

单轴应变 Si 导带色散关系解析模型*

王冠宇[†] 宋建军 张鹤鸣 胡辉勇 马建立 王晓艳

(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7月25日收到; 2011年9月20日收到修改稿)

本文基于 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理论框架, 分析了单轴应力对导带能带结构的影响, 详细讨论了剪切应力作用下布里渊区边界 X 点处 Δ_1 和 Δ_2 能带之间的耦合作用及其对导带能谷极小值的改变, 由此进一步给出了能谷极值点附近的色散关系. 最后通过不同能谷之间的坐标变换, 得到了任意单轴应力作用下每个能谷的色散关系. 本文的研究可以为单轴应变 Si 材料物理性质的理解以及对反型层能带结构、电学特性的相关研究提供一定的理论参考.

关键词: 单轴应力, 应变 Si, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理论, 色散关系

PACS: 71.20.-b, 73.20.At

1 引言

Si 基半导体器件是半导体产业的基石, 但是随着现代半导体器件特征尺寸的不断减小以及芯片集成度的提高, 出现了一系列涉及到半导体材料、器件物理和工艺的问题及挑战. 利用应变技术提高器件性能是当前技术发展的重点, 并且已经成为研究设计高速/高性能小尺寸器件与集成电路的首选方案^[1].

在实际的器件应用中, 工艺致单轴应变 Si 相对于在弛豫 SiGe 衬底上外延生长的双轴应变 Si 材料, 更加广泛地用于小尺寸器件与超大规模集成电路之中, 且施加单轴应力可使体 Si MOSFET 的迁移率以及驱动电流得以大幅提高^[2]. 而能量色散关系是进一步研究应变 Si MOSFET 反型层能带结构的重要理论基础, 便于深入理解相关器件的电学输运特性. 因此从纳米应变 Si CMOS 器件的应用角度考虑, 则需要对单轴应变 Si 材料的能带结构进行系统深入的研究.

综合国内外的研究现状, 迄今为止国内对双轴应变 Si 材料能带结构已有相关的理论研究^[3]; 对单轴应变 Si 能带结构的研究工作则比较少, 除了对价带能带结构的相关报道^[4]之外, 未见对单轴应变 Si 导带色散关系的相关报道. 国外的相关研究主要集中于对 n MOSFET 器件反型层能带结构的

数值计算^[5,6], 但是并未对任意单轴应力作用下应变 Si 材料导带不同能谷的色散关系进行详细系统的研究, 缺乏物理意义明确的解析模型, 尤其是针对导带能谷极小值点附近的各能谷的 $E(\mathbf{k})-k$ 关系亦未明确给出. 鉴于此, 本文基于 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论, 分别给出了未考虑带间耦合作用以及考虑带间耦合作用下的能谷极值点附近的色散关系. 不失一般性, 还通过不同能谷之间的坐标变换, 得到了沿任意晶面晶向单轴张/压应力作用下导带不同能谷的色散关系. 本文的模型可为单轴应变 Si MOSFET 的研究与设计提供一定的理论参考.

2 模型建立

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰法是计算半导体材料在能带极值附近能带结构的一种有效方法, 可给出在一些特殊对称点附近能带结构的相关信息. 要获得单轴应变 Si 导带色散关系, 其理论关键是研究导带极小值附近的 $E(\mathbf{k})-k$ 关系. 基于薛定格方程, 我们在研究建立势能算符的基础上, 采用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰法, 对于能谷 ν 通过引入应变哈密顿 $H_{\varepsilon, \nu}$, 建立了应变 Si 导带极小值附近的 $E(\mathbf{k})-k$ 模型 (详见文献 [3])

$$E_{\nu}(\mathbf{k}) = E_{\nu}(\mathbf{k}_0) + H_{\varepsilon, \nu} + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x, \nu})^2}{m_t} \right]$$

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

[†] E-mail: gywang@stu.xidian.edu.cn

$$+ \frac{(k_y - k_{0y,\nu})^2}{m_t} + \frac{(k_z - k_{0z,\nu})^2}{m_l} \Big]. \quad (1)$$

式中, $E_\nu(\mathbf{k}_0)$ 为能谷 ν 的参考能量, $\mathbf{k}_{0,\nu} = (k_{0x,\nu}, k_{0y,\nu}, k_{0z,\nu})$ 为该能谷极值的位置, m_t, m_l 为导带能谷纵横有效质量. 该式表明: 与体 Si 材料相比, 应变哈密顿的出现说明应变引起了导带能谷能级的移动. 事实上, 对于很小的单轴、双轴应力, m_l 的变化不大^[7-8], 为了便于后文分析推导, 在较小应力下这里仍近似认为 m_t, m_l 均不变 (其数值变化后文将会分析). 将应变导致的形变势场视为微扰, 应变哈密顿可由形变势理论得到

$$H_{\varepsilon,\nu} = \Xi_d(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + \Xi_u \varepsilon_{\nu\nu}. \quad (2)$$

