

## [110]/(001) 单轴应变 Si 本征载流子浓度模型\*

王冠宇<sup>†</sup> 马建立 张鹤鸣 王晓艳 王斌

(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10月7日收到; 2010年10月30日收到修改稿)

本文首先讨论了在沿[110]方向的单轴应力对体 Si 材料能带结构参数的影响, 在此基础上计算出单轴应变 Si 中平衡载流子浓度, 给出了物理意义明确的导带、价带有效态密度的表达式. 最后, 结合有效态密度和禁带宽度的表达式, 建立了[110]/(001)单轴应变 Si 本征载流子浓度模型. 本文的研究方法亦适用于建立(001)面任意应力方向上的应变 Si 本征载流子浓度模型, 并为相关单轴应变 Si 器件的设计、建模以及仿真提供了一定的理论参考.

**关键词:** [110]/(001)单轴应变 Si, 有效态密度, 本征载流子浓度

**PACS:** 71.20.-b, 73.20.At

## 1. 引言

应变 Si (strained-Si, SSi) 材料由于具有载流子迁移率高、能带结构可调, 并与当前主流的 Si 工艺技术相兼容等优异特性, 从而逐渐成为提高器件与电路性能的首选方案<sup>[1]</sup>. 相对于传统的双轴 (biaxial) 应变, 工艺致单轴 (uniaxial) 应变更有效的提高了 MOSFET 的性能, 尤其沿[110]方向单轴应变 Si pMOSFET 的性能得以极大提高<sup>[2,3]</sup>. 并且, 由于沿[110]方向施加应力使得 Si 材料的晶格发生了明显的弹性形变, 目前的单轴应变 MOSFET 技术大都在此方向上施以单轴应力, 以此来大幅提高超大规模集成电路 (VLSI) 的性能.

另外, 为了深入的研究应变 Si 器件性能, 则必须了解应变材料的特性. 作为基本的物理参量之一, 本征载流子浓度本身也包含了诸多重要的材料物理参数, 也是决定应变 Si 器件电学特性特性的参量之一, 具有比较重要的研究意义. 迄今为止国内外对应变 Si 器件的研究基本上集中在应变 Si 材料能带结构以及双轴应变 Si/SiGe 器件的结构优化等方面, 理论研究滞后于应用研究. 国内近年来在双轴应变材料的能带结构也进行了一些相关的工

作<sup>[4-6]</sup>. 据目前已报道的文献, 对于单轴应变 Si 材料本征载流子浓度仍缺乏系统的理论研究. 为此本文建立了(001)面沿[110]方向单轴应变 Si 本征载流子浓度的物理模型, 以便为相关 MOSFET 器件物理的理解, 器件的设计以及器件仿真建模提供一定的理论支持.

## 2. 模型建立与分析

根据半导体理论, 应变 Si 本征载流子浓度模型的建立同体 Si 相同, 需要确定其导带、价带有效态密度以及禁带宽度改变量, 其表达式为

$$n_{i, \text{SSi}} = \sqrt{N_{c, \text{SSi}} N_{v, \text{SSi}}} \exp\left(-\frac{E_{g, \text{Si}}}{2k_B T}\right) \exp\left(-\frac{\Delta E_{g, \text{SSi}}}{2k_B T}\right). \quad (1)$$

$E_{g, \text{Si}}$  为弛豫的体 Si 禁带宽度. 建立本征载流子浓度模型需确定应变张量以及导带、价带的相关能带结构参数. 下面逐一进行计算分析.

