*** 学术论文 ***

SiC 电子输运性质研究及散射率的简化计算*

全宏俊　汪秉宏**

中国科学技术大学近代物理系及非线性科学中心，合肥 230026

摘要　用流体动力学平衡方程研究了 4H-SiC 的漂移速度，平均电子能量等输运性质，并考虑了非抛物能带效应和各向异性效应．同时对散射率的计算进行了简化，并用简化公式研究了 3C-SiC 的线性和非线性输运，在场强不超过 200 kV/cm 时，引起的误差仍在允许范围内．

关键词　输运性质　非抛物能带效应　各向异性　散射率

随着半导体尺寸的不断缩减，半导体器件模拟起着越来越重要的作用，它可以提供一个成本较少的手段分析和设计半导体器件．建立在漂移-扩散描述基础上的传统器件模拟，由于它的低场特性而不再适用．MC(Monte Carlo)模拟可以较全面地描述电子动力学现象，但需要巨大的计算资源，因此仅限于一些简单器件．基于 Lei-Ting 平衡方程的流体动力学近似，虽然不如 MC 方法准确，但它具有处理高场，热电子效应等能力，且可以模拟复杂的器件而不需化费很大的计算资源，因而得到广泛应用[1,2]．

1 Lei-Ting 平衡方程简介

在电场 $\boldsymbol{E}$ 作用下，导带电子的动量和能量平衡方程可写为[1,3]($\hbar = k_B = 1$)

$$e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{K} + \boldsymbol{A}_i + \boldsymbol{A}_p = 0, \tag{1}$$

$$e\boldsymbol{E}\cdot\boldsymbol{v}_d - W_p = 0, \tag{2}$$

e 为电子电荷．$\boldsymbol{K}$ 为系统平均逆有效质量张量，$\boldsymbol{v}_d$ 为电子平均漂移速度，$\boldsymbol{A}_i$，$\boldsymbol{A}_p$ 和 W_p 分别是由于电子杂质和电子-声子散射而产生的摩擦力及能量损失．

2 计算结果及分析

2.1 各向异性对电子漂移速度，平均能量的影响

考虑到各向异性时，引入 Herring-Vogt 变换[4,5]，$\boldsymbol{A}_i$，$\boldsymbol{A}_p$ 和 W_p 可分别写为

2000-07-20 收稿，2000-10-08 收修改稿

* 国家重点基础研究规划项目（九七三项目）、国家攀登计划"非线性科学"、国家自然科学基金重点项目（批准号：19932020）及国家自然科学基金（批准号：19974039，59876039）项目资助

** 联系人，E-mail Address：bhwang@ustc.edu.cn

$$A_i = \frac{2\pi n_i}{N} \sum_{k^*, q^*} | u(q_1^*) |^2 | g(k^*, q^*) |^2 (v^{(0)}(k^* + q^*) - v^{(0)}(k^*)) \cdot$$

$$\underline{M} \delta(\varepsilon^{(0)}(k^* + q^*) - \varepsilon^{(0)}(k^*)) \frac{f(\varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*), T_e) - f(\varepsilon^{(0)}(k^* + q^* - p_1^*), T_e)}{|\in [q^*, \varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*) - \varepsilon^{(0)}(k^* + q^* - p_1^*)]|^2}, \tag{3}$$

$$A_p = \frac{4\pi}{N} \sum_{k^*, q^*, \lambda} | M(q_1^*, \lambda) |^2 | g(k^*, q^*) |^2 (v^{(0)}(k^* + q^*) - v^{(0)}(k^*)) \cdot \underline{M}$$

$$\delta(\varepsilon^{(0)}(k^* + q^*) - \varepsilon^{(0)}(k^*) + \Omega_{q_1^*, \lambda}) \frac{f(\varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*), T_e) - f(\varepsilon^{(0)}(k^* + q^* - p_1^*), T_e)}{|\in [q^*, \varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*) - \varepsilon^{(0)}(k^* + q^* - p_1^*)]|^2}$$

$$\times \left[n\left(\frac{\Omega_{q_1^*, \lambda}}{T}\right) - n\left(\frac{\varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*) - \varepsilon^{(0)}(k^* + q^* - p_1^*)}{T_e}\right) \right], \tag{4}$$

