

单轴应变 Si(001) 任意晶向电子电导有效质量模型*

靳钊^{1)†} 乔丽萍²⁾ 郭晨¹⁾ 王江安¹⁾ 刘策¹⁾³⁾

1) (长安大学信息工程学院, 西安 710064)

2) (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)

3) (University of Houston, Houston, Texas, USA)

(2012年8月13日收到; 2012年10月9日收到修改稿)

单轴应变 Si 材料电子电导有效质量是理解其电子迁移率增强的关键因素之一, 对其深入研究具有重要的理论意义和实用价值. 本文从 Schrödinger 方程出发, 将应力场考虑进来, 建立了单轴应变 Si 材料导带 $E-k$ 解析模型. 并在此基础上, 最终建立了单轴应变 Si(001) 任意晶向电子电导有效质量与应力强度和应力类型的关系模型. 本文的研究结果表明: 1) 单轴应力致电子迁移率增强的应力类型应选择张应力. 2) 单轴张应力情况下, 仅从电子电导有效质量角度考虑, [110]/(001) 晶向与 [100]/(001) 晶向均可. 但考虑到态密度有效质量的因素, 应选择 [110]/(001) 晶向. 3) 沿 (001) 晶面上 [110] 晶向施加单轴张应力时, 若想进一步提高电子迁移率, 应选取 [100] 晶向为器件沟道方向. 以上结论可为应变 Si nMOS 器件性能增强的研究及导电沟道的应力与晶向设计提供重要理论依据.

关键词: 单轴应变, $E-k$ 关系, 电导有效质量

PACS: 85.30.De, 85.30.Pq, 85.30.Tv

DOI: 10.7498/aps.62.058501

1 引言

单轴应力作用下, Si 材料导带结构发生变化, 电子迁移率获得增强. 该特性可大幅提高 Si nMOS-FET 的性能^[1-5], 在小尺寸器件与超大规模集成电路 (VLSI) 中有广泛的应用.

单轴应变 Si nMOSFET 性能的增强主要得益于单轴应力作用下材料电子迁移率的提高, 其中, 单轴应变 Si 材料 (s-Si) 电子电导有效质量是理解电子迁移率增强的关键因素之一, 对其深入研究具有重要的理论意义和实用价值. 然而, 就作者所知, 目前国内外文献重点报道单轴应变 Si 电子迁移率结果^[6-10], 而对求解过程中各重要物理参量报道较少, 有关单轴应变 Si 材料电子电导有效质量的报道缺乏, 制约了单轴应力致电子迁移率增强物理机理的深入理解, 也限制了对单轴应力作用下应该如何进一步增强电子迁移率的探索.

有鉴于此, 本文基于 (001) 晶面单轴应变 Si (nMOS 制作常用晶面), 将应力场考虑进来, 从 Schrödinger 方程出发, 首先建立了单轴应变 Si 材料导带 $E-k$ 解析模型. 然后在此基础上, 获得了单轴应变 Si (001) 导带能谷能级、简并度与应力强度及是施加应力角度的关系. 基于以上各物理模型, 最终建立了单轴应变 Si(001) 任意晶向电子电导有效质量与应力强度和应力类型的关系, 为单轴应力致电子迁移率增强最优晶向的选择提供了理论依据. 最后, 本文还对最优晶向单轴应力作用下如何进一步降低电子电导有效质量, 进而提高电子迁移率进行了讨论, 获得了有实用价值的相关结论.

2 单轴应变 Si(001) 导带 $E-k$ 解析模型

获得单轴应变 Si 材料电子电导有效质量, 必须首先建立单轴应变 Si 材料导带 (CB) $E-k$ 模型. 单电子近似下, 单轴应变 Si 材料 Schrödinger 方程可

* 国家自然科学基金 (批准号: 51277012, 61162025) 和中央高校基本科研业务费专项资金 (批准号: CHD2011ZD004, CHD2013JC023, CHD2013JC035, CHD2013JC048, CHD2013JC056) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: jinzhao@126.com

表示为 [11,12]

