

应变 Si 价带色散关系模型*

宋建军† 张鹤鸣 戴显英 胡辉勇 宣荣喜

(西安电子科技大学微电子学院, 宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室, 西安 710071)

(2008 年 3 月 8 日收到, 2008 年 6 月 4 日收到修改稿)

基于 K.P 理论框架, 通过引入应变哈密顿微扰项, 详细推导并建立了应变 Si 的价带色散关系模型. 所得模型适用于任意晶向弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($0 \leq x \leq 0.6$) 衬底上生长的应变 Si, 并且, 通过该模型可以获取任意 K 矢方向的应变 Si 价带结构及空穴有效质量, 对器件研究设计可提供有价值的参考.

关键词: 应变 Si, K.P 理论, 色散关系

PACC: 7360F, 7125C, 7115M

1. 引 言

利用应变 Si 提高载流子迁移率是当前 Si CMOS 技术发展的重点, 已经成为研究设计高速、高性能小尺寸 CMOS 器件与电路的首选方案^[1-3]. 而其材料的价带色散关系是理解、改进空穴迁移率增强的理论基础, 研究意义重大^[4,5].

不同晶向弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底外延生长的应变 Si 材料的结构是不同的, 自然, 其基本属性也是不一样的. 因此, 出于满足器件设计需求的考虑, 建立一个能够广泛适用于任意晶向生长应变 Si 的价带色散关系模型十分必要. 然而, 到目前为止, 还未发现相关的文献报道.

本文基于 K.P 理论框架, 通过引入应变哈密顿微扰项, 详细推导并建立了应变 Si 的价带色散关系模型. 所得模型适用于任意晶向弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($0 \leq x \leq 0.6$) 衬底上生长的应变 Si, 并且, 通过该模型可以获取任意 K 矢方向的应变 Si 价带结构及空穴有效质量, 对器件研究设计可提供有价值的参考.

2. 应变哈密顿模型

2.1. 应变张量

对于任意晶向弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底上生长的应变

Si, 应变哈密顿项的确定需要先计算其应变张量 ϵ .

为了讨论的方便, 首先建立辅助的 (x', y', z') 坐标系, 其中 z' 轴垂直于衬底的表面. 该坐标系与初基原胞 (x, y, z) 坐标系可以通过矩阵 U 实现坐标变换:

$$U = \begin{pmatrix} \cos\varphi\cos\theta & -\sin\varphi & \cos\varphi\sin\theta \\ \sin\varphi\cos\theta & \cos\varphi & \sin\varphi\sin\theta \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}, \quad (1)$$

其中, θ 和 φ 是 z' 轴相对于 (x, y, z) 坐标系的极角和方位角.

假设: 1) 衬底足够的厚, 以至于在受力情况下还可以保持它的体晶格常数; 2) 衬底离子间的平面角保持不变, 即衬底对外延层没有平行的剪切应变, 不存在平行方向上的扭曲. 因此, 在 (x', y', z') 坐标系下, 由于晶格失配, Si 外延层在平行于衬底的平面内发生了应变, 但不存在面内剪切应变. 面内应变大小可以由 Vegard 规则来确定:

$$\epsilon_{//} = (a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} - a_{\text{Si}}) / a_{\text{Si}}, \quad (2)$$

式中 $a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}$ 为弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的晶格常数, 由 Si 和 Ge 晶格常数的线性插值获得. 于是, 我们得到^[6]

$$\epsilon'_{11} = \epsilon'_{22} = \epsilon_{//}, \quad (3)$$

$$\epsilon'_{12} = 0. \quad (4)$$

(x', y', z') 坐标系下其余三个独立的应变张量 ϵ'_{13} , ϵ'_{23} , ϵ'_{33} 需要联立的方程才能确定. 一方面, Si 外延层在垂直衬底的方向上没有受到外力 T ,

* 国家部委项目(批准号: 51308040203, 9140A08060407DZ0103)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: wmsshsong@tom.com

因而

$$T'_{33} = T'_{23} = T'_{13} = 0. \quad (5)$$

由胡克定律可知,应力和应变张量存在如下关系:

$$T'_{\alpha\beta} + C'_{\alpha\beta ij} \epsilon'_{ij} = 0, \quad (6)$$

其中, $C'_{\alpha\beta ij}$ 是 (x', y', z') 坐标系下的弹性劲度系数.