$$W_p = \frac{4\pi}{N} \sum_{k^*, q^*, \lambda} | M(q_1^*, \lambda) |^2 | g(k^*, q^*) |^2 \Omega_{q_1^*, \lambda} \delta(\varepsilon^{(0)}(k^* + q^*) - \varepsilon^{(0)}(k^*) + \Omega_{q_1^*, \lambda}) \cdot$$

$$\frac{f(\varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*), T_e) - f(\varepsilon^{(0)}(k^* + q^* - p_1^*), T_e)}{|\in [q^*, \varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*) - \varepsilon^{(0)}(k^* + q^* - p_1^*)]|^2}$$

$$\left[n\left(\frac{\Omega_{q_1^*, \lambda}}{T}\right) - n\left(\frac{\varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*) - \varepsilon^{(0)}(k^* + q^* - p_1^*)}{T_e}\right) \right], \tag{5}$$

$$eE \cdot K = \frac{2e}{N} E \cdot \sum_{k^*} \underline{M} \cdot \nabla_{k^*} \nabla_{k^*} \varepsilon^{(0)}(k^*) \cdot \underline{M} f(\varepsilon^{(0)}(k^* - p_1^*)), \tag{6}$$

在上方程中，N_i 为杂质密度，$\Omega_{q,\lambda}$是波矢为 q 的λ 分支声子频率，$u(q)$和 $M(q,\lambda)$分别为杂质势和电子-声子耦合矩阵元的 Fourier 变换，$f(\varepsilon(k), T_e)$是电子温度为 T_e 的 Fermi 分布，T 为晶格温度，$n(x)$为 Bose 函数，$\in(q,\omega)$为电子系统无规位相近似介电函数，$|g(k,q)|^2$ 是由于能带非抛物性引起的重叠积分．

$$\varepsilon^{(0)}(k) = \frac{1}{2\alpha}\left[\left(1 + \frac{2\alpha k^2}{m_s}\right)^{\frac{1}{2}} - 1\right],$$

为各向同性能带的 Kane 色散关系，$\alpha = 0.323\ \mathrm{eV}^{-1}$为非抛物性系数，$m_s = (m_t^2 m_1)^{1/3}$是有效状态密度质量，$m_t = 0.42 m_0$，$m_1 = 0.29 m_0$ 分别为横向和纵向有效质量[6]，m_0 为自由电子质量，p_1^* 和 q_1^* 是 Herring-Vogt 变换位移矢量，

$$p_1^* = p_d \cdot \underline{M}^{-1},\ q_1^* = q^* \cdot \underline{M}^{-1}. \tag{7}$$

为便于与 MC 方法比较，取 $N_A = 10^{16}\ \mathrm{cm}^{-3}$，$N_D = 6 \times 10^{16}\ \mathrm{cm}^{-3}$，$N_i = N + 2N_A$[7]，其他大部分材料参数和散射参数取自文献[8]．图 1 和 2 分别给出了不同晶格温度时平行和垂直 C 轴方向上的电子漂移速度与电场的关系．Joshi[9]和 Nilsson 等[8]在室温下的 MC 模拟结果也画在图中．低场时，我们的结果与 MC 模拟结果符合得很好．当电场超过 200 kV/cm 时开始出现偏离．在室温下，随着电场增加，漂移速度先增加，达到峰值后则减小，在高场时达到饱和．在平行 C 轴方向 $v_d = 2.07 \times 10^7$ cm/s，此值与 6H-SiC 的实验结果(2.1×10^7 cm/s[10])和 3C-SiC 的理