## 2.1. (001) 面单轴应变张量

应变张量的确定是计算应变 Si 能带结构参数乃至本征载流子浓度的必要前提条件. 我们设定初基原胞坐标系为  $(x, y, z)$ , 在辅助坐标系为  $(x', y',$

\* 国家部委资助项目 (批准号: 51308040203, 6139801), 中央高校基本科研业务费 (批准号: 72105499, 72104089) 和陕西省自然科学基金研究计划 (批准号: 2010JQ8008) 资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: SiGeBiCMOS@foxmail.com

$z'$ )下施加的任意方向的应力记为  $\sigma$ ,  $z'$  轴垂直于 (001) 平面, 且在  $(x', y', z')$  坐标系下, 该平面内的应力张量只有唯一元素  $\sigma'_{11} = \sigma$ , 该坐标系与初基原胞坐标系  $(x, y, z)$  二者可以通过矩阵  $U(\varphi)$  来实现坐标变换

$$U(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

其中,  $\varphi$  为应力方向与  $x$  轴的夹角. 在以上两个坐标系下应力的转换公式可表示为  $\sigma_{ij} = U_{\alpha i} U_{\beta j} \sigma'_{ij}$ , 下标  $i, j$  取 1, 2, 3. 在弹性限度范围内, 应变张量  $\varepsilon$  可由胡克定律  $\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl}$  算得,  $S_{ijkl}$  为弹性顺度系数张量, 由矩阵

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{12} & & & \\ s_{12} & s_{11} & s_{12} & & & \\ s_{12} & s_{12} & s_{11} & & & \\ & & & \frac{1}{4}s_{44} & 0 & 0 \\ & & & 0 & \frac{1}{4}s_{44} & 0 \\ & & & 0 & 0 & \frac{1}{4}s_{44} \end{pmatrix}$$

给出,  $s_{11}, s_{12}$  和  $s_{44}$  的数值由表 1 给出. 对于沿 [110] 方向的应力, 需令 (2) 式中的  $\varphi = \pi/4$ , 那末此时的应力张量可表示为

$$\varepsilon_{[110]} \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} = \sigma \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12}) & \frac{1}{4}s_{44} & 0 \\ \frac{1}{4}s_{44} & \frac{1}{2}(s_{11} + s_{12}) & 0 \\ 0 & 0 & s_{12} \end{pmatrix}. \quad (3)$$

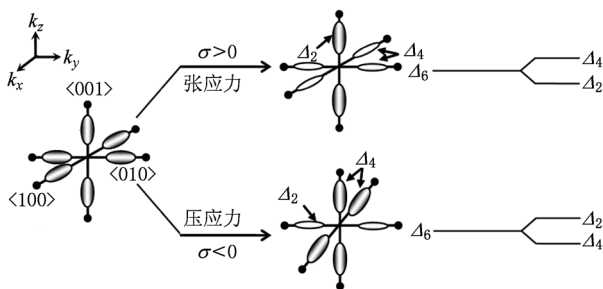


图 1 应变 Si 导带底能谷分裂示意图

## 2.2. 能带结构参数

对于弛豫的体 Si 材料, 导带底的等能面为沿 [100] 方向的 6 个旋转椭球面, 导带极小值位于 [100] 方向的布里渊区中心到其边界的 0.85 倍处的  $\Delta$  轴上. 当体 Si 材料受到单轴应力时, 晶格应变使 Si 导带结构发生变化, 相对于弛豫 Si 的导带带边, 由外加应力所导致的导带底能量的改变可用形势理论来描述<sup>[7]</sup>,

$$\Delta E_{C,i} = \Xi_d \text{Tr}(\varepsilon_{[110]}) + \Xi_u \varepsilon_{ii} = \Xi_d(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + \Xi_u \varepsilon_{ii}. \quad (4)$$

同样地, 式中下标  $i = 1, 2, 3$  分别代表主坐标系的三个坐标轴  $x, y, z$  的方向.  $\Xi_d, \Xi_u$  为体 Si 形势常数 (见表 1). 将 (3) 式代入 (4) 式, 在单轴应力作用下 Si 导带底能量的改变则可分别表示为

$$\Delta E_{C,1}^{<100>} = \Delta E_{C,2}^{<010>} = \Xi_d(s_{11} + 2s_{12})\sigma + \Xi_u(s_{11} + s_{12})\sigma/2, \quad (5)$$

