

四方晶系应变 Si 空穴散射机制*

宋建军[†] 张鹤鸣 胡辉勇 王晓艳 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)

(2011年6月17日收到; 2011年7月13日收到修改稿)

基于 Fermi 黄金法则及 Boltzmann 方程碰撞项近似理论, 推导建立了 (001) 弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底外延四方晶系应变 Si 空穴散射几率与应力及能量的理论关系模型, 包括离化杂质、声学声子、非极性光学声子及总散射概率 (能量 40 meV 时) 模型. 结果表明: 当 Ge 组分 (x) 低于 0.2 时, 应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料空穴总散射概率随应力显著减小. 之后, 其随应力的变化趋于平缓. 与立方晶系未应变 Si 材料相比, 四方晶系应变 Si 材料空穴总散射概率最多可减小 66%. 应变 Si 材料空穴迁移率增强与其散射概率的减小密切相关, 本文所得量化模型可为应变 Si 空穴迁移率及 PMOS 器件的研究与设计提供理论参考.

关键词: 应变 Si, 散射概率, 迁移率

PACS: 73.50.Dn, 73.43.Cd, 73.50.-h

1 引言

利用应变 Si CMOS 提高载流子迁移率是当前 Si 技术发展的重点, 已经成为研究设计高速、高性能小尺寸 CMOS 器件与电路的首选方案^[1-3]. 应变 Si 空穴迁移率增强与其散射概率的减小密切相关^[4-6]. 因此, 建立应变 Si 材料空穴散射概率模型是研究其空穴迁移率增强机理和实现应用的理论基础.

目前, 国内外针对应变 Si 材料反型层空穴迁移率的研究已有报道 (其求解过程中包含空穴散射概率部分), 但空穴散射概率研究在该类报道^[7,8]中所占比重小, 相应的论述缺乏深入性和系统性. 另一方面, 该类报道采用 Monte-Carlo 模拟方法求取空穴迁移率, 因而无法给出空穴散射概率的量化模型, 制约了应变 Si 材料空穴散射概率对其迁移率影响的深入理解.

为此, 本文以 (001) 面弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 衬底外延生长四方晶系应变 Si (见示意图 1) 为例, 基于 Fermi 黄金法则及 Boltzmann 方程碰撞项近似理论, 系统研究了其空穴散射概率与应力及能量的理论关系模型, 获得了有实用价值的相关结论. 本文所得模型数据量化, 可为应变 Si 材料物理的理解及空穴迁

移率的研究提供重要理论参考.

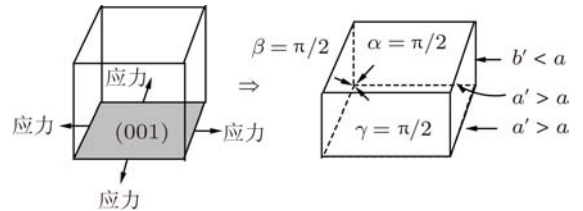


图 1 立方晶系 Si 变为四方晶系应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 其中 α, β, γ, a 为立方晶系未应变 Si 晶格常数, $\alpha, \beta, \gamma, a', b'$ 为四方晶系应变 Si 晶格常数

2 物理模型

从 Schrödinger 方程出发, 采用与时间相关的一阶微扰理论, 本文首先获得了空穴散射的量子力学理论基础——Fermi 黄金法则 (由于本文重点讨论散射概率模型, 未给出 Fermi 黄金法则详细的推导).

$$P_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{k'k}|^2 \delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar\omega), \quad (1)$$

式中, E_k 和 $E_{k'}$ 分别是 ϕ_k 态和 $\phi_{k'}$ 态的能量, $F_{k'k}$ 是微扰矩阵元 $\int_{\Omega} \phi_{k'}^* \hat{F} \phi_k \text{d}r$, $\hbar\omega$ 是跃迁中空穴吸收或发射的能量, Ω 为晶格体积.

该法则通过 δ 函数将空穴能量守恒条件明显

* 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).

