

应变 Ge 空穴有效质量的各向异性与各向同性*

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, 宽禁带半导体技术国家重点实验室, 西安 710071)

(2012年6月5日收到; 2012年6月19日收到修改稿)

在利用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论获得应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 价带 $E(k)$ - k 关系的基础上, 研究得到了 (001), (101), (111) 面应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿不同晶向及各向同性的价带空穴有效质量. 结果显示, 应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿各晶向的带边有效质量随应力增大而减小, 且沿 [010] 晶向最小; 子带空穴有效质量在应力较大时变化不明显, 并且在数值上与带边空穴有效质量相差不大. 最后利用各向同性有效质量与文献结果进行对比, 验证了结果的正确性.

关键词: 应变 $\text{Ge}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, 空穴有效质量, 价带结构各向异性与各向同性

PACS: 71.15.-m, 71.70.Fh

1 引言

硅基应变技术由于能显著提高载流子迁移率、与 Si 工艺完全兼容等优势, 成为 21 世纪延续摩尔定律的 Si 集成电路关键技术 [1,2]. 半导体 Ge 的电子和空穴迁移率分别是 Si 的 2.8 倍和 4.2 倍, 其空穴迁移率是所有半导体中最高的 [3]. 利用较厚的 SiO_2 栅介质, Si 基埋层应变 Ge 沟道 Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor (MOSFET) 的空穴迁移率可提高 6—8 倍 [4,5]. 因而, ITRS(国际半导体技术路线图) 已将 Ge 及应变 Ge 列为 22 nm 及以下工艺节点 Si 基 MOSFET 的最佳沟道材料 [6,7].

提高空穴迁移率是提高 P Channel Metal-Oxide Semiconductor (PMOS) 器件性能的有效途径之一, 而空穴迁移率的提高与空穴有效质量的减小密切相关. 因此, 如何减低空穴有效质量, 成为 Ge 材料性能研究的关键. 而根据半导体能带理论, 相对弛豫 Ge, 应变 Ge 的空穴有效质量与晶向和应力大小的关系更为密切 [8]. 本文以弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底生长应变 Ge 为例, 以 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论为基础, 研究并分析了 (001), (101) 和 (111) 面的不同晶向应变 Ge 价带空穴有效质量, 为 Si 基应变 Ge 沟道 PMOS 器件导电沟道应力与晶向的设计提供了理论依据.

2 应变 Ge 价带 $E(k)$ - k 关系模型

根据半导体能带理论 [9], 应变 Ge 沿不同晶向的带边及子带空穴有效质量可由 (1) 式表征:

$$\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right) = \frac{1}{m_p^*}, \quad (1)$$

式中, m_p^* 为空穴有效质量, \hbar 为普朗克常数. 由 (1) 式可见, 若要得到空穴有效质量, 首先应建立应变 Ge 的价带 $E(k)$ - k 关系模型. 应变 Ge 的价带 $E(k)$ - k 关系模型可采用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论得到, 如 (2) 式所示, 详细推导可见文献 [10]:

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

式中 $Q = (p^2 - 3q)/9$, $\Theta = \cos^{-1}(-R/\sqrt{Q^3})$, $R = (2p^3 - 9pq + 27r)/54$, E_{v1} 为应变 Ge 带边能量, E_{v2} 为应变 Ge 子带能量, p, q, r 可通过 (3) 式确定:

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

* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 6139801-1) 资助的课题.

† E-mail: xydai@xidian.edu.cn

$$+ a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2), \quad (3)$$

式中 a_{ij} ($i, j = 1, 2, 3$) 为 (4) 式的矩阵元素.

$$\begin{pmatrix} A & Nk_xk_y + n\varepsilon_{xy} & Nk_xk_z + n\varepsilon_{zx} \\ Nk_xk_y + n\varepsilon_{xy} & B & Nk_yk_z + n\varepsilon_{yz} \\ Nk_xk_z + n\varepsilon_{zx} & Nk_yk_z + n\varepsilon_{yz} & C \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$A = Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}),$$

$$B = Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) + l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}),$$

$$C = Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) + l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}),$$

其中,

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{//},$$

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{//}/\sigma^{(001)},$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz},$$

$$\varepsilon_{//} = (a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} - a_{\text{Ge}})/a_{\text{Ge}}. \quad (5)$$

表 1 给出了本文应变 Ge 价带模型所需的参数.

