

考虑量子效应的短沟道 MOSFET 二维阈值电压模型^{*}

李艳萍 徐静平[†] 陈卫兵 许胜国 季 峰

(华中科技大学 电子科学与技术系, 武汉 430074)

(2005 年 12 月 5 日收到, 2005 年 12 月 31 日收到修改稿)

通过数值方法求解泊松方程和薛定谔方程的自洽解, 提出了考虑量子效应时不同于经典理论的阈值条件, 并得出了精确的一维阈值电压模型. 模拟结果与实验十分符合. 在此基础上, 基于准二维泊松方程, 通过考虑短沟道效应和量子效应, 建立了较为精确的适合于小尺寸 MOSFET 的量子修正阈值电压模型, 模型同样适用于(超)深亚微米高 k 栅介质 MOSFET 电特性的模拟和结构参数的设计.

关键词: 阈值电压, 量子效应, 短沟道效应, 高 k 栅介质

PACC: 7340Q, 7755, 7960E

1. 引 言

随着微电子技术的不断发展, CMOS 集成电路的器件尺寸已经进入超深亚微米水平^[1], 按照等比缩小原理, 要求衬底浓度不断提高, 栅氧化层厚度不断减小. 在这两者的共同影响下, Si/SiO₂ 界面出现高的垂直电场, 从而造成 MOSFET 反型沟道载流子的量子化效应越来越严重, 给器件设计和电特性模拟带来显著的影响. 这种影响随着氧化层厚度的减小而不断增大, 使得在电路模拟中使用经典模型来模拟器件电特性出现偏差, 如当沟道掺杂达到 $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时, 模拟的阈值电压偏差达 0.1 V.

自 Stern 等人提出使用自洽解的方法分析量子效应以来^[2,3], 已经有许多相关的研究报告. Van Dort 等人在分析能带变化的基础上提出了一个与实验结果较符合的半经验模型^[4], 对一维阈值电压模型进行了修正. 代月花等采用改进后的三角阱近似对强反型表面势进行了修正, 并给出了开启电压的量子力学修正模型^[5]. 所有这些方法主要集中于垂直 Si/SiO₂ 界面方向的量子力学效应, 所建立的一维模型并不适用于短沟道 MOSFET.

本文利用自洽解数值结果及实验数据提出了较为精确的量子修正一维阈值电压模型, 由此推广至二维情况, 通过同时考虑短沟道效应和量子化效应,

建立了适用于短沟道 MOSFET 的二维阈值电压模型, 对器件结构设计和电特性模拟具有较大指导意义.

2. 薛定谔方程和泊松方程的自洽解

由于反型层中的载流子被限制在硅衬底表面很窄的势阱中, 载流子在垂直表面方向的运动受到限制, 因此反型载流子不能像体内的载流子那样在三维空间自由运动, 可以用二维电子气描述反型层中的电子状态. 二维电子气中电子在垂直方向的运动是量子化的, 电子的能量只能取一些分立的值 E_n , 但是电子在平行于表面的两个方向仍可以自由运动, 与每个分立的能量 E_n 相对应形成一个子带, 如图 1 所示. 为简化计算, 本文仅讨论均匀掺杂的情况, 即衬底和沟道具有同样的掺杂浓度.

为了分析沟道电子的量子化效应, 可联立解一维薛定谔方程和泊松方程

$$\frac{d^2 \psi_{ij}(z)}{dz^2} + \frac{2m_{zi}}{\hbar^2} [E_{ij} + q\phi(z)] \psi_{ij}(z) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{d^2 \phi(z)}{dz^2} = \frac{q}{\epsilon} [p(z) - n(z) + N_D(z) - N_A(z)]. \quad (2)$$

根据半导体基本理论, 载流子浓度分布可表示为

^{*} 国家自然科学基金(批准号 60376019)和湖北省自然科学基金(批准号 2003ABA087)资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: jpxu@mail.hust.edu.cn

$$n(z) = \frac{kT}{\pi \hbar^2} \sum_i g_i m_{di} \times \sum_j \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_{ij}}{kT} \right) \right] |\psi_{ij}(z)|^2, \quad (3)$$

