

SiGeC/Si 功率二极管的数值模拟与分析*

高 勇¹ 刘 静^{1,†} 马 丽² 余明斌²

(1 西安理工大学电子工程系, 西安 710048)

(2 西安理工大学应用物理系, 西安 710048)

摘要: 将 SiGeC 技术应用于功率半导体器件的特性改进, 提出了一种新型 p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 异质结功率二极管结构. 在分析 SiGeC 合金材料物理特性的基础上, 给出了该结构的关键物理参数模型, 并在此基础上利用 MEDICI 模拟, 对比分析了 C 的引入对器件各种电特性的影响. 此外, 还模拟比较了不同 p^+ 区厚度对器件反向漏电流的影响. 结果表明: 在 SiGe/Si 功率二极管中加入少量的 C, 在基本不影响器件正向 $I-V$ 特性和反向恢复特性的前提下, 大大减少了器件的反向漏电流, 并且 C 的加入还减小了器件特性对材料临界厚度的依赖性, 提高了器件稳定性.

关键词: SiGeC/Si 异质结; 功率二极管; 反向恢复; 漏电流

EEACC: 2520M; 2560P; 2560H

中图分类号: TN313+.4

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)06-1068-05

1 引言

近年来, SiGe 合金因其载流子迁移率高、能带可调等优点受到人们的广泛关注. 迄今对 SiGe 合金的研究已得到很多有意义的结果^[1,2], 并在很多方面得到了应用. 尤其是 SiGe 异质结双极晶体管 (HBT) 的研制成功, 使得与硅工艺兼容的高速集成电路成为现实. 但是, 在 SiGe 应变合金层中, 由于 Ge 的晶格常数比 Si 大 4.2%, 以赝晶方式生长的 SiGe 外延层中存在很大应变能, 当外延层厚度超过平衡临界厚度时出现亚稳态结构, 材料特性在高温下退化. 这些都严重限制了 SiGe 合金在微电子学领域的应用. 在此情形下, 人们提出在 SiGe 材料中加入少量的 C, 控制 C 的含量使其完全处于替代位置, 用以缓解和补偿 SiGe 薄膜中的压应变. 目前, 国际上已有很多关于 SiGeC 合金材料制作 MOS 器件和光电器件的相关报道, 认为 C 的引入大大提高了 SiGe 合金材料的热稳定性^[3]. 但是, 有关将 SiGeC 合金材料应用于功率器件的研究还鲜有报道.

本文提出了一种新型 SiGeC/Si 异质结功率二极管结构, 在分析 SiGeC 合金材料物理特性的基础上, 给出了该结构的关键物理参数模型, 并在此基础上利用 MEDICI 模拟, 对比分析了 SiGeC/Si 异质结功率二极管中 C 的引入对器件各种电特性的影响. 此外, 还模拟比较了不同 p^+ 区厚度对器件反向漏电流的影响. 模拟结果表明: 在 SiGeC/Si 异质结

功率二极管中引入 C, 在基本不影响器件正向 $I-V$ 特性和反向恢复特性的前提下, 大大减少了器件的反向漏电流, 并且 C 的加入还减小了器件特性对材料临界厚度的依赖性, 大大提高了器件设计的自由度. 当控制 C 的含量小于 1% 时, 该二极管不仅具有 V_f - I_r - Q_s 良好的折中能力, 而且 C 的加入还提高了器件稳定性.

2 器件结构及原理

p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管采用类似 p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 二极管结构, 所不同的是其 p^+ 层中由于 C 对 Ge 的应变补偿作用, 提高了 p^+ 层设计厚度的自由度, 可以在几十到几百纳米之间变化. 但是, 由于 p^+ 层厚度与器件的反向恢复特性有关, p^+ 层越厚反向恢复特性越差, 所以, 在保证器件 p^+ - n^- 结不发生穿通的前提下 p^+ 层厚度越小越好. n^- 区的厚度可以根据反向耐压进行选择, 同时该区厚度将影响器件通态压降, 厚度越大, 通态压降也越大. 因此, 在满足器件反向耐压条件下, n^- 厚度不宜过大. p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ , p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 以及 Si p-i-n 二极管的结构分别如图 1(a), (b), (c) 所示.