对于 $(\alpha\beta) = (33)(23)(13)$ 根据 (3)(4) 和 (6) 式, 同时考虑到 $C'_{\alpha\beta ij}$ 和 ϵ'_{ij} 是对称张量, 可以得到

$$C'_{\alpha\beta 33} \epsilon'_{33} + 2C'_{\alpha\beta 23} \epsilon'_{23} + 2C'_{\alpha\beta 13} \epsilon'_{13} = (C'_{\alpha\beta 11} + C'_{\alpha\beta 22}) \epsilon_{//}. \quad (7)$$

由于文献中的弹性劲度系数是 (x, y, z) 坐标系下的, (7) 式中的 $C'_{\alpha\beta ij}$ 需要通过坐标变化来求取, 即

$$C'_{\gamma\delta kl} = U_{\alpha\gamma} U_{\beta\delta} U_{ik} U_{jl} U_{\alpha\beta ij}, \quad (8)$$

其中, 弹性劲度系数张量 $C_{\alpha\beta ij}$ (C_{11}, C_{12}, C_{44} 的值见表 1) 为

$$C_{\alpha\beta ij} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & & c_{44} & 0 \\ & & & & & c_{44} \end{pmatrix}. \quad (9)$$

另一方面, 通过对应变张量 $\epsilon'_{13}, \epsilon'_{23}, \epsilon'_{33}$ 再次的坐标变换, 可以得到

$$\sigma = -\epsilon_{//} / \epsilon'_{33}, \quad (10)$$

$$\tau = \sqrt{(\epsilon'_{13})^2 + (\epsilon'_{23})^2} / \epsilon_{//}, \quad (11)$$

其中, 系数 σ 和 τ 可从文献 [7] 获得. 这样, 联立 (7), (10)(11) 式, 应变张量 $\epsilon'_{13}, \epsilon'_{23}, \epsilon'_{33}$ 得以确定.

有了 (x', y', z') 坐标系下的应变张量, 只要进行坐标变换就可以得到 (x, y, z) 坐标系下的应变张量. 变换公式为

$$\epsilon'_{\alpha\beta} = U_{ia} U_{j\beta} \epsilon_{ij}. \quad (12)$$

2.2. 应变哈密顿

不考虑自旋轨道耦合作用时, 未应变 Si 价带顶处为 Γ'_{25} 三度简并态, 其 K.P 哈密顿表达式 (L, M, N 的数据见表 1) 为

$$H' = \begin{bmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_x k_y & Nk_z k_x \\ Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_z^2 + k_x^2) & Nk_y k_z \\ Nk_z k_x & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix}. \quad (13)$$

求解该矩阵的本征值就可以建立未应变 Si 不考虑自旋轨道耦合作用时的价带色散关系.

我们知道, 应变也就意味着发生了位移. 体现在色散关系上就是波矢 K 多了一个应变变化量, 而求解出的本征能量值也会发生相应的变化. 基于这一思想, 应变哈密顿应为类似于 (13) 式的一个表达式^[8], 即

$$H'' = \begin{bmatrix} l\epsilon_{xx} + m(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) & n\epsilon_{xy} & n\epsilon_{zx} \\ n\epsilon_{xy} & l\epsilon_{yy} + m(\epsilon_{xx} + \epsilon_{zz}) & n\epsilon_{yz} \\ n\epsilon_{zx} & n\epsilon_{yz} & l\epsilon_{zz} + m(\epsilon_{yy} + \epsilon_{xx}) \end{bmatrix}, \quad (14)$$

式中, 形变势 l, m, n 由实验确定, 其值见表 1; 应变张量可由 (12) 式计算获得.

表 1 文中所用参数说明及其具体数值

| 参数 | 参考文献 |
|---|-------------------------|
| Si, Ge 晶格常数 $a_{Si}, a_{Ge}/\text{\AA}$ | 5.431, 5.658 [7] |
| 弹性劲度系数 | |
| $C_{11}, C_{12}, C_{44} (10^{11} \text{ dyn/cm}^2)^*$ | 16.56, 6.39, 7.95 [7] |
| KP 参数 L, M, N | -5.78, -3.44, -8.64 [9] |
| 形变势 $l, m, n/\text{eV}$ | -0.15, 6.84, -5.89 [7] |
| 自旋轨道劈裂能 Δ/eV | 0.044 [9] |

* $1 \text{ dyn} = 10^{-5} \text{ N}$.