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + U_{\text{unstrain}}(\mathbf{r} + U_{\text{Deformation}}(\mathbf{r})) \right\} \Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \Psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

其中, $U_{\text{unstrain}}(\mathbf{r})$ 是弛豫 Si 材料的晶格周期性势场, $U_{\text{Deformation}}(\mathbf{r})$ 是晶格形变势场, $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

考虑单轴应变 Si 导带 6 个能谷极值中的任意一个 \mathbf{k}_0^i , 用零级波函数在单轴应变 Si 材料导带 6 个能谷极值中的任意一个 \mathbf{k}_0^i ($i = 1-6$) 处将 $u_{n\mathbf{k}}$ 展开, 并写为 \mathbf{k}_0^i 表象形式, (1) 式变为下式:

$$(H_{r_0^i} + H_{\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{p}}} + H_{\text{strain}}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n^i(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

其中

$$H_{\mathbf{k}_0^i} = \frac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k}_0^i \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 \cdot k_0^i{}^2}{2m_0} + U_{\text{unstrain}}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

$$H_{\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{p}}} = \frac{\hbar}{m_0} \left[(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0^i) \right] \cdot \widehat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2 (k^2 - k_0^i{}^2)}{2m_0}, \quad (4)$$

$$H_{\text{strain}} = U_{\text{Deformation}}(\mathbf{r}). \quad (5)$$

采用微扰理论, 能量 E 与波矢量 k 关系可由 (2) 式获得,

$$\begin{aligned} \varepsilon_n^i(\mathbf{k}) = & \varepsilon_n^i(\mathbf{k}_0^i) + U_{\mathbf{k}_0^i} + \frac{\hbar^2 (k^2 - k_0^i{}^2)}{2m_0} \\ & + \frac{\hbar}{m_0} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0^i) \cdot \mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}_0^i) + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \\ & \times \sum_{n' \neq n} \frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0^i) \cdot \mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}_0^i) (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0^i) \cdot \mathbf{p}_{n'n}(\mathbf{k}_0^i)}{\varepsilon_n^i(\mathbf{k}_0^i) - \varepsilon_{n'}^i(\mathbf{k}_0^i)}. \end{aligned} \quad (6)$$

将 (6) 式与未应变 Si 材料的式子相比较, 发现单轴应变 Si 材料的式子中除了多出常数项 $U_{\mathbf{k}_0^i}$ 外, 导带其他部分色散关系与未应变材料的相同. 这样, (6) 式中反映单轴应变材料导带能谷形状的电子有效质量与未应变的相同, 也可表示为横向、纵向电子有效质量 (m_t^* 和 m_l^*).

为了更方便的看到这点, 利用关系式 $\mathbf{p}_{nn'}(\mathbf{k}_0^i) + \hbar \mathbf{k}_0^i = 0$, 将 (6) 式可化为我们熟悉的形式, 即为单轴应变 Si 材料导带 $E-k$ 关系,

$$\begin{aligned} \varepsilon^i(\mathbf{k}) = & \varepsilon_c(\mathbf{k}_0) + U_{\mathbf{k}_0^i} + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x}^i)^2}{m_t^*} \right. \\ & \left. + \frac{(k_x - k_{0y}^i)^2}{m_t^*} + \frac{(k_x - k_{0z}^i)^2}{m_t^*} \right], \end{aligned} \quad (7)$$

其中, $U_{\mathbf{k}_0^i}$ 可由形变势理论得到,

$$H_{\varepsilon, \nu} = \Xi_d (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + \Xi_u \varepsilon_{\nu\nu}, \quad (8)$$

式中 $\nu = 1, 2, 3$, Ξ_d 和 Ξ_u 为形变势常数, ε_{11} , ε_{22} , ε_{33} , ε_{12} 为应变张量, 它们的表达式为

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\cos^2 \theta c_{11} + \cos 2\theta c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2} T,$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\sin^2 \theta c_{11} - \cos 2\theta c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2} T,$$

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{c_{12}}{c_{11}^2 + c_{11}c_{12} - 2c_{12}^2} T,$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{\sin 2\theta}{2c_{44}} T,$$

$$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0, \quad (9)$$

式中, T 为应力强度, θ 为 (001) 面内施加应力的角度, c_{11} , c_{12} , c_{44} 为弹性劲度系数, 以上数值可参阅文献 [13] 获得.

