

应变 Ge/Si_{1-x}Ge_x 价带色散模型*戴显英[†] 杨程 宋建军 张鹤鸣 郝跃 郑若川

(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)

(2012 年 1 月 11 日收到; 2012 年 2 月 15 日收到修改稿)

基于 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论, 通过引入应变哈密顿量作为微扰, 建立了双轴应变 Ge/Si_{1-x}Ge_x 价带色散关系模型. 模型适于任意晶向弛豫 Si_{1-x}Ge_x 虚衬底上的应变 Ge 价带结构, 通过该模型可获得任意 $\mathbf{k}$ 方向应变 Ge 的价带结构和空穴有效质量. 模型的 Matlab 模拟结果显示, 应变 Ge/Si_{1-x}Ge_x 价带带边空穴有效质量随 Ge 组分的增加而减小, 其各向异性比弛豫 Ge 更加显著. 本文研究成果对 Si 基应变 Ge MOS 器件及集成电路的沟道应力与晶向的设计有参考价值.

关键词: 应变 Ge, 价带结构, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理论, 色散关系模型

PACS: 71.15.-m, 71.70.Fk

1 引言

Ge(锗)的电子与空穴迁移率分别是 Si(硅)的 2.8 倍和 4.2 倍, 其空穴迁移率是所有半导体中最高的^[1]. 与应变 Si 相似, 应变 Ge 的载流子迁移率也有较大的提升, 故应变 Ge 沟道 p-MOSFET 应比体硅 p-MOSFET 具有更高的空穴迁移率^[2]. 因而, 使用应变 Ge 材料作为导电沟道, 将会大大提高 Si 基 CMOS 器件与集成电路的性能. 由于 Ge 及应变 Ge 优异的材料特性, 以及 Ge 及应变 Ge 技术与标准 Si 工艺完全兼容的特性, 因而 ITRS (国际半导体技术路线图) 把 Ge 及应变 Ge 作为 16 nm 及以下工艺节点 Si 基 CMOS 器件及集成电路用来增强沟道载流子驱动能力的最佳沟道材料^[3,4].

国内外有关应变 Ge 技术的研究刚刚开始, 主要集中在 Si 基应变 Ge 沟道 pMOS 器件的制备研究^[5]. 有研究报道, 利用较厚 Si 帽层或厚 SiO₂ 栅介质, Si 基埋沟应变 Ge pMOS 的空穴迁移率可提高 6—8 倍^[6,7]. 能带结构是应变 Ge 材料的基本属性, 更是设计高速、高性能 Si 基应变 Ge 沟道 CMOS 器件与电路的重要理论依据, 但目前对应变 Ge 能带结构的研究尚未见有报道, 仅有应变 Si

和应变 SiGe 能带结构的有关研究报道^[8,9].

本文基于 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论, 通过引入应变哈密顿量作为微扰, 建立了适用于弛豫 Si_{1-x}Ge_x 衬底上任意晶向的双轴应变 Ge 的价带色散关系模型, 得到了应变 Ge/Si_{1-x}Ge_x 的价带结构及空穴有效质量, 为 Si 基应变 Ge 沟道 CMOS 器件及集成电路的设计提供参考价值.

2 应变 Ge 的应变哈密顿量模型

2.1 应变张量 ϵ

对于任意晶向弛豫 SiGe 虚衬底上生长的应变 Ge, 其应变哈密顿量的确定首先需要计算其应变张量 ϵ . 为了讨论的方便, 应建立辅助的坐标系 (x', y', z') , 其中 z' 轴垂直衬底的表面. 该坐标系与初基原胞坐标系 (x, y, z) 的变换可通过矩阵 U 实现.

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

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号:61398) 资助的课题.

[†] E-mail: xydai@xidian.edu.cn

式中, θ 和 ϕ 是 z' 轴相对于 (x, y, z) 坐标系的极角和方位角. 由于晶格失配, 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^[4,7]. 面内应变张量 $\varepsilon_{\parallel}$ 可由 Vegard 定则确定^[10]:

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

式中, a_{Ge} 是应变 Ge 的晶格常数, $a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}$ 是弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 虚衬底的晶格常数, $a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}$ 可由 Si 和 Ge 晶格常数的线性插值获得^[10]. 于是得到^[11]

$$\varepsilon'_{11} = \varepsilon'_{22} = \varepsilon_{\parallel}, \quad (3)$$

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

由于外延层在垂直衬底的方向上没有受到外力 T 的作用, 沿该方向的应力分量为零, 即

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

在线性弹性范围内, 应力与应变张量满足胡克定律, 存在如下关系

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

其中, $\alpha, \beta = 1, 2, 3$, $C'_{\alpha\beta ij}$ 是 (x', y', z') 坐标系下的弹性劲度系数. 对于 $(\alpha\beta) = (33), (23), (13)$, 根据 (5) 和 (6) 式, 可以得到

$$\begin{aligned} C'_{33ij} \varepsilon'_{ij} &= 0, \\ C'_{23ij} \varepsilon'_{ij} &= 0, \\ C'_{13ij} \varepsilon'_{ij} &= 0. \end{aligned} \quad (7)$$

对于 $(ij) = (11), (22), (12)$, ε'_{ij} 是已知的. 利用张量对称性, 并对 (ij) 展开求和, (8) 式变为

$$\begin{aligned} &C'_{\alpha\beta 33} \varepsilon'_{33} + 2C'_{\alpha\beta 23} \varepsilon'_{23} + 2C'_{\alpha\beta 13} \varepsilon'_{13} \\ &= -(C'_{\alpha\beta 11} + C'_{\alpha\beta 22}) \varepsilon_{\parallel}. \end{aligned} \quad (8)$$

上式写为矩阵形式为

$$\begin{bmatrix} C'_{3333} & C'_{3323} & C'_{3313} \\ C'_{2333} & C'_{2323} & C'_{2313} \\ C'_{1333} & C'_{1323} & C'_{1313} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon'_{33}/2 \\ \varepsilon'_{23} \\ \varepsilon'_{13} \end{bmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) - E_k'^2 & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_x k_y & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) - E_k'^2 & Nk_y k_z \\ Nk_x k_z & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) - E_k'^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (14)$$

式中, L, M, N 可由实验来确定^[11]. 求解该矩阵的本征值, 就可以建立未应变 Ge 不考虑自旋轨道耦合的价带色散关系.

应变就是晶格发生了位移, 体现在色散关系上就是波矢 $\mathbf{k}$ 多了一个应变变量, 而其本征能量值也会发生相应变化. 基于这一思想, 应变哈密顿量应为类似于 (14) 式的一个表达式^[13], 即

$$= -\frac{\varepsilon_{\parallel}}{2} \begin{bmatrix} C'_{3311} + C'_{3322} \\ C'_{2311} + C'_{2322} \\ C'_{3111} + C'_{3122} \end{bmatrix}. \quad (9)$$

由于弹性劲度系数 $C_{\alpha\beta ij}$ 是 (x, y, z) 坐标系的 $C'_{\alpha\beta ij}$. 需要通过坐标变化来求取. 利用 (1) 式的变换矩阵 U 可得

$$C'_{\gamma\delta kl} = U_{\alpha\gamma} U_{\beta\delta} U_{ik} U_{jl} C_{\alpha\beta ij}, \quad (10)$$

式中弹性劲度系数张量 $C_{\alpha\beta ij}$ 形式为

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & c_{44} & 0 & 0 \\ & & & & c_{44} & 0 \\ & & & & & c_{44} \end{pmatrix} \quad (11)$$

其中, 弹性劲度系数分量 C_{11}, C_{12} 和 C_{44} 见表 1.

为了使表达式简洁、方便应用, 定义了泊松比 σ 和剪切系数 τ 两个物理量, 即

$$\sigma = -\frac{\varepsilon_{\parallel}}{\varepsilon'_{33}}, \quad \tau = \frac{\sqrt{(\varepsilon'_{13})^2 + (\varepsilon'_{23})^2}}{\varepsilon_{\parallel}}, \quad (12)$$

对 (x', y', z') 坐标系下的应变张量进行坐标变换, 就可得到 (x, y, z) 坐标系下的应变张量, 变换公式为

$$\varepsilon'_{\alpha\beta} = U_{i\alpha} U_{j\beta} \varepsilon_{ij}. \quad (13)$$

2.2 应变哈密顿量

金刚石结构的 Ge 具有 Oh 对称点群, 不考虑自旋轨道耦合作用时, 未应变 Ge 价带顶处为三度简并态, 其 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量表达式为

