

应变 Si 电子电导有效质量模型^{*}

赵丽霞[†] 张鹤鸣 胡辉勇 戴显英 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重点实验室, 西安 710071)

(2009 年 8 月 7 日收到; 2010 年 1 月 7 日收到修改稿)

采用 K·P 微扰法建立了应变 Si 导带能谷由纵、横向有效质量表征的 $E-k$ 关系, 并在此基础上, 研究分析了 (001), (101), (111) 晶面应变 Si 电子的电导有效质量与应力、能谷分裂能及晶向的关系. 结果表明, 弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料 (001) 面生长的应变 Si 沿 [100], [010] 晶向的电子电导有效质量和弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料 (101) 面生长的应变 Si 沿 [010] 晶向的电子电导有效质量随 Ge 组分 (应力) 的增加而减小, 并逐渐趋于常数. 以上结论可为应变 Si nMOS 器件性能增强的研究及导电沟道晶向与应力设计提供理论依据.

关键词: 应变 Si, K·P 法, 电导有效质量

PACC: 7360F, 7125C, 7115M

1. 引 言

Si 器件在半导体产业中占主导地位, 随着器件特征尺寸减小、集成度的提高, 出现了一系列涉及材料、器件物理和工艺技术等方面新的理论与技术问题. 应变 Si 技术与现有的 Si 工艺兼容, 利用其能够制作出更高性能的器件与电路, 是当前国内外关注的热点和研究发展的重点^[1-3].

应变 Si MOS 器件性能的增强主要得益于材料载流子迁移率的提高. 其中, 应变 Si 材料导带结构及其电子电导有效质量是其电子迁移率提高的理论基础, 对 nMOS 器件设计及其电子输运特性增强的研究具有十分重要的意义. 但目前国内外对该理论的研究缺乏深入性和系统性. 文献常见“应变 Si 电子迁移率增强源于其导带能谷分裂引起的电子谷间散射概率减小”的报道没有考虑电导有效质量的因素^[4], 因而不能全面反映电子迁移率增强机理.

事实上, 应变 Si 材料电子电导有效质量与应力、晶面、导带谷间分裂能及晶向密切相关, 研究电子迁移率时必须对其予以考虑. 本文基于弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料 (001), (101), (111) 晶面生长的应变 Si, 采用 K·P 微扰法研究分析了应变 Si 材料导带能谷由纵、横向有效质量表征的 $E-k$ 关系, 并在此基础上,

研究建立了应变 Si 的 (001), (101), (111) 晶面不同晶向电导有效质量的解析模型, 获得了有实用价值的相关结论, 可为应变 Si 材料电子迁移率、应变 Si nMOS 器件的研究与设计提供理论参考.

2. 应变 Si 导带结构

要获得应变 Si 材料导带结构, 理论关键是研究建立其 $E-k$ 关系. 基于薛定格方程, 在研究建立应变张量模型和势能算符基础上, 采用 K·P 微扰法^[6], 建立了应变 Si 材料导带底 $E-k$ 关系模型 (详见文献 [5]).

$$\begin{aligned} \varepsilon^i(\mathbf{k}) = & \varepsilon_c(\mathbf{k}_0) + U_{k_0^i} \\ & + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x}^i)^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y}^i)^2}{m_y^*} \right. \\ & \left. + \frac{(k_z - k_{0z}^i)^2}{m_z^*} \right], \end{aligned} \quad (1)$$

式中, $\varepsilon_c(\mathbf{k}_0)$ 为弛豫 Si 导带底能级, $(k_{0x}^i, k_{0y}^i, k_{0z}^i)$ 为导带底能级 \mathbf{k} 矢位置, m_x^*, m_y^*, m_z^* (或者为 m_1, m_1) 分别为弛豫 Si 材料导带有效质量, $U_{k_0^i}$ 为应变 Si 导带底相对弛豫 Si 的能级偏移量 ($\Delta\varepsilon_c$).

弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (001), (101) 和 (111) 晶面生长的应变 Si 材料能谷能级的偏移量 ($\Delta\varepsilon_c$) 可由线性形变势理论获得^[5-7]. 通过导带底各能谷能级的偏移

* 国家部委项目 (Nos. 51308040203, 9140A08060407DZ0103, 6139801) 资助的课题.