3 电子电导有效质量模型

3.1 简并度及能级

单轴应变 Si 材料导带能谷简并度及能级是确定电子电导有效质量的另一必要条件. 基于上节所得单轴应变 Si 材料导带 $E-k$ 解析模型, 图 1 给出了单轴张应变 Si(001) 导带能谷能级与应力强度及受力角度的关系.

为了讨论方便, 图 2 进一步给出了单轴应变 Si(001) 导带能谷简并度与应力强度及受力角度的关系. 由图 2(a) 可见, 当施加的单轴应力为张应力时, 导带带边简并度随受力晶向变化情况为 $4^\circ \rightarrow 2^\circ \rightarrow 4^\circ$; 当施加的单轴应力为压应力时 (见图 2(b)), 导带带边简并度随受力晶向变化情况为 $2^\circ \rightarrow 4^\circ \rightarrow 2^\circ$.

图 2(c) 是为 [110]/(001) 单轴应变 Si 导带能谷简并度及能级与应力强度及类型的关系. 从图上我们可以清楚地看到由于应变导致导带底附近的六度简并能谷分裂成两组分立的能谷: 一组为二重简并能谷 Δ_2 ([001], [00 $\bar{1}$] 方向能谷), 另一组为四重简并能谷 Δ_4 ([100], [$\bar{1}$ 00], [010], [0 $\bar{1}$ 0] 方向能谷). 其中, 张应力作用下, Δ_2 能谷能量极小值降低, 成为导带带边, Δ_4 能谷能量极小值升高. 压应力情况与之相反, Δ_4 能谷能量极小值降低, 成为导带带边.

图 2(d) 是为 $[100]/(001)$ 单轴应变 Si 导带能谷简并度及能级与应力强度及类型的关系. 与图 2(c) 情况类似, 从图上我们可以清楚地看到由于应变导致导带底附近的六度简并能谷分裂成两组分立的能谷: 一组为二重简并能谷 Δ_2 ($[100]$, $[\bar{1}00]$ 方向能

谷), 另一组为四重简并能谷 Δ_4 ($[001]$, $[00\bar{1}]$, $[010]$, $[0\bar{1}0]$ 方向能谷). 其中, 张应力作用下, Δ_4 能谷能量极小值降低, 成为导带带边, Δ_2 能谷能量极小值升高. 压应力情况与之相反, Δ_2 能谷能量极小值降低, 成为导带带边.