$\nu = 1, 2, 3$ 分别表示 [100], [010] 和 [001] 能谷. 若假设 [001] 能谷为导带最低能谷,

$$E_3(\mathbf{k}) = H_{\varepsilon,3} + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_x^2}{m_t} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{(k_z - k_0)^2}{m_l} \right]. \quad (3)$$

$(0,0,k_0)$ 为能谷极小值点处的 \mathbf{k} 矢, ε_{ij} 为应变张量. 其中 Ξ_d 和 Ξ_u 为形变势常数, 其值由文献 [4] 给出.

然而, 根据群论的知识, 未应变时导带 Δ 轴上有 5 类对称性的状态, 分别为 $\Delta_1, \Delta_2, \Delta_1', \Delta_2'$ 和 Δ_5 , 并且在布里渊区边界 X 点处 Δ_1 和 Δ_2' 是简并的. 前文的模型假设应变 Si 导带底能谷极小值位置并未发生移动, 但是实际上在 $\varepsilon_{ij} \neq 0$ 的单轴剪切应力作用下, X 点处 Δ_1 和 Δ_2' 能带的简并会消除, 能带会分裂, 二者相互耦合, 从而导致导带底能谷极小值位置发生移动. 在较大单轴应力作用下, 则需在 (6) 式色散关系的基础上进一步考虑 Δ_1 和 Δ_2' 能带耦合作用的影响. 为便于分析, 仍然以 [001] 能谷为例 (图 1), 并忽略导带边能量及导带底能谷能级 \mathbf{k} 矢的实际位置, 事实上这并不妨碍我们分析剪切应变对导带能谷极小值的影响.

根据文献 [9] 的假设: X 点为 \mathbf{k} 空间的原点, 并且未应变时 Δ_1 和 Δ_2' 能带在该点处切线斜率的绝对值相等, 符号相反, 即沿 Δ 轴 [001] 能谷的电子动量矩阵对角线元素 $p_{z,ii}$ 仅差一个负号, 表示为 $p_{z,11} = -p_{z,22} = p$, 如图 1(a) 所示. 若忽略导带边能量及导带底能谷能级 \mathbf{k} 矢位置, 与 (3) 式类似, 根据 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰理论可得未应变的 [001] 能谷在 X 点处的能量 $E(\mathbf{k})$ - k 表达式

$$E_{ii}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_t} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_l} \right) + \frac{\hbar}{m_0} k_z p_{z,ii}, \quad (4)$$

式中, $i = 1, 2$ 分别表示 Δ_1 和 Δ_2' 能带. 第二项为一阶微扰项, 由于 Δ_1 和 Δ_2' 在 X 点是简并的, 因此 $E_{ii}(\mathbf{k})$ 中可以忽略二阶微扰. 注意到 Δ_1 为最低能带, 能谷极小值位于 $\mathbf{k} = (0, 0, -k_0)$ 处 (若以 X 点为原点, $-k_0 = -0.15(2\pi/a_0)$), 则有

$$\left. \frac{\partial E_{11}(\mathbf{k})}{\partial k_z} \right|_{k=(0,0,-k_0)} = 0 \Rightarrow \frac{p}{m_0} = \frac{\hbar k_0}{m_l}. \quad (5)$$

如前所述, Δ_1 和 Δ_2' 在 X 点是简并的, 二者无相互耦合作用, $E_{ii}(\mathbf{k})$ 中可以忽略二阶微扰, 但是在该点附近二者是非简并的, 其耦合作用不能忽略. 为了描写未应变的体 Si 导带在 X 点附近的能量色散关系, 则需考虑二阶微扰. X 点附近的哈密顿由 2×2 对称矩阵所给出^[10]

$$\mathbf{H}_0 \equiv \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_{11}(\mathbf{k}) & P k_x k_y \\ P k_x k_y & E_{22}(\mathbf{k}) \end{bmatrix}, \quad (6)$$

其中 $P = \hbar^2/M$, 参数 $M = 0.235m_0$ 可在 $\mathbf{k} = (0, 0, -k_0)$ 处由经验赝势方法得到. 该哈密顿中的非对角线元素 $P k_x k_y$ 则体现了 Δ_1 和 Δ_2' 在 X 点附近的耦合作用.