3 空穴有效质量各向异性

为了能直观反映价带空穴有效质量的各向异性, 本文分别采用了极坐标等能线图和直角坐标等能面图. 图 1 为不同 SiGe 衬底晶面应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x、应变 Ge/(101)Si_{1-x}Ge_x 和应变 Ge/(111)Si_{1-x}Ge_x 带边的 40 meV 平面极坐标等能线图. 利用 $k_x = k_y$ 平面去截三维等能面, 可得沿不同晶向的各向异性程度, 即曲率半径. 根据 (1) 式, 空穴有效质量与曲率半径成反比, 曲率半径越大, $\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$ 越小, 有效质量也就越大. 图 2 为应变 Ge/Si_{0.4}Ge_{0.6} 子带的 40 meV 三维等能面. 等能线和等能面沿不同晶向的曲率半径不同说明, 在研究空穴有效质量中, 必须考虑材料价带结构的各向异性.

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	[3]
Ge 晶格常数 $a_{\text{Ge}}/\text{\AA}$	5.658	[3]
Ge 泊松比 $\sigma^{(001)}, \sigma^{(101)}, \sigma^{(111)}$	1.332 2.691 2.222	[3]
旋轨劈裂能 Δ/eV	0.29	[3]
$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 参数 L, M, N	-30.53 -4.64 -33.64	[11]
$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 参数 $l, m, n/\text{eV}$	-2.4 4.2 -7.621	[12]