$$\Delta E_{C,3}^{<001>} = \Xi_d(s_{11} + 2s_{12})\sigma + \Xi_u s_{12}\sigma,$$

其中标号  $<100>, <010>, <001>$  表示导带中 3 对等价能谷 (如图 1 所示). 显然, 施加  $\sigma > 0$  的张应力时, 2 个方向上导带底附近的能谷均分裂为一组 2 度简并能谷 ( $\Delta_2$ ) 和一组 4 度简并能谷 ( $\Delta_4$ ), 2 度简并的  $<001>$  能谷成为导带带边. 而施加  $\sigma < 0$  的压应力时, 能谷亦分裂为一组 2 度简并能谷和一组 4 度简并能谷, 但这时 4 度简并能谷 ( $<100> <010>$  能谷) 能量较低而成为导带带边. 所以对于本文来说, 无论施加张应力还是压应力, 导带能谷之间的能量分裂值  $\Delta E_{C,\text{split}}$  均可写为

$$\Delta E_{C,\text{split}} = \max\{\Delta E_{C,1}^{<100>}, \Delta E_{C,2}^{<010>}, \Delta E_{C,3}^{<001>}\} - \min\{\Delta E_{C,1}^{<100>}, \Delta E_{C,2}^{<010>}, \Delta E_{C,3}^{<001>}\}. \quad (6)$$

结合 (5), (6) 两式, 可得到: 当应力沿 [110] 方向时, 无论施加张应力还是压应力, 都有  $\Delta E_{C,\text{split}} = \Xi_u (s_{11} - s_{12}) |\sigma|/2$ .

在应力的作用下, 原来  $\Gamma$  点处 4 度简并的轻、重空穴带分离, 在 (001) 面内的所有晶向均分裂为一组 2 度简并能带  $V_1$  (称为价带边, 对应重空穴带 HH) 和一组 2 度简并能带  $V_2$  (称为次带边, 对应轻空穴带 LH). 为了获得应变 Si 材料价带带边 (即  $k = 0$  的  $\Gamma$  点处) 参数模型, 需采用结合形势理论的  $k \cdot p$  微扰法来求解  $\Gamma$  点处的薛定格方程. 在考虑到应变以及自旋耦合效应 (SO) 的薛定格方程  $H\psi_k = E(k)\psi_k$  中, 哈密顿量  $H = H_{k \cdot p} + H_{SO} + H_{\text{strain}}$ . 其中  $k \cdot p$  哈密顿量  $H_{k \cdot p}$ 、自旋耦合哈密顿量

$H_{s0}$ 以及应变哈密顿量  $H_{strain}$  均为  $6 \times 6$  矩阵<sup>[8]</sup>. 对  $H$  进行 Hermite 变换可将其化为对称矩阵, 其本征值为 3 个二重根, 利用 Euler 公式文献<sup>[8]</sup> 分别给出了  $V_1$  和  $V_2$  的能量表达式为

$$E_{V_1}(\mathbf{k}) = 2\sqrt{Q}\cos\left(\frac{\Theta}{3}\right) - \frac{p}{3},$$

$$E_{V_2}(\mathbf{k}) = 2\sqrt{Q}\cos\left(\frac{\Theta + 2\pi}{3}\right) - \frac{p}{3}, \quad (7)$$

其中,  $p, Q, \Theta$  分别为关于  $a_{ij}$  的函数, 而  $a_{ij}$  则是关于波矢  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  的函数, 对波矢  $\mathbf{k}$  以及应变张量  $\varepsilon_{ij}$  赋值就可以得到具体的  $E(\mathbf{k})$ - $k$  关系. 上述各个参数具体可参见文献<sup>[8]</sup>. 这里将  $a_{ij}$  重新定义为

$$a_{ij} = \begin{cases} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + l\varepsilon_{11} + m(\varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}), & i = j, \\ Nk_x k_y + n\varepsilon_{ij}, & i \neq j, \end{cases} \quad (8)$$

$L, M, N$  为价带 Luttinger 常数,  $l, m, n$  为形变势参数, 其值同样参见表 1. 据此,  $\Gamma$  点处  $V_1$  和  $V_2$  的能量分裂值可表示为  $\Delta E_{V,split} = E_{V_1}(\mathbf{k}=0) - E_{V_2}(\mathbf{k}=0)$ .

