导致了散射的迅速增强,曲线呈下降趋势,并达到最小值. 此后,随着电场的进一步增强(大于  $2.0 \times 10^5$  V/cm),极化光学声子散射逐步占优,弛豫时间随之增加. 对纵向电子能量弛豫时间而言,受到其电子能量的限制,变化幅度不大.

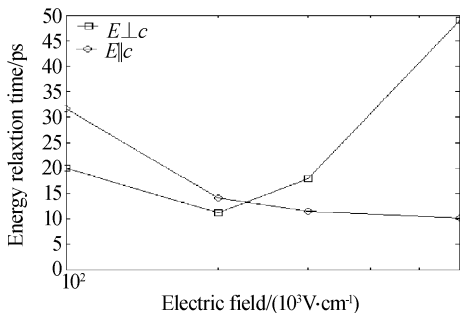


图4 电子能量弛豫时间随电场的变化  
Fig. 4 Electron energy relaxation time as a function of the electric field at 296 K

图5 是不同温度下,c 轴方向(6H-SiC 的生长轴方向)电子碰撞电离率随倒数电场变化的模拟结果同实验结果<sup>[8]</sup>的比较. 从图中可以看出,温度一定时,电子碰撞电离率随着倒数电场的增大而减小. 并且当电场一定时,电子碰撞电离率随着温度的增加而增加,即具有正向的温度系数. 而在立方碳化硅(3C-SiC)中,由于光学声子的非弹性散射,使得电子碰撞电离率随温度的增加而下降.

最后,本文还对 6H-SiC 中电子的速度过冲效应进行了模拟,速度过冲是一种高场作用下的典型非

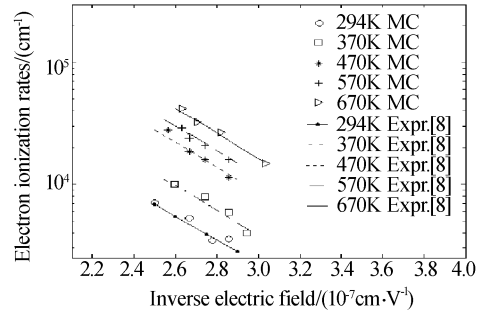


图5 不同温度下,c 轴方向电子碰撞电离率同倒数电场的关系

稳态热载流子输运效应,对于深亚微米器件的工作速度影响很大. 在本文模拟中,阶跃电场强度分别取为  $1.0 \times 10^5$  V/cm,  $5.0 \times 10^6$  V/cm 和  $1.0 \times 10^6$  V/cm. 由图6中可看出,在电子横向漂移速度达到稳定之前,明显出现了过冲现象. 当阶跃电场强度为  $1.0 \times 10^6$  V/cm 时,电子横向瞬态速度峰值接近  $3.0 \times 10^7$  cm/s,大大高于稳态时的饱和速度. 另一方面,由于此时散射强度很高,使得反应时间很短,大约只有百分之几皮秒量级.

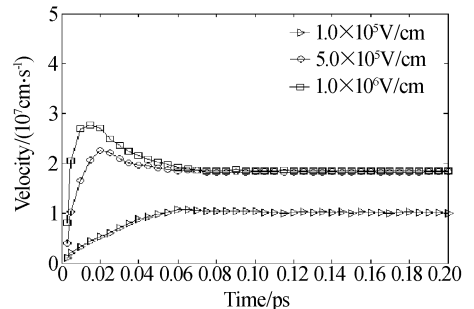


图6 电子横向漂移速度随不同阶跃电场的瞬态变化  
Fig. 6 Transient response of electron velocity for  $E \perp c$  to different step electric field

## 4 结论

本文在分析 6H-SiC 能带结构以及主要散射机制的基础之上,建立了非抛物性等效能谷模型. 对高场条件下 6H-SiC 中热电子的静态和瞬态输运特性进行了多粒子蒙特卡罗模拟研究. 模拟结果和测量值较为一致,表明了整个模拟的正确性,反映了 6H-SiC 中电子在高场下的输运机理. 对模拟结果的分析表明:温度为 296 K 时,电子横向漂移速度在电场为  $2.0 \times 10^4$  V/cm 处偏离线性区,  $5.0 \times 10^5$  V/cm 处达到饱和. 当电场小于  $1.0 \times 10^6$  V/cm 时,碰撞电离效应对高场电子漂移速度的影响较小. 另一方面,6H-SiC 电子漂移速度和电子平均能量具有很强的各向异性:温度为 296 K 时,6H-SiC 电子横向饱和和漂移速度为  $1.95 \times 10^7$  cm/s,是纵向的 3 倍多. 同样温度下,电场为  $1.0 \times 10^6$  V/cm 时的电子横向

平均能量为 1.0 eV 左右,比纵向平均能量大约一个数量级. 此外,电场一定时,6H-SiC  $c$  轴方向的电子碰撞电离率随着温度的增加而增加. 分析还表明:当阶跃电场强度为  $1.0 \times 10^6$  V/cm 时,电子横向瞬态速度峰值接近  $3.0 \times 10^7$  cm/s,反应时间大约只有百分之几皮秒量级,表明 6H-SiC 在高频应用中具有很大的潜力.