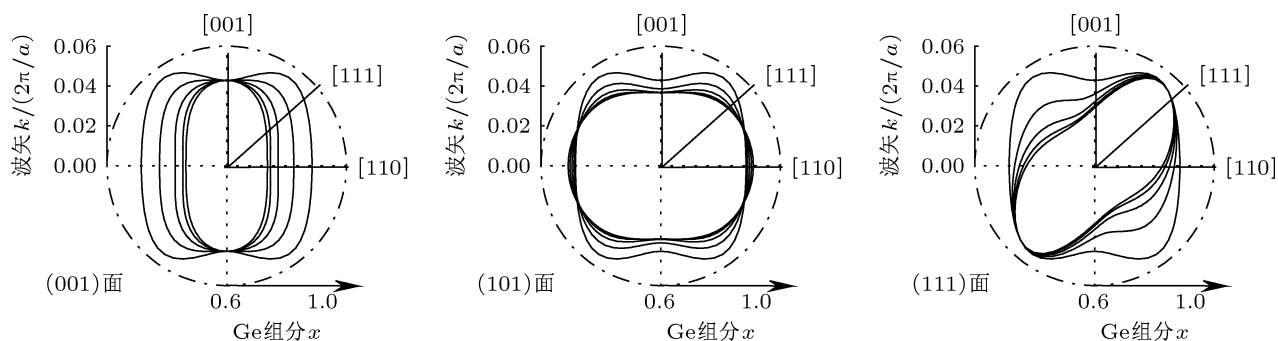


图 1 40 meV 不同 SiGe 衬底晶面应变 Ge 带边 $k_x = k_y$ 平面极坐标等能线

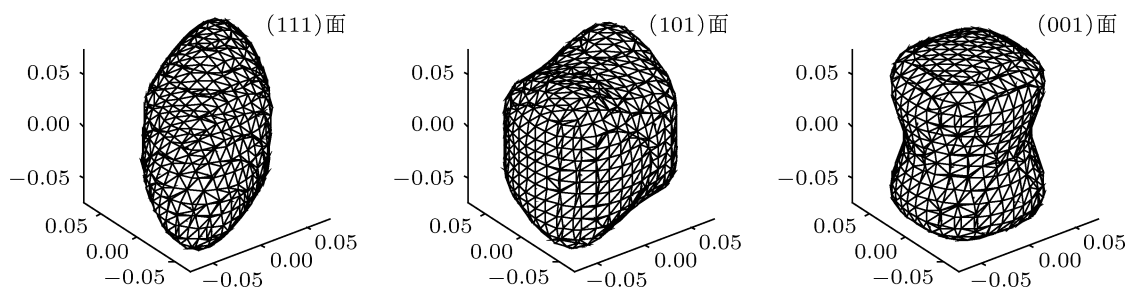


图 2 40 meV 不同 SiGe 衬底晶面应变 Ge/Si_{0.4}Ge_{0.6} 子带三维等能面

图 3 为不同衬底晶面, 如应变 Ge/(001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, 应变 Ge/(101) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 和应变 Ge/(111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的带边空穴有效质量与 Ge 组分的关系曲线. 图 3 表明, 应变 Ge/(001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带边 [111], [101], [110] 和 [010] 晶向的空穴有效质量在应力作用下变化明显, 并且随着应力的增加 (即 Ge 组分减小) 而显著减小. [001] 晶向空穴有效质量基本保持不变. [010] 晶向带边空穴有效质量的绝对值最小, 比弛豫 Ge[010] 晶向明显减小. 应变 Ge/(101) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带边空穴有效质量在应力作用下沿各晶向均显著减少, 且 [010] 晶向带边空穴有效质量的绝对值最小. 应变 Ge/(111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 带边空穴有效质量沿 [111] 晶向基本保持不变, 沿 [110] 和 [101] 晶向的空穴有效质量完全相同, 且

变化显著. [001] 和 [010] 晶向的空穴有效质量也是完全相同, 且绝对值最小.

由图 3 还可知, 应变 Ge/(001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, 应变 Ge/(101) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 和应变 Ge/(111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的带边有效质量最小值均在沿 [010] 晶向时取得. 表 2 给出了三种不同晶面生长的应变 Ge 沿 [010] 和 [110] 晶向的带边空穴有效质量的数值. 由表 2 可看出, 即使沿相同晶向 (如 [110]), 由于生长在不同晶面的衬底上, 带边空穴有效质量也是不同的. 特别指出的是, 应变 Ge/(101) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿 [010] 晶向的带边空穴有效质量小于应变 Ge/(001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 和应变 Ge/(111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿 [010] 晶向的数值, 同时也是在不同晶面的衬底上生长的应变 Ge 沿不同晶向的最小值.