论估计值(1.9×10^{7}cm/s[11])十分接近．在 Joshi 的模拟中，考虑单个等价各向同性能谷和能带的非抛物效应，得到 $v_d=2.7\times10^{7}$cm/s，此值比 6H-SiC 的实验结果和 3C-SiC 的理论预言值大 30%．Nilsson 等采用双能带多重最小模型，在 C 轴方向得到的 v_d 比垂直方向的 v_d 小，仅为 1.8×10^{7}cm/s．而我们的结果是平行方向 v_d 比垂直方向 v_d 大，此差异来自不同的能带模型．我们采用的是单个非抛物能带模型，由于 C 轴方向有效质量比垂直方向的小，所以在单个能带模型中，C 轴方向 v_d 高于平行方向的 v_d．晶格温度为 673，1073 K 的漂移速度同样出现峰值．随着晶格温度升高，峰值变小．由于散射与温度有关，对给定的电场值，不同温度的漂移速度不同，在高场下，它们的差别减小，这是因为电子已经足够“热”[9]，高场时晶格温度的变化对漂移速度所造成的影响不再显著了．

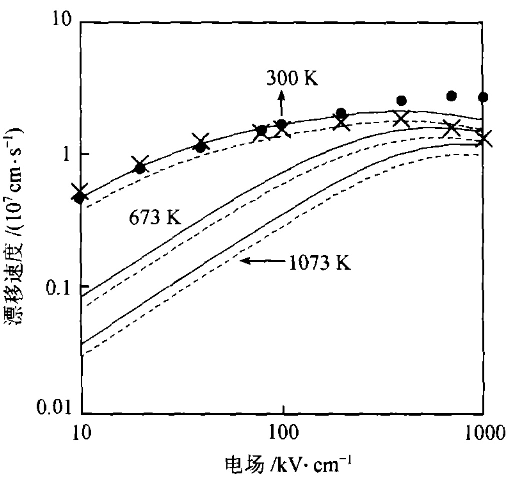

图 1　漂移速度(平行 C 轴方向)与电场的关系
－－－为各向同性的结果；－为各向异性的结果；●是 Joshi[9]的结果；×是 Nilsson[8]的结果

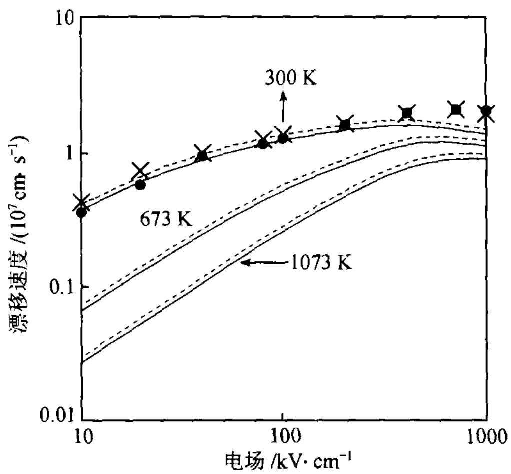

图 2　漂移速度(垂直 C 轴方向)与电场的关系
－－－为各向同性的结果；－为各向异性的结果；●是 Joshi[9]的结果；×是 Nilsson[8]的结果

不同晶格温度下不同方向的平均电子能量与电场的关系由图 3，4 给出．Nilsson 等[9]在室温的 MC 模拟结果也画在图上．在低场时，平均电子能量增加缓慢，当电场较高时，平均电子能量迅速增加．低场时的平均电子能量随晶格温度增加而增加，而在高场时，平均电子能量随晶格温度增加反而减小．各向异性效应对平均电子能量的影响很小，仅在高场时才出现小的偏离．电子温度与电场的关系也有类似结果．

当电场较低时，由于电场增加获得的电子能量主要通过电子-声子散射传给声子系统并转化为电子漂移能量，因此漂移速度明显增加而电子温度和平均电子能量增加很小．当电场足够高时，从电子系统到声子系统的传递速率达到饱和，漂移速度达到峰值，而平均电子能量增加．当电场大于 460 kV/cm 时，从电场获取的能量全部变成无规热运动能量，引起电子温度迅速增加，从而平均电子能量也迅速增加．此外，电子系统平均逆有效质量在非抛物能带近似中是电子能量的函数，随着电子能量的增加而减少．由于声子散射，漂移能量达到饱和，从而电场继续增加，漂移速度减少．当晶格温度增加时，从电子系统传递给声子系统的能量也增加，从而平均电子能量和漂移速度减少．