应变 Si 的禁带宽度  $E_{g,ssi}$  则由上移的重空穴带顶和下移的简并导带能谷所决定, 其值应小于未应变的体 Si, 因此无论施加张应力还是压应力, 禁带宽度改变量  $\Delta E_{g,ssi}$  均小于 0. 根据(5)式和(7)式, 那末在单轴应力作用下, (1)式中应变所导致的禁带宽度的改变量  $\Delta E_{g,ssi}$  则可写成

$$\Delta E_{g,ssi} = \min\{\Delta E_{C,1}^{<100>}, \Delta E_{C,2}^{<010>}, \Delta E_{C,3}^{<001>}\} - E_{V_1}(\mathbf{k}=0). \quad (9)$$

### 2.3. 本征载流子浓度

根据上述分析, (001) 面沿 [110] 晶向施加应力时, 导带中 6 度简并能谷受应力影响分裂为两组简并度不同的能谷, 其分裂能则导致了电子在能谷中的浓度分布的改变. 同样, 价带轻重空穴带的分裂能也改变了空穴在其中的分布. 为了得到导带和价带有效态密度的表达式, 首先需要计算平衡态载流子浓度. 在应力作用下导带底附近的量子态密度分别为

$$g_{c,i}(E) = M_i \times \frac{4\pi(2m_n)^{3/2}}{h^3} \times \sqrt{E - E_{C,i}}, \quad (10)$$

式中  $h$  为普朗克常数, 下标  $i = 1, 2$  代表  $\Delta_2, \Delta_4$  能谷,  $M_i$  为该能谷等效极小值的数目, 对于  $\Delta_2$  能谷,  $M = 2$ ; 对于  $\Delta_4$  能谷,  $M = 4$ .  $m_n$  为电子有效质量,  $E_{C,i}$  为能谷  $i$  的能量最小值, 对于导带最低能谷来说,  $E_{C,i}$  即为导带底能量  $E_{C,ssi}$ . 在单轴应力作用下,  $m_n$

可以认为是各项同性的, 且可以表示为  $m_n = (m_l \times m_{l//} \times m_{l\perp})^{1/3}$ , 其中,  $m_l$  为纵向有效质量,  $m_{l//}$  表示平行于应力方向的有效质量,  $m_{l\perp}$  则表示垂直于应力方向的有效质量, 其值为关于应力  $\sigma$  的函数<sup>[9]</sup>:

$$m_l = (0.918 - 0.0236\sigma^2)m_0,$$

$$m_{l//} = (0.196 - 0.016\sigma)m_0,$$

$$m_{l\perp} = (0.196 + 0.029\sigma)m_0. \quad (11)$$

至于导带电子服从何种统计分布, 我们做如下考虑: 当衬底掺杂浓度达到一定程度就会发生简并, 此时电子服从费密分布. 一般情况下, 掺硼的 p 型 Si 只有在  $N_A = 9.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  时发生简并, 通常在器件应用中衬底掺杂浓度低于此值, 因此本文假设电子服从玻尔兹曼分布. 考虑到应变所导致的导带能带分裂, 平衡状态下导带电子浓度可以表示为

$$n_0 = \int_{E_{C,ssi}}^{\infty} g_{c,1}(E)f_B(E) dE$$

$$+ \int_{E_{C,ssi} + \Delta E_{C,split}}^{\infty} g_{c,2}(E)f_B(E) dE$$

$$= \int_{E_{C,ssi}}^{\infty} M_1 \times \frac{4\pi(2m_n)^{3/2}}{h^3}$$

$$\times \exp\left(\frac{E_f - E}{k_B T}\right) \times \sqrt{E - E_{C,ssi}} dE$$

$$+ \int_{E_{C,ssi} + \Delta E_{C,split}}^{\infty} M_2 \times \frac{4\pi(2m_n)^{3/2}}{h^3}$$