### 参考文献

- 1 Siergiej R R, Clark C R, Sriram S. Advances in SiC materials and devices: an industrial point of view. *Material Science and Engineering(B)*, 1999, **61-62**(1): 1 ~ 8
- 2 Brown D M, Downey E T, Kretchmer J W, et al. Silicon carbide UV photodiodes. *IEEE Trans Electron Device*, 1993, **40**(2): 325 ~ 331
- 3 郝跃,彭军,杨银堂. 碳化硅宽带隙半导体技术. 北京: 科学出版社, 2000. 190 ~ 196  
Hao Y, Peng J, Yang Y T. SiC semiconductor technology. Beijing: Science Press, 2000. 190 ~ 196
- 4 Schaffer W J, Negley G H, Irvine K G, et al. Conductivity anisotropy in epitaxial 6H-SiC and 4H-SiC. *Mat Res Soc Symp Proc*, 1994, **339**: 595 ~ 600
- 5 尚也淳,张义门,张玉明. 6H-SiC 电子输运的 Monte Carlo 模拟. 物理学报, 2000, **49**(9): 1786 ~ 1790  
Shang Y C, Zhang Y M, Zhang Y M. *Acta Physica Sinica*. 2000, **49**(9): 1786 ~ 1790
- 6 Mickevicius P, Zhao J H. Monte Carlo study of electron transport in SiC. *J Appl Phys*, 1998, **83**(6): 3161 ~ 3167
- 7 Khan I A, Cooper J A. Measurement of high-field electron transport in SiC. *IEEE Trans Electron Device*, 2000, **47**(2): 269 ~ 273
- 8 Levinshtein M E, Rumyantsev S L, Michael S S. Properties of advanced semiconductor materials. New York: John Wiley & Sons, 2001. 93 ~ 149
- 9 Persson C, Lindefelt U. Relativistic band structure calculation of cubic and hexagonal SiC polytypes. *J Appl Phys*, 1997, **82**(11): 5496 ~ 5507
- 10 叶良修. 小尺寸半导体器件的 Monte Carlo 模拟. 北京: 科学出版社, 1997. 342 ~ 383  
Ye L X. Monte Carlo simulation of small size semiconductor device. Beijing: Science Press, 1997. 342 ~ 383
- 11 Nilsson H E, Hjelm M. Monte Carlo simulation of electron transport in 2H-SiC using a three valley analytical band model. *J Appl Phys*, 1999, **86**(11): 6230 ~ 6233
- 12 Nilsson H E, Sannemo U, Petersson C S. Monte Carlo simulation of electron transport in 4H-SiC using a two-band model with multiple minima. *J Appl Phys*, 1996, **80**(6): 3365 ~ 3169

## An Ensemble Monte Carlo Study of High Field Electron Transport in 6H-SiC

Wang Ping<sup>1</sup>, Zhou Jinhui<sup>1</sup>, Yang Yintang<sup>1</sup>, Qu Hanzhong<sup>2</sup>, Yang Yan<sup>1</sup>, Fu Junxing<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Microelectronics Institute, Xidian University, Xi'an 710071

<sup>2</sup> Department of Information and Control, Xi'an Institute of Posts and Telecom, Xi'an 710061

Received date: 2003-04-21

**Abstract** Based on the new experiment result and an recent ab initio band structure calculation, the high-field electron transport properties in 6H-SiC have been analyzed by an Ensemble Monte Carlo technique with an nonparabolic band model. The result shows that the electron drift velocity deviates from the linear law at about  $2.0 \times 10^4$  V/cm and saturates at  $5.0 \times 10^5$  V/cm. The impact ionization process has little effect on the high field electron drift velocities when the applied electric fields are lower than  $1.0 \times 10^6$  V/cm. And the anisotropy of the electron saturation velocities is very pronounced in 6H-SiC. At 296 K, the peak saturation velocities given by the model are  $6.0 \times 10^6$  cm/s and  $1.95 \times 10^7$  cm/s for  $E \parallel c$  and  $E \perp c$  respectively. At high electric fields, the difference in electron mean energy for  $E \perp c$  and  $E \parallel c$  is also very pronounced. The polar optical phonons scattering is very important for electron energy relaxation times when the electron field is applied perpendicular to the  $c$  axis. Besides, the electron impact ionization rates for  $E \parallel c$  increases with temperatures when the electric field is kept constant. The peak transient velocity for  $E \perp c$  at high step electric field such as  $1.0 \times 10^6$  V/cm is  $3.0 \times 10^7$  cm/s. The response time is only in deep subpicoseconds.

**Keywords** 6H-SiC; Ensemble Monte Carlo study; Anisotropy; Drift velocity; Mean energy; Electron impact ionization rates



**Wang Ping** was born in 1977, in Xi'an. He received bachelor degree from Northwest University in 1999 and master degree from Xidian University in 2002. Now he is a doctoral student. His research interest is in wide band-gap semiconductor, thin film and device process. He has published several research papers in this area.