表 1 本文模型所用参数

参数	参考文献		
Si 晶格常数 $a_{\text{Si}}/\text{\AA}$	5.431	[1]	
Ge 晶格常数 $a_{\text{Ge}}/\text{\AA}$	5.658	[1]	
$C_{11}, C_{12}, C_{44}/10^6 \text{ N}\cdot\text{cm}^{-2}$	16.56	6.39	7.95 [8]
$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 参数 L, M, N	-30.53	-4.64	-33.64 [12]
$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 参数 $a, b, c/\text{eV}$	2.0	-2.2	-4.4 [13]

$$H_S = \begin{pmatrix} l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{xy} & n\varepsilon_{zx} \\ n\varepsilon_{xy} & l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{yz} \\ n\varepsilon_{zx} & n\varepsilon_{yz} & l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}) \end{pmatrix}, \quad (15)$$

其中, l, m 和 n 由形变势参数 a, b, c 确定^[12], 即

$$a = \frac{l+2m}{3}, \quad b = \frac{l-m}{3}, \quad c = \frac{n}{\sqrt{3}}. \quad (16)$$

3 应变 Ge 价带色散关系模型

为了获得更为精细的应变 Ge 价带结构, 必须考虑自旋轨道耦合的作用. 首先将 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量和应变哈密顿量从单群态的形式转变为双群态的形式, 即,

$$H_{\text{KP}} = \begin{bmatrix} H & 0_{3 \times 3} \\ 0_{3 \times 3} & H \end{bmatrix} \begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix}, \quad (17)$$

$$H_{\text{Str}} = \begin{bmatrix} H_S & 0_{3 \times 3} \\ 0_{3 \times 3} & H_S \end{bmatrix} \begin{matrix} \uparrow \\ \downarrow \end{matrix}, \quad (18)$$

然后加入自旋轨道耦合哈密顿量 H_{SO} , 求解 $H_{\text{KP}} + H_{\text{Str}} + H_{\text{SO}}$ 的本征值, 建立应变 Ge 的色散关系. 自旋轨道耦合哈密顿量为

$$H_{\text{SO}} = -\frac{\Delta}{3} \begin{bmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i & i & 0 & 0 \\ -1 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (19)$$

考虑到 6×6 的 $H_{\text{KP}} + H_{\text{Str}} + H_{\text{SO}}$ 久期行列式为对称行列式, 其能量本征解必为 3 个 2 重根. 因此, 假设矩阵的本征值为 E , 可以将该 6×6 对称行列

式降为 3 次幂的特征多项式, 并令其为零, 即

$$E^3 + pE^2 + qE + r = 0, \quad (20)$$

式中, 多项式系数 p, q 和 r 表达式如下

$$\begin{cases} p = \Delta - (a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\ q = a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2 - (2\Delta/3)(a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\ r = a_{11}a_{23}^2 + a_{22}a_{13}^2 + a_{33}a_{12}^2 - a_{11}a_{22}a_{33} - 2a_{12}a_{23}a_{13} + (\Delta/3)(a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2), \end{cases} \quad (21)$$

式中, a_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) 是矩阵 $\mathbf{H}_a$ 的元素. 利用计算机辅助计算并配合使用欧拉公式, 将 (20) 式的实数根通式解的实部提取出来, 最终建立了应变 Ge 的价带色散关系模型, 即

$$\begin{cases} E_{v1} = 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta}{3}\right) - \frac{p}{3}, \\ E_{v2} = 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta - 2\pi}{3}\right) - \frac{p}{3}, \\ E_{v3} = 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta + 2\pi}{3}\right) - \frac{p}{3}, \end{cases} \quad (22)$$

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

4 应变 Ge 价带结构

图 1 至图 5 是采用 MATLAB 软件工具计算得到的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 虚拟衬底上弛豫 Ge 及应变 Ge 的价带结构能带图, 由图可以看出, 随着 Ge 组分减小,

价带顶的重空穴带和轻空穴带逐渐分裂. 重空穴带上移, 称为带边, 轻空穴带和自旋轨道耦合带下移, 分别称为子带边和次带边.

图 1 显示, 弛豫 Ge 的价带带边 (重空穴带) 和子带边 (轻空穴带) 在 $k = 0$ 极值点处简并, 且沿 [001] 和 [100] 两个晶向的价带结构对称, 相应的空穴有效质量也相同.