$$\times \exp\left(\frac{E_f - E}{k_B T}\right)$$

$$\times \sqrt{E - (E_{C,ssi} + \Delta E_{C,split})} dE, \quad (12)$$

上式中, 对于沿 [110] 方向的张应力, 下标 1 代表 2 度简并能谷  $\Delta_2$ ; 标号 2 代表 4 度简并能谷  $\Delta_4$ . 对于压应力则正好相反 (如图 1 所示).  $f_B(E)$  为玻尔兹曼分布函数,  $k_B$  为玻尔兹曼常数. 对(12)式进行计算, 可求得平衡态电子浓度的表达式

$$n_0 = 2 \left[ M_1 + M_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_{C,split}}{k_B T}\right) \right]$$

$$\times \left( \frac{2\pi m_n k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \times \exp\left(\frac{E_f - E_{C,ssi}}{k_B T}\right)$$

$$= 2 \left( \frac{2\pi m_{dn} k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_f - E_{C,ssi}}{k_B T}\right)$$

$$\equiv N_{C,ssi} \exp\left(\frac{E_f - E_{C,ssi}}{k_B T}\right). \quad (13)$$

式中,  $m_{dn} = \left[ M_1 + M_2 \exp\left(-\frac{\Delta E_{C,split}}{k_B T}\right) \right]^{2/3} \times m_n$  即为应变 Si 导带底电子态密度有效质量. 而在应变 Si 的

价带中起作用的能带主要是价带边  $V_1$  和次带边  $V_2$ , 对(7)式中的价带  $E(\mathbf{k})$ - $k$  模型求二阶导数就可得到价带边、次带边空穴的有效质量, 分别记为  $m_{p,v1}, m_{p,v2}$ , 则价带顶附近量子态密度为

$$g_{v,i}(E) = \frac{4\pi(2m_{p,i})^{3/2}}{h^3} \times \sqrt{E - E_{V,i}} \quad (14)$$

同导带的情况类似, 下标  $i = 1, 2$  代表  $V_1$  或  $V_2$  能带. 同样地, 对于能带  $V_1$  来说,  $E_{V,i}$  即为价带边能量  $E_{V,ssi}$ . 这样我们就可以采用与导带平衡载流子浓度相同的计算方法, 同时注意到价带空穴的分布为  $[1 - f_B(E)]$ , 可求得平衡态价带空穴浓度为

$$\begin{aligned} p_0 &= 2 \left[ (m_{p,v1})^{3/2} + (m_{p,v2})^{3/2} \exp\left(-\frac{\Delta E_{V,split}}{k_B T}\right) \right] \\ &\times \left( \frac{2\pi k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \times \exp\left(\frac{E_{V,ssi} - E_f}{k_B T}\right) \\ &= 2 \left( \frac{2\pi m_{dp} k_B T}{h^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_{V,ssi} - E_f}{k_B T}\right) \\ &\equiv N_{V,ssi} \exp\left(\frac{E_{V,ssi} - E_f}{k_B T}\right), \end{aligned} \quad (15)$$

式中,  $m_{dp} = \left[ (m_{p,v1})^{3/2} + (m_{p,v2})^{3/2} \exp\left(-\frac{\Delta E_{V,split}}{k_B T}\right) \right]^{2/3}$