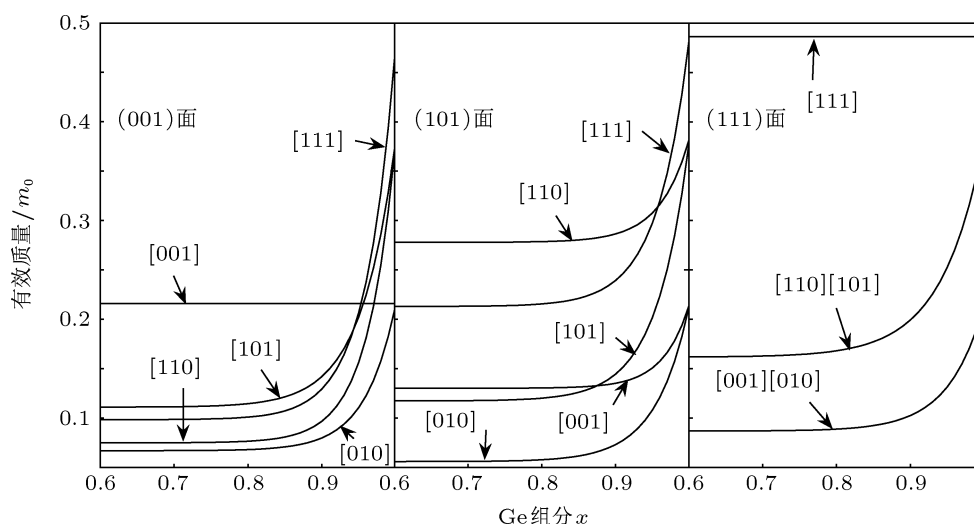


图 3 应变 Ge 带边空穴有效质量与 Ge 组分的关系

表 2 应变 Ge 沿 [010] 和 [110] 晶向的带边空穴有效质量

Ge 组分		0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
[010] 晶向	(001) 晶面	0.0662	0.0676	0.0707	0.0821	0.2160
	(101) 晶面	0.0536	0.0564	0.0614	0.0757	0.2155
	(111) 晶面	0.0851	0.0872	0.0916	0.1046	0.2155
[110] 晶向	(001) 晶面	0.0740	0.0767	0.0824	0.1027	0.3835
	(101) 晶面	0.2900	0.2779	0.2710	0.2813	0.3828
	(111) 晶面	0.1563	0.1623	0.1737	0.2038	0.3828

图 4 为不同晶面衬底应变 Ge/(001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, 应变 Ge/(101) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 和应变 Ge/(111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 子带空穴有效质量与 Ge 组分的关系曲线. 从图 4 可以看出, 应变 Ge/(001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿 [010], [110] 晶向子带空穴有效质量随应力的增加, 先增加后减小; 而 [111], [101], [001] 晶向子带空穴有效质量随应力的增加逐渐增大. 但是不论哪个晶向,

在应变较大时, 子带空穴有效质量的变化趋于平缓, 而且与带边空穴有效质量在数值上相差不大. 应变 Ge/(101) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 和应变 Ge/(111) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的子带空穴有效质量都有类似的变化. 其中应变 Ge/(101) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿 [010] 晶向的子带空穴有效质量数值最大, 大小可以与带边空穴有效质量相比拟.

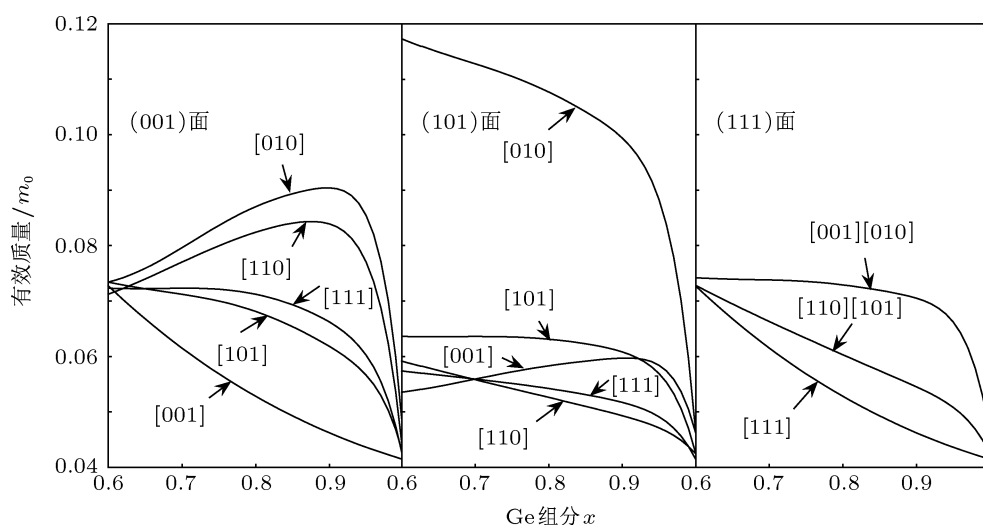


图4 应变 Ge 子带空穴有效质量与 Ge 组分的关系

应变 Ge 空穴有效质量随应力增加而显著减小, 这是由于在 (001), (101) 和 (111) 面弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底上外延生长所产生的应力将立方晶系的弛豫 Ge 分别变为四方晶系、单斜晶系和三角晶系的应变 Ge. 由于对称性的降低, 使得价带顶简并消除, 从而导致带边与子带分裂. 带边和子带能级间的相对移动改变了它们之间的耦合力, 进而影响到价带带边和子带在 Γ 点附近沿不同晶向的能量值 $E(k)$, 空穴有效质量也发生相应的改变.