其中 $\psi_{ij}(z)$ 是第 i 能谷第 j 子带的电子波函数, m_{zi} 是垂直于 Si/SiO₂ 界面方向的有效质量, E_{ij} 是第 i 能谷第 j 子带的本征能级, $n(z)$ 和 $p(z)$ 分别是电子浓度和空穴浓度, $\phi(z)$ 是 Si 表面电势, m_{di} 是每个能谷的态密度有效质量, g_i 是每个能谷的简并度, $N_D(z)$ 和 $N_A(z)$ 分别是施主浓度和受主浓度。

通过对垂直于沟道的方向划分网格,采用自洽的方法可以求解方程(1)~(3),最终可得到反型电荷、耗尽电荷、栅电压与表面势的关系,求解方法如图 2 所示。采用此数值方法可得到较为精确的关于器件特性的数值解,但其运算过程复杂,耗时较长,不适宜用于实际的器件模拟。下面将借助于此数值

方法,讨论考虑量子化效应的 MOSFET 阈值电压模型。

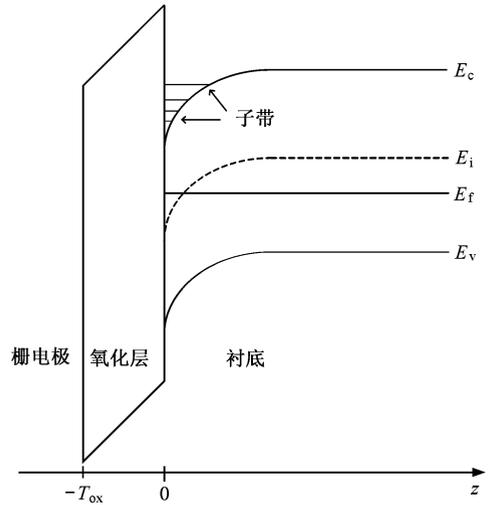


图 1 量子化能带图

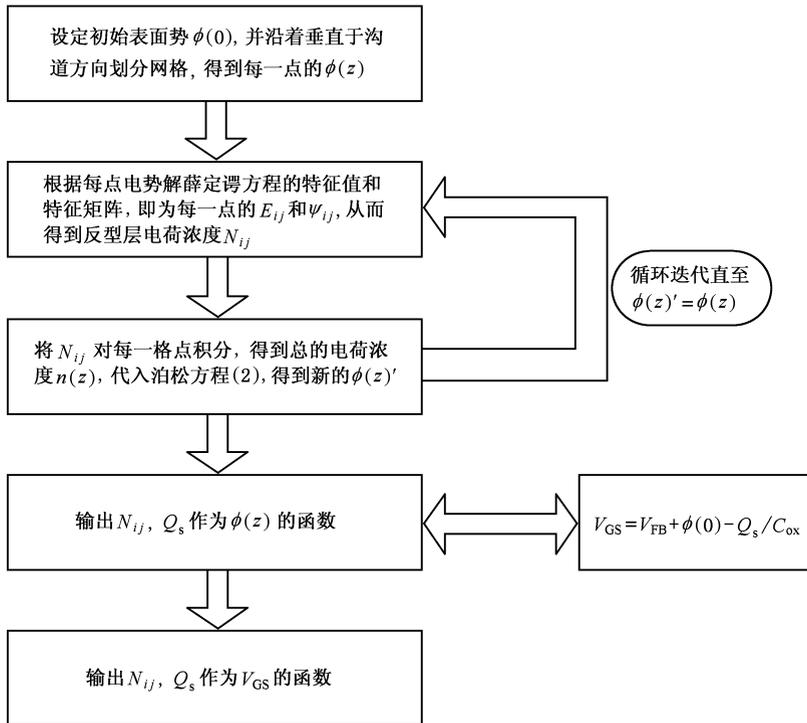


图 2 泊松方程与薛定谔方程自洽解流程图

3. 量子效应修正的长沟道 MOSFET 阈值电压模型

量子效应对阈值电压的影响主要体现在三个方面:

1) 经典的阈值电压条件不再适用于量子化情况。

2) 考虑量子效应后, Si/SiO₂ 界面处电子浓度为 0, 最大值出现在体内, 载流子与界面的平均距离 z 与经典情况相差 Δz , 如图 3 所示。电场在 Δz 上产生

额外压降,且有效氧化层厚度变为 $T_{ox} + \frac{\epsilon_{ox}}{\epsilon_{Si}} \Delta z$,当栅氧化层非常薄时, Δz 对氧化层电容 C_{ox} 的影响非常显著.

3) 量子效应导致能级的分裂(如图 1 所示),最低允带能级不再是导带底 E_c ,于是产生 ΔE 的能量差,这个能量差随沟道掺杂浓度的升高而增大,表面势随之增大.

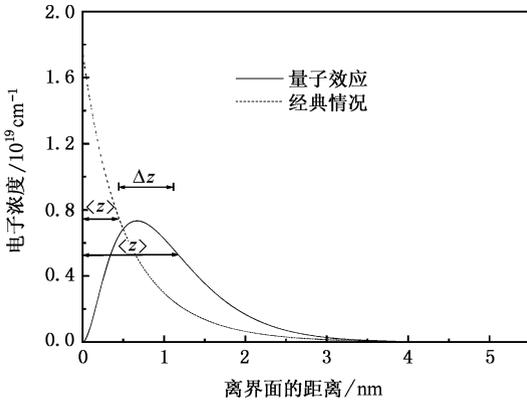


图 3 由数值方法得到的反型层电子沿垂直界面方向的分布 ($N_{sub} = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$)

表面势的增加 $\Delta\phi_s$ 导致经典阈值条件($\phi_s = 2\phi_f$, ϕ_f 为费米势)不再适用于量子化情况,而被下面的阈值条件所取代^[6]:

$$\left. \frac{dQ_{inv}}{d\phi_s} \right|_{\phi_{sTH}} = \left. \frac{dQ_{dep}}{d\phi_s} \right|_{\phi_{sTH}}, \quad (4)$$

上式等效于

$$\left. \frac{dQ_{inv}}{dV_{GS}} \right|_{V_{TH}} = \left. \frac{dQ_{dep}}{dV_{GS}} \right|_{V_{TH}}, \quad (5)$$

式中 Q_{inv} 和 Q_{dep} 分别为反型层电荷和耗尽层电荷.

依据(4)式或(5)式,由自洽解方法可以得到考虑量子化效应时阈值条件下表面势随沟道掺杂浓度的变化,如图 4 所示.可见,与经典理论相比,量子理论的阈值表面势大于经典理论值,且随着沟道掺杂浓度的增加,表面势差值逐渐增大.对图中数值计算结果进行拟合,得到量子修正的阈值表面势

$$\phi_{sTH} = 2\phi_f + \eta V_t, \quad (6)$$

其中 $V_t = kT/q = 0.026\text{V}$, $\eta = 1.785 \times (N_{sub}/10^{17})^{0.3522}$, N_{sub} 为沟道掺杂浓度 (cm^{-3}).

如图 5 所示, Si 表面的总感生电荷 $Q_s (= Q_{inv} + Q_{dep})$ 与衬底掺杂的关系类似于表面势增量 $\Delta\phi_s$ 与衬底掺杂的关系.对于衬底高掺杂情况, Q_s 和