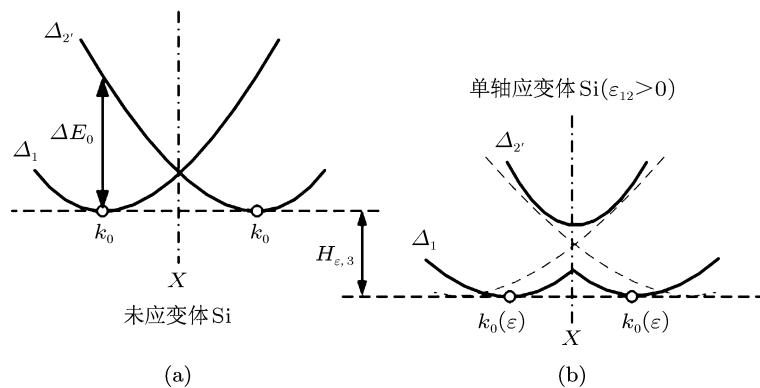


图 1 X 点附近 Δ_1 和 Δ_2' 能带结构示意图 (a) 未应变; (b) 单轴剪切应变

由图 1(b) 所示, 剪切应变导致了 X 点处的简并消除. 同时我们知道, 应变意味着发生了位移, 体现在哈密顿上就是叠加一个应变变化量, 导致求解出来的本征能量值 (色散关系) 也会发生相应的变化. 基于这一思想, 文献 [6], 应变哈密顿应为类似 (6) 式的一个表达式, 即

$$\mathbf{H}_\varepsilon = \begin{bmatrix} H_{\varepsilon,3} & -\Xi'\varepsilon_{12} \\ -\Xi'\varepsilon_{12} & H_{\varepsilon,3} \end{bmatrix}, \quad (7)$$

式中 $\Xi' = 14 \text{ eV}$. 结合 (4),(5) 二式, 矩阵 $\mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_\varepsilon$ 的本征值即为应变 Si 导带 [001] 能谷在 X 点附近的色散关系

$$E_i(k) = H_{\varepsilon,3} + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_t} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_l} \right) - (-1)^{i-1} \left[\left(\frac{\hbar^2 k_z k_0}{m_l} \right)^2 + (Pk_x k_y - \Xi'\varepsilon_{12})^2 \right]^{1/2}, \quad (8)$$

同样, $i = 1, 2$ 分别表示 Δ_1 和 Δ_2 能带. 需要指出的是, 并不是所有单轴应力都能发生剪切形变 (例如沿 (001) 面 [100] 方向的应力). 换言之, 并不是任意单轴应力都能导致 X 点处能带分裂. 若某一能谷的任一剪切应变张量 $\varepsilon_{ij} = 0$, 那末 X 点处 Δ_1 和 Δ_2 仍然简并, 无相互耦合作用, 即 (6) 式中的哈密顿中非对角线元素 $Pk_x k_y = 0$, 此时 (8) 式退化为

$$E_i(\mathbf{k}) = H_{\varepsilon,3} + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_t} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_l} \right) - (-1)^{i-1} \left(\frac{\hbar^2 k_z k_0}{m_l} \right)^2. \quad (9)$$

比较 (4) 式与 (9) 式, 在不包含剪切应变的单轴应力作用下, X 点处的色散关系仅比未应变时多了一个应变哈密顿项, 单轴应力仅导致了导带能谷能级的移动.

对于 [001] 能谷, 根据 (8) 式, 导带极小值位置可表示为

$$k_0(\varepsilon) = -k_0 \left[1 - (Pk_x k_y - \Xi'\varepsilon_{12})^2 \left(\frac{2}{\Delta E_0} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (10)$$

其中 $\Delta E_0 = 2\hbar^2 k_0^2 / m_0 = 0.53 \text{ eV}$ 为 Δ_1 和 Δ_2 能带在 $\mathbf{k} = (0, 0, -k_0)$ 处的能量差. 令 (10) 式中 $k_x = k_y = 0$ 则可得到 [001] 能谷极小值的位置. 剪切应变张量 ε_{12} 则体现了应变对其的影响. 为了得到 [001] 能谷极小值 $k_0(\varepsilon)$ 附近的能量色散关系,