[†]E-mail: zhaolixia@poshing.cn

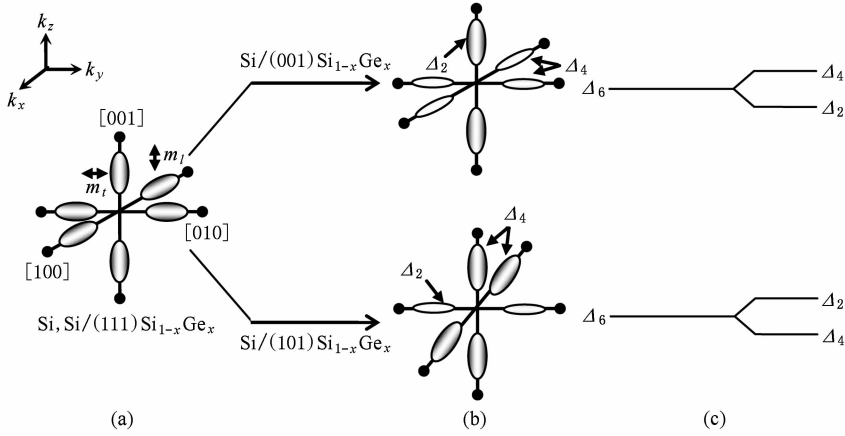


图1 应变 Si 材料导带底能谷分裂示意图(其中 $m_1 = 0.19m_0$, $m_1 = 0.97m_0$)

量分析,可得导带底能谷的简并度(见图1)及能谷分裂能与应力、晶向的关系(见图2).需要说明的是,对于应变 Si/(111)Si_{1-x}Ge_x材料,由于导带底附近各能谷能级偏移量一致,因此简并能谷没有发生分裂,但其能级的位置与弛豫 Si 的不同.

3. 电子电导有效质量

基于已建立的应变 Si 导带 E - k 关系、能谷简并度及分裂能模型,下面具体讨论应变 Si (001), (101) 和 (111) 晶面导带电子电导有效质量 m_c . 低简并能谷电导有效质量记作 $m_{\text{low}}^{(100)}$ (上标 <100> 表示晶向簇,表征了不同晶面中的不同晶向,即 [100], [010] 和 [001] 晶向,且与电场 E 施加方向相同), 迁移率记作 μ_{low} . 高简并能谷的相同量分别记作 $m_{\text{high}}^{(100)}$ 和 μ_{high} . 另外,低能谷和高能谷的电子密度分别为 n_{low} 和 n_{high} , 总的电子浓度为

$$n = n_{\text{low}} + n_{\text{high}}. \quad (2)$$

应变 Si 电流密度可写作

$$J = qn\mu_c E = q(n_{\text{low}}\mu_{\text{low}} + n_{\text{high}}\mu_{\text{high}})E. \quad (3)$$

采用类似 GaAs 的处理方法^[8], 能量差为 $\Delta E_{\text{C,Split}}$ 的高低能谷之间的填充数比为

$$\frac{n_{\text{high}}}{n_{\text{low}}} = R \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{C,Split}}}{k_B T}\right), \quad (4)$$

$\Delta E_{\text{C,Split}}$ 为应变 Si 导带分裂能, 其具体数值见表 1 (单位为 eV). 式中 R 为态密度比, 用下式表示:

$$R = \frac{M_{\text{high}}}{M_{\text{low}}}, \quad (5)$$

M_{low} 和 M_{high} 分别为低能谷和高能谷数目, 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 和 Si/(101)Si_{1-x}Ge_x 的 R 值分别为 2 和 0.5. 联立方程 (2), (4) 和 (5), 可得

$$n_{\text{low}} = \left(\frac{1}{R(\exp(-\Delta E_{\text{C,Split}}/k_B T) + 1)} \right) n$$

$$n_{\text{high}} = \left(\frac{1}{R(\exp(\Delta E_{\text{C,Split}}/k_B T) + 1)} \right) n. \quad (6)$$

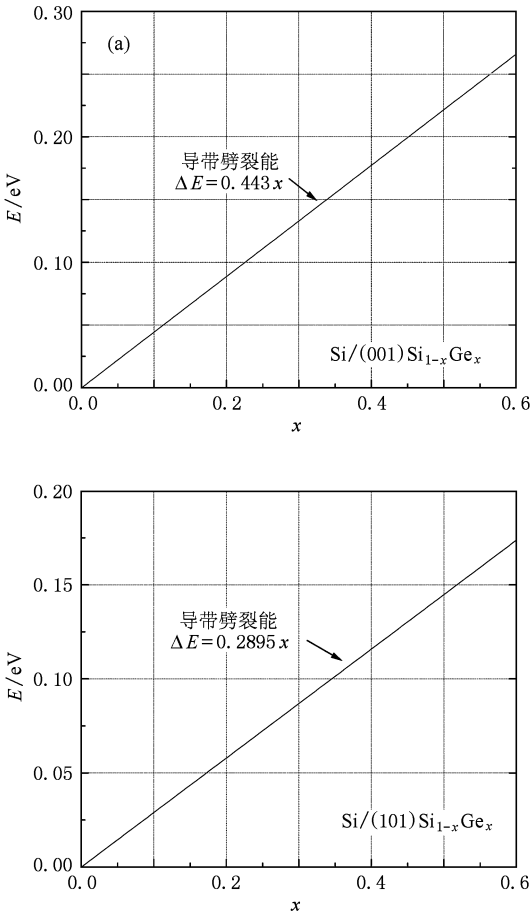


图2 应变 Si 材料导带分裂能与 Ge 组分 x 的关系 (a) 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x; (b) 应变 Si/(101)Si_{1-x}Ge_x