4 空穴有效质量各向同性

建立价带顶的态密度有效质量及本征载流子浓度模型都需要用到价带各向同性有效质量. 由上述知, 应变 Ge 的价带等能面已不是球面, 不过等能面仍然能用球形等能面近似^[13], 使球形等能面的体积与扭曲球面的体积相等, 从而得到近似的球形等能面半径, 进而得到带边与子带各向同性有效质量. 如图 5 所示, 带边空穴有效质量随 Ge 组分的减小而明显减小, 子带空穴有效质量在增大应力的作用下略微增加, 但变化不大. 而且带边有效质量与子带有效质量的差值随着 Ge 组分的变小而变小, 当 Ge 组分小于 0.7 时, 两者的差值已不明显.

由于应变 Ge 的带边和子带在应力作用下发生分裂, 大部分空穴占据带边能级, 因此在研究空穴输运过程中, 可忽略子带空穴有效质量的贡献. 由图 5 可知, 随着应力的增加, 带边空穴有效质量逐渐减小, 故空穴有效质量随着应力的增加而减小, 空穴迁移率也随之增加. 此结论与文献 [14] 的实验

结果符合, 这也说明了本文结果的正确性.

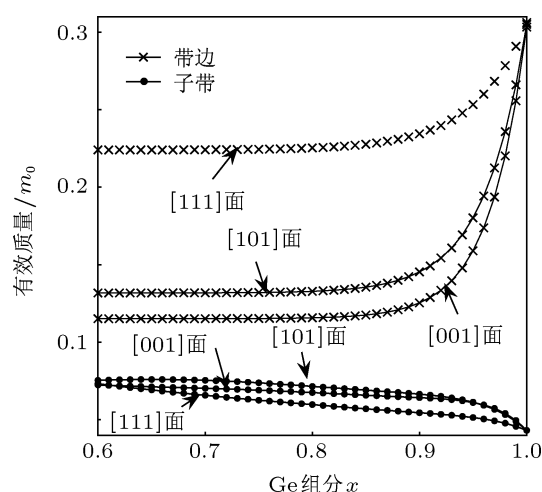


图5 应变 Ge 带边、子带各向同性空穴有效质量与 Ge 组分的关系

表3 弛豫 Ge 空穴有效质量本文结果与文献对比

空穴有效质量		本文	文献 [13]
带边	[100] 晶向	0.2160	0.2128
	[110] 晶向	0.3835	0.3831
	[111] 晶向	0.4819	0.5
	各向同性	0.3070	0.307
子带	[100] 晶向	0.0461	0.0469
	[110] 晶向	0.0423	0.04275
	[111] 晶向	0.0416	0.04167
	各向同性	0.0431	0.04397

目前, 国内外有关应变 Ge 能带结构的理论与实验尚未见有报道, 无法与本文的研究结果进行

分析对比. 为此, 本文将 $x = 1$ 时的应变 Ge/弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴有效质量与弛豫 Ge 进行对比, 如表 3 所示. 由表 3 可知, 本文的应变弛豫 Ge 空穴有效质量与文献 [13] 弛豫 Ge 空穴有效质量的变化趋势十分符合, 且差别甚小, 说明了本文研究结果的正确性与精确性.