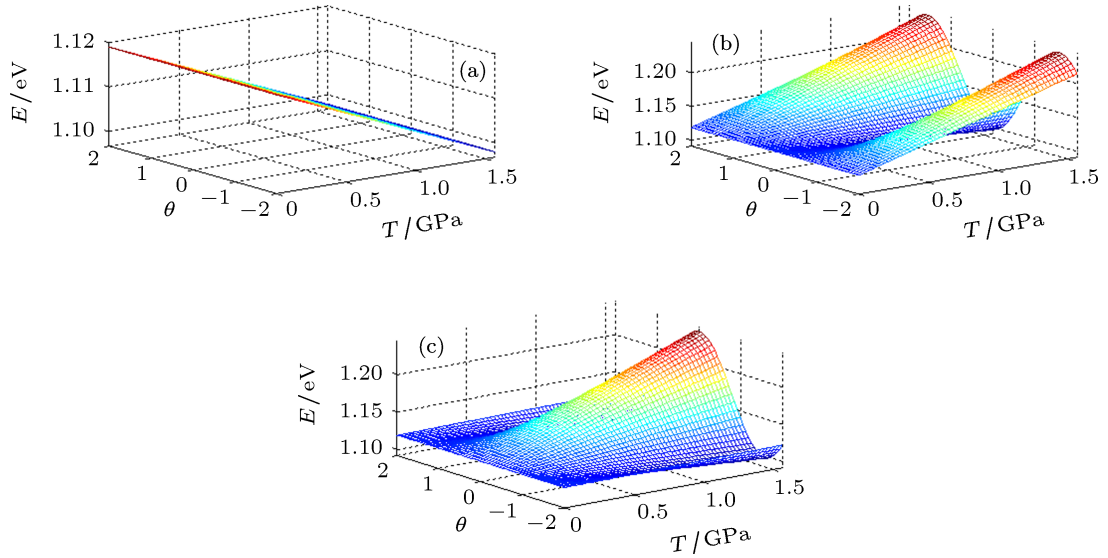


图 1 单轴张应变 Si(001) 导带能谷能级与应力大小及角度关系 (a) $[001]$ 能谷; (b) $[010]$ 能谷; (c) $[100]$ 能谷

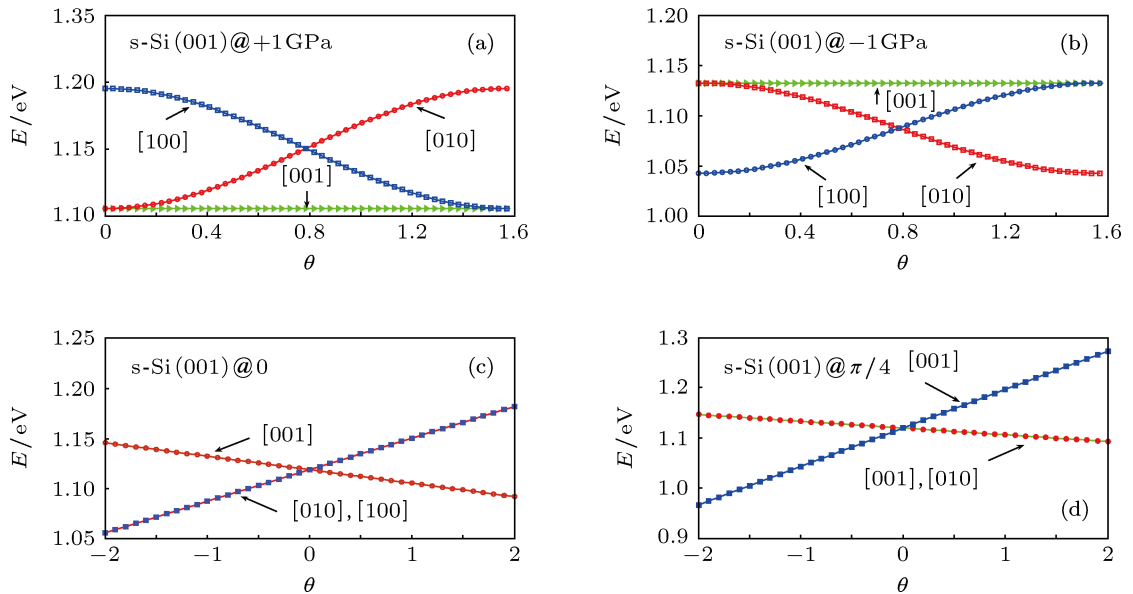


图 2 单轴应变 Si(001) 导带能谷简并度与应力强度及受力角度的关系 (a) $T = +1$ GPa; (b) $T = -1$ GPa; (c) $[110]$ 晶向 ($\theta = \pi/4$); (d) $[100]$ 晶向 ($\theta = 0$)

3.2 (001) 任意晶向张/压应变电子电导有效质量

基于已获得的单轴应变 Si 材料导带 $E-k$ 关系、能谷简并度及能级模型, 下面进一步建立单轴应变 Si 材料沿 (001) 面任意晶向电子电导有效质量 m_c . 低简并能谷电导有效质量记作 m_{low} , 移率记作 $\mu_{\text{low}}^{[14]}$. 高简并能谷的各量分别记作 m_{high}^i 和 μ_{high}^i ($i=1,2$, 分别表示次高和最高能谷). 另外, 低能谷、次高和最高能谷的电子密度分别为 n_{low} 和 n_{high}^i , 总的电子浓度为

$$n = n_{\text{low}} + n_{\text{high}}^i. \quad (10)$$

应变 Si 电流密度可写作

$$J = qn\mu_c E = q(n_{\text{low}}\mu_{\text{low}} + n_{\text{high}}^i\mu_{\text{high}}^i)E. \quad (11)$$