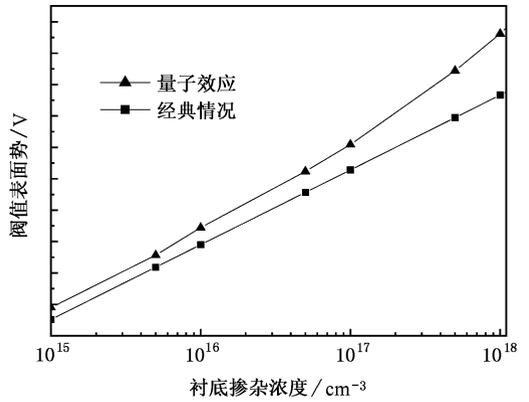


图 4 阈值条件下表面势随沟道掺杂浓度的变化

$\Delta\phi_s$ 呈线性关系,低掺杂时线性关系不成立.因此,考虑到模型的准确性和实用性,可以用下面的多项式来描述两者之间的关系:

$$\Delta\phi_s = a_2 Q_s^2 + a_1 Q_s + a_0, \quad (7)$$

其中 $a_2 = -293.93 \text{ m}^4/\text{F} \cdot \text{C}$, $a_1 = 15.393 \text{ m}^2/\text{F}$, $a_0 = 0.022247 \text{ V}$.

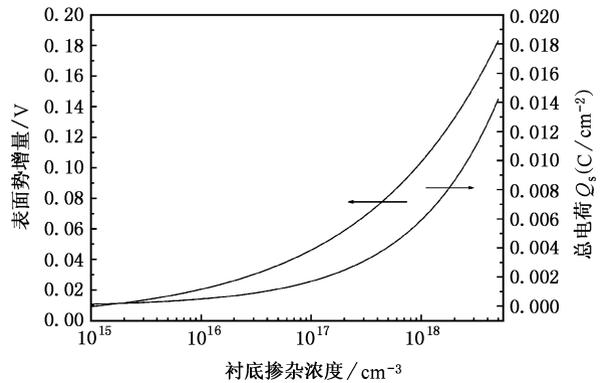


图 5 表面势增量和表面总电荷作为衬底掺杂浓度的函数

此外,从上面所述第二点影响,氧化层电容应该修正为

$$C_{ox} = \begin{cases} \frac{\epsilon_{ox}}{T_{ox} + (\epsilon_{ox}/\epsilon_{Si})\Delta z}, & (\Delta z \geq 0), \\ \frac{\epsilon_{ox}}{T_{ox}}, & (\Delta z < 0), \end{cases} \quad (8)$$

其中

$$\Delta z = \frac{2\Delta E}{3qE_{eff}} - \frac{kT}{qE_{eff}} = \frac{2}{3q} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \times \left(\frac{9}{8} \pi q \right)^{2/3} \left(\frac{Q_s}{\epsilon_0 \epsilon_{Si}} \right)^{-1/3} - \frac{kT}{q} \left(\frac{Q_s}{\epsilon_0 \epsilon_{Si}} \right)^{-1} \quad (9)$$

$$Q_s = \sqrt{2\epsilon_{Si} q N_{sub} \phi_{sTH}}. \quad (10)$$

根据长沟道 MOSFET 经典理论,栅压与表面势的关系可表示为

$$V_{GS} = V_{FB} + \phi_s - \frac{Q_{dep}}{C_{ox}} \quad (11)$$

将(6)和(10)式代入(11)式,并忽略 Q_{inv} (阈值条件下 $Q_{inv} \ll Q_{dep}$),即得到考虑量子效应的阈值电压表达式

$$V_{TH2} = V_{FB} + 2\phi_f + \eta V_t + \frac{\sqrt{2q\epsilon_0\epsilon_{Si}N_{sub}(2\phi_f + \eta V_t)}}{C_{ox}} \quad (12)$$

根据(12)式计算出阈值电压漂移(相对于长沟经典理论)与沟道掺杂浓度的关系如图6所示.为比较,图中也示出根据 V_{an} 模型的计算结果.可见,上述阈值电压模型与实验结果十分符合,在大于 10^{18} cm^{-3} 的高掺杂范围比 V_{an} 的模型更为精确,表明所建立的量子修正 MOSFET 阈值电压模型与实际情况相符,是合理的.从图中数据可以看到,当沟道掺杂浓度达到 $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时,阈值电压漂移大于 0.1 V .这一量子效应导致的误差在电路模拟中必须予以考虑.在下一节,此模型将被扩展到小尺寸 MOSFET,从而得到同时考虑短沟道效应和量子效应的阈值电压模型.