将 (8) 式在 $k_0(\varepsilon)$ 处级数展开并忽略高次项, 可以得到如下形式:

$$E(\mathbf{k}) = A + B(k_x, k_y) + C(k_z), \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} A &= H_{\varepsilon,3}; \\ B(k_x, k_y) &= - \left[(Pk_x k_y - \Xi'\varepsilon_{12})^2 + \left(\frac{\hbar^2 k_0 k_0(\varepsilon)}{m_l} \right)^2 \right]^{1/2} + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_t} + \frac{k_y^2}{m_t} + \frac{k_0^2(\varepsilon)}{m_l} \right); \\ C(k_z) &= - \frac{\hbar^2 k_0(\varepsilon)(k_z - k_0(\varepsilon))}{m_l} + \frac{\hbar^2 (k_z - k_0(\varepsilon))^2}{2m_l}. \end{aligned}$$

不失一般性, (11) 式的色散关系还应包括其他两对等价能谷, 其建立过程与 [001] 能谷一致. 我们以 [001] 能谷的 \mathbf{k} 空间坐标系作为基准, 并记 [001] 能谷的坐标向量为

$$\mathbf{k} = [k_x \ k_y \ k_z]^T,$$

对其他两个能谷的坐标系进行转化. 对于不同能谷, \mathbf{k} 空间坐标均可用 [001] 能谷的坐标来统一表示:

$$\mathbf{k}_\nu = \mathbf{T}_\nu \mathbf{k},$$

这里下标 ν 同样代表导带三对等价能谷, \mathbf{T}_ν 为能谷之间的坐标转换关系. 显然,

$$\mathbf{T}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{T}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{T}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

这样在上述坐标变换矩阵的变化下, 在各个能谷的坐标系中, z 轴都与旋转椭球的旋转轴相重合. 将上述变换关系代入 (8) 式, 对于 [100] 能谷, 剪切张量 $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{23}$; 对于 [010] 能谷, 剪切张量 $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{13}$, 然后对 (8) 式进行一阶求导就可得到 [100] 和 [010] 能谷的极小值位置. 再将坐标变换关系以及各个能谷的剪切应变张量代入 (11) 式, 并注意到剪切应变对能量极小值的改变, 还应在应变哈密顿上叠加一

个能量改变量. 对于不同能谷, 可将应变哈密顿 H_ε 修正为如下形式:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} H_{\varepsilon,1} \\ H_{\varepsilon,2} \\ H_{\varepsilon,3} \end{bmatrix} &= \Xi_d(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) \times \hat{\mathbf{I}} + \Xi_u \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \end{bmatrix} \\ &- \frac{\Xi'^2}{(2\hbar^2 k_0^2/m_l)} \times \begin{bmatrix} \varepsilon_{23}^2 \\ \varepsilon_{13}^2 \\ \varepsilon_{12}^2 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (12)$$

式中, $\hat{\mathbf{I}} = [1 \ 1 \ 1]^T$. 结合 (8),(9),(10) 三式以及三个能谷之间的坐标转换关系, 我们建立了单轴应变 Si 导带色散关系的解析模型.

另外, 根据 (8) 式的导带色散关系, 我们还可以进一步分析导带能谷纵横有效质量的变化. 如图 2

所示 (为了便于分析, 图 2 以 (001) 面 [001] 能谷为例), 将初基原胞坐标系 (x, y, z) 旋转 θ 角度得到应力坐标系 (x', y', z') , 两个坐标系下的 \mathbf{k} 空间坐标转换关系为

$$\begin{aligned} \mathbf{k} &= [k_x \ k_y \ k_z]^T \\ &= \mathbf{U} [k_{x'} \ k_{y'} \ k_{z'}]^T = \mathbf{U} \mathbf{k}_\varepsilon. \end{aligned} \quad (13)$$

\mathbf{U} 为上述两个坐标系转换矩阵, 下面仍假设 $\varepsilon_{ij} \neq 0$. 若施加任意方向的单轴应力, 此时应力坐标系 (x', y', z') 下应变张量也应随之转化, 即

$$\hat{\varepsilon} \mapsto \mathbf{U}^T \hat{\varepsilon} \mathbf{U}.$$

将 (13) 式代入 (8) 式中 X 点附近的 Δ_1 能带色散关系, 在应力坐标系下, 有

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}_\varepsilon) &= H_{\varepsilon,3} + \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{k}_\varepsilon^T \mathbf{U}^T) \hat{\mathbf{M}} (\mathbf{U} \mathbf{k}_\varepsilon) \\ &- \left[\begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{\hbar^2 k_0}{m_l} \end{bmatrix} \mathbf{U} \mathbf{k}_\varepsilon + \left((\mathbf{k}_\varepsilon^T \mathbf{U}^T) \begin{bmatrix} 0 & P & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} (\mathbf{U} \mathbf{k}_\varepsilon) - \Xi' \varepsilon_{12} \right)^2 \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (14)$$