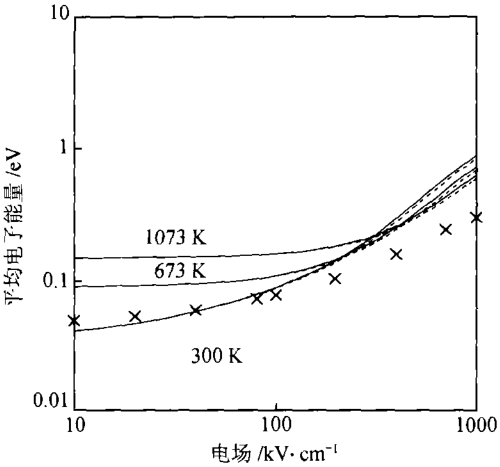

图 3 平均电子能量(平行 C 轴方向)与电场的关系
- - - 为各向同性的结果; - 为各向异性的结果; × 是 Nilsson[8]的结果

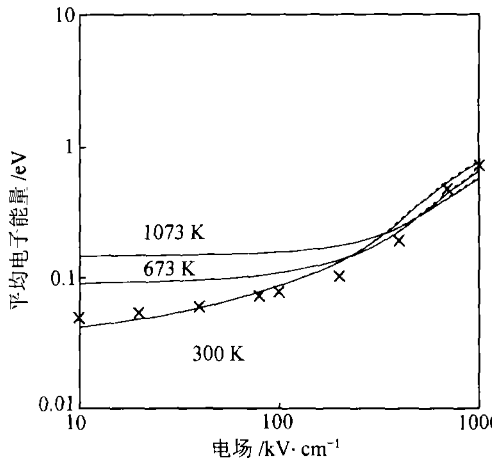

图 4 平均电子能量(垂直 C 轴方向)与电场的关系
- - - 为各向同性的结果; - 为各向异性的结果; × 是 Nilsson[8]的结果

因此漂移速度有明显的各向异性效应,电场依赖性和温度效应,而平均电子能量仅存在电场和温度效应,各向异性效应较弱.

2.2 流体动力学方程中散射率的简化计算

应用流体动力学近似模拟半导体器件,当考虑能带的非抛物性时,散射率的计算为四重积分,计算时间较长. 为此我们对散射率的计算公式进行简化.

在场强不很高时($\alpha\varepsilon \ll 1$),我们可以将 $\boldsymbol{A}_i$, $\boldsymbol{A}_p$ 和 W_p 简化为[12],

$$\boldsymbol{A}_i = \frac{4\pi N_i}{N}\sum_{\boldsymbol{q}} |u(\boldsymbol{q})|^2 \boldsymbol{q}\,\frac{T_e}{(2\pi)^2\beta^2 q}\ln\left(\frac{1+\exp\{[\mu-\varepsilon_1(\boldsymbol{p}_d,0)]/T_e\}}{1+\exp\{[\mu-\varepsilon_2(\boldsymbol{p}_d,0)]/T_e\}}\right), \tag{8}$$

$$\boldsymbol{A}_p = \frac{4\pi}{N}\sum_{\boldsymbol{q},\lambda} |M(\boldsymbol{q},\lambda)|^2\left[\boldsymbol{q} + \frac{2\alpha\Omega_{\boldsymbol{q},\lambda}(\boldsymbol{p}_d+\boldsymbol{q})}{\sqrt{1+2\alpha\beta\boldsymbol{p}_d^2}}\right]\frac{T_e}{(2\pi)^2\beta^2 q}\sqrt{1+2\alpha\beta p_d^2}$$
$$\times\ln\left(\frac{1+\exp\{[\mu-\varepsilon_1(\boldsymbol{p}_d,0)]/T_e\}}{1+\exp\{[\mu-\varepsilon_2(\boldsymbol{p}_d,0)]/T_e\}}\right)\left[n\left(\frac{\Omega_{\boldsymbol{q},\lambda}}{T}\right)-n\left(\frac{\Omega_{\boldsymbol{q},\lambda}+\beta\boldsymbol{p}_d\cdot\boldsymbol{q}}{T_e\sqrt{1+2\alpha\beta p_d^2}}\right)\right], \tag{9}$$