采用类似 GaAs 的处理方法, 能量差为 $\Delta E_{\text{C,Split}}^i$ 的高低能谷之间的填充数比为

$$\frac{n_{\text{high}}^i}{n_{\text{low}}} = R_i \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{C,Split}}^i}{k_B T}\right), \quad (12)$$

式中 R_i 为态密度比, 用下式表示:

$$R_i = \frac{M_{\text{high}}^i}{M_{\text{low}}}, \quad (13)$$

M_{low} 和 M_{high}^i 分别为低能谷和高能谷数目, 可由图 1 判断得出. 联立方程 (10), (12) 和 (13), 可得

$$n_{\text{low}} = \left(\frac{1}{R_i \times (\exp(-\Delta E_{\text{C,Split}}^i/k_B T) + 1)}\right)n,$$

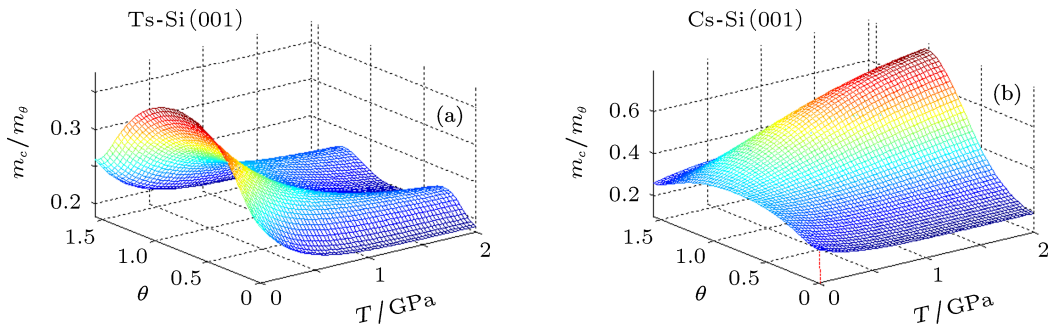


图 3 单轴应变 Si(001) 电子电导有效质量与应力强度及受力角度的关系 (a) 张应变; (b) 压应变

依据半导体迁移率的计算公式 $\mu = q\langle\tau\rangle/m_c$ (式中, $\langle\tau\rangle$ 为平均动量弛豫时间, q 为电子电量), 单轴应变 Si 材料电子平均动量弛豫时间和电子电导有效质量是电子迁移率增强的两个关键因素. 前者可

$$n_{\text{high}}^i = \left(\frac{1}{\frac{1}{R_i} \times (\exp(\Delta E_{\text{C,Split}}^i/k_B T) + 1)}\right)n. \quad (14)$$

如将 μ_c , μ_{low} 及 μ_{high}^i 写为显含电导率有效质量的形式

$$\begin{aligned} \mu_c &\propto \frac{1}{m_c}, \\ \mu_{\text{low}} &\propto \frac{1}{m_{\text{low}}}, \\ \mu_{\text{high}}^i &\propto \frac{1}{m_{\text{high}}^i}. \end{aligned} \quad (15)$$

采用未应变 Si 电子电导率有效质量的求解方法, 可得单轴应变 Si 材料的 (001) 晶面任意晶向电子电导有效质量 m_c 的模型为

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_c} &= \left(\frac{1}{m_{\text{low}}}\right) \times \left(\frac{1}{R \times (\exp(-\Delta E_{\text{C,Split}}^i/k_B T) + 1)}\right) \\ &+ \left(\frac{1}{m_{\text{high}}^i}\right) \times \left(\frac{1}{\frac{1}{R} \times (\exp(\Delta E_{\text{C,Split}}^i/k_B T) + 1)}\right). \end{aligned} \quad (16)$$