图 2 和图 3 表明, 应变引起了 Ge 的价带带边和子带边的劈裂, 消除了价带带边的简并度. 与弛豫 Ge 不同的是, 应力的作用下, 同一晶向族内沿 [001] 和 [100] 两个晶向的应变 Ge 价带结构不

再对称, 其相应的空穴有效质量亦不相同. [101] 和 [111] 晶向的带边最大值比弛豫 Ge 时有所提高, 并且随 Ge 组分 x 的增大而提高. 自旋轨道耦合能级比弛豫 Ge 时有所降低, 并且随 Ge 组分 x 的减小而降低, 即随应力的增大而降低.

图 4 和图 5 分别为应变 Ge/(101) $\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$ 和应变 Ge/(111) $\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$ 沿 [100], [001], [101] 和 [111] 4 个晶向的价带结构, 与图 1 所示的弛豫 Ge 价带结构比较, 在应力的作用下, 沿 [100] 和 [001] 晶向的价带结构及相应的空穴有效质量产生了与 (100) 面相同的变化趋势.

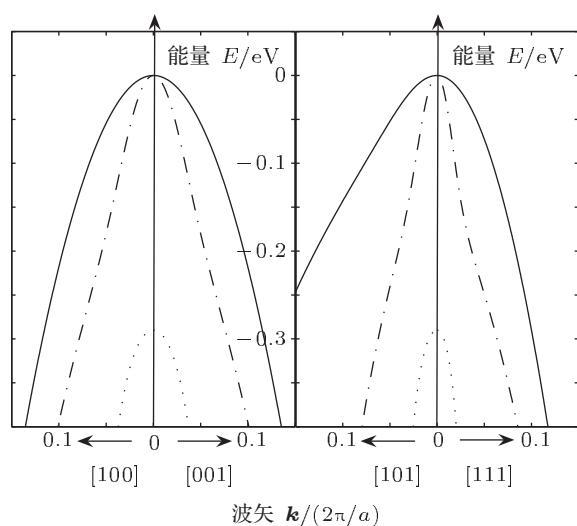


图 1 弛豫 Ge 价带能带结构

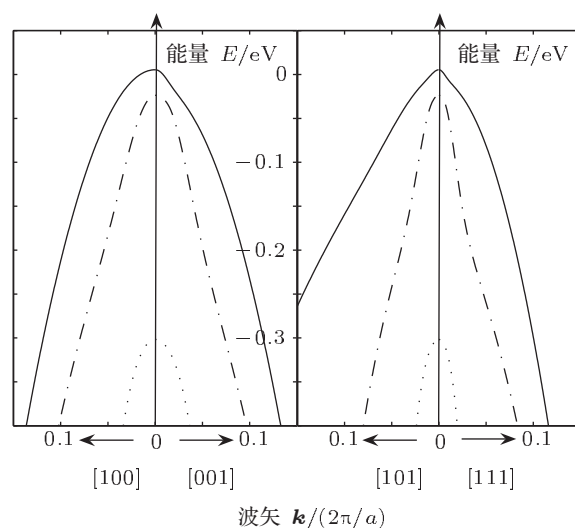


图 2 应变 Ge/(100)Si_{0.1}Ge_{0.9} 价带能带结构

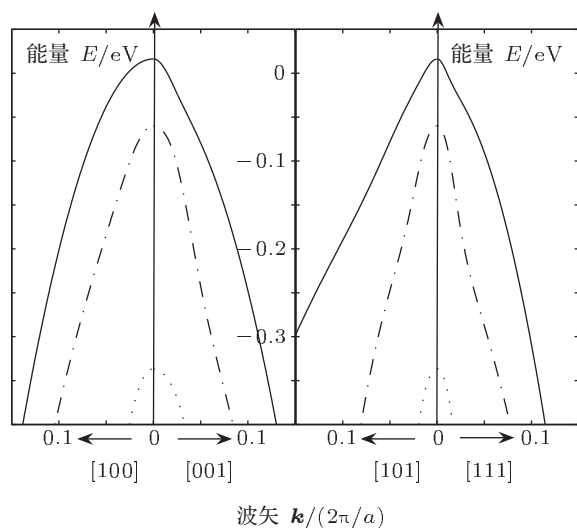


图 3 应变 Ge/(100)Si_{0.3}Ge_{0.7} 价带能带结构

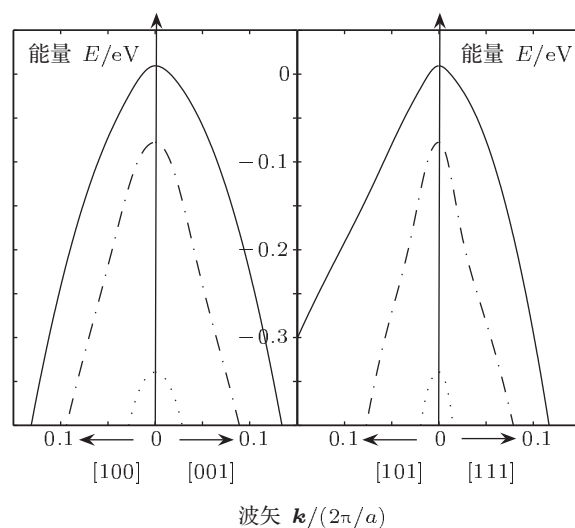