[†] E-mail: wmsjhsong@tom.com

地体现出来, 基于该法则, 即可获得单位时间内空穴由 ϕ_k 态跃迁到 $\phi_{k'}$ 态的概率 $P_{k'k}$.

事实上, 为使用 Fermi 黄金法则, 必须首先求得微扰势 \hat{F} , 并计算微扰矩阵元 $F_{k'k}$. 考虑到微扰势 \hat{F} 具有晶体的周期性 (外延生长临界厚度内, 双轴应变材料不仅受到了应力, 同时也保持了晶格周期性), 可以展开成含有倒格矢 q 的 Fourier 级数. 因此, 散射势 $\hat{F} = V(r)$ 有如下形式

$$V(r) = \sum_q A(q) e^{iq \cdot r}, \quad (2)$$

其中, 对 q 从负无穷到正无穷求和. 因为微扰势是实数, 则有

$$A_q^* = A_{-q}, \quad (3)$$

其中, A_q^* 是 A_q 的共轭复数 (两个量都是复数, $V(r)$ 才能是实数). 将 (2), (3) 式代入微扰矩阵元 $F_{k'k}$ 表达式, 同时将 ϕ_k 变为 Bloch 波形式, 可得

$$F_{k'k} = \sum_q A(q) \int_{\Omega} u_{k'}^*(r) u_k(r) e^{i(q-k'+k) \cdot r} dr. \quad (4)$$

由于

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\theta} d\theta = \begin{cases} 0 & m' \neq m \\ 2\pi & m' = m \end{cases}, \quad (5)$$

所以, 只有当

$$q = k' - k \quad (6)$$

时 $F_{k'k}$ 才不为零. (6) 式表明, 跃迁同时也要求准动量守恒. 于是 (4) 式可以简化为

$$F_{k'k} = A(q) I_{k'k} \delta(q - k' + k) = A(k' - k) I_{k'k}, \quad (7)$$

式中 $I_{k'k}$ 为重叠积分

$$I_{k'k} = \int_{\Omega} u_{k'}^*(r) u_k(r) dr, \quad (8)$$

对于抛物线性带, $I_{k'k} \approx 1$.

这样, 只要给出散射势 $V(r)$, 通过 Fourier 变换出 $A(q)$, 即可解出微扰矩阵元 $F_{k'k}$. 与未应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料类似, 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/(100)\text{Si}$ 材料也应主要考虑离化杂质散射、声学声子散射、谷间声子及合金无序这几种散射机制, 通过引入它们相应的散射势场 $V(r)$, 即可获得相应的跃迁概率 $P_{k'k}$. 此外, 对于每一种散射机制 i , 都可用散射概率 P_i 来描述发生该种散射的频率, 即单位时间内发生该种散射的平均次数. 为了获得各散射机制相应的散射概率, 需要利用 Boltzmann 方程碰撞项近似理论将所有终态 k' 考虑进来 [9]

$$P = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int P_{k'k} (1 - \cos \theta') d^3 k' \quad (9)$$

式中, θ' 为 k' 和 k 之间的夹角.

最终, 本文建立了应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/(100)\text{Si}$ 材料离化杂质散射、声学声子散射、非极性光学声子散射概率模型 (分别用 P_{II} , P_{ac} , P_{op} 表示):

$$P_{\text{II}} = \frac{N_i e^4}{16\pi(2m^*)^{1/2}(\varepsilon_0 \varepsilon)^2 E^{3/2}} \times \ln \left(\frac{12m^* k_{\text{B}}^2 T^2 \varepsilon_0 \varepsilon}{e^2 \hbar^2 N_i} \right), \quad (10)$$

$$P_{\text{ac}} = \frac{m^{*3/2} \Xi^2 K_{\text{B}} T (2E)^{1/2}}{\pi \hbar^4 c_1}, \quad (11)$$

$$P_{\text{op}} = \frac{D_0^2 (m^*)^{3/2}}{2^{1/2} \pi \hbar^3 \rho \omega_0} \left(n_{\text{op}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times (E \pm \hbar \omega_0)^{1/2}, \quad (12)$$

式中, m^* 为应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 状态密度有效质量 (其随应力变化的关系见图 2), 其他参数的具体数值见表 1.