在 p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管中, 从理论上讲调整 Ge/C 比值满足一定的关系可以完全补偿 SiGeC 合金中的压应变. 事实上, 只有处于替代位置的 C 才对应变的缓解起作用, 而 C 原子的状态和含量不仅受控于材料的生长工艺, 而且还与外延层中 Ge 的

* 国家自然科学基金(批准号: 50477012), 陕西省教育厅专项科研项目(批准号: 05JK268)资助项目

† 通信作者. Email: liujing935@163.com

2005-09-06 收到, 2005-10-17 定稿

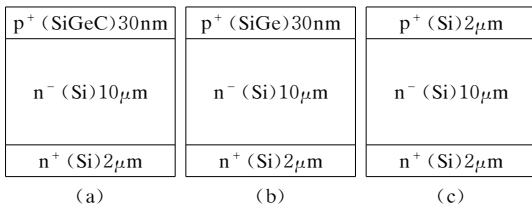


图 1 (a) p⁺ (SiGeC)-n⁻-n⁺ 二极管; (b) p⁺ (SiGe)-n⁻-n⁺ 二极管; (c) Si p-i-n 二极管
Fig.1 (a) Structure of SiGeC diodes; (b) Structure of SiGe diodes; (c) Structure of Si diodes

含量有关. 大量的实验结果表明^[4]: 当 Ge 含量小于等于 31% 时, 控制 C 的含量小于 1%, 合金中不会有导致外延层质量下降的非替位式 C 原子的产生. 此外, 文献^[5]也说明了当 C 含量小于 1.08% 时, 几乎所有的 C 原子都处于替位式, 不会有导致外延层质量下降的非替位式 C 原子的存在. 但是, 当 C 的含量超过 1% 时, 在与 Si 工艺兼容的各种工艺条件下很难使 C 原子完全处于替位式. 也就是说, 当 C 含量大于 1% 时, 合金中大量的失配位错、缺陷以及 Si-C 间隙复合体的存在, 导致 SiGeC 外延层的质量急剧下降. 因此, 在本文提出的 p⁺ (SiGeC)-n⁻-n⁺ 二极管结构中, 严格控制 C 的含量小于 1%. 在此条件下, 大量的文献数据^[6]表明: 在 SiGeC 合金中小于 1% 的 C 对其能带结构中 $\Delta E_v, \Delta E_c$ 的影响都在 meV 数量级, 因此可以认为 p⁺ (SiGeC)-n⁻-n⁺ 二极管与 p⁺ (SiGe)-n⁻-n⁺ 二极管有相似的电流输运机构. 在 p⁺ (SiGe)-n⁻-n⁺ 二极管中, 我们曾报道过^[7]其电流是由电子通过生长在 n⁻ 区上的 p⁺ 区形成的扩散电流决定的, 而且认为通过势垒的电流主要是电子电流, 空穴电流可以忽略. 这样可以用下式来表示 p⁺ (SiGeC)-n⁻-n⁺ 二极管中的电流.

$$J_f \approx J_n = \frac{qD_n n_{i(SiGeC)}^2}{W_p N_A} \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (1)$$

由上式可知, p⁺ (SiGeC)-n⁻-n⁺ 二极管与 p⁺ (SiGe)-n⁻-n⁺ 二极管有相似的电流输运机构. 由此可见, p⁺ (SiGeC)-n⁻-n⁺ 二极管从器件机理上讲也具备 p⁺ (SiGe)-n⁻-n⁺ 二极管的优点, 很容易实现 V_f - I_f - Q_s 三者的良好折中.

3 模型选取

为适应 SiGeC/Si 异质结器件模拟的需要, 我们以 Avanti 公司的二维器件模拟软件 MEDICI 为基础, 综合已发表的文献数据, 给出了适用于 SiGeC/Si 功率二极管结构的关键物理参数模型.