K_z 轴系确定的波矢方向上加入了应变变化量, 求解两式之和的本征值就是不考虑自旋轨道耦合作用时应变 Si 的能量本征值.

3. 色散关系模型

为了得到更加精细的能带结构, 必须考虑自旋轨道耦合作用. 这需要首先将单群态转变为双群态, 然后求解本征值. 即

$$H_{\text{KP}} = \begin{bmatrix} H' & 0_{3 \times 3} \\ 0_{3 \times 3} & H' \end{bmatrix}, \quad (15)$$

当 (13) 和 (14) 两式相加时, 也就是在由 $K_x, K_y,$

$$H_{\text{Str}} = \begin{bmatrix} H'' & 0_{3 \times 3} \\ 0_{3 \times 3} & H'' \end{bmatrix} \updownarrow. \quad (16)$$

然后求解 $H_{\text{KP}} + H_{\text{Str}} + H_{\text{SO}}$ 的本征值, 建立色散关系. 其中, 自旋轨道作用哈密顿的表达式为

$$H_{\text{SO}} = -\frac{\Delta}{3} \begin{bmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i & i & 0 & 0 \\ -1 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (17)$$

直接求解 6×6 矩阵 $H_{\text{KP}} + H_{\text{Str}} + H_{\text{SO}}$ 的本征解相当困难, 不能得到具体的表达式. 对于未应变 Si ($H_{\text{Str}} = 0$) 通过行列式变化出 0 矩阵块的方法, 可以将 6×6 矩阵 $H_{\text{KP}} + H_{\text{Str}} + H_{\text{SO}}$ 转换而来的久期行列式化简为 4×4 和 2×2 两个矩阵块来处理, 从而可以得到明确的色散表达式. 而考虑应变以后, 由于 $H_{\text{Str}} \neq 0$, 分块化简的办法不再适用. 考虑到该 6×6 矩阵经过适当的厄米变换可以化为对称矩阵, 所以其本征解必为 3 个 2 重根. 从群论对称性的角度分析也可以得到同样的结果. 因此, 当假设矩阵的本征值为 E , 其 6 次幂的久期方程可以降为 3 次幂的特征多项式. 令其为零, 可以得到

$$E^3 + pE^2 + qE + r = 0, \quad (18)$$

其中

$$\begin{aligned} p &= \Delta - (a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\ q &= a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 \\ &\quad - a_{23}^2 - (2\Delta/3)(a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\ r &= a_{11}a_{23}^2 + a_{22}a_{13}^2 + a_{33}a_{12}^2 \\ &\quad - a_{11}a_{22}a_{33} - 2a_{12}a_{23}a_{13} \\ &\quad + (\Delta/3)(a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} \\ &\quad - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2), \end{aligned}$$

而 a_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) 是矩阵 $H' + H''$ 的元素.

虽然我们成功地实现了降幂化简, 但三次幂方程 (18) 的实数根通式解形式仍然不是我们所需要的结果. 这是因为, 该表达式是一个虚数形式表达式. 理论上, 用该表达式计算的结果可以将虚部约掉, 得到实数结果. 但是由于方程中含有大量的符号, 即使计算机求解也会存在约不掉的情况. 这样, 结果反倒真的是虚数了, 与物理意义不符. 通过它计算不出我们所需的数据. 针对这一情况, 我们利用计算机辅助计算并配合使用欧拉公式, 将实数根通式解的实部提取出来, 最终建立了应变 Si 价带色散关系模型.

上式中符号元素 a_{ij} 由任意晶向 $[k_x, k_y, k_z]$ 和任意晶面生长情况应变张量 ϵ_{ij} 明显表示, 因此, 只要对晶向 $[k_x, k_y, k_z]$ 赋值就可以求出该方向的价带结构. 对该方向价带能量的二阶导可获得相应的空穴有效质量.

$$\begin{aligned} E_V^1 &= 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta}{3}\right) - \frac{p}{3}, \\ E_V^2 &= 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta - 2\pi}{3}\right) - \frac{p}{3}, \\ E_V^3 &= 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta + 2\pi}{3}\right) - \frac{p}{3}, \end{aligned} \quad (19)$$

其中, $Q = (p^2 - 3q)/9$, $R = (2p^3 - 9pq + 27r)/54$, $\Theta = \cos^{-1}(-R/\sqrt{Q^3})$.