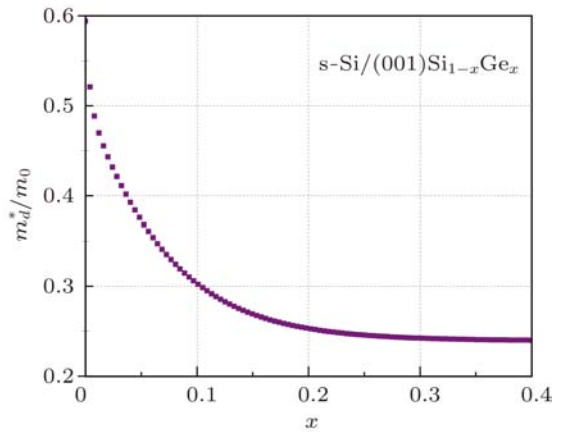


图 2 四方晶系应变 Si 空穴态密度有效质量

表 1 计算所需参数值 [10]

物理量	符号	单位	数值
离化杂质浓度	N_i	cm^{-3}	10^{17}
声学声子形变势常数	Ξ	eV	9.0
非极性光学形变势常数	D_0	$\text{eV} \cdot \text{cm}^{-1}$	2.5×10^8
纵向弹性常数	c_1	$\text{kg/m}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$	1.903×10^{11}
真空介电常数	ε_0	$\text{F} \cdot \text{m}^{-1}$	8.854×10^{-12}
介电常数	ε	—	11.9
长波光学声子能量	$\hbar \omega_0$	eV	0.0579
光学声子数	n_{op}	—	0.121
材料密度	ρ	$\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	2.329

任何时候, 各散射机制均同时存在, 因而需要把各种散射机构的散射概率相加, 可获得应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴总散射概率

$$P = \sum_i P_i = P_{\text{II}} + P_{\text{ac}} + P_{\text{in}} + P_{\text{ad}}. \quad (13)$$

3 结果分析与讨论

图 3(2D, 3D), 图 4(2D, 3D), 图 5(2D, 3D) 分别为不同应力状态下 (由 Ge 组分 x 表征) 四方晶系应变 Si 材料空穴离化杂质散射、声学声子散射和非极性光学声子散射概率与能量的量化关系. 由图 3 可见, 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴离化杂质 (掺

杂 10¹⁷) 散射概率随能量的增加而减小. 当能量 E 为 40 meV 时 (根据热力学统计原理可知, 空穴运输的平均能量为 $E = 1.5 K_B T = 0.04$ eV), 离化杂质散射概率 (P_{II}) 随 Ge 组分 (x) 的增加而增加.

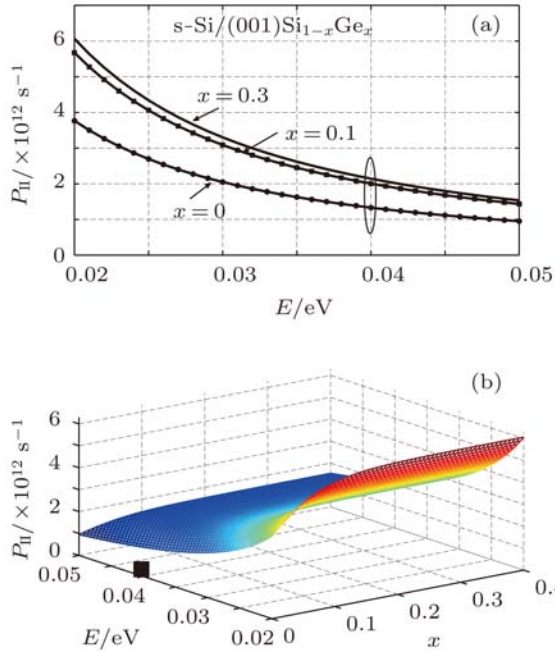


图 3 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 材料空穴离化杂质散射概率与能量 E , Ge 组分 x 的关系