3.1 能带模型

在 SiGeC 三元合金中, 针对 C 对其能带结构的

影响, 人们已作了大量的理论计算与实验验证. 其中 Galdin 等人的理论^[6]与实验有较好的吻合. 他们以异质结理论为基础, 综合 SiGeC 合金材料的物理特性, 认为 SiGeC/Si 异质结能带的偏移 ΔE 主要受三方面的影响: 流体静应力 (hydrostatic strain)、单轴应力 (uniaxial strain) 以及材料内部 Ge, C 的化学性质. 当 Ge, C 含量分别限制在 50% 和 3% 之内时, SiGeC/Si 异质结能带偏移 ΔE 可表示为:

$$\Delta E = \Delta E_a + \Delta E_h + \Delta E_s \quad (2)$$

其中 $\Delta E_h, \Delta E_s, \Delta E_a$ 分别代表流体静应力、单轴应力和材料内部 Ge, C 的化学性质对合金能带偏移的影响.

3.2 迁移率模型

载流子迁移率是决定半导体器件工作特性的一个非常重要的基本特性参数, 可以将其表示为电荷量 q 和有效质量 m 的函数, 即

$$\mu = q\tau/m \quad (3)$$

其中 τ 是平均自由时间. 因此, 当载流子有效质量保持不变时, 载流子的散射机构就是决定载流子迁移率大小的决定因素. 在几种散射机构同时起作用时, 载流子迁移率主要由散射作用较强的一种或几种散射机构决定, 其值与每一种散射机构单独作用时决定的迁移率 $\mu_L, \mu_I, \mu_C \dots$ 之间具有如下关系:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_L} + \frac{1}{\mu_I} + \frac{1}{\mu_C} + \dots \quad (4)$$

其中 μ_L, μ_I, μ_C 分别表示晶格振动散射、电离杂质散射和载流子-载流子散射单独起作用时决定的载流子迁移率. 在此理论基础上, 根据 Osten 给出的实验数据^[8], 拟合出 300K 时 SiGeC 材料中载流子迁移率相应于 Ge, C 含量的变化关系:

$$\mu_p = \frac{\mu_{pmax} - \mu_{pmin}}{1 + (N_{total}/N'_0)^\beta} + \mu_{pmin} \quad (5)$$

式中 $\mu_{pmin} = 49.7 \times (1 + 30x^2 - 17y - 900y^2) \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$; $\mu_{pmax} = 480 \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$; $N'_0 = 1.61 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; $\beta = 0.7$.

$$\mu_n = \frac{\mu_{nmax} - \mu_{nmin}}{1 + (N_{total}/N'_0)^\alpha} (1 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3) + \mu_{nmin} \quad (6)$$

其中 $\mu_{nmin} = 175 \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$; $\mu_{nmax} = 1350 \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$; $a_1 = -3.02$; $a_2 = -7.08$; $a_3 = 53.08$; $N'_0 = 1.1 \times (1 + 14.15x) \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; $\alpha = 0.625$.

在本文设计的 p⁺ (SiGeC)-n⁻-n⁺ 二极管结构中, p⁺ (SiGeC) 层为高掺杂区 (掺杂浓度为 10^{19} cm^{-3}). 因此, 300K 时, 在高掺杂的 p⁺ (SiGeC) 区中, 决定载流子迁移率大小的多种散射机构中占主导地位的主要是电离杂质散射, 半导体晶格中的杂质, 无论是施主还是受主, 当其电离之后, 皆以其静

电作用力对运动于附近的电子和空穴产生散射作用. 空穴相对于电子运动速度较低, 不能迅速掠过, 一个电离杂质的附加势场, 受散射作用时间长, 其受散射效果比运动速度相对较高的电子明显. 因此, SiGe 合金中 C 的加入, 空穴受其影响远比电子复杂得多, 这一结论与文献[8]中的分析是一致的. 另外, Osten 在文献[9]中也提到在 npn 异质结晶体管 (HBT) 中, 电子迁移率不会因为低 C 含量的引入而减小. 因此, 在本设计中我们忽略电子迁移率随 C 含量的变化是可行的.

同时, 在模拟中还考虑到了能带窄化、高场饱和等效效应, 但由于 SiGeC 材料这方面的数据还很缺乏, 在模拟中我们以 SiGe 材料的相关模型参数为基础.

4 模拟结果与分析

4.1 正向 $I-V$ 特性的模拟与分析

图 2 示出了相似结构下 Si p-i-n, p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 和 p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管的正向 $I-V$ 特性曲线.