图 4 应变 Ge/(101)Si_{0.3}Ge_{0.7} 价带能带结构

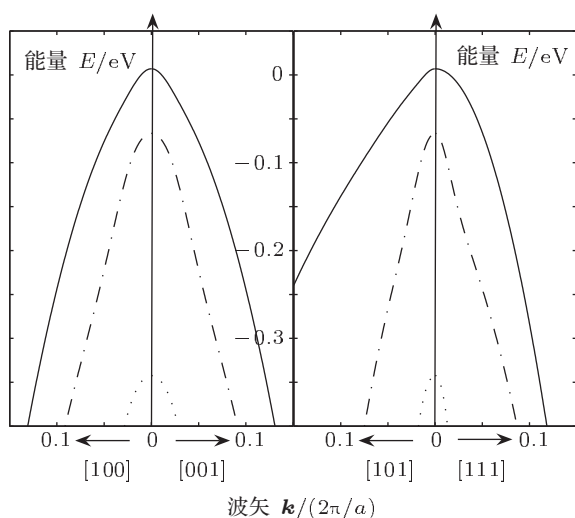
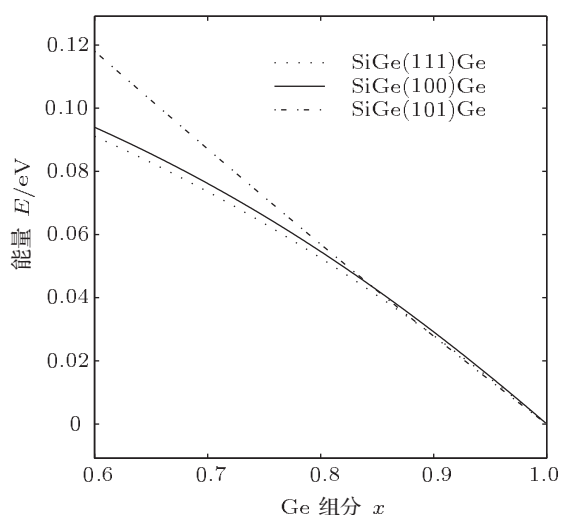
图5 应变 Ge/(111)Si_{0.3}Ge_{0.7} 价带能带结构图6 应变 Ge/Si_{1-x}Ge_x 价带带边劈裂能与 Ge 组分的关系

图6是应变 Ge/Si_{1-x}Ge_x 价带带边劈裂能与 Ge 组分 x 的关系,从图中可以看出,价带带边劈裂能随着 Ge 组份 x 的增加而逐渐减小.在相同 Ge 组分 x 的情况下,Ge/(101)Si_{1-x}Ge_x 的价带带边劈裂能最大,而 Ge/(111)Si_{1-x}Ge_x 的价带带边劈裂能最小.

5 空穴有效质量

图7为 Ge 组分 $x = 0.8$ 时, Si_{1-x}Ge_x 虚拟衬底上应变 Ge 价带带边及子带边距离各自最高能量值为 50 meV 的等能图.由图可见,带边和子带边都表现出了各向异性,而且带边的各向异性比较严重,子带边接近各向同性.

根据半导体能带理论^[14],对上述应

变 Ge/Si_{1-x}Ge_x 价带结构模型的带边能量进行二阶微分,可得到带边空穴有效质量.表2给出了 Ge 组分 x 分别为 1(弛豫 Ge)、0.9 和 0.7 时,应变 Ge/Si_{1-x}Ge_x 沿 [001], [100], [101] 和 [111] 晶向的价带带边附近有效质量.

由表2可知,弛豫 Ge 沿 [100] 和 [111] 晶向的带边空穴有效质量计算值分别为 0.2155 和 0.4862,与文献[10]报道的 0.21 和 0.5 结果吻合地很好.