即为应变 Si 价带顶空穴态密度有效质量. 此外, 值得注意的是, 根据(7)式中的价带  $E(\mathbf{k})$ - $k$  模型求得的价带边、次带边空穴的有效质量  $m_{p,v1}, m_{p,v2}$  具有明显的各向异性. 3 个对称晶向的有效质量计算结果如图 2 所示. 但是, 对于特定的半导体材料, 其本征载流子浓度却是一定的, 即不同的晶向的材料具有相同的本征载流子浓度值. 对于本文的应变 Si 材料, 则需将各向异性有效质量  $m_{p,v1}, m_{p,v2}$  进行各向同性近似(即球型近似), 近似后的结果由表 2 给出. 从表中可以看出, 本文得到的弛豫 Si 的价带边和次带边的有效质量与轻重空穴带的公认值 ( $m_{hh} = 0.49m_0, m_{lh} = 0.16m_0$ ) 很接近, 间接地证明了图 2 与表 2 的计算结果的正确性. 还应注意到当压应力大约  $\geq 0.5$  GPa 时, 表 2 中次带边轻空穴有效质量开始大于带边的重空穴有效质量, 即  $m_{p,v2} > m_{p,v1}$ , 且  $m_{p,v2}$  随应力的增大而不断增大, 反之,  $m_{p,v1}$  随应力的增大而不断减小, 这导致了传统意义上的“轻空穴”、“重空穴”的概念失效. 也正因为如此, 如引言中所述, 如今大多数 MOSFET 器件尤其是 pMOSFET 都选用 [110] 方向来施加应力以提高器件迁移率.

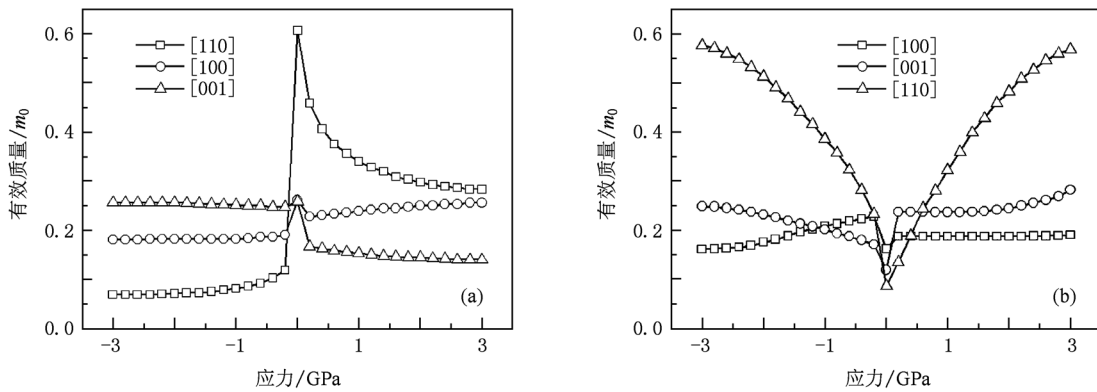


图 2 [110] 方向应力作用下 (a) 价带边, (b) 次带边各项异性空穴有效质量

表 1 本文模型参数取值

参数	取值	参数	取值	参数	取值
$s_{11}/(\text{cm}^2/\text{dyn})$	$7.69 \times 10^{-13}$	$L/\text{eV}$	-5.78	$n/\text{eV}$	-5.89
$s_{12}/(\text{cm}^2/\text{dyn})$	$-2.44 \times 10^{-13}$	$M/\text{eV}$	-3.44	$\Xi_d/\text{eV}$	1.75
$s_{44}/(\text{cm}^2/\text{dyn})$	$1.25 \times 10^{-12}$	$N/\text{eV}$	-8.64	$\Xi_u/\text{eV}$	9.16
$\alpha/(\text{eV}/\text{K})$	$4.73 \times 10^{-4}$	$l/\text{eV}$	-0.15	—	—
$\beta/\text{K}$	636	$m/\text{eV}$	6.84	—	—

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

表2 [110]/(001)应变 Si 价带边和次带边各向同性有效质量

应力	-3	-2.5	-2	-1.5	-1	-0.5	0	0.5	1	1.5	2	2.5	3
$m_{p,v1}$	0.151	0.151	0.152	0.153	0.156	0.165	0.512	0.440	0.433	0.430	0.429	0.428	0.327
$m_{p,v2}$	0.421	0.421	0.420	0.418	0.414	0.403	0.169	0.264	0.324	0.351	0.363	0.369	0.373

\* 应力的单位为 GPa,有效质量的单位为  $m_0$ .