图 3 为基于 (16) 式获得的单轴应变 Si 材料电子电导有效质量 m_c 与应力强度及受力角度的关系. 由图可见, 当施加单轴张应力时, Si 材料沿 (001) 面内任意晶向的电子电导有效质量 m_c 随应力增大均有明显减小. 值得注意的是, 虽然 [110]/(001) 晶向电子电导有效质量在应力作用下减小的幅度最大, 但其绝对值与 [100]/(001) 晶向电子电导有效质量的相当 (应力大于一定量值时). 而当施加单轴压应力时, Si 材料沿 (001) 面内高对称晶向的电子电导有效质量 m_c 随应力增大或明显增大或几乎不变.

由电子各散射概率倒数之和获得.

$$1/\langle\tau\rangle = P = \sum_i P_i = P_{\text{II}} + P_{\text{ac}} + P_{\text{in}}, \quad (17)$$

式中, P_{II} , P_{ac} , P_{in} 分别为离化杂质散射、声学声子散

射、谷间声子散射概率, 它们的表达式依次为^[15,16]

$$P_{\text{II}} = \frac{N_i e^4}{16\pi(2m^*)^{1/2}(\epsilon_0\epsilon)^2 E^{3/2}} \times \ln\left(\frac{12m^*k_B^2 T^2 \epsilon_0 \epsilon}{e^2 \hbar^2 N_i}\right), \quad (18)$$

$$P_{\text{ac}} = \frac{m^{*3/2} \Xi^2 k_B T (2E)^{1/2}}{\pi \hbar^4 c_1}, \quad (19)$$

$$P_{\text{in}} = \frac{D_i^2 (m^*)^3 Z_f}{2^{1/2} \pi \hbar^3 \rho \omega_i} \left(N_i + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\right) \times (E - E_c \pm \hbar\omega_i - \Delta E_{\text{fi}})^{1/2}. \quad (20)$$

分析(18)—(20)式可以发现, m^* (电子态密度有效质量)是导致应变 Si 与未应变 Si $\langle\tau\rangle$ 值不同的关键参量. 对于未应变 Si 来说, 只要晶面是确定的, 如(001)晶面, 无论选择哪个晶向作为器件沟道晶向, 它们的 m^* 值都是同一个值. 这样, m_c (未应变 Si 沿不同晶向电子电导有效质量不同)就决定了未应变 nMOS 器件迁移率最优晶向该如何选择. 而对于单轴应变 Si 来说, 虽然制作 nMOS 器件的晶面确定为(001)晶面, 但沿不同晶向施加单轴应力致使单轴应变 Si m^* 不仅与未应变 Si 的不同, 且沿不同晶向的 m^* 值也各不相同. 值得注意的是, 虽然单轴应变 Si m^* 小于未应变 Si 的 m^* , 且沿不同晶向的 m^* 值也不同, 但观察(17)—(20)式可以发现, (001)面单轴应变 Si 迁移率 μ 的增强主要由 m_c 引起(μ 与 m_c 的 1 次幂反比, 与 m^* 的约 1.5 次幂反比). 这样, (001)面单轴应变 Si m^* 值对晶向选择的影响可以忽略, 即若确定(001)面单轴应变 Si 迁移率最优晶向, 只需考虑 m_c 值即可.

依据图 3 所得的结果, 张应力可使 m_c 减小, 单轴应力致电子迁移率增强的应力类型应选择为张应力. 同时, 单轴张应力情况下, 仅从电子电导有效

质量角度考虑, [110]/(001) 晶向与 [100]/(001) 晶向均可. 但考虑到 [110]/(001) 晶向单轴张应力作用下材料态密度有效质量会小于 [100]/(001) 晶向的情况(这点可从图 2(c) 中简并度做出初步的判断, 前者导带边简并度为 2, 后者为 4), 单轴张应力致电子迁移率增强的晶向应选择 [110]/(001), 这与工艺文献报道的结论一致^[17-19].

