

压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴散射与迁移率模型

白敏 宣荣喜 宋建军 张鹤鸣 胡辉勇 舒斌

Hole scattering and mobility in compressively strained Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x

Bai Min Xuan Rong-Xi Song Jian-Jun Zhang He-Ming Hu Hui-Yong Shu Bin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 038501 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.038501

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.038501>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I3>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

堆叠栅介质对称双栅单 Halo 应变 Si 金属氧化物半导体场效应管二维模型

Two-dimensional model of symmetrical double-gate strained Si single Halo metal-oxide semiconductor field effect transistor with gate stack dielectric

物理学报.2014, 63(24): 248502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.248502>

对称三材料双栅应变硅金属氧化物半导体场效应晶体管二维解析模型

Two-dimensional analytical models for the symmetrical triple-material double-gate strained Si MOSFETs

物理学报.2014, 63(14): 148502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.148502>

90 nm 互补金属氧化物半导体静态随机存储器局部单粒子门锁传播效应诱发多位翻转的机理

Mechanism of multiple bit upsets induced by localized latch-up effect in 90 nm complementary metal semiconductor static random-access memory

物理学报.2014, 63(12): 128501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.128501>

SOI SiGe HBT 结构设计及频率特性研究

Structure design and frequency characteristics of SOI SiGe HBT

物理学报.2014, 63(11): 118501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.118501>

累积剂量影响静态随机存储器单粒子效应敏感性研究

Synergistic effects of total ionizing dose on the single event effect sensitivity of static random access memory

物理学报.2014, 63(1): 018501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.018501>

压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴散射与迁移率模型*

白敏 宣荣喜 宋建军[†] 张鹤鸣 胡辉勇 舒斌

(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)

(2014年7月12日收到; 2014年9月14日收到修改稿)

应变 Ge 材料因其载流子迁移率高, 且与硅工艺兼容等优点, 已成为硅基 CMOS 研究发展的重点和热点. 本文基于压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 价带结构模型, 研究了压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴各散射概率、空穴迁移率与 Ge 组分 (x) 的关系, 包括空穴离化杂质散射概率、声学声子散射、非极性光学声子散射、总散射概率以及空穴各向同性、各向异性迁移率, 获得了有实用价值的相关结论. 本文量化模型可为应力致 Ge 改性半导体物理的理解及相关器件的研究设计提供有重要的理论参考.

关键词: 锗, 应变, 散射, 迁移率

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

DOI: 10.7498/aps.64.038501

1 引言

应变 Ge 材料载流子迁移率高, 且与硅工艺兼容, 将其应用于 MOS 沟道是硅基 CMOS 延续摩尔定律的重要技术手段^[1-6]. 应变 Ge 空穴散射及迁移率等基本物理属性是研究、设计应变 Ge 材料与器件的重要理论基础, 具有重要的研究价值^[7-8].

目前, 国外有关应变 Ge 的文献报道, 集中于应变 Ge 沟道材料致器件性能增强的应用方面, 而对应变 Ge 空穴散射及迁移率等基本物理属性的研究仍然缺乏^[9-12]. 为此, 本文采用 kp 能带理论^[13], 首先研究了压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x ((001) 晶向弛豫 Si_{1-x}Ge_x 虚拟衬底上的压应变 Ge) 价带结构模型, 在此基础上, 进一步获得了压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴各散射概率、空穴迁移率与 Ge 组分 (x) 的关系, 包括空穴离化杂质散射概率、声学声子散射、非极性光学声子散射、总散射概率以及空穴各向同性、各向异性迁移率.

通过给出量化的理论模型, 旨在为应力致 Ge 改性半导体物理的理解及相关器件的研究设计提

供有重要的理论参考.