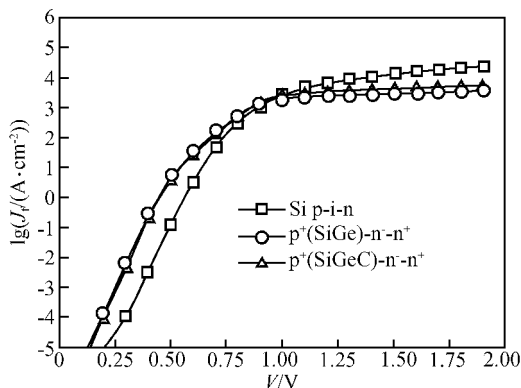


图 2 正向 $I-V$ 特性比较曲线

Fig.2 Comparison curves of forward $I-V$ characteristics

由图可知, 在电流密度小于 1000 A/cm^2 时, p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管的正向电流密度与 p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 二极管相比差别不大. 但是, 在大电流密度条件下 (大于 1000 A/cm^2 时), p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管的正向电流密度相对于 p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 二极管有所增加, 这正是 SiGeC 合金中掺 C 优越性的体现. SiGe 材料因其固有的材料缺陷, 成为大电流情况下限制 p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 二极管正向电流的主要因素; 而在 p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 功率二极管中 C 的引入减小了异质界面处的晶格失配, 增加了材料的热稳定性, 使其在大电流情况

下的正向 $I-V$ 特性优于 SiGe 材料的同类型结构.

4.2 反向 $I-V$ 特性的模拟与分析

图 3 为 Si p-i-n, p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 和 p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管的反向 $I-V$ 特性模拟比较曲线. 由图可知, p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管中 C 的引入在保证原有反向击穿电压的前提下, 大大减小了 p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 二极管的反向漏电流.

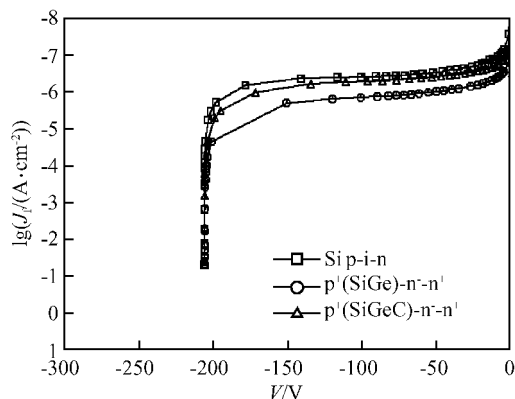


图 3 反向 $I-V$ 特性比较曲线

Fig.3 Comparison curves of reverse $I-V$ characteristics

Ross 等人在 1992 年就曾报道过 SiGe/Si p-n 异质结二极管 $I-V$ 特性的退化原因^[10]. 他们在 SiGe/Si p-n 异质结二极管中观察到较大的反向漏电流, 并将此归结为异质界面处的失配位错, 并且认为降低界面失配位错是 SiGe/Si 异质结二极管获得稳定 $I-V$ 特性的基础. 图 3 所示模拟结果与这一结论是一致的; 在 SiGe 合金中掺入 C 元素, 并且严格控制 C 的含量使其完全处于替代位置, 利用 C 对 SiGe 合金的应变补偿作用减小界面失配位错, 提高材料的热稳定性, 获得较优的反向 $I-V$ 特性. 同时, 这一模拟结果与理论的吻合, 又从侧面证实了我们所用模型的正确性、有效性.

4.3 反向恢复电流的模拟与分析

图 4 为 Si p-i-n, p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 和 p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管反向恢复电流的模拟比较曲线. 由图可知, p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管的反向恢复特性与 p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 二极管相比差别不大; 但与 Si p-i-n 二极管反向恢复特性相比, 其仍保留了 p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 二极管的优点, 具有快而软的反向恢复特性.