由表2可以看出,弛豫 Ge 价带结构是各向异性的,即沿不同 $\mathbf{k}$ 矢方向(例如 $\langle 001 \rangle$, $\langle 101 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 三个典型晶向族方向)的弛豫 Ge 空穴有效质量不同,而同一晶向不同晶面的空穴有效质量是相同的.这是因为弛豫 Ge 的等能图是中心对称图形,所以关于原点对称的晶向,其价带结构都相同,故空穴有效质量也相同.

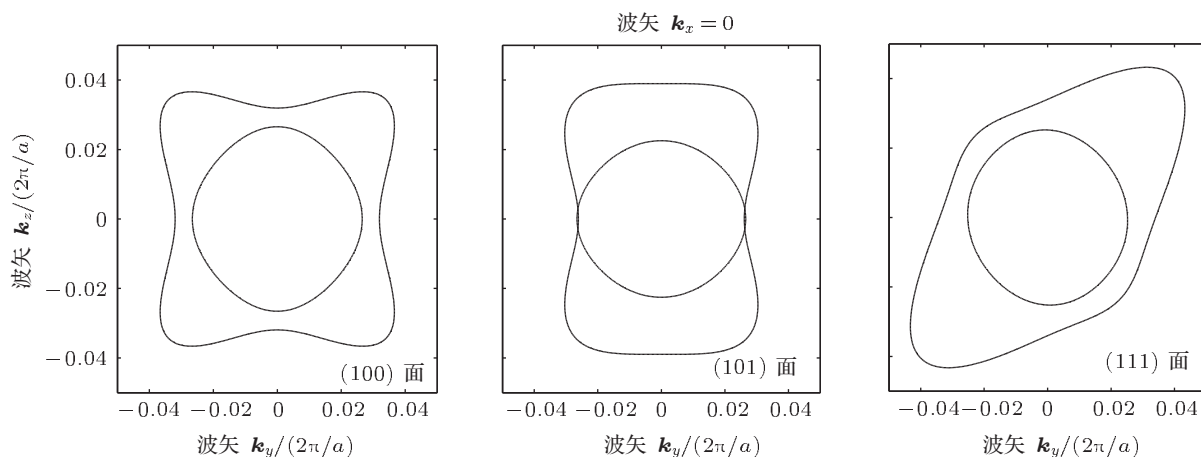
图7 应变 Ge/Si_{0.2}Ge_{0.8} 带边和子带边 50 meV 等能图

表 2 弛豫和应变 $\text{Ge/Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带边空穴有效质量

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 组分 晶面	$x = 1.0$			$x = 0.9$			$x = 0.7$		
	(100)	(101)	(111)	(100)	(101)	(111)	(100)	(101)	(111)
晶向 [001]	0.2155	0.2155	0.2155	0.1368	0.1433	0.1556	0.0776	0.1187	0.0864
晶向 [100]	0.2155	0.2155	0.2155	0.2155	0.2012	0.2276	0.2155	0.2133	0.2167
晶向 [101]	0.4124	0.4124	0.4124	0.2997	0.3045	0.3144	0.1311	0.1579	0.1952
晶向 [111]	0.4862	0.4862	0.4862	0.4108	0.4487	0.3984	0.3112	0.3563	0.3024

而应变 Ge 材料的价带结构在应力的作用下发生改变, 其各向异性更加显著, 即同一晶向内不同晶面的空穴有效质量也不相同. 例如, 应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [001] 晶向与 [100] 晶向的空穴有效质量不同. 这是因为, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底上异质外延生长产生的应力使得立方晶系的弛豫 Ge 变为四方晶系应变 Ge, 对称性的降低消除了价带顶简并, 引起了带边与子带边的分裂. 带边和子带边能级之间的相对移动改变了它们之间的耦合相互作用力, 使得价带带边和子带边沿不同 $\mathbf{k}$ 矢方向的曲率发生了变化, 相应的空穴有效质量随之改变.

6 结 论

本文在引入了应变哈密顿量作为微扰的基础上, 采用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论模型, 严格推导并最终建立了应变 Ge 价带的色散关系模型, 该模型适于

任意晶向弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 虚衬底上的应变 Ge 价带结构. 通过该模型的 MATLAB 计算, 给出了应变 Ge 的带边和子带边等能面, 获得了任意 $\mathbf{k}$ 方向应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的空穴有效质量. 这些研究结果将对 Si 基应变 Ge 沟道 MOS 器件的设计提供有价值的参考.