下面, 对所建立色散关系模型的精确性进行评价. 由于目前应变 Si 能带结构实验数据报道较少, 理论与实验值比对存在困难. 同时考虑到, 以上所建模型亦能对未应变 Si 进行计算, 因此, 我们将以未应变 Si 为例来进行评价. 如前面所述, 在求解未应变 Si 的价带结构时, 通常把 6×6 矩阵简化为 4×4 和 2×2 两个矩阵块的办法来处理, 有些文献称之为解析法. 解析法计算未应变 Si 的结果与实验值符合较好. 使用上面所建模型来求解, 我们称之为数值法, 下面进行数值法与解析法的比对.

图 1—4 是解析法和数值法求解的未应变 Si 重空穴带、轻空穴带等能面的比较结果. 数值法所得等能面图表明, 重空穴带比轻空穴带有较强的各向异性, 这和解析法的结果是一致的, 反映出了所建模型的正确性. 同时, 我们也要注意的: 只有在等能面能值较小的时候, 数值法和解析法的结果才较为一致, 这在重空穴带中体现得比较明显. 这种结果上的

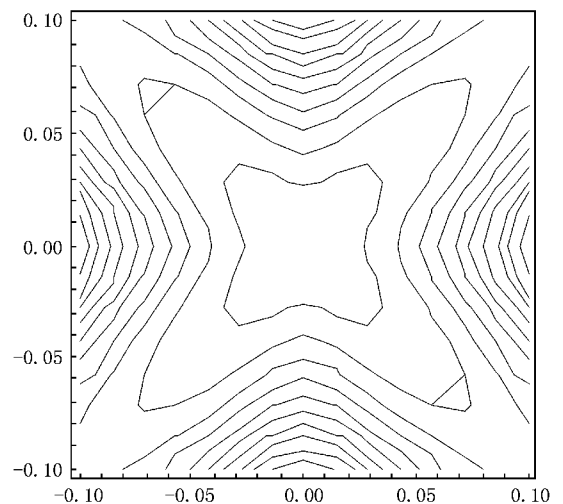


图 1 数值法求解的重空穴带等能面

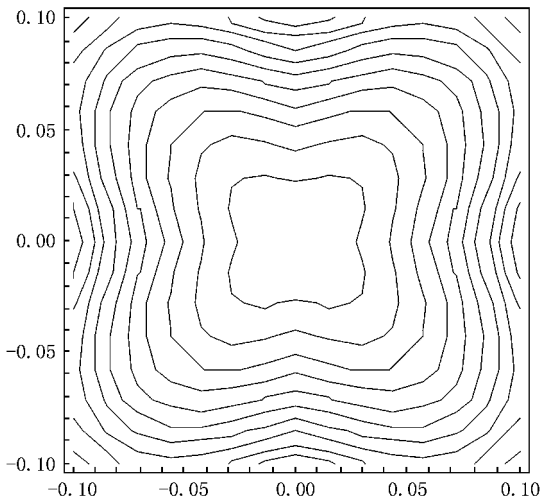


图2 解析法求解的重空穴带等能面

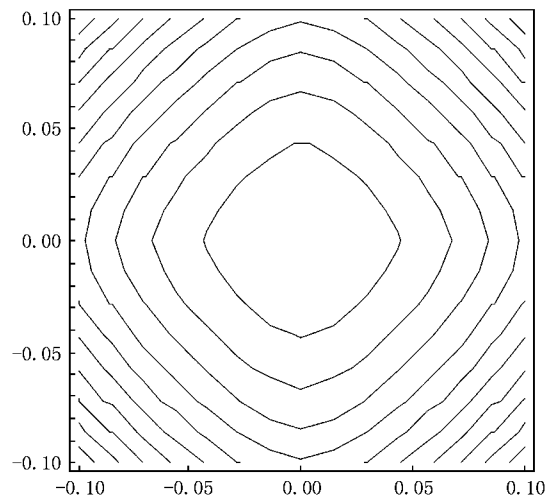


图4 解析法求解的轻空穴带等能面

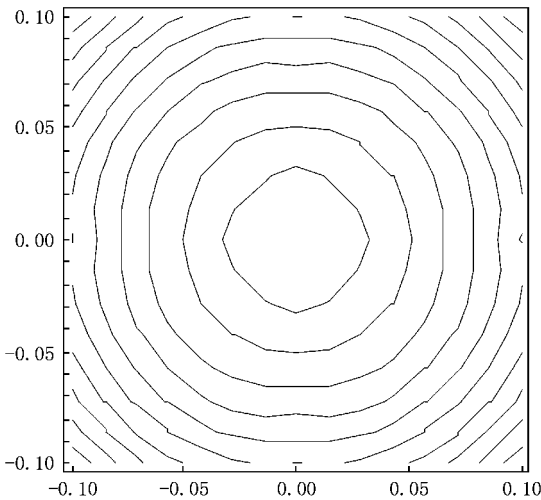


图3 数值法求解的轻空穴带等能面

空间四次方有贡献的若干项,有一定的近似,而数值法是经过严格的数学推导的,没有近似.因此,使用数值法来求解未应变 Si 的价带结构,结果应该更加精确.

4. 结 论

本文首先构建了应变哈密顿微扰项,然后基于 K.P 理论框架,详细推导并建立了应变 Si 的价带色散关系模型.最后,以未应变 Si 为例对所建模型的精确性进行了评价.结果表明,该模型精确度高,适用范围广,任意晶向弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($0 \leq x \leq 0.6$) 衬底上生长的应变 Si 都可适用.并且,通过该模型可以获取任意 K 矢方向的应变 Si 价带结构及空穴有效质量,对器件研究设计可提供有价值的参考.

差异主要是因为解析法在计算过程中省略了对 K

- [1] Hu H Y, Zhang H M, Jia X Z, Dai X Y, Xuan R X 2007 *Chinese Journal of Semiconductors* **28** 36 (in Chinese) [胡辉勇、张鹤鸣、贾新章、戴显英、宣荣喜 2007 半导体学报 **28** 36]
- [2] Shu Zh Y, Yang H D 2006 *Chin. Phys.* **15** 1374
- [3] Chakraborty S, Bera M K, Bhattacharya S, Bose P K, Maiti C K 2006 *Thin Solid Films* **504** 73
- [4] Guillaume T, Mouis M 2006 *Solid-State Electronics* **50** 701
- [5] Hu H Y, Zhang H M, Dai X Y, Li Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 4314 (in Chinese) [胡辉勇、张鹤鸣、戴显英、吕懿 2004 物理

学报 **53** 4314]

- [6] Smirnov S, Kosina H 2004 *Solid-State Electronics* **48** 1325