其中

$$\hat{\mathbf{M}} \equiv \begin{bmatrix} m_t^{-1} & & \\ & m_t^{-1} & \\ & & m_l^{-1} \end{bmatrix}$$

为 [001] 能谷的倒易有效质量张量. 由于单轴应力改变了 (001) 晶面等能面的形状, 根据 (10) 式, 那

末 [001] 能谷的纵横有效质量可由

$$\begin{aligned} m_i(\varepsilon) &= \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\mathbf{k}_\varepsilon)}{\partial k_i^2} \right)_{\mathbf{k}=(0,0,-k_0(\varepsilon))}^{-1}, \\ &(i = x', y', z') \end{aligned} \quad (15)$$

来具体求出.

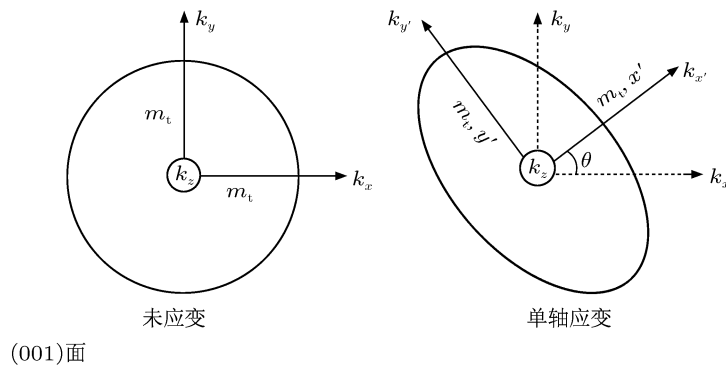


图 2 (001) 面单轴应变对 [001] 能谷等能面形状的改变示意图

3 结果与讨论

工艺致单轴应变更有效的提高了 MOSFET 的性能, 尤其单轴应变使得 [110]/(001) CMOS 的性能得以极大提高. 并且, 由于沿 [110] 方向施加应力使得 Si 材料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张/压应力, 以此来大幅提高超大规模集成电路 (VLSI) 的性能. 并且考虑到体 Si 材料有很多不同的晶面晶向, 限于篇幅, 不能对其一一讨论, 因此本小节主要针对 [001] 能谷, 选择 [110]/(001) 单轴应力来进行分析 (其他能谷的分析与此相同). 基于应变张量原理及广义胡克定律, (001) 单轴任意晶向的应变 Si 应变张量为 (单轴应力 σ 为正对应张应力, 为负则对应压应力)

$$\begin{aligned}\varepsilon_{11} &= \left(\frac{\cos^2 \theta c_{11} + \cos 2\theta c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{11}^2} \right) \sigma, \\ \varepsilon_{22} &= \left(\frac{\sin^2 \theta c_{11} - \cos 2\theta c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{11}^2} \right) \sigma, \\ \varepsilon_{33} &= - \left(\frac{c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{11}^2} \right) \sigma,\end{aligned}$$