2 理论模型

研究压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴散射与迁移率模型, 需要首先给出其价带结构 $E-k$ 关系^[14],

$$E_V^1 = 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta}{3}\right) - \frac{p}{3},$$

$$E_V^2 = 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta - 2\pi}{3}\right) - \frac{p}{3},$$

$$E_V^3 = 2\sqrt{Q} \cos\left(\frac{\Theta + 2\pi}{3}\right) - \frac{p}{3},$$

$$Q = (p^2 - 3q)/9,$$

$$p = \Delta - (a_{11} + a_{22} + a_{33}),$$

$$R = (2p^3 - 9pq + 27r)/54,$$

$$\Theta = \cos^{-1}(-R/\sqrt{Q^3}),$$

$$q = a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2$$

$$- a_{23}^2 - (2\Delta/3)(a_{11}a_{22} + a_{33}),$$

$$r = a_{11}a_{23}^2 + a_{22}a_{13}^2 + a_{33}a_{12}^2 - a_{11}a_{22}a_{33}$$

$$- 2a_{12}a_{23}a_{13} + (\Delta/3)(a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33})$$

* 教育部博士点基金 (批准号: JY0300122503) 和陕西省自然科学基金研究计 (批准号: 2014JQ8329) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: jianjun_79_81@xidian.edu.cn

$$+ a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2), \quad (1)$$

式中, 各参量物理意义详见文献 [14], 其具体数值见文献 [3] 和 [6].

基于压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 价带结构 $E-k$ 关系, 可获得空穴沿不同晶向的电导率有效质量. 由于应力作用下, 应变材料价带带边和亚带边发生分裂, 空穴主要占据带边, 因此, 带边方向有效质量为压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴电导率有效质量.

同时, 基于压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 价带结构 $E-k$ 关系, 考虑压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 价带劈裂能, 依据

$$m_d^* = \left[(m_a^*)_h^{3/2} + (m_a^*)_l^{3/2} \times \exp(-\Delta E_{V,Split}/k_B T) \right]^{2/3} \quad (2)$$

可进一步给出压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 价带顶空穴态密度有效质量 (m_d^*), 该参量是下一步计算压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴各散射概率的重要参数 [15]. (2) 式中, $(m_a^*)_h$ 和 $(m_a^*)_l$ 分别为“重”“轻”平均有效质量, $\Delta E_{V,Split}$ 为“重”“轻”空穴带分裂能.

压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 与未应变 Ge 相比, 虽然二者所属晶系不同, 但应变未引起空穴散射机理类型的变化, 仅仅改变了各散射概率的量化数值. 所以, 压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 与未应变 Ge 散射机理的类型应该是一致的.

本文在核实验证未应变 Ge 空穴各散射机理后 [7], 确定了压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 应主要考虑离化杂质散射、声学声子散射及非极性光学声子这几种空穴散射机理 (分别用 P_{II} , P_{ac} , P_{in} 表示), 其数理模型如下:

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

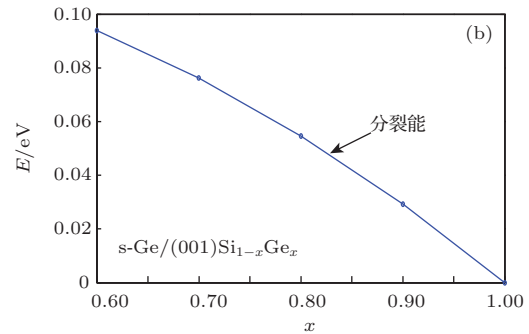
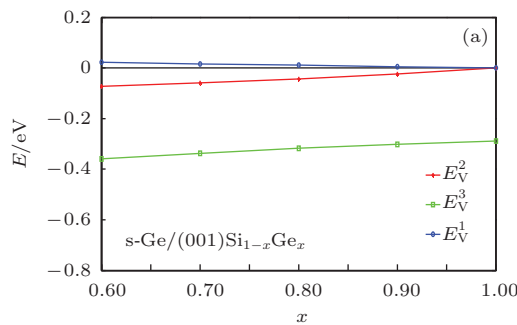


图 1 (网刊彩色) 压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x Γ 点处价带各能级、分裂能与 Ge 组分 (x) 的关系 (a) Γ 点价带能级; (b) 分裂能

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

$$P_{op} = \frac{D_0^2 (m^*)^{3/2}}{2^{1/2} \pi \hbar^3 \rho \omega_0} \left(n_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times (E \pm \hbar \omega_0)^{1/2}, \quad (5)$$

式中各参数物理意义详见文献 [7, 8], 其具体数值见文献 [16].