3.3 [110]/(001) 张应变 Si 材料电子电导有效质量

3.2 节给出了(001)单轴应变 Si 材料任意晶向电子电导有效质量 m_c 与应力强度及受力角度的关系, 需要强调补充的是, 该任意晶向为单轴应力施加的晶向, 也是器件应用时的沟道晶向. 这样的情况与当今主流 CMOS 工艺中 SiN 膜致沟道单轴应力工艺兼容. 试想一下, 如果施加单轴应力的晶向不作为器件沟道晶向会有什么样的情况发生? 本小节将以 [110]/(001) 单轴应力为例, 讨论施加该应力后各晶向电子电导有效质量随应力变化的情况.

图 4 即为所获得的 [110]/(001) 单轴应变 Si 导带底电子电导有效质量 m_c 与应力及其沿各晶向变化的关系. 由图可见, [110]/(001) 单轴张应力作用下, 电子沿各晶向电导有效质量均随着应力的增大而减小. [110]/(001) 压应力的情况刚好相反, 电子沿各晶向电导有效质量均随着应力的增大而增大. 此外, 无论是张应变还是压应变, (001)面上沿 [110] 晶向 ($\theta = \pi/4$) 电导有效质量均大于 [100] 晶向 ($\theta = 0$) 电导有效质量. 这一结果表明, 沿(001)晶面上 [110] 晶向施加单轴应力时, 若不以该晶向作为沟道晶向, 而选择 [100] 晶向作为沟道时, 电子电导有效质量更小, 电子迁移率会进一步增强.

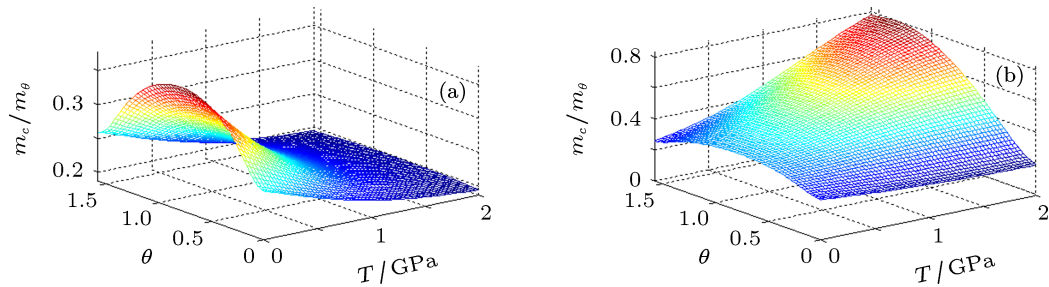


图 4 [110]/(001) 单轴应变 Si 导带电子电导有效质量与应力及晶向的关系 (a) 张应力; (b) 压应力

4 结 论

本文从 Schrödinger 方程出发, 将应力场考虑进来, 建立了单轴应变 Si 材料导带 $E-k$ 解析模型. 在此基础上, 获得了单轴应变 Si(001) 导带能谷能级、简并度与应力强度及受力角度的关系, 并最终建立了单轴应变 Si(001) 任意晶向电子电导率有效质量与应力强度和应力类型的关系模型.

本文的研究结果表明: 1) 单轴应力致电子迁移率增强的应力类型应选择张应力. 2) 单轴张应力情

况下, 仅从电子电导有效质量角度考虑, [110]/(001) 晶向与 [100]/(001) 晶向均可. 但考虑到态密度有效质量的因素, 应选择 [110]/(001) 晶向. 3) 沿 (001) 晶面上 [110] 晶向施加单轴张应力时, 若想进一步提高电子迁移率, 器件沟道应选取 [100] 晶向较好.

单轴应变 Si 材料电子电导有效质量随应力减小是其电子迁移率增强的关键因素之一. 本文的模型解析、结果量化, 所得结论可为应变 Si nMOS 器件性能增强的研究及导电沟道的应力与晶向设计提供重要理论依据.