5 结论

利用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论建立了应变 Ge/ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 价带 $E(k)$ - k 关系模型, 并以此为基础得到 (001),

(101), (111) 面应变 Ge/ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿不同晶向的空穴各向异性有效质量. 结果表明: 应变 Ge/ $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿各晶向的带边有效质量随应力增大而显著减小, 其中沿 [010] 晶向的带边有效质量最小. 在应力较大时, 子带空穴有效质量与带边空穴有效质量在数值上相差不大. 根据本文的研究结果, 为了能更有效地提高器件的驱动电流, Si 基应变 Ge PMOS 器件应以应变 Ge/(101) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料 [010] 晶向为导电沟道. 本文还利用球形近似的方法得到了空穴各向同性有效质量并与文献结果进行比对, 验证本文结果在应变时的正确性.

-
- [1] Bedell S W, Daval N, Khakifirooz A 2011 *Microelectron* **88** 324
- [2] Yang Y J, Ho W S, Huang C F 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 102103
- [3] Claeys C, Simoen E (Translated by Tu H L et al.) 2010 *Semiconductor Ge Material and Devices* (Beijing: Metallurgical Industry Press) p326 [克莱 C, 西蒙 E 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]
- [4] 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
- [5] Shang H, Chu J Q, Wang X, Mooney P M, Lee K, Ott J, Rim K, Chan K, Guarini K, Jeong M 2004 *VLSI Symp. Tech. Dig.* p204
- [6] International Technology Working Group (Translated by Wei G) 2010 *China Integrated Circult* **131** 17 (in Chinese) [国际技术工作组 (为国译) 2010 中国集成电路 **131** 17]
- [7] 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]
- [8] Fischetti M V, Laux S E 1996 *J. Appl. Phys.* **80** 2234
- [9] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 2003 *Semiconductor Physics* (6th Ed.) (Beijing: Publishing House of Electronics Industry) pp18–23 [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 18–23 页]
- [10] Dai X Y, Yang C, Song J J, Zhang H M, Hao Y, Zheng R C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 137103 (in Chinese) [戴显英, 杨程, 宋建军, 张鹤鸣, 郝跃, 郑若川 2012 物理学报 **61** 137103]
- [11] Li M F 1998 *Semiconductor Physics* (Beijing: Science Press) p64 [李名复 1998 半导体物理学 (北京: 科学出版社) 第 64 页]
- [12] Kasper E (Translated by Yu J Z) 2002 *Properties of Strained and Relaxed Silicon Germanium* (Beijing: National Defence Industrial Press) [Erich Kasper (余金中译) 2002 硅锗的性质 (北京: 国防工业出版社)]
- [13] Gu Z Y, Tian L L, Fu L W 1995 *Semiconductor Physics* (Beijing: Electronics Industry Press) (in Chinese) p46 [顾祖毅, 田立林, 富力文 1995 半导体物理学 (北京: 电子工业出版社) 第 46 页]
- [14] Lee Minjoo L, Fitzgerald Eugene A 2003 *Appl. Phys. Lett.* **83** 4202

Anisotropy and isotropy of hole effective mass of strained Ge*

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

(School of Microelectronic, State Key Discipline Laboratory of Wide Bandgap Semiconductor Technologies,
Xidian University, Xi'an 710071, China)

(Received 5 June 2012; revised manuscript received 19 June 2012)

Abstract

In this paper, the hole effective mass along arbitrarily \mathbf{k} wavevector direction and the hole isotropic effective masses in strained Ge/(001)(101)(111)Si_{1-x}Ge_x are obtained with in the frame work of $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ theory. It is found that the hole effective mass of the top valence band along [010] wave vector decreases obviously with stress increasing and its absolute value is smallest. The hole effective mass of the second valence band tends to gently decrease with stress increasing, and is not significant in magnitude. Compared with the existing isotropic effective quality, the result obtained in this paper is proved to be correct.

Keywords: strained Ge/Si_{1-x}Ge_x, the hole effective mass, valence-band structure, anisotropy and isotropy

PACS: 71.15.-m, 71.70.Fh

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 6139801-1).

[†] E-mail: xydai@xidian.edu.cn