需要说明的是, 各散射机理同时存在, 故压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴总散射概率应为

$$P = \sum_i P_i = P_{II} + P_{ac} + P_{op}. \quad (6)$$

基于 (6) 式, 采用 (7) 式和 (8),

$$\mu = q \langle \tau \rangle / m_c, \quad (7)$$

和

$$\mu_p = \frac{q}{m_{c,h}} \left[\frac{N_i e^4}{16\pi(2m^*)^{1/2}(\epsilon_0\epsilon)^2 E^{3/2}} \times \ln \left(\frac{12m^* k_B^2 T^2 \epsilon_0 \epsilon}{e^2 \hbar^2 N_i} \right) + \frac{m^*{}^{3/2} \Xi^2 k_B T (2E)^{1/2}}{\pi \hbar^4 c_1} + \frac{D_0^2 m^*{}^{3/2}}{2^{1/2} \pi \hbar^3 \rho \omega_0} \left(n_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times (E \pm \hbar \omega_0)^{1/2} \right]^{-1} \Big|_{E=1.5k_B T, T=300K}, \quad (8)$$

可计算获得压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴沿不同晶向迁移率与空穴平均迁移率随应力变化的关系.

3 结果与讨论

图 1 为压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x Γ 点处价带各能级、分裂能与 Ge 组分 (x) 的关系, 由图可见, 在应力的作用下, 压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 价

带 Γ 点处简并消除, 能带发生了分裂, 且分裂能随应力的增加而增大. 图2至4为压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿不同晶向的价带结构, 通过与未应变 Ge 价带结构的比较, 我们可以清晰的发现, 压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 价带 Γ 点处简并消除, 以及价带对称性的变化情况.

图5为压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴各有效质量与 Ge 组分(x)的关系, 包括空穴平均有效质量、空穴电导率有效质量及空穴态密度有效质量. 由图可见, 压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴各有效质量(除“轻”空穴平均有效质量外)随应力变

化明显, 均显著减小. 需要特别说明的是, 压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 沿 $[100]$ 和 $[110]$ 晶向空穴电导率有效质量在应力的作用下均显著降低, 利于压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴迁移率的增强. 当应力达到一定程度时, 压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴电导率有效质量各向异性程度降低.

此外, 为了便于分析压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴有效质量的变化情况, 本文还给出了压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴方向有效质量随应力的量化关系(见表1).

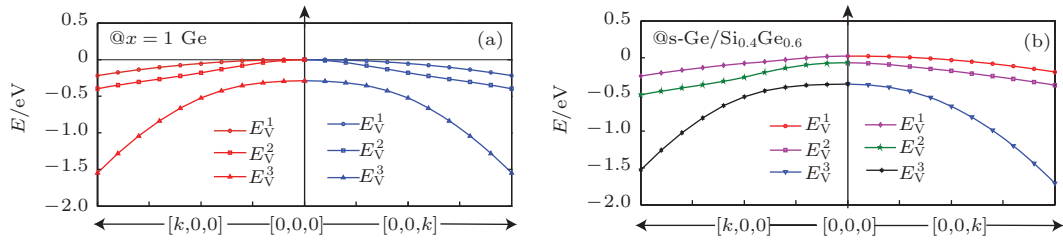


图2 (网刊彩色) 未应变 Ge 、压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ 沿 $[k, 0, 0]$ 与 $[0, 0, k]$ 晶向价带结构 (a) 未应变 Ge ; (b) 压应变 $\text{Ge}/(100)\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$