从导通机理上讲, Si p-i-n 二极管是通过电导调制效应来降低其通态压降的. 因此, 正向导通时其 i 区内必然积累大量存储电荷; 而 p^+ (SiGe)- n^- - n^+ 和 p^+ (SiGeC)- n^- - n^+ 二极管在异质结能带理论中,

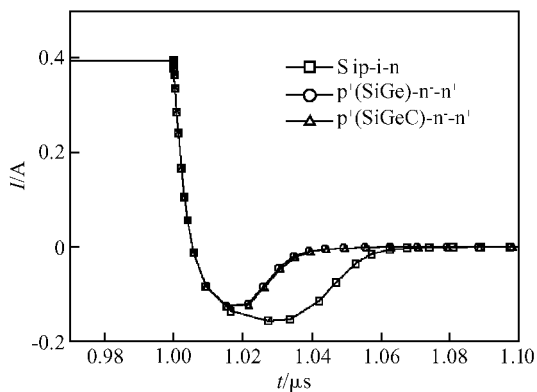


图 4 反向恢复电流模拟比较曲线

Fig.4 Comparison curves of reverse recovery current

由于 ΔE_V 和 ΔE_C 的存在,正向导通时其在 i 区存储的电荷远远小于 Si p-i-n 二极管在 i 区中存储的电荷,这必然使其反向恢复特性远远优于 Si p-i-n 二极管.

4.4 p+(SiGeC)区不同厚度的反向 I-V 特性模拟与分析

图 5 示出了不同 p+ 区厚度时, p+(SiGe)-n-n+ 和 p+(SiGeC)-n-n+ 二极管反向 I-V 特性模拟比较曲线.

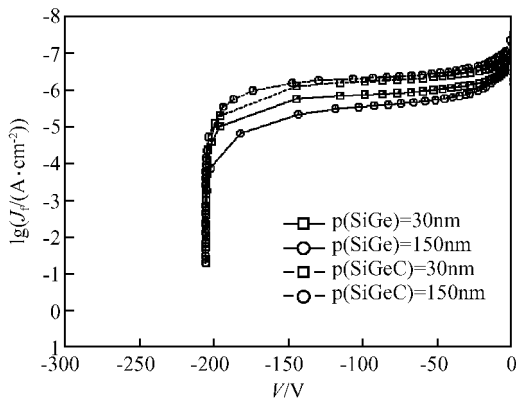


图 5 不同 p+ 区厚度时, p+(SiGe)-n-n+ 和 p+(SiGeC)-n-n+ 二极管反向 I-V 特性模拟比较曲线

Fig.5 Comparison curves of reverse I-V characteristics between p+(SiGe)-n-n+ and p+(SiGeC)-n-n+ diodes with different p+ region thickness

由图可知,在 p+ 区厚度由 30nm 增加到 150nm 时, p+(SiGe)-n-n+ 功率二极管的反向漏电流急剧恶化,而 p+(SiGeC)-n-n+ 二极管的漏电流却几乎没有变化.这验证了本文前面所给出的结论:在 p+(SiGeC)-n-n+ 二极管中,C 的加入提高了 p+ 层设计厚度的自由度,可以在几十到几百个纳米之间变化.事实上,SiGe 材料最根本的缺陷就是 Ge 的晶格常数比 Si 大 4.2%,以赝晶方式生长的 SiGe 外延层

中存在很大应变能,当外延层厚度超过平衡临界厚度时出现亚稳态结构,材料特性退化.在 SiGeC 合金中,由于 C 的应变补偿作用,大大减少了器件特性对材料临界厚度的依赖性.同时,图 5 所示模拟结果与这一理论的吻合,也说明了我们所模型的可靠性、正确性.

5 结论

本文将 SiGeC 技术应用于功率半导体器件的特性改进,提出了一种新型 p+(SiGeC)-n-n+ 异质结功率二极管结构.在分析材料物理特性与器件机理的基础上,给出了该结构的关键物理参数模型,并在此基础上利用 MEDICI 模拟,对比分析了 SiGeC/Si 异质结功率二极管中 C 的引入对器件各种电特性的影响.此外,还模拟比较了不同 p+ 区厚度对器件反向漏电流的影响.结果表明:在 SiGeC/Si 异质结功率二极管中 C 的引入,在基本不影响器件正向 I-V 特性和反向恢复特性的前提下,大大减少了器件的反向漏电流,并且 C 的加入还减小了器件特性对材料临界厚度的依赖性,大大提高了器件设计的自由度.因此,该二极管不仅具有 p+(SiGe)-n-n+ 二极管的优点 (V_f - I_r - Q_s 三者良好的折中能力),而且由于 C 的加入提高了器件的稳定性.