如将 μ_c, μ_{low} 及 μ_{high} 写为显含电导率有效质量的形式, 即

$$\mu_c \propto \frac{1}{m_c}, \quad \mu_{low} \propto \frac{1}{m_{low}^{(100)}}, \quad \mu_{high} \propto \frac{1}{m_{high}^{(100)}}. \quad (7)$$

采用未应变 Si 电子电导率有效质量的求解方法^[9], 可得沿 [100], [010] 和 [001] 晶向施加电场的高、低能谷电导率有效质量 $m_{low}^{(100)}$ 和 $m_{high}^{(100)}$, 其具

表 1 $m_{low}^{(100)}, m_{high}^{(100)}$ 与 $\Delta E_{C, Split}$

应变 Si 材料	$m_{low}^{[100]}$	$m_{low}^{[010]}$	$m_{low}^{[001]}$	$m_{high}^{[100]}$	$m_{high}^{[010]}$	$m_{high}^{[001]}$	$\Delta E_{C, Split}$
Si/(001)Si _{1-x} Ge _x	0.19	0.19	0.97	0.318	0.318	0.19	0.443x
Si/(101)Si _{1-x} Ge _x	0.318	0.19	0.318	0.19	0.97	0.19	0.2895x
Si/(111)Si _{1-x} Ge _x	0.26	0.26	0.26	0	0	0	0

式中, a 与 b 由态密度比 R 及其倒数确定, 对于应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x, a 与 b 分别为 2 和 0.5. 对于应变 Si/(101)Si_{1-x}Ge_x, a, b 分别取 0.5 和 2; 虽然应变 Si/(111)Si_{1-x}Ge_x 导带能谷未发生分裂, 当 a 取 3 时, (8) 式仍可将其涵盖.

图 3 为基于 (2) 式获得的应变 Si 导带底电子电导有效质量 m_c 与 Ge 组分、晶面及晶向 (施加电场方向) 的关系. 由图可见, 对于应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 材料, 沿 [100], [010] 晶向的电导有效质量 m_c 相同, 且在 Ge 组分 x 较低时随 x 的增加而减小, 之后随 x 的继续增大而逐渐趋于常数, 其值为 $0.19m_0$. 当沿 [001] 方向时, m_c 随着 Ge 组分 x 的增加而显著增大, 在 Ge 组分 x 较大时, m_c 随 x 变化趋于平坦. 对于应变 Si/(101)Si_{1-x}Ge_x 材料, 沿 [100], [001] 方向的 m_c 相同, 且随着 Ge 组分 x 的增加而缓慢增大, 当 Ge 组分 x 较大时, m_c 为 $0.318m_0$. 当方向为 [010] 时, 其 m_c 与应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 材料沿 [100], [010] 方向的 m_c 相同. 应变 Si/(111)Si_{1-x}Ge_x 的 m_c 与 Ge 组分 x 无关, 其值与弛豫 Si 材

体数值见表 1 (单位为 m_0). 将 (6) 和 (7) 式代入 (3) 式, 获得应变 Si 的 (001), (101) 和 (111) 晶面导带电子电导有效质量 m_c 的模型为

$$\frac{1}{m_c} = \left(\frac{1}{m_{low}^{(100)}} \right) \left(\frac{1}{a \times (\exp(-\Delta E_{C, Split}/k_B T) + 1)} \right) + \left(\frac{1}{m_{high}^{(100)}} \right) \left(\frac{1}{b \times (\exp(\Delta E_{C, Split}/k_B T) + 1)} \right), \quad (8)$$

料 m_c 相同 (为 $0.26m_0$).

电子电导有效质量 m_c 是决定电子迁移率的关键因素之一. 应变使 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 沿 [100], [010] 方向的 m_c 和 Si/(101)Si_{1-x}Ge_x 材料沿 [010] 晶向的 m_c 降低, 该结论对应变 Si 材料的应用及器件结构设计具有重要的理论意义和参考价值.