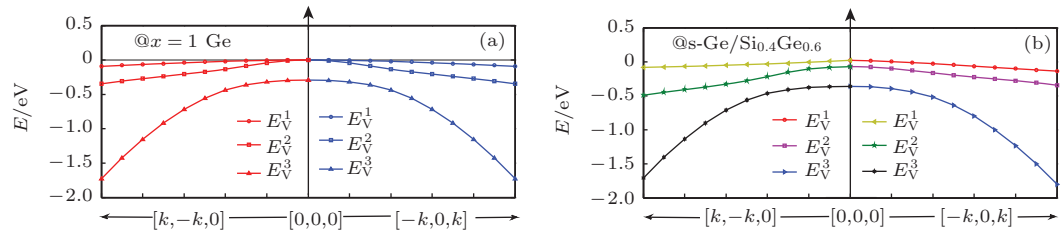


图3 (网刊彩色) 未应变 Ge 、压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ 沿 $[k\bar{k}0]$ 与 $[\bar{k}0k]$ 晶向价带结构 (a) 未应变 Ge ; (b) 压应变 $\text{Ge}/(100)\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$

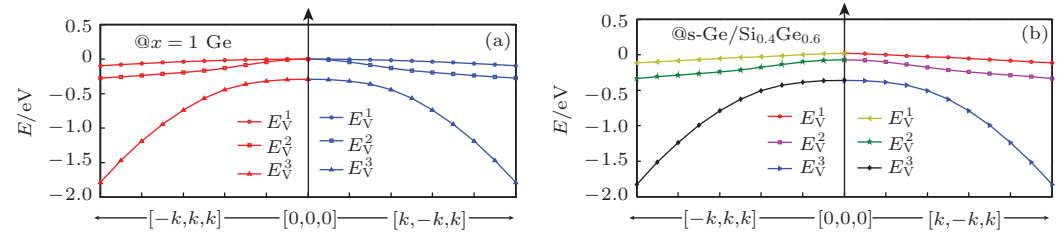


图4 (网刊彩色) 未应变 Ge 、压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ 沿 $[\bar{k}k\bar{k}]$ 与 $[k\bar{k}k]$ 晶向价带结构 (a) 未应变 Ge ; (b) 压应变 $\text{Ge}/(100)\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$

表1, 压应变 $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴方向有效质量

晶向	(a) 带边					(b) 亚带边				
	[001]	[111]	[110]	[010]	[101]	[001]	[111]	[110]	[010]	[101]
$x = 1.0$	0.23	0.527	0.41	0.23	0.41	0.05	0.047	0.048	0.05	0.048
0.9	0.23	0.149	0.11	0.09	0.16	0.03	0.033	0.034	0.036	0.033
0.8	0.23	0.118	0.09	0.077	0.13	0.024	0.024	0.024	0.025	0.024
0.7	0.23	0.108	0.083	0.073	0.121	0.02	0.020	0.019	0.02	0.02
0.6	0.23	0.103	0.08	0.072	0.115	0.017	0.017	0.016	0.017	0.017

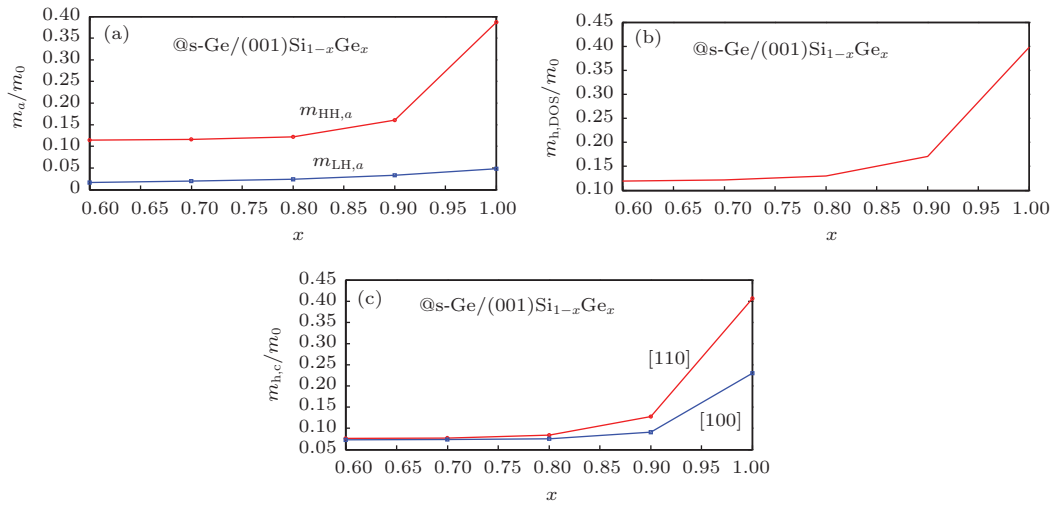


图5 压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴各有效质量与 Ge 组分 (x) 的关系 (a) 平均有效质量; (b) 态密度有效质量; (c) 电导率有效质量