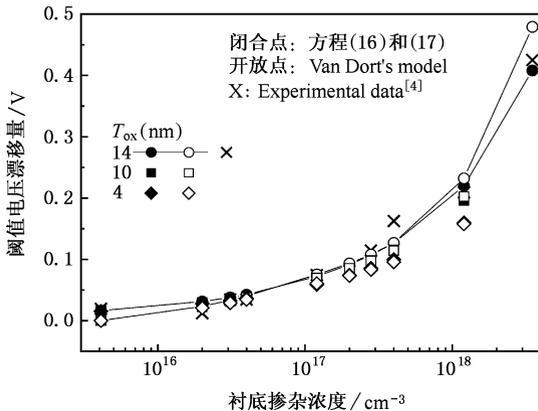


图6 量子效应修正的长沟道 MOSFET 阈值电压随沟道掺杂浓度的变化

4. 量子效应修正的小尺寸 MOSFET 阈值电压模型

2004年,英特尔公司宣布开始使用栅长 35 nm ,氧化层厚度 1.2 nm 的 CMOS 工艺.显然,对于这样短的沟道长度,经典理论已不再适用,必须同时考虑量子效应和短沟道效应对阈值电压的影响,建立相

应的模型.

考虑短沟道效应即需考虑沿沟道方向(y 向)横向电场的影响,这时需解二维泊松方程.若设垂直沟道方向的纵向电场(z 向)均匀分布,则得到同时考虑沟道中横向和纵向电场的准二维泊松方程^[7]

$$\epsilon_{Si} X_{dep} \frac{dE(y)}{dy} + \epsilon_{ox} \frac{V_{GS} - V_{FB} - \phi(y)}{T_{ox}} = qN_{sub} X_{dep} \quad (13)$$

式中, $E(y) = d\phi(y)/dy$, 为沟道 y 处的横向电场.上式是关于表面势的二阶偏微分方程.利用边界条件 $\phi(0) = V_{bi}$, $\phi(L) = V_{bi} + V_{ds}$ (L 为沟道长度, V_{ds} 为漏源电压, V_{bi} 为漏源内建电势),可求出解如下:

$$\phi(y) = \phi_0 + (\phi(0) - \phi_0) \frac{\sinh[(L-y)/l]}{\sinh(L/l)} + (\phi(L) - \phi_0) \frac{\sinh(y/l)}{\sinh(L/l)} \quad (14)$$

其中 ϕ_0 是长沟道表面电势, $\phi_0 = V_{GS} - V_{FB} - qN_{sub} X_{dep} T_{ox} / \epsilon_{ox}$, $l = \sqrt{\frac{\epsilon_{Si} T_{ox} X_{dep}}{\epsilon_{ox}}}$ 为特征长度, X_{dep} 为耗尽层宽度.在 $V_{ds} \ll V_{bi} - \phi_0$ 的条件下,由于漏源电压对整个沟道表面势影响甚微,表面势呈对称分布,最小值 ϕ_{min} 出现在沟道中间.由此将 $y = L/2$ 带入(14)式并加以量子修正,得到

$$\phi_{min} = \phi_0 + [2(V_{bi} - \phi_0) + V_{ds}] \frac{\sinh(L/2l)}{\sinh(L/l)} + a_2 Q_s^2 + a_1 Q_s + a_0 \quad (15)$$

式中 $Q_s = C_{ox}(V_{GS} - V_{FB} - \phi_{min})$.当 ϕ_{min} 达到阈值表面势 ϕ_{sTH} 时,器件即导通.于是联立(6)式和(15)式得到同时考虑量子效应和短沟道效应的小尺寸 MOSFET 阈值电压表达式

$$V_{THB} = V_{FB} + \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (16)$$