与弛豫 Ge 相比, 应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带边空穴有效质量的各向异性更加显著. 在 Ge 组分相同, 即应变相同的情况下, 应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [001] 晶向的带边空穴有效质量是各晶向中最小的. 与弛豫 Ge [001] 晶向带边空穴有效质量相比, 随 Ge 组分的减小 (相应地应变增大), 应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ [001] 晶向带边空穴有效质量明显减小. 因此, 从减小空穴有效质量、增强空穴迁移率的应用角度出发, 基于应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料的 Si 基 Ge 沟道 pMOS 器件应以其 [001] 晶向作为导电沟道的首选方案.

- [1] Tu H L (Translator) 2010 *Gemanium-based Technologies from Materials to Devices* (Beijing: Metallurgical Industry Press) p326 (in Chinese) [C. 克莱, E. 西蒙著, 屠海令等译 2010 半导体锗材料与器件 (北京: 冶金工业出版社) 第 326 页]
- [2] Nayak D K, Woo J C S, Park J S, Wang K L, Macwilliams K P 1991 *Electron Device Letters* **15** (1-4):19
- [3] Wei G (Translator) 2010 *China Integrated Circult* **4** (131): 17 [为国 (译) 2010 中国集成电路 **4** (131):17]
- [4] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827 [宋建军, 张鹤鸣, 胡辉勇, 戴显英, 宣荣喜 2007 中国物理 **16** 3827]
- [5] Phama A T, Jungemann C, Meinerzhagen B 2008 *Solid-State Electronics* **52** 1437
- [6] Lee M L, Leitz C W, Cheng Z, Pitera A J, Langdo T, Currie M T, Taraschi G, Fitzgerald E A, Antoniadis D A 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 3344
- [7] Shang H, Chu J Q, Wang X, Mooney P M, Lee K, Ott J, Rim K, Chan K, Guarini K, Jeong M 2004 *2004 Symposium on VLSI Technology* Honolulu June 15-17, 2004 p204
- [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 2008 **57** 7228]
- [9] Sang Kook Chun, Kang L Wang 1992 *IEEE Transaction on Electron Device* **39** 2153
- [10] Peopel R 1986 *Journal of Quantum Electronics* **22** 1696
- [11] Smirnov S, Kosina H 2004 *Solid-State Electronics* **48** 1325
- [12] Li M F 1998 *Semiconductor Physics* (Beijing: Science Press) p64 (in Chinese) [李名复 1998 半导体物理学 (北京: 科学出版社) 第 64 页]
- [13] Yu J Z (Translator) 2002 *Properties of Strained and Relaxed Silicon Germanium* (Beijing: National Defence Industrial Press) p73 (in Chinese) [余金中 (译) 2002 硅锗的性质 (北京: 国防工业出版社) 第 73 页]
- [14] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 2003 *Semiconductor Physics* (Sixth Ed.) (Beijing: Publishing House Of Electronics Industry) p18 (in Chinese) [刘恩科, 朱秉升, 罗晋生 2003 半导体物理学 (第 6 版) (北京: 电子工业出版社) 第 18 页]

The model of valence-band dispersion for strained Ge/Si_{1-x}Ge_x*

Dai Xian-Ying[†] Yang Cheng Song Jian-Jun Zhang He-Ming Hao Yue
Zheng Ruo-Chuan

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

(Received 11 January 2012; revised manuscript received 15 February 2012)

Abstract

Based on the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory, the valence-band dispersion model for biaxial strained Ge/Si_{1-x}Ge_x is derived by taking strained Hamiltonian perturbation into account. The model can be used to calculate the valence band structure and hole effective mass along arbitrarily $\mathbf{k}$ wavevector direction in strained Ge grown on arbitrarily oriented relaxed Si_{1-x}Ge_x virtual substrate. The MATLAB simulation results of the model show that by comparison with relaxed Ge, the more anisotropy of the hole effective mass occurs in strained Si_{1-x}Ge_x and the hole effective mass of the top valence band decreases with the increase of Ge fraction. The results can supply valuable references to the conduction channel design related to stress and orientation in the Si-based strained Ge MOS devices and integrated circuits.

Keywords: strained Ge, valence-band structure, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory, dispersion model

PACS: 71.15.-m, 71.70.Fk

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 61398).

[†] E-mail: xydai@xidian.edu.cn