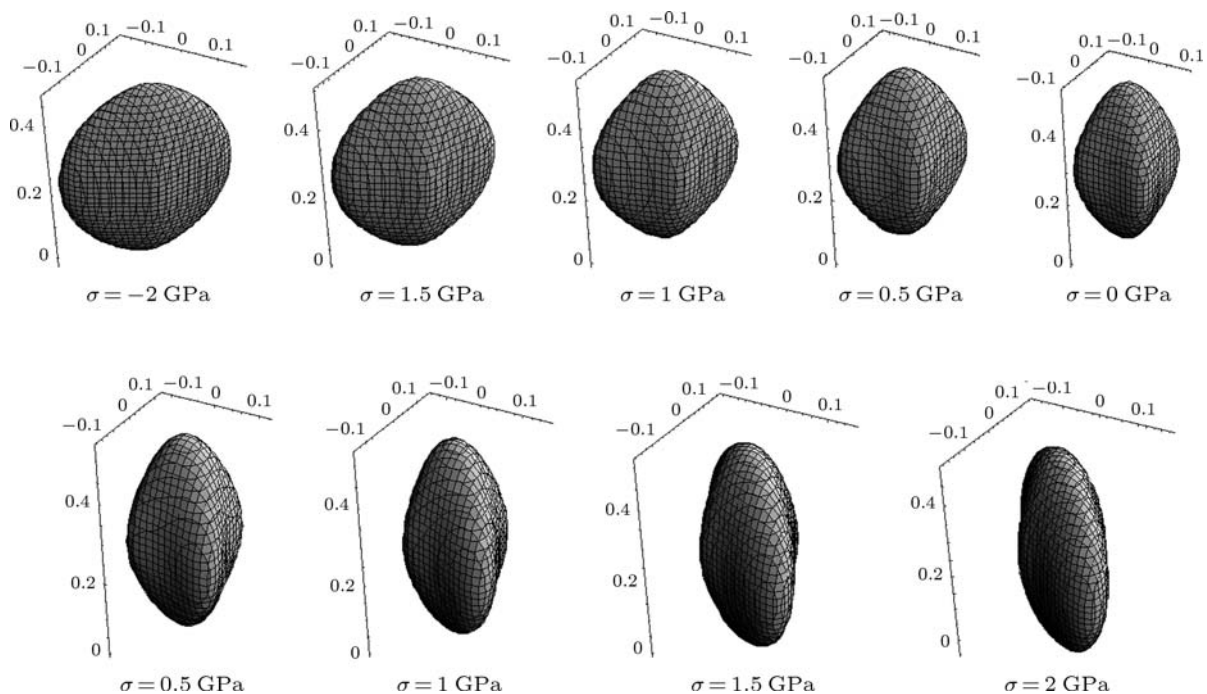


图 3 不同应力作用下考虑带间耦合作用的体 Si 导带 [001] 能谷 40 meV 三维等能面

由图 4 可见, 与未应变 Si 导带 k_x-k_y 二维等能图相比, 单轴张应变 Si 导带二维等能图在应力的作用下各向异性相对显著, 三维等能图发生扭曲. 特别值得注意的是, 单轴张应变 Si 导带二

$$\varepsilon_{12} = \left(\frac{\sin 2\theta}{2c_{44}} \right) \sigma, \quad \varepsilon_{13} = 0, \quad \varepsilon_{23} = 0,$$

式中 c_{11}, c_{12}, c_{44} 为弹性劲度系数, 数值由文献 [3] 给出. 对于 [110]/(001) 单轴应力, $\theta = \pi/4$. 根据 (3) 式的未考虑带间耦合作用的导带色散关系, 因为未考虑带间耦合作用, 可知应变不会改变其等能面形状, 仅对导带边有平移作用, 所以二维等能图不发生扭曲, 仍为圆形.

若考虑带间耦合作用, 基于 (11) 式中的 $E(\mathbf{k})-k$ 关系解析模型, 图 3、图 4 分别给出了不同张/压应力下单轴应变 Si 导带三维等能图以及 k_x-k_y 剖面二维等能图. 图 3 为单轴张/压应变 Si 导带 40 meV 三维等能面形状随应力变化的情况, 三维等能面反映了不同应力下单轴应变 Si 沿各晶向的电子有效质量的变化. 由图可见, 无论是张应变还是压应变, $\langle 110 \rangle$ 晶向与 $\langle 100 \rangle$ 晶向在对应的横切面等能图曲率显著不同. 同时考虑到 40 meV ($\sim 3k_B T/2$) 为载流子输运的平均能量, 这意味着, 若在 k_x-k_y 平面上选择 MOSFET 沟道晶向时, 必须考虑有效质量各向异性.

维等能图中的 [110] 晶向明显突出, 所对应的有效质量也发生了一定的变化. 单轴压应变 Si 导带 k_x-k_y 剖面二维等能图随应力变化情况与单轴张应变 Si 类似, 只是等能图中“突出”部分所对

应的晶向不同. 本文建立的单轴应变 Si 导带极小值点附近的 $E(\mathbf{k})-k$ 解析模型也可给出考虑带间耦合作用时未应变 Si ($\sigma = 0$ GPa) 导带二维等能图和 40 meV 三维等能面, 与未考虑带间耦合作用下的体 Si 色散关系模型相比, 在能量较低时, 二者之间的区别很小, 均显示出各向同性, 两种模型差别不大. 能量为 40 meV 时, 未应变 Si 横切面

上 $\langle 100 \rangle$ 晶向部分考虑带间耦合时与传统模型相比略微收缩, 其所对应的有效质量无明显变化, 说明考虑带间耦合作用时未应变体 Si 导带色散关系表达式与未考虑耦合作用的体 Si $E(\mathbf{k})-k$ 表达式相似. 换言之, 由其所得未应变 Si 导带能带结构信息与基于传统未应变 Si 色散关系表达式所得的结果近似相同.