以上的计算均设定温度  $T = 300$  K,实际上本征载流子浓度在一定程度上也依赖于温度  $T$ ,为了涵盖温度对本征载流子浓度的影响,需将(1)式中的弛豫 Si 材料的禁带宽度  $E_{g,Si}$  修正为  $E_{g,Si}(T) = E_{g,Si}(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$ , 其中  $\alpha$  和  $\beta$  为温度系数,其值同样由表 1 给出. 这里  $E_{g,Si}(0) = 1.17$  eV 表示温度为 0 K 时的禁带宽度. 至此,将(9)式以及(13)式中的  $N_{c,SSi}$ , (15)式的  $N_{v,SSi}$  代入到(1)式中,遂建立了完备的[110]/(001)单轴应变 Si 本征载流子浓度的物理模型.

尽管温度对本征载流子浓度有一定影响,但是温度对应变 Si 能带结构参数的影响仅限于上文所述的禁带宽度,而从模型公式来看,其对有效态密度、态密度有效质量以及本征载流子浓度的影响也只限于含有  $k_B T$  的项,这与弛豫的体 Si 材料类似. 根据半导体物理,温度越高,禁带宽度越窄,本征载流子浓度随温度迅速增加,在高温下,热产生是本征载流子浓度增加的主要原因. 相比之下,单轴应变所包含的物理含义更加丰富,对能带结构、本征载流子浓度的影响也更加重要,因此下面在室温 300 K 下着重讨论单轴应变对本征载流子浓度的影响.

图 3 最终给出了不同应力下本征载流子浓度的计算结果. 从图中可以看出,无论施加张应力还是压应力,当应力的数值较大时,  $n_{i,SSi}$  均随应力的增大而增大,另外本文所得到的弛豫 Si 材料的本征载流子浓度与理论值  $0.78 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$  比较接近,据此可以间接说明本文理论模型的正确性. 需要注意的是,在小于 1 GPa 的张/压应力下,  $n_{i,SSi}$  的变化十分缓慢,曲线比较平坦,而当应力大于 1 GPa 时,  $n_{i,SSi}$  则迅速增大,尤其当压应力的大小超过 3 GPa 时,  $n_{i,SSi}$  相对于弛豫 Si 材料增大了一个数量级以上. 根据(1)式,我们知道  $n_{i,SSi}$  是由有效态密度和禁带宽度二者决定的,因此这个现象从物理上可以解释为:应力在小于 1 GPa 时,分裂能  $\Delta E_{c,split}$  和  $\Delta E_{v,split}$  均随应力的增大而增大,这样(13)和(15)式中的态密度有效质量  $m_{dn}$  和  $m_{dp}$  以指数形式减小,有

有效态密度  $N_{c,SSi}$  与  $N_{v,SSi}$  亦随之减小. 另一方面,(1)式中的指数项随禁带宽度的减小而增大,只不过增大与前述的减小量可以相比拟,从而导致了  $n_{i,SSi}$  增加的十分缓慢. 当应力大于 1 GPa 时,随着  $\Delta E_{c,split}$  和  $\Delta E_{v,split}$  的不断增大,  $m_{dn}$  和  $m_{dp}$  表达式中的指数项趋近于 0,  $N_{c,SSi}$  与  $N_{v,SSi}$  随之恒定,不再减小,这说明导带底和价带顶均被载流子所占据,并且已达到饱和. 但是,此时(1)式中的指数项仍随  $E_{g,SSi}$  的减小而不断增大,因此导致了大应力下  $n_{i,SSi}$  的继续大幅增加. 综上所述,当施加较小应力时,  $n_{i,SSi}$  主要由有效态密度以及禁带宽度二者共同决定;当施加较大应力时,  $n_{i,SSi}$  则主要由禁带宽度所决定.

