

不同晶系应变 Si 状态密度研究*

宋建军[†] 张鹤鸣 戴显英 宣荣喜 胡辉勇 王冠宇

(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)

(2010年3月18日收到; 2010年8月6日收到修改稿)

应变 Si 技术是当前微电子领域研究发展重点, 态密度是其材料的重要物理参量. 本文基于应力相关 KP 理论, 建立了(001), (101) 和(111) 晶面施加双轴应力形成的四方、单斜及三角晶系应变 Si 导带、价带态密度模型. 结果表明, 除单斜和三角晶系导带底态密度外, 应力对其余各态密度均有显著影响. 本文所得模型数据量化, 可为应变 Si 材料物理的理解及其他物理参数模型的建立奠定重要理论基础.

关键词: 应变 Si, KP, 态密度

PACS: 71.20.-b, 71.15.-m, 71.20.mg

1. 引言

应变 Si 是当前国内外研究发展重点, 在高速/高性能 CMOS 器件和电路, 以及光电子器件中有广阔的应用前景^[1-3]. 由于晶格失配, 弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底上可外延获得应变 Si, 且不同晶面衬底对应不同晶系应变 Si. 典型的晶面(001), (101) 和(111) 分别对应形成四方、单斜和三角晶系应变 Si.

态密度是应变 Si 重要物理参数, 其研究可为应变 Si 材料物理的理解及其他物理参量(如有效状态密度、载流子散射机理等)模型^[4]的建立奠定重要理论基础. 然而, 到目前为止, 有关应变 Si 态密度的文献仍缺乏报道. 有鉴于此, 本文采用应力相关 KP 理论, 基于所得导带底电子和价带顶空穴态密度有效质量, 进一步建立了四方、单斜和三角三个不同晶系应变 Si 的导带、价带态密度与应力(由 Ge 组分表征)的量化解析模型. 结论所含立方晶系未应变 Si(Ge 组分 x 为 0 时)导带底电子和价带顶空穴态密度有效质量及导带底和价带顶附近态密度模型与文献报道一致^[5], 间接说明了本文结果的正确性.

2. 模型建立

与立方晶系未应变 Si 材料类似, 四方、单斜和

三角晶系应变 Si 导带底、价带顶附近态密度模型($g_c(E), g_v(E)$)如下:

$$g_c(E) = 4\pi V(2m_n^*)^{3/2}(E - E_C)^{1/2}/h^3,$$

$$g_v(E) = 4\pi V(2m_p^*)^{3/2}(E_V - E)^{1/2}/h^3, \quad (1)$$

式中, E_C, E_V 分别对应四方、单斜和三角晶系应变 Si 导带底能谷、价带顶带边能级, 其值参见文献[6-9]; V 是应变 Si 材料的体积; m_n^*, m_p^* 分别是导带底电子、价带顶空穴态密度有效质量.

弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底 Ge 组分较低(≤ 0.4)时, 晶格失配引起外延应变 Si 层的应变可视为微扰, 即应变 Si 材料体积 V 在应力的作用下变化不大, 可近似取未应变 Si 体积. 其正确性由应变 Si 晶格常数的分析得以证实^[10,11]. 因此, 进一步建立导带底电子、价带顶空穴态密度有效质量模型(m_n^*, m_p^*)便成为获得应变 Si 材料导带底、价带顶附近态密度的关键.

为此, 本文采用应力相关 KP 微扰理论, 首先建立了四方、单斜和三角晶系应变 Si 导带、价带结构模型, 包括其导带能谷劈裂能($\Delta E_{C, \text{split}}$)、价带带边劈裂能($\Delta E_{V, \text{split}}$)及电子、空穴的有效质量与 Ge 组分(x)的关系模型^[7-9,12,13]. 考虑应变 Si 导带能谷简并度(简并度由 a 和 b 表征, 四方晶系应变 Si a 与 b 分别为 2 和 4; 单斜晶系应变 Si a, b 分别取 4 和 2; 三角晶系应变 Si a 与 b 分别为 6 和 0)^[6], 基于已建能带结构和载流子有效质量模型, 采用类似 GaAs 系统处理方法最终建立了应变 Si 导带底电子、价带

* 国家部委项目(批准号:51308040203, 9140A08060407DZ0103, 6139801), 高校基本科研业务费项目(批准号:72105499, 72104289)资助的课题.