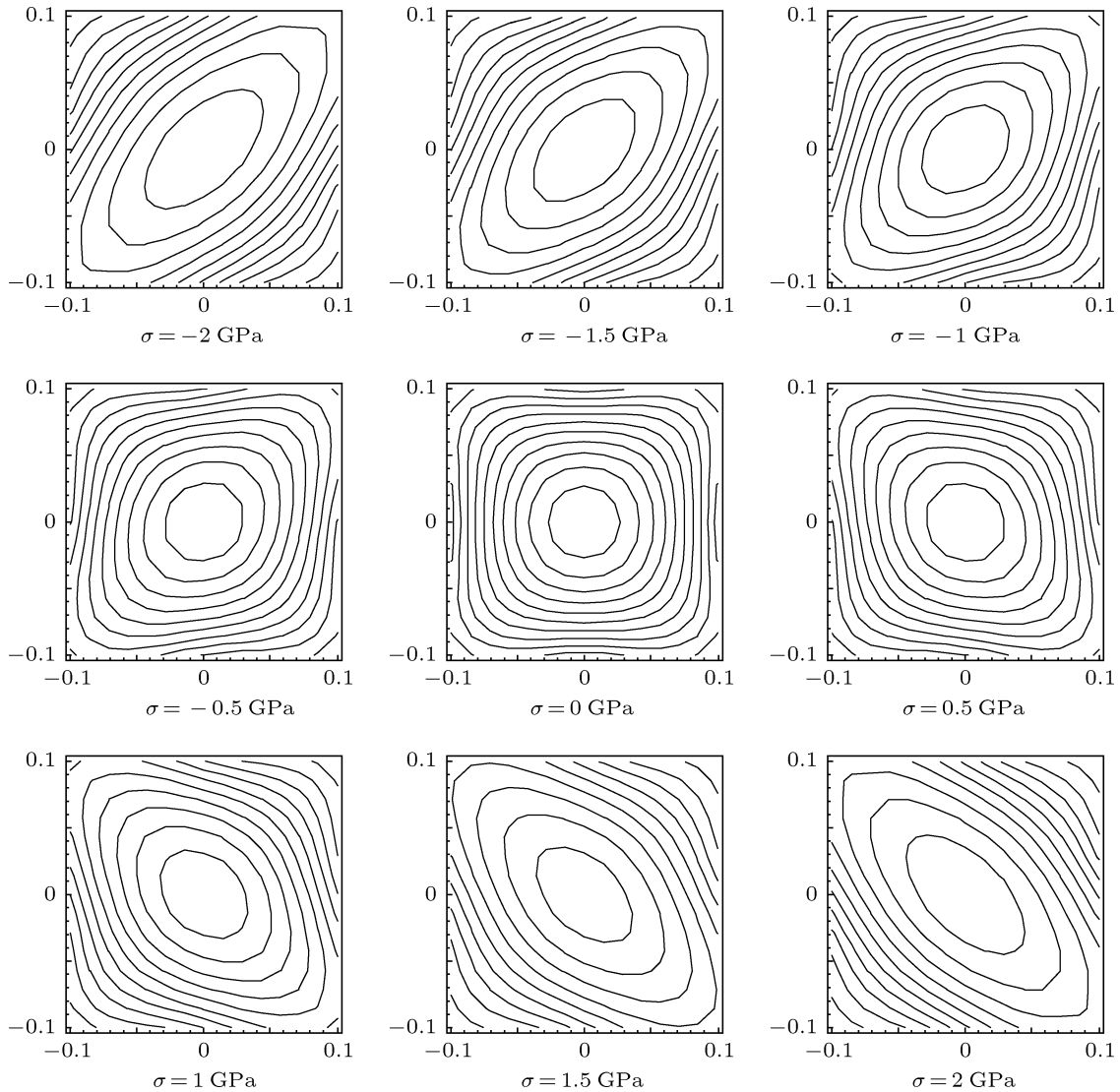


图 4 不同应力作用下考虑带间耦合作用的体 Si 导带 [001] 能谷 k_x-k_y 剖面二维等能图

图 3 和图 4 的三维等能面和二维等能图均反映了单轴应力对导带 [001] 能谷电子横纵有效质量的影响, 为了使应力的影响量化, 并经过初基原胞坐标系 (x, y, z) 与应力坐标系 (x', y', z') 之间的坐标转换, [001] 能谷横纵有效质量则可由 (15) 式求出. 图 5 给出了沿张应力方向横纵有效质量的变化. 从图 5 中可见, 在较小的应力作用下 (< 1 GPa), 横

纵有效质量的改变并不十分明显, 应力不断增大, 其变化才逐渐明显, 因此此前在色散关系模型推导中所做的“横纵有效质量近似不变”在较小应力作用下是合理的 (将应变视为微扰, 如果施加很大应力, 那末 $k \cdot p$ 微扰理论失效), 也应看到未应变时 Δ_1 和 Δ_2 能带的耦合作用对横向有效质量的影响比较微弱. 同时观察图 4 的二维能等图所反映的规律