4. 结 论

本文采用 K·P 微扰法在研究应变 Si 导带能谷由纵、横有效质量表征的 $E-k$ 关系模型基础上, 建立了应变 Si 电子电导有效质量与应力、能谷分裂能及晶向的关系, 获得了应变 Si 电子电导有效质量的解析模型. 结果表明, 对于应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x, [100], [010] 晶向的电导有效质量相同, 且随 Ge 组分的增加而减小, 在 x 较高时逐渐趋于 $0.19m_0$. 在 [001] 晶向, m_c 随着 Ge 组分的增加而显著增大, 当 Ge 组分较大时, m_c 随 x 变化趋于平坦. 对于应变 Si/(101)Si_{1-x}Ge_x, 沿 [100], [001] 方向的 m_c 相同, 且随着 Ge 组分 x 的增加缓慢, 当 Ge 组分 x 较大时, m_c 为 $0.318m_0$. 当方向为 [010] 时, 其 m_c 与应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 沿 [100], [010] 方向的 m_c 相同. 应变 Si/(111)Si_{1-x}Ge_x 的 m_c 与 Ge 组分无关, m_c 与弛豫 Si 材料相同 ($0.26m_0$).

应变 Si 材料电子的电导有效质量和散射概率是研究其迁移率增强的理论基础. 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 沿 [100], [010] 晶向和应变 Si/(101)Si_{1-x}Ge_x 沿 [010] 方向的 m_c 随 Ge 组分的增加而减小. 以上结论可为应变 Si nMOS 器件性能增强的研究及导电沟道的应力与晶向设计提供重要理论依据.

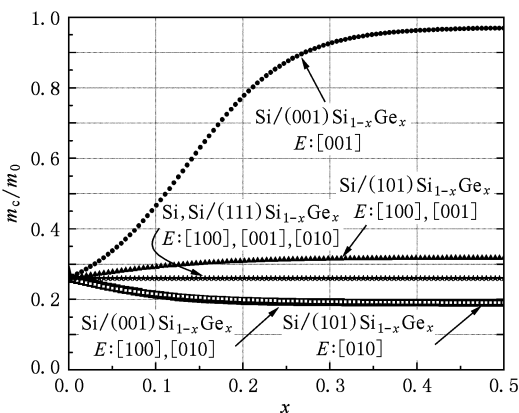


图 3 应变 Si 材料带底电子电导有效质量

- [1] Lin J Y, Tang Y H, Tsai M H, 2009 *Computer Physics Communication* **180** 659
- [2] Song J J, Zhang H M, Dian X Y, Hu H Y, Xuan R X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7228 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、戴显英、胡辉勇、宣荣喜 2008 物理学报 **57** 7228]
- [3] Song J J, Zhang H M, Dian X Y, Hu H Y, Xuan R X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5918 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、戴显英、胡辉勇、宣荣喜 2008 物理学报 **57** 5918]
- [4] Courtesy J R, 2005 *IEEE Circuits & Magazine* **9** 18
- [5] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dian X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827
- [6] Xie X D, Lu D 1998 *Energy band theory of solids* (Shanghai: Fudan University Press) (in Chinese) p58 [谢希德、陆 栋 1998 固体能带理论 (上海: 复旦大学出版社) 第 58 页]
- [7] Smirnov S, Kosina H 2004 *Solid - State Electronics* **48** 1325
- [8] Shi M, Wu G J 2008 *Physics of Semiconductor Devices* (Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press) (in Chinese) p389 [施 敏、伍国珏 2008 半导体器件物理 (西安: 西安交通大学出版社) 第 389 页]
- [9] Liu E K, Zhu B Sh, Luo J Sh 1994 *Semiconductor Physics* (Beijing: Defense Industry Press) (in Chinese) p95 [刘恩科、朱秉升、罗晋生 1994 半导体物理学 (北京: 国防工业出版社) 第 95 页]

Model of electrical conductivity effective mass of strained Si*

Zhao Li-Xia[†] Zhang He-Ming Hu Hui-Yong Dai Xian-Ying Xuan Rong-Xi

(Key Lab of Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices, School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 7 August 2009; revised manuscript received 7 January 2010)

Abstract

Strained Si CMOS technology is one of the most advanced technologies in present day microelectronics. Electrical conductivity effective mass of strained Si is a key parameter to study electron mobility enhancement. Using K·P method with the help of perturbation theory, dispersion relation near conduction band valley was determined, including the longitudinal and transverse masses. And then, electrical conductivity effective masses of strained Si on (001), (101) and (111) planes were obtained with respect to stress, splitting energy and directions. It was found that both the [100] and [010] directional electrical conductivity effective masses of strained Si/(001)Si_{1-x}Ge_x and the [010] directional one of strained Si/(101)Si_{1-x}Ge_x decrease with increasing Ge fraction or stress, and both values tend to be constant. The results provide valuable reference to the conduction channel design related to stress and orientation in the strained Si nMOS devices.

Keywords: strained Si, K·P method, conductivity effective mass

PACC: 7360F, 7125C, 7115M

* Project supported by the National Ministries and Commissions (Grant Nos. 51308040203, 9140A08060407DZ0103, 6139801).

[†] E-mail: zhaolixia@poshing.cn