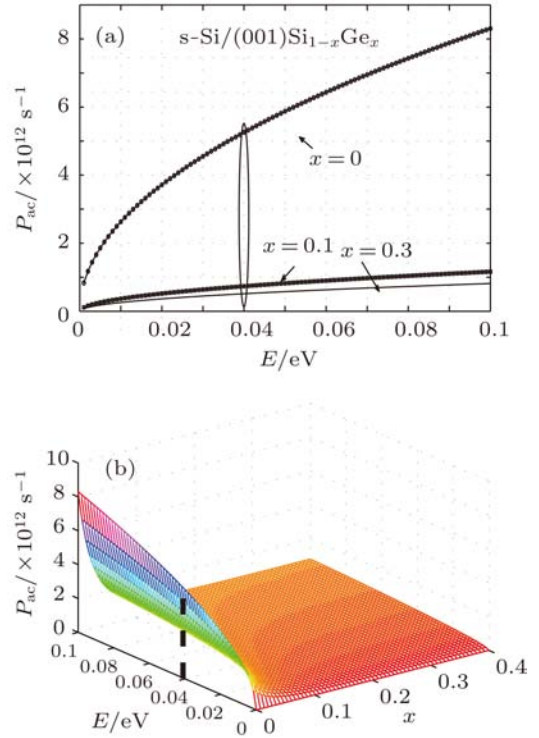


图 4 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 材料空穴声学声子散射概率与能量 E , Ge 组分 x 的关系

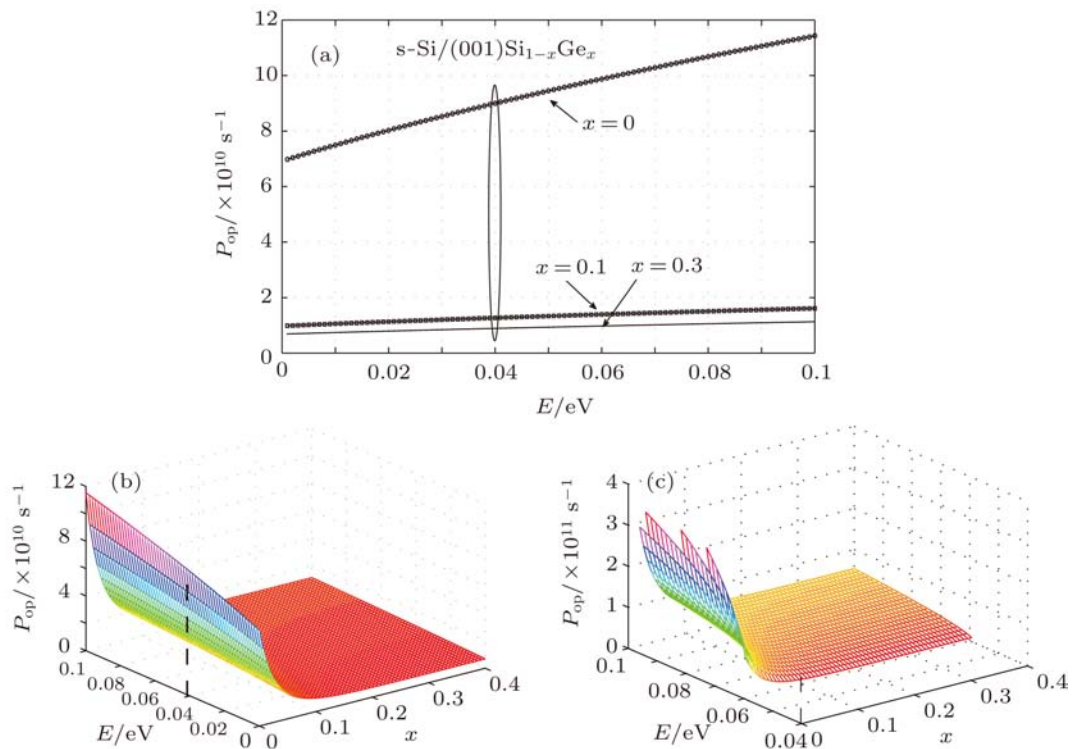


图 5 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 材料空穴非极性光学声子散射概率与能量 E , Ge 组分 x 的关系