-
- [1] Jiseok K and Massimo V F 2010 *J. App. Phys.* **108** 013710
- [2] Weber O, Takenaka M and Takagi Sh I 2010 *Jpn. J. Appl. Phys.* **49** 0741011
- [3] Uchida K, Kinoshita A and Saitoh 2006 *IEDM* 1019
- [4] Song J J, Zhang H M, Dian X Y, Hu H Y and Xuan R X 2008 *Acta Physica Sinica*. **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]
- [5] 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]
- [6] Tan Y H, Li X J, Tian L L 2008 *IEEE Trans. Electron Devices* **55** 1386
- [7] Courtesy J R 2005 *IEEE Circuits & Magazine* **9** 18
- [8] Ungersboeck E, Sverdlov V, Kosina H 2006 *International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices* 43
- [9] Thompson S E, Armstrong M, Auth C 2004 *IEEE Trans. Electron. Dev.* **51** 11
- [10] Paul D J 2004 *Semiconductor Science and Technology* **19** 75
- [11] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dian X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827
- [12] Song J J, Zhang H M, Shu B, Hu H Y, Dian X Y 2008 *Chinese Journal of Semiconductor* **29** 442
- [13] Song J J, Zhang H M, Dian X Y, Hu H Y, Xuan R X 2010 *Science In China* **53** 454
- [14] Shi M, Wu G J 2008 *Physics of Semiconductor Devices* (Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press) (in Chinese) p389 [施敏, 伍国珏 2008 半导体器件物理 (西安: 西安交通大学出版社) 第 389 页]
- [15] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Xang X Y, Wang G Y 2012 *Acta Physica Sinica* **61** 057304 (in Chinese) [宋建军, 张鹤鸣, 胡辉勇, 王晓艳, 王冠宇 2012 物理学报 **61** 057304]
- [16] Song J J, Zhang H M, Dian X Y, Hu H Y, Xang X Y, Wang G Y 2012 *Science in China* **55** 1399
- [17] Thompson S E, Parthasarathy S 2006 *Materials Today* **9** 20
- [18] Thompson S E, Sun G Y, Parthasarathy S 2006 *Materials Science & Engineering B* **135** 179
- [19] Thompson S E, Sun G Y, Choi Y S 2006 *IEEE Trans. Electron Devices* **53** 1010

Electronic conductivity effective masses along arbitrary directional channel in uniaxial strained Si(001)*

Jin Zhao^{1)†} Qiao Li-Ping²⁾ Guo Chen¹⁾ Wang Jiang-An¹⁾ Richard C. Liu¹⁾³⁾

1) (School of Information Engineering, Chang'an University, Xi'an 710064, China)

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

3) (University of Houston, Houston, Texas, USA)

(Received 13 August 2012; revised manuscript received 9 October 2012)

Abstract

Electronic conductivity effective mass is one of the key parameters studying electron mobility enhancement in uniaxial strained Si material. Its in-depth study has the significant theoretical and practical values. In this paper, we first establish the $E-k$ relation for conduction band in a uniaxial strained Si material. And the model of electronic conductivity effective mass along an arbitrary directional channel in the uniaxial strained Si (001) is obtained. Our concluding results are described as follows. 1) Tensile stress should be used to enhance electron mobility for uniaxial strained Si. 2) In the case of tensile stress application, both [110]/(001) and [100]/(001) directions are the desirable ones from the evaluation of electronic conductivity effective mass. And [110]/(001) direction should be preferable when the density of state effective mass is taken into consideration. 3) If [100] direction becomes the channel direction under [110]/(001) uniaxial strain, the further electron mobility enhancement will occur. The results above can provide valuable reference for the conduction channel design related to stress and orientation in the strained Si nMOS device.

Keywords: uniaxial strain, $E-k$ relation, conductivity effective mass

PACS: 85.30.De, 85.30.Pq, 85.30.Tv

DOI: 10.7498/aps.62.058501

* Project Supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51277012, 61162025), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities (Grant Nos. CHD2011ZD004, CHD2013JC023, CHD2013JC035, CHD2013JC048, CHD2013JC056).

† Corresponding author. E-mail: jinzhao@126.com