其中

$$\begin{aligned} a &= a_2 C_{ox}^2, \\ b &= 1 - \frac{2\sinh(L/2l)}{\sinh(L/l)} - 2a_2 C_{ox} 2\phi_{sTH} + a_1 C_{ox}, \\ c &= (2V_{bi} + V_{ds}) \frac{\sinh(L/2l)}{\sinh(L/l)} \\ &\quad - \left(1 - \frac{2\sinh(L/2l)}{\sinh(L/l)}\right) \frac{qN_A X_{dep}}{C_{ox}} + a_2 C_{ox} 2\phi_{sTH}^2 \\ &\quad - (a_1 C_{ox} + 1)\phi_{sTH} + a_0 \end{aligned} \quad (17)$$

对于高 k 栅介质 MOSFET,特征长度 l 应修正为

$$l = \left(\frac{\frac{5}{6} \epsilon_{ox} T_{ox} + A + \epsilon_{Si} X_{dep}}{C_{ox} + \frac{5}{6} C_{dep}} \right)^{1/2}, \quad (18)$$

其中 $C_{dep} = \epsilon_{Si}/X_{dep}$, $A = 2(T_{ox}/X_{dep}) + (4/3)(T_{ox}/X_{dep})^{81}$.

为了检验(16)式的正确性,表1列出了实验数据和理论数据的比较.可以看出,两者误差不超过1.9%.

表1 阈值电压模拟结果与实验数据的比较

L/nm	T_{ox}/nm	N_{sub}/cm^{-3}	实测 $V_{TH}/V^{[9]}$	模拟 V_{TH}/V
50	3	3×10^{18}	0.874	0.879
50	2	3×10^{18}	0.594	0.594
50	2	5×10^{18}	0.814	0.798

5. 阈值电压模型的比较

小尺寸 MOSFET 同时受到短沟道效应和量子效应的影响.为了研究这两种效应对阈值电压影响的程度,可对不同情况下的阈值电压进行比较,即未考虑量子效应的长沟道和短沟道阈值电压模型、考虑量子效应的长沟道和短沟道阈值电压模型,它们分别对应 $V_{TH0}, V_{TH1}, V_{TH2}, V_{TH3}$. V_{TH2}, V_{TH3} 表达式见(13)和(16)式,而 V_{TH0}, V_{TH1} 有其经典表达式

$$V_{TH0} = V_{FB} + qN_{sub}X_{dep}T_{ox}/\epsilon_{ox} + 2\phi_f, \quad (19)$$

$$V_{TH1} = V_{TH0} - \frac{[\chi V_{bi} - \phi_s] + V_{ds}}{2\cosh(L/2l) - 2}. \quad (20)$$

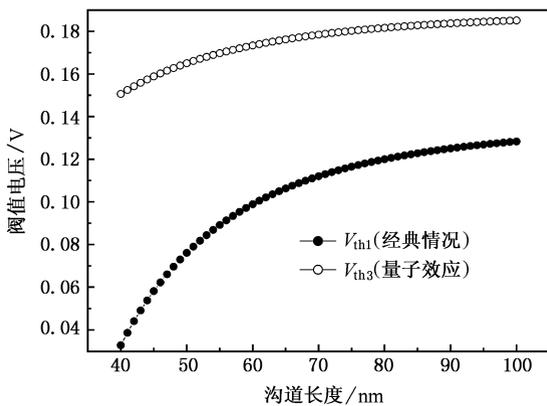


图7 短沟道 MOSFET 阈值电压与沟道长度的关系 ($N_{sub} = 9 \times 10^{17} cm^{-3}, T_{ox} = 1.5nm$)

量子效应对短沟道 MOSFET 阈值电压的影响如图7所示.可以看出,短沟道情况下,量子效应使阈值电压增大,两条曲线变化趋势基本相同,只是当 $L < 60 nm$ 时, V_{TH3} 随沟长减小较 V_{TH1} 为缓.这是由于

量子效应引起的阈值电压增加部分抵消了由沟长缩短所致阈值电压的减小.换句话说,实际的短沟道器件阈值电压随沟长的减小并不像经典短沟道阈值电压模型所预测的那样灵敏.