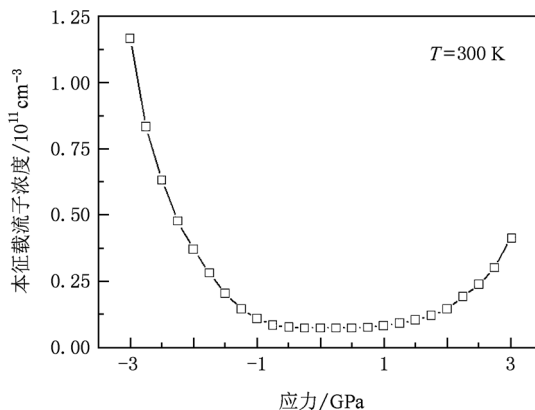


图3 室温下本征载流子浓度随应力的变化

### 3. 结 论

本文首先讨论了在沿[110]方向的单轴应力对体 Si 材料能带结构参数的影响,给出了物理意义明确的导带、价带有效态密度的表达式. 在此基础上,建立了 300 K 下[110]/(001)单轴应变 Si 本征载流子浓度模型. 计算结果表明:  $n_{i,SSi}$  在较大应力下随张/压应力的增大而增大,当施加较小应力时,  $n_{i,SSi}$  变化缓慢,其值主要由有效态密度以及禁带宽度二者共同决定;当施加较大应力时,  $n_{i,SSi}$  则有数量级的变化,其值主要由禁带宽度决定. 由于单轴应变 Si 的  $n_{i,SSi}$  值缺乏报道,而本文所得到的弛豫 Si 材料的

本征载流子浓度与公认值比较接近,因此可以间接说明本文模型的正确性. 本文是基于半导体物理理论建立的模型,其研究方法以及本征载流子的变化

趋势对相关材料和器件具有一定的参考意义. 相信随着对全能带 (full-band) 数值计算方法研究的不断深入,本征载流子的模型计算结果将会更加精确.

- [1] Zhang Z F, Zhang H M, Hu H Y, Xuan R X, Song J J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4948 (in Chinese) [张志锋、张鹤鸣、胡辉勇、宣荣喜、宋建军 2009 物理学报 **58** 4948]
- [2] Thompson S E, Sun G Y, Choi Y S 2006 *IEEE Trans. Electron Devices* **53** 1010
- [3] Shifren L, Wang X, Matagne P 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 6188
- [4] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827
- [5] Song J J, Zhang H M, Dai 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]
- [6] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Xuan R X, Dai X Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7947 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、胡辉勇、宣荣喜、戴显英 2009 物理学报 **58** 7947]
- [7] Van der Walle C G 1989 *Phys. Rev. B* **39** 1871
- [8] Song J J, Zhang H M, Dai 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]
- [9] Dhar S, Ungersböck E, Kosina S, Grasser T, Selberherr S 2007 *IEEE Trans. Nano.* **6** 97

## Model of intrinsic carrier concentration of $[110]/(001)$ -uniaxial strained Si\*

Wang Guan-Yu<sup>†</sup> Ma Jian-Li Zhang He-Ming Wang Xiao-Yan Wang Bin

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

(Received 7 October 2010; revised manuscript received 30 October 2010)

### Abstract

In this paper, the effect of uniaxial stress along  $[110]$  direction on the energy-band structure parameters of  $(001)$ -bulk Si is discussed, thereby we investigate the equilibrium carrier concentration and the expressions of effective density of state (DOS) in conduction and valence band, which contain explicit physical significance. The model of intrinsic carrier concentration is proposed by combining the expressions of DOS and bandgap. The proposed method in this paper is also applicable to modeling the intrinsic carrier concentration under the action of uniaxial stress along an arbitrary direction, and provides some references for design, modeling and simulation of similar uniaxial strained Si devices.

**Keywords:**  $[110]/(001)$ -uniaxial strained Si, effective density of state, intrinsic carrier concentration

**PACS:** 71.20.-b, 73.20.At

\* Project supported by National Ministries and Commissions (Grant Nos. 51308040203, 6139801), the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant Nos. 72105499, 72104089), and Natural Science Basic Research Plan in Shaanxi Province of China (Grant No. 2010JQ8008)

<sup>†</sup> E-mail: SiGeBiCMOS@foxmail.com