- [7] Levinshtein M E, Rumyantsev S L, Shur M S 2001 *Properties of Advanced Semiconductor Materials* (New York: John Wiley & Sons)
- [8] Manku T, Nathan A 1991 *Appl. Phys.* **43** 12634
- [9] Li M F 1998 *Semiconductor Physics* (Beijing: Science Press) (in Chinese) p64 [李名复 1998 半导体物理学(北京:科学出版社)第 64 页]

Dispersion relation model of valence band in strained Si^{*}

Song Jian-Jun[†] Zhang He-Ming Dai Xian-Ying Hu Hui-Yong Xuan Rong-Xi

(*Key Lab of Ministry of Education for Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices* ,

School of Microelectronics , Xidian University , Xi 'an 710071 , China)

(Received 8 March 2008 ; revised manuscript received 4 June 2008)

Abstract

There has been much interest lately in the strained Si CMOS technology used for carrier mobility enhancement. The dispersion relation of valence band in strained Si is the theoretical basis for understanding and enhancing hole mobility. With in the frame of K. P theory , the dispersion relation is derived by taking strained Hamiltonian perturbation into account. The corresponding model obtained can be applied to calculate the valence band structure and hole effective mass along arbitrarily K wavevector direction in strained Si grown on arbitrarily oriented relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ($0 \leq x \leq 0.6$) substrates , and hence is valuable as reference for the design of devices.

Keywords : strained Si , K. P method , dispersion relation

PACC : 7360F , 7125C , 7115M

* Project supported by the National Ministries and Commissions (Grant Nos. 51308040203 , 9140A08060407DZ0103).

[†] Corresponding author. E-mail :wmshhsong@tom.com