由图 4, 图 5 可见, 应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴声学声子和非极性光学声子散射概率均随能量的增加而增大. 当能量 E 为 40 meV 时, 空穴声学声子散射概率 (P_{ac}) 在张应力作用下较未应变 Si 有显著的降低. 非极性光学声子散射分为吸收声子 (+) 和发射声子 (-) 两种情况, 当能量 E 为 40 meV 时, 只需考虑吸收声子情况下空穴的散射 (如图 5(c) 所示), 该散射概率 (P_{op}) 随 Ge 组分 (x) 的增大而减小.

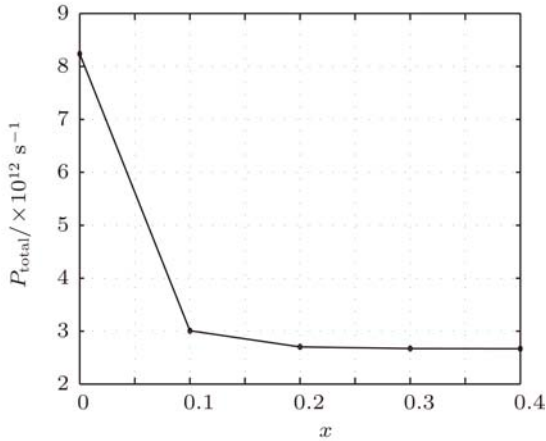


图 6 当能量 $E = 0.04 \text{ eV}$ 时, 应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料空穴总散射概率与 Ge 组分 x 的关系

基于 (13) 式, 现在讨论能量为 40 meV 时应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴总散射概率与应力 (由 Ge 组分 x 表征) 的理论关系 (见图 6). 由图可知,

应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴的总散射概率与 Ge 组分 (x) 成反比. 当 Ge 组分 (x) 低于 0.2 时, 应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴的总散射概率在应力的作用下陡降; 之后, 其随应力的变化趋于平缓. 与立方晶系未应变 Si 材料相比, 四方晶系应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴的总散射概率最多可减少约 66%.

这里需要特别指出的是, 立方晶系未应变 Si 材料价带空穴各散射机制均分为带间和带内散射两种情况, 对其散射概率进行计算时, 可忽略带间散射情况 [11]. 与立方晶系未应变 Si 材料相比, 四方晶系应变 Si 材料价带顶简并消除, “轻”、“重”空穴带发生分裂 (见示意图 7), 空穴带间散射情况更无须考虑. 本文所得图 6 的结论就意味着四方晶系应变 Si 材料应力致空穴总散射概率的降低与空穴带间散射无关, 主要是由于价带分裂产生的“轻”、“重”空穴带间耦合作用致空穴有效质量的变化引起, 也与价带分裂致空穴布居变化进而引起态密度有效质量的进一步变化有关, 即四方晶系应变 Si 材料空穴态密度有效质量随应力的变化致使其总散射概率降低.

应变 Si 材料空穴迁移率增强与其散射概率的减小密切相关, 本文所得应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴散射概率量化模型可为 Si 基应变材料物理的理解及器件的研究设计提供有价值的参考.