$$W_p = \frac{4\pi}{N}\sum_{\boldsymbol{q},\lambda} |M(\boldsymbol{q},\lambda)|^2\Omega_{\boldsymbol{q},\lambda}\,\frac{T_e}{(2\pi)^2\beta^2 q}\ln\left(\frac{1+\exp\{[\mu-\varepsilon_1(\boldsymbol{p}_d,0)]/T_e\}}{1+\exp\{[\mu-\varepsilon_2(\boldsymbol{p}_d,0)]/T_e\}}\right)$$
$$\times\sqrt{1+2\alpha\beta\boldsymbol{p}_d^2}\left[n\left(\frac{\Omega_{\boldsymbol{q},\lambda}}{T}\right)-n\left(\frac{\Omega_{\boldsymbol{q},\lambda}+\beta\boldsymbol{p}_d\cdot\boldsymbol{q}}{T_e\sqrt{1+2\alpha\beta p_d^2}}\right)\right], \tag{10}$$

此处 $\beta = 1/m^*$, m^* 为有效质量,

$$\varepsilon_1(\boldsymbol{p}_d,\omega) = \frac{-1+\sqrt{1+2\alpha\beta\left[\dfrac{\omega_0(\boldsymbol{p}_d,\omega)-\boldsymbol{q}^2}{\boldsymbol{q}}\right]^2}}{2\alpha}, \tag{11}$$

$$\varepsilon_2(\boldsymbol{p}_d,\omega)=\frac{-1+\sqrt{1+2\alpha\beta\left[\dfrac{\omega_0(\boldsymbol{p}_d,\omega)}{q}\right]^2}}{2\alpha},\tag{12}$$

$$\omega_0(p_d,\omega)=\frac{\beta q+2\beta\boldsymbol{p}_d\cdot\boldsymbol{q}+2\omega\sqrt{1+2\alpha\beta p_d^2}}{2\alpha\beta}.\tag{13}$$

我们取电子密度 $N=1.5\times10^{18}\mathrm{cm}^{-3}$，其他 3C-SiC 的材料参数为公共接受的值，如有效电子质量为 $0.346m_0$，能隙 2.3 eV[11]．在线性极限时，$\boldsymbol{p}_d\to0$，$T_e=T+0(\boldsymbol{p}_d^2)$，低场载流子迁移率可写为

$$\mu_e=\frac{ev_dK}{A},\ (A=A_i\text{ 或 }A_p).\tag{14}$$

图 5 分别给出了 3C-SiC 中杂质、声学声子、极化光学声子及谷间声子散射引起的 μ_{im}，μ_{ac}，μ_{op}，μ_{ij}和晶格温度的关系．当温度不太高时，由简化公式得到的结果与由四重积分得到的结果符合很好．随着温度的增加，两者之间出现偏差，然而即使在 3000K 时，μ_{im}，μ_{ac}，μ_{op}，μ_{ij}的差异也分别只在 25%，10%，11%，14%．由于高场时的 μ_{im}，远大于 μ_{ac}，μ_{op}，μ_{ij}，而总的载流子迁移率倒数等于各迁移率倒数之和，所以较大的 μ_{im}误差不会给输运性质带来大的影响．

3C-SiC 的非线性输运性质可以由方程(1)，(2)得到．图 6 给出了漂移速度和电子温度与电场的关系．在低场时，由简化公式得到的漂移速度和电子温度与由四重积分得到的结果相同．而当场强高于 100 kV/cm 时，结果开始出现偏离．然而即使当场强高达 200 kV/cm 时，漂移速度的偏差为 5%，电子温度的偏差为 14%．当电场进一步增加时，简化方法与四重积分的结果偏离加大，这是因为简化条件 $\alpha\varepsilon\ll1$ 不再成立．采用简化方法和四重积分得到的漂移速