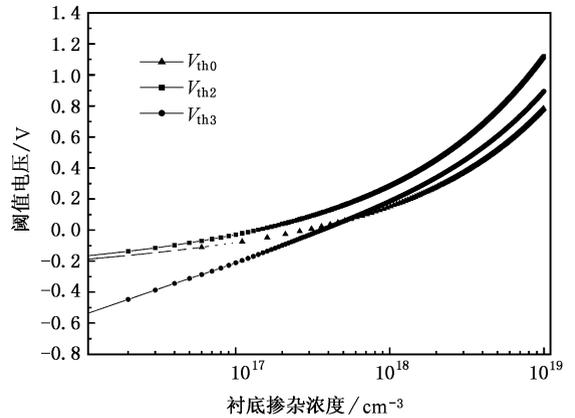


图8 阈值电压与沟道掺杂浓度的关系 ($L = 50nm, T_{ox} = 1.5nm$)

图8比较了 V_{TH2} 和 V_{TH3} 相对于 V_{TH0} 的变化,可以看出,与短沟道 MOSFET 类似,量子效应也使长沟道模型的阈值电压增大,且随沟道掺杂浓度增加,阈值电压增加越显著.对于短沟道模型,短沟道效应和量子效应分别在不同的掺杂浓度范围控制着阈值电压特性:在沟道掺杂浓度较低时,量子效应较弱,短沟道效应是主要影响机理,从而导致阈值电压急剧减小,且 L 越小,阈值电压下降越显著.两种效应的相互补偿导致一临界掺杂浓度 N_c ,使 $V_{TH0} = V_{TH3}$.以图8中 $L = 50nm, T_{ox} = 1.5nm$ 的 MOSFET 为例,当 $N_{sub} < 5.1 \times 10^{17} cm^{-3}$ 时,短沟道效应引起阈值电压的减小占主导地位;反之,量子效应引起阈值电压的增加是主要的机理.实际上,为了构造性能优良的小尺寸增强型 MOSFET,掺杂浓度不应低于 $3.6 \times 10^{17} cm^{-3}$ ($V_{TH3} = 0$ 处).总之,对于短沟道 MOSFET,在一定的栅氧化层厚度下,可以将掺杂浓度作为调整阈值电压的主要参数.

对于高 k 栅介质 MOSFET 器件,阈值电压与 k 值密切相关,如图9所示.显然,不同模型(是否考虑量子效应)之间,模拟结果差异较大.随 k 值增加,量子修正的 SCE 阈值电压模型给出比经典模型小得多的阈值电压漂移,即未考虑量子效应的经典短沟道模型过高地估计了 k 值的影响.因此,为了精确模拟小尺寸高 k 栅介质 MOSFET 的阈值电压,必须考虑量子效应的影响.

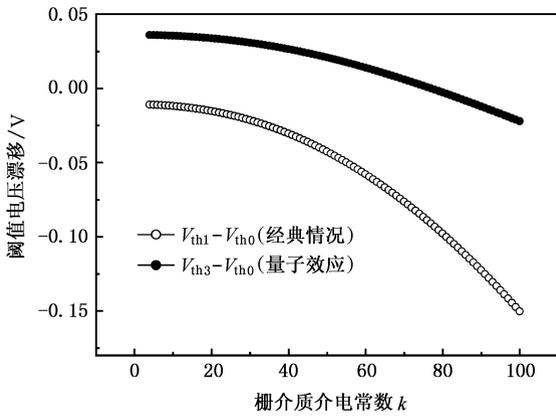


图9 短沟道 MOSFET 阈值电压随 k 值的漂移量 ($L = 50\text{nm}$, $T_{\text{ox}} = 1.5\text{nm}$, $N_{\text{sub}} = 5 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$)