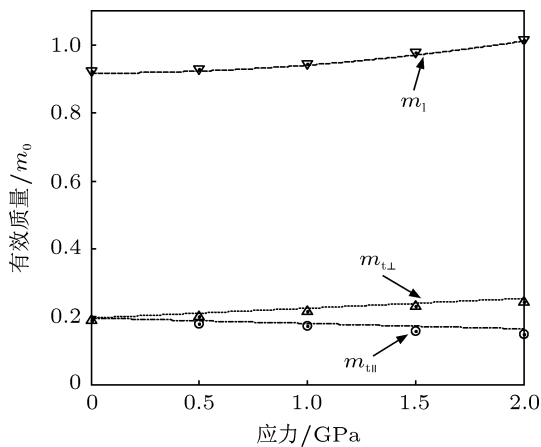


图5 [110]/(001) 张应力作用下 [001] 能谷有效质量 (线段表示文献 [11] 拟合结果, 符号表示本文计算结果)

可知, 平行于张 (压) 应力方向的横向有效质量 $m_{t\parallel}$ 即为垂直于压 (张) 应力方向的纵向有效质量 $m_{t\perp}$, 体现了张/压应力下横向有效质量之间的对称转换关系. 另外, 如图 2 所示, 对于给定的单轴应力数值大小, 沿 [110]/(001) 张、压应力作用下 [001] 能谷

的纵向有效质量不会发生变化.

4 结论

本文在 $k \cdot p$ 微扰理论的基础上, 量化分析了剪切应力作用下布里渊区边界 X 点处 Δ_1 和 Δ_2 能带之间的耦合作用, 建立了任意单轴应力作用下单轴应变 Si 导带各个能谷色散关系的解析模型. 本文的研究结果表明: 单轴张应变 Si 导带等能图在应力的作用下各向异性相对显著, 有效质量是各向异性的, 因此在选择 MOSFET 沟道晶面晶向时, 必须考虑有效质量各向异性. 此外, 与未考虑带间耦合作用下的传统体 Si 导带色散关系模型相比, 在能量较低时, 与本文耦合模型之间的区别很小, 均显示出各向同性. 本文模型的分析建立可以为单轴应变 Si 材料物理性质的理解以及对反型层能带结构的相关研究提供一定理论参考. 相信随着数值模型研究的不断深入, 单轴应变 Si 导带色散关系模型会更加精确.

[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] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827

[4] Ma J L, Zhang H M, Song J J, Wang G Y, Wang X Y 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 017101 (in Chinese) [马建立, 张鹤鸣, 宋建军, 王冠宇, 王晓艳 2011 物理学报 **60** 017101]

[5] Rahman M M 2008 *International Conference on Solid-State and Integrated-Circuit Technology (ICSICT)* p142

[6] Viktor S, Siegfried S 2008 *Solid-State Electronics* **52** 1861

[7] Soline R, Nicolas C 2003 *Journal of Applied Physics* **94** 5088

[8] Dhar S, Ungersböck E, Kosina S, Grasser T, Selberherr S 2007 *IEEE Trans. Nano.* **6** 97

[9] Hensel J C, Hasegawa H, Nakayama M 1965 *Physical Review* **138** A225

[10] Tan Y H, Li X J, Tian L L, Yu Z P 2008 *IEEE Trans. Electron Devices* **55** 1386

Analytical dispersion relation model for conduction band of uniaxial strained Si*

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

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

(Received 25 July November 2011; revised manuscript received 20 September 2011)

Abstract

In this paper, based on the framework of $k \cdot p$ method, the influence of uniaxial stress on the conduction band energy-band structure of bulk-Si is analysed first, the coupling of Δ_1 and $\Delta_{2'}$ bands at the X point, and the influence of that band-band coupling on the minimum of energy valley are then separately discussed under the action of shear strain. On that basis, the dispersion relation close to the minimum is obtained. Furthermore, the different valley orientations need to be taken into account. Using the coordinate transformation, the modelling for dispersion relation of each valley with arbitrary uniaxial stress is finally achieved. The proposed analytical model in this paper is also suited to the understanding of the physical properties of uniaxial strained Si material and may provide some references for the study on bandstructure and electrical properties of the inversion layer in uniaxial strained Si n MOSFETs.

Keywords: uniaxial stress, strained-Si, $k \cdot p$ method, dispersion relation

PACS: 71.20.-b, 73.20.At

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

[†] E-mail: gywang@stu.xidian.edu.cn