[†] E-mail: wmsjhsong@tom.com

顶空穴态密度有效质量模型^[14],

$$m_n^* = [a \times (m_c)^{3/2} + b \times (m_c)^{3/2} \times \exp(-\Delta E_{c,split}/k_B T)]^{2/3},$$

$$m_p^* = [(m_p)_f^{3/2} + (m_p)_s^{3/2} \times \exp(-\Delta E_{v,split}/k_B T)]^{2/3}, \quad (2)$$

式中, $m_c = (m_l \times m_t)^{1/3}$ 为导带一个能谷的态密度有效质量, m_l, m_t 分别为应变 Si 导带底电子横向、纵向有效质量, $(m_p)_f, (m_p)_s$ 分别为应变 Si 价带带边、亚带边空穴有效质量^[12,13].

3. 模型讨论

图1—图6所示分别为300 K时四方、单斜和三角晶系应变 Si 导带底、价带顶态密度与能量(E)及应力(由 Ge 组分 x 表征)的理论关系. 由图可见, 四方、单斜和三角晶系应变 Si 导带底、价带顶态密度与能量(E)均为抛物线性关系. 除单斜和三角晶系导带底态密度外, 应力对其余各态密度均有显著影响. 尤其是四方晶系应变 Si, 无论是导带底还是价带顶态密度, 其值在 Ge 组分低于 0.2 时均随着 Ge 组分(应力)的增加而显著减小. 之后, 虽然应力继续增大, 而其变化却不大. 应变 Si 材料有效状态密度及各载流子散射机构与态密度密切相关, 基于所得态密度模型, 可为以上模型建立奠定重要的理论基础.