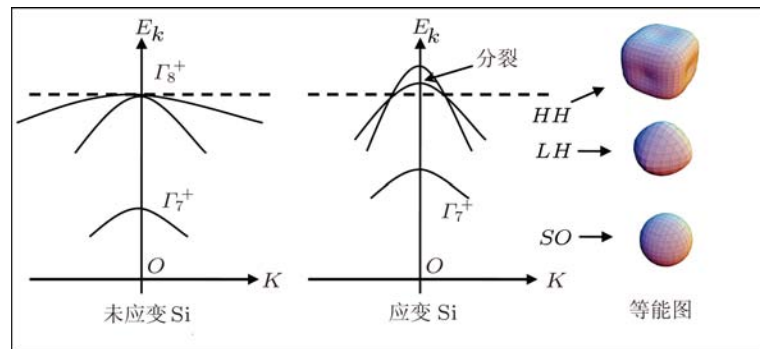


图 7 四方晶系应变 Si 价带分裂示意图

4 结论

本文基于 Fermi 黄金法则和 Boltzmann 方程碰撞项近似理论, 并考虑离化杂质散射、声学声子散射和非极性光学声子的散射势能, 研究获得应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴相应散射概率模型及总散射概率模型. 结果表明: 应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴离化杂质散射概率随能量的增加而减小. 当能

量为 40 meV 时, 其随 Ge 组分 (x) 的增加而增加; 应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴声学声子和非极性光学声子散射概率均随能量的增加而增大. 当能量 E 为 40 meV 时, 只需考虑吸收声子情况下空穴的散射, 该散射概率随 Ge 组分 (x) 的增大而减小. 应变 $\text{Si}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴 (40 meV 时) 总散射概率随 Ge 组分的增加减小, 当 Ge 组分 (x) 低于 0.2 时, 空穴的总散射概率在应力的作用下陡降; 之后, 其

随应力的变化趋于平缓. 与未应变 Si 材料相比, 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴的总散射概率最多可减少

约 66%. 以上量化结论可为 Si 基应变材料物理的理解及器件的研究设计提供有价值的参考.

-
- [1] 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]
 - [2] 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]
 - [3] Liu H H, Duan X F, Xu Q X 2009 *Micron* **40** 274
 - [4] Guillaume T, Mouis M 2006 *Solid-State Electronics* **50** 701
 - [5] Phama A T, Jungemann C, Meinerzhagen B 2008 *Solid-State Electronics* **52** 1437
 - [6] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Fu Q 2009 *Science in China* **52** 546
 - [7] Demaring N V, Gruetzmacher D A 2008 *International Conference on Advanced Semiconductor Devices and Microsystems*, ASDAM 91–94
 - [8] Wang E X, Matagne P, Shifren L 2006 *IEEE Trans. Electron Dev.* **53** 1840
 - [9] Chen X B, Yan J M, Fang Z 1979 *Introduction to Solid State Physics* (Beijing: Defense Industry Press) p190 (in Chinese) [陈星弼, 鄢俊明, 方政 1979 固体物理导论 (北京: 国防工业出版社) 190]
 - [10] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 1994 *Semiconductor Physics* (Beijing: Defense Industry Press) p367 (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) 367]
 - [11] Jacoboni C, Reggiani L 1983 *Rev. Mod. Phys.* **55** 648

Hole scattering mechanism in tetragonal strained Si*

Song Jian-Jun[†] Zhang He-Ming Hu Hui-Yong Wang Xiao-Yan Wang Guan-Yu

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

Abstract

Based on Fermi's golden rule and the theory of Boltzmann collision term approximation, hole scattering mechanism in strained Si/(001)Si_{1-x}Ge_x, namely, tetragonal strained Si is studied, including ionized impurity, acoustic phonon, non-polar optical phonon and total scattering rates. It is found that the total scattering rate of hole in strained Si/(001)Si_{1-x}Ge_x decreases obviously with the increase of stress when Ge fraction (x) is less than 0.2 and the values continue to show a constant tendency. The total hole scattering rate of strained Si/(001)Si_{1-x}Ge_x decreases about 66% at most in comparison with one of unstrained Si. The hole mobility enhancement in strained Si material is due to the decrease of hole scattering rate. The result can provide valuable references for the research of hole mobility of strained Si materials and the design of PMOS devices.

Keywords: strained Si, scattering rates, mobility

PACS: 73.50.Dn, 73.43.Cd, 73.50.-h

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

[†] E-mail: wmschwong@tom.com