参考文献

- [1] Rich J S, Jagannathan B, Chen H, et al. SiGe HBTs with cut-off frequency of 350GHz. Electron Devices Meeting, Technical Digest, San Francisco, America, 2002: 771
- [2] Ma Li, Gao Yong. Analysis and optimal design of a novel SiGe/Si power diode for fast and soft recovery. Chin Phys Lett, 2004, 21(2): 414
- [3] Hsieh W T, Fang Y K, Ting S F, et al. Improving high temperature characteristic of SiGeC/Si heterojunction diode with propane carbon source. Solid-State Electron, 2002, 46: 1949
- [4] Kanzawa Y, Nozawa K, Saitoh T, et al. Dependence of substitutional C incorporation on Ge content for Si_{1-x}Ge_xC_y crystals grown by ultrahigh vacuum chemical vapor deposition. Appl Phys Lett, 2000, 77(24): 3962
- [5] Loup V, Hartmann J M, Rollend G, et al. Growth temperature dependence of substitutional carbon incorporation in SiGeC/Si heterostructures. J Vac Sci Technol B, 2003, 21(1): 246
- [6] Galdin S, Dollfus P, Aubry-Fortuna V, et al. Band offset predictions for strained group IV alloys: Si_{1-x}Ge_xC_y on Si(001) and Si_{1-x}Ge_x on Si_{1-z}Ge_z(001). Semicond Sci Technol, 2000, 15: 565
- [7] Gao Yong, Chen Botao, Yang Yuan. Analysis and optimal design of novel SiGe/Si heterojunction switching power diodes. Chinese Journal of Semiconductors, 2002, 23(7): 735 (in Chinese) [高勇, 陈波涛, 杨媛. 新型 SiGe/Si 异质结开关功率二极管的特性分析与优化设计. 半导体学报, 2002, 23(7):

- 735]
- [8] Osten H J, Gaworzewski P. Charge transport in strained $\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$ and $\text{Si}_{1-x-y}\text{Ge}_x\text{C}_y$ alloys on Si(001). *J Appl Phys*, 1997, 82(10):4977
- [9] Osten H J, Knoll D, Heinemann B, et al. Carbon doped SiGe heterojunction bipolar transistors for high frequency application. *IEEE Bipolar/BiCMOS Circuits and Technology Meeting(BCTM)*, Minneapolis, USA, 1999, 109
- [10] Ross F M, Hull R, Bahnck D, et al. In situ transmission electron microscopy measurements of the electrical and structural properties of strained layer SiGe/Si p-n junctions. *J Vac Sci Technol B*, 1992, 10(1):2008

Numerical Simulation and Analysis of SiGeC/Si Heterojunction Power Diodes*

Gao Yong¹, Liu Jing^{1,†}, Ma Li², and Yu Mingbin²

(1 Department of Electronic Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

(2 Department of Applied Physics, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

Abstract: A novel SiGeC/Si heterojunction structure for p-i-n power diodes is presented. Based on analysis of the physical characteristics of SiGeC alloys, models of the physical parameters are given, and the effects on the device characteristics of the incorporation of carbon are simulated and analyzed with MEDICI. The reverse leakage current is also compared for devices with different p+ region thicknesses. The simulation results indicate that the reverse leakage current and the dependence of the device characteristics on a critical thickness are reduced greatly, and the stability is improved by the incorporation of carbon atoms into SiGe/Si diodes, when the forward $I-V$ and reverse recovery characteristics remain constant.

Key words: SiGeC/Si heterojunction; power diodes; reverse recovery; leakage current

EEACC: 2520M; 2560P; 2560H

Article ID: 0253-4177(2006)06-1068-05

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(No.50477012) and the Special Scientific Research Program of the Education Bureau of Shanxi Province(No.05JK268)

† Corresponding author. Email: liujing935@163.com

Received 6 September 2005, revised manuscript received 17 October 2005

©2006 Chinese Institute of Electronics