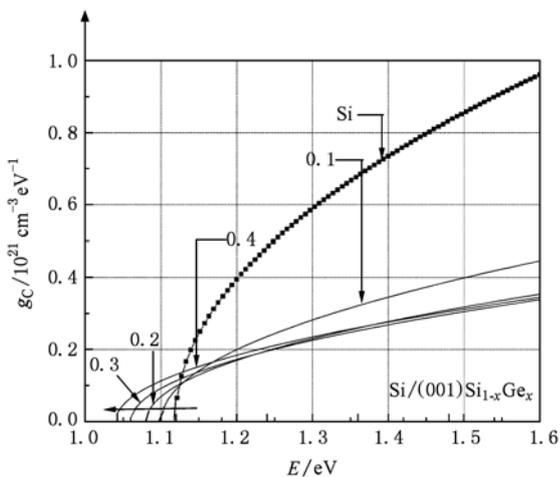


图1 四方晶系应变 Si 导带态密度

四方、单斜和三角晶系应变 Si 态密度不同于立方晶系未应变 Si 的物理现象可解释为, Si 材料所属晶系不同, 相应的能带结构及载流子有效质

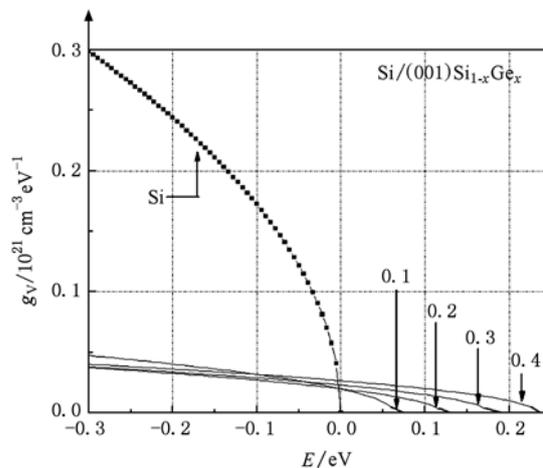


图2 四方晶系应变 Si 价带态密度

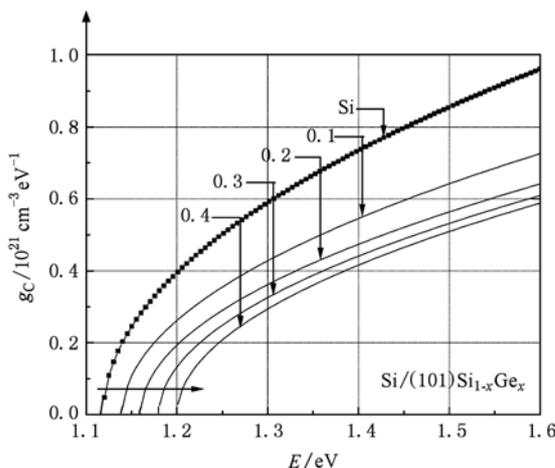


图3 单斜晶系应变 Si 导带态密度

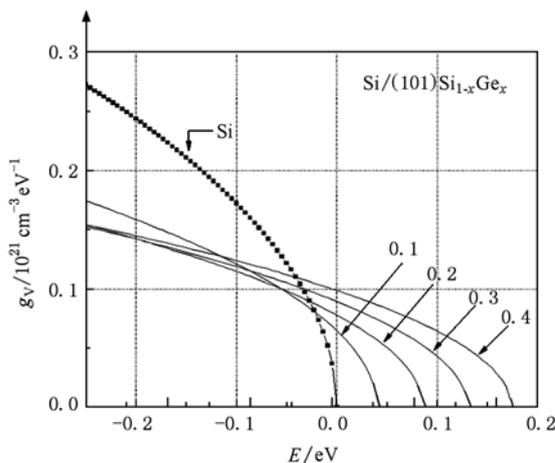


图4 单斜晶系应变 Si 价带态密度

量不同, 即导带底电子、价带顶空穴态密度有效质

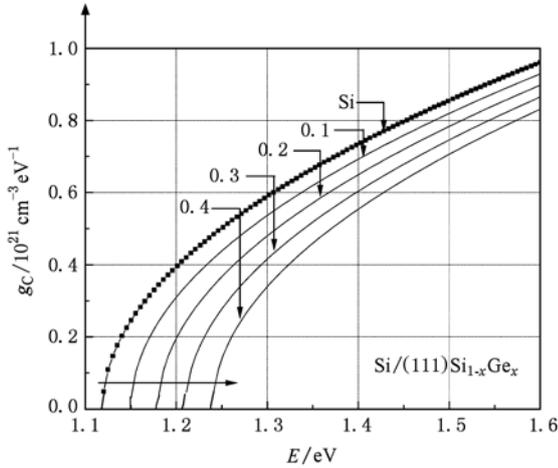


图5 三角晶系应变 Si 导带态密度

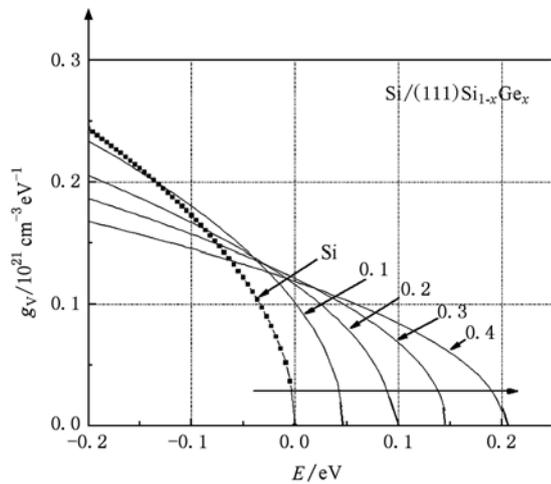


图6 三角晶系应变 Si 价带态密度

量不同. 态密度有效质量是决定态密度的本质因素. 正是由于四方、单斜和三角晶系应变 Si 导带底电子、价带顶空穴态密度有效质量不同于立方晶系未应变 Si, 其态密度必然发生相应变化. 值得一提的是, 应力对单斜和三角晶系应变 Si 的导带底状态密度影响很小, 这主要是由于应力没有引起

三角晶系应变 Si 导带能谷的分裂, 其导带底仍为 6 度简并能谷. 虽然应力使得单斜晶系应变 Si 导带底能谷发生分裂, 但由于其导带底为 4 度简并能谷, 故单斜晶系应变 Si 导带底态密度变化不如四方晶系应变 Si 变化显著.

此外, 各晶系应变 Si 材料导带底能谷 (E_C), 价带顶带边能级 (E_V) 随应力 Ge 组分的变化在图上也有体现. 综合 E_C, E_V 二者的变化, 可进一步获得各晶系应变 Si 材料禁带宽度随应力变化的情况. 值得一提的是, 基于本文模型还可获得立方晶系未应变 Si (Ge 组分 x 为 0 时) 导带底和价带顶附近态密度, 本文所得结果与文献报道结果一致, 据此可以间接说明本文四方、单斜和三角晶系应变 Si 态密度模型的正确性.