从以上讨论可知,短沟道量子修正阈值电压模型 (V_{TH3})能够较好地描述 MOSFET 的阈值特性.因此 (16)式可以用来对器件有关参数进行合理的设计.例如,对于小尺寸 MOSFET 的低功耗要求,列于

表 1 中的阈值电压偏大 ($> 0.8\text{V}$),这主要由于沟道掺杂浓度偏高.这时,可采用(16)式来确定合适的 T_{ox} 和 N_{sub} .如若设计阈值电压为 0.3V ,则对于 $T_{\text{ox}} = 1\text{nm}$, $L = 50\text{nm}$ 的器件,掺杂浓度应降低到 $2.8 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$,而对于相同的 L ,但 $T_{\text{ox}} = 2\text{nm}$ 的结构参数,掺杂浓度应调整为 $1.2 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$.

6. 结 论

本文通过考虑沟道二维电场分布,同时借助自治数值解结果,建立了适用于小尺寸 MOSFET 的二维量子修正阈值电压模型.模拟结果与实验数据符合较好.将模型用于器件参数的设计,可以获得主要结构参数,如氧化层厚度、衬底掺杂浓度的合理确定.而且,模型也可用于小尺寸高 k 栅介质 MOSFET.因此,该模型对于深亚微米和超深亚微米 MOSFET 电特性的模拟和结构参数的设计具有较大应用潜力.

- [1] Gan X W, Huang R, Liu X Y et al 2004 *Nano CMOS Devices* (Beijing: Science Press) p20 (in Chinese)[甘学温、黄如、刘晓彦等 2004 纳米 CMOS 器件(北京:科学出版社)第 20 页]
- [2] Stern F 1972 *Phys. Rev. B* **5** 4891
- [3] Stern F, Howard W E 1967 *Phys. Rev.* **163** 916
- [4] van Dort M J, Woerlee P H, Walker A J 1992 *IEEE Trans. Electron Devices* **39** 932
- [5] Dai Y H, Chen J N, Ke D M, Sun J E 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 897 (in Chinese)[代月花、陈军宁、柯导明、孙家訃 2005 物理

学报 **54** 897]

- [6] Janik T, Majkusiak B 1994 *J. Appl. Phys.* **75** 5186
- [7] Arora N 1999 *MOSFET Models for VLSI Circuit Simulation Theory and Practice* (Beijing: Science Press) p320 (in Chinese)[N. 艾罗拉用于 VLSI 模拟的小尺寸 MOS 器件模型 1999(北京:科学出版社)第 320 页]
- [8] Liu X Y, Kang J F, Sun L et al 2002 *IEEE Electron Device Lett* **23** 270
- [9] Gross W 1999 Ph.D dissertation Arizona State University

2-D threshold voltage model for short-channel MOSFET with quantum-mechanical effects^{*}

Li Yan-Ping Xu Jing-Ping[†] Chen Wei-Bing Xu Sheng-Guo Ji Feng

(Department of Electronic Science & Technology , Huazhong University of Science and Technology , Wuhan 430074 , China)

(Received 5 December 2005 ; revised manuscript received 31 December 2005)

Abstract

A threshold condition different from the classical one is proposed for MOSFET with quantum effects , by means of self-consistent numerical solution of the Schrödinger 's and Poisson 's equations , and thus an accurate 1-D threshold-voltage model is obtained with good agreements between simulated results and measurement data. Based on this 1-D model , an accurate 2-D quantum-modified threshold-voltage model for small-scale MOSFET is developed by solving the quasi-2D Poisson 's equation and taking short-channel effects and quantum-mechanical effects into consideration. The model can also be used for simulation of electrical properties and design of structural parameters for deep-submicron MOSFETs with high- k materials as gate dielectric.

Keywords : threshold voltage , quantum effects , short-channel effects , high- k gate dielectric

PACC : 7340Q , 7755 , 7960E

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60376019) and the Natural Science Foundation of Hubei Province , China (Grant No. 2003ABA087).

[†] Corresponding author. E-mail : jpxu@mail.hust.edu.cn