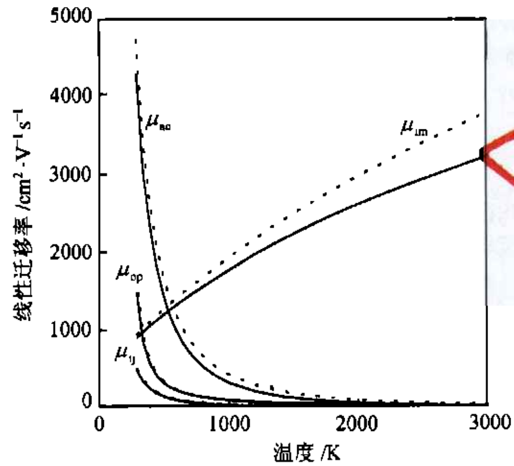

图 5　迁移率与晶格温度的函数关系
— 是四重积分的结果，－－－是用简化的二重积分散射率计算的结果

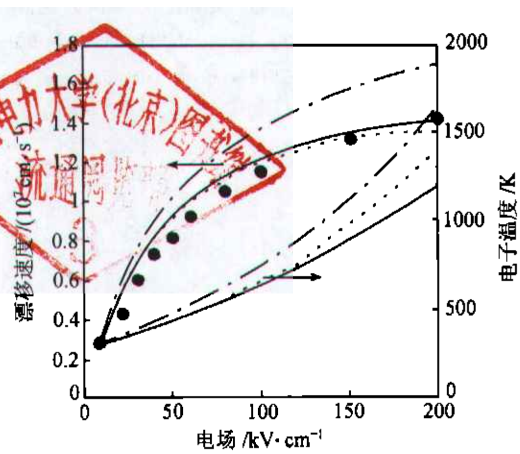

图 6　电子漂移速度和电场的函数关系
— 是四重积分的结果，－－－是简化的二重积分的结果；－·－是抛物能带近似的结果；●是 Monte Carlo 模拟[11]的结果

度与MC方法的结果符合较好．由图6还可见，抛物能带近似的结果远大于非抛物能带近似的结果．虽然3C-SiC的能隙高达2.3 eV，能带的非抛物效应对它的非线性输运有很大的影响．

3 结束语

我们用Lei-Ting流体动力学平衡方程对4H-SiC的输运性质进行了研究，并考虑了能带的非抛物效应和各向异性效应．同时对流体动力学方程中的散射率计算进行了简化，并用此简化公式研究了3C-SiC的线性和非线性输运，计算时间大大缩短．在场强不超过200 kV/cm时，造成的误差仍在允许范围内．使得可能用非抛物流体动力学方程模拟诸如碳化硅MESFET，MOSFET和闸流管的半导体器件．

参考文献

1 Lei X L, et al. Theory of negative differential conductivity in a superlattice miniband. Phys Rev Lett, 1991, 66: 3277

2 Lee C C, et al. Transient device modeling using the Lei-Ting hydrodynamic balance equations. J Appl Phys, 1996, 80: 1891

3 Lei X L. Balance equation for hot electron transport in an arbitrary energy band. Phys Stat Sol(b), 1992, 170: 519

4 Nag B R. Electron Transport in Compound Semiconductors edited by M. Cardona, et al, New York: Springer-Verlag, 1980. 120

5 Quan H J, et al. Effects of anisotropy on the electron transport of 4H-SiC. Phys Stat Sol (b), 2000, 219: 339

6 Son N T, et al. Electron effective masses in 4H-SiC. Appl Phys Lett, 1995, 66: 1074

7 Suzuki A, et al. Analysis of temperature dependence of Hall mobility of nondoped and nitrogen-doped β-sic crystals grown by chemical vapor deposition. J Appl Phys, 1988, 64: 2818

8 Nilsson H E, et al. Monte Carlo simulation of electron transport in 4H-SiC using a two-band with multiple minima. J Appl Phys, 1996, 80: 3365

9 Joshi R P. Monte Carlo calculations of the temperature-and field-dependent electron transport parameters for 4H-SiC. J Appl Phys, 1995, 78: 5518

10 Muench W V, et al. Saturates electron drift velocity in 6H silicon carbide. J Appl Phys, 1977, 48: 4823

11 Zhou J R, et al. Modeling of β-sic MESFETs using hydrodynamic equations. Solid State Electronics, 1993, 36: 1289

12 Weng X M, et al. Simplified scattering rate calculation in nonparabolic hydrodynamic equation. J Appl Phys, 1999, 85: 2658