4. 结 论

态密度是应变 Si 材料的重要物理参数, 其研究可为应变 Si 材料物理的理解及其他物理参量模型的建立奠定重要的理论基础. 有鉴于此, 本文采用应力相关 KP 理论, 基于所得导带底电子和价带顶空穴态密度有效质量, 进一步建立了四方、单斜和三角三个不同晶系应变 Si 的导带、价带态密度与应力 (由 Ge 组分表征) 的量化解析模型.

结果表明, 四方、单斜和三角晶系应变 Si 导带底、价带顶态密度与能量 (E) 均为抛物线性关系. 除单斜和三角晶系导带底态密度外, 应力对其余各态密度均有显著影响. 尤其是四方晶系应变 Si, 无论是导带底还是价带顶态密度, 其值在 Ge 组分较低时均随着 Ge 组分 (应力) 的增加而显著减小. 之后, 虽然 x 继续增大, 而其变化却不大. 此外, 基于本文模型可以得到立方晶系未应变 Si (Ge 组分 x 为 0 时) 导带底和价带顶附近态密度, 本文所得结果与文献报道结果一致, 据此可以间接说明本文四方、单斜和三角晶系应变 Si 材料态密度模型的正确性.

[1] Phama A T, Jungemann C, Meinerzhagen B 2008 *Solid-State Electronics* **52** 1437
 [2] Jiang T, Zhang H M, Wang W, Hu H Y, Dai X Y 2006 *Chin. Phys.* **15** 1339
 [3] Chang S T, Liao S H, Lin C Y 2008 *Thin Solid Films* **517** 356

[4] Smith R A 1978 *Semiconductors* (London: Cambridge University Press) p116
 [5] Liu E K, Zhu B Sh, Luo J Sh 1994 *Semiconductor Physics* (Beijing: Defense Industry Press) p52 (in Chinese) [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 367 页]
- [6] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827
- [7] Song J J, Zhang H M, Dai X Y, Hu H Y, Xuan R X 2008 *Journal of Semiconductors* **29** 1670 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、戴显英、胡辉勇、宣荣喜 2008 半导体学报 **29** 1670]
- [8] Song J J, Zhang H M, Dai X Y, Hu H Y, Xuan R X 2010 *Journal of Semiconductors* **31** 1670 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、戴显英、胡辉勇、宣荣喜 2010 半导体学报 **31** 1]
- [9] Song J J, Zhang H M, Dian X Y, Hu H Y, Xuan R X 2009 *Research & Progress of SSE* **29** 14 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、戴显英、胡辉勇、宣荣喜 2009 固体电子学研究进展 **29** 14]
- [10] 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]
- [11] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Fu Q 2009 *Science In China(G)* **52** 546
- [12] Song J J, Zhang H M, Xuan R X, Hu H Y, Dian X Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4958 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、宣荣喜、胡辉勇、戴显英 2009 物理学报 **58** 4958]
- [13] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Xuan R X, Dian X Y 2009 *IEEE International Conference on Electron Devices and Solid-State Circuit Xi'an*
- [14] 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]

Densities of states of strained Si in different crystal systems *

Song Jian-Jun[†] Zhang He-Ming Dai Xian-Ying Xuan Rong-Xi Hu Hui-Yong Wang Guan-Yu
 (Key Lab of Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices, School of Microelectronics, Xidian University, Xi'an 710071, China)
 (Received 18 March 2010; revised manuscript received 6 August 2010)

Abstract

There has been aroused a lot of interest in the strained Si technology in the microelectronic field. Density of states (DOS) is an important physical parameter in strained Si materials. Based on the Kleinert's Variational perturbation (KP) theory related to stress, DOSs of electrons and holes near the bottom of conduction band and the top of valence band are obtained in tetragonal, rhombohedral and monoclinic strained Si grown from (001), (101) and (111) substrates respectively. It is found that their DOSs are obviously different from the ones of cubic unstrained Si, except DOSs of electrons near the bottom of conduction band in rhombohedral and monoclinic strained Si. The quantized model obtained can provide valuable references for understanding the strained Si material physics and developing the theoretical model of the other important physical parameters.

Keywords: strained Si, KP, density of state

PACS: 71.20.-b, 71.15.-m, 71.20.mg

* Project supported by the National Ministries and Commissions (Grant Nos. 51308040203, 9140A08060407DZ0103, 6139801), the Fundamental Research Funds for the Central University (Grant Nos. 72105499, 72104289).

[†] E-mail: wmsong@tom.com