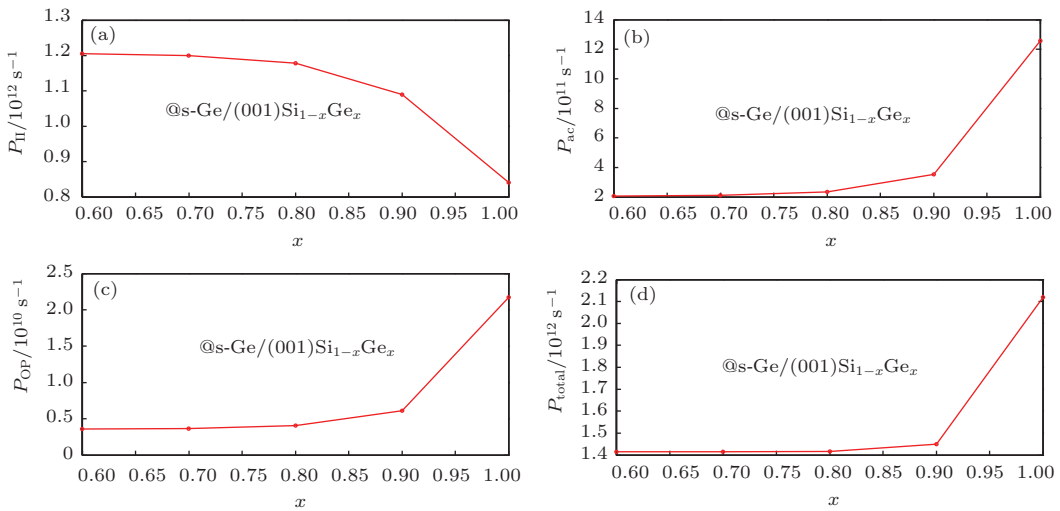


图6 压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴各散射概率与 Ge 组分 (x) 的关系 (a) 离化杂质散射; (b) 声学声子散射; (c) 非极性光学声子散射; (d) 总散射概率

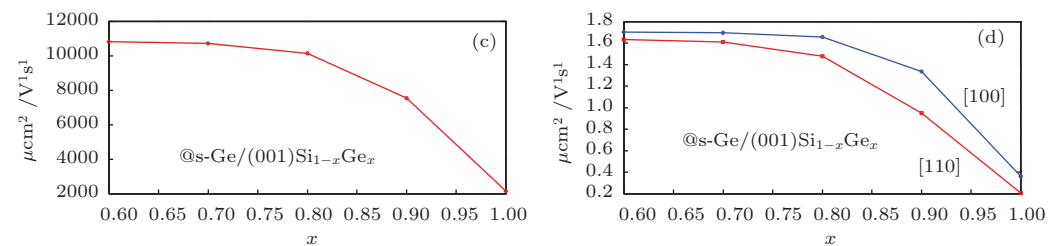


图7 压应变 Ge/(100)Si_{1-x}Ge_x 空穴迁移率与 Ge 组分 (x) 的关系 (a) 平均迁移率; (b) [100], [110] 晶向空穴迁移率

图6为压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴各散射概率与 Ge 组分 (x) 的关系, 包括离化杂质散射概率、声学声子散射、非极性光学声子散射、及总散射概率. 由图可见, 压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴声学声子散射概率与非极性光学声子散射概率随

应力的增加而显著减小. 特别是声子散射概率, 降低约一个数量级. 总散射概率方面, 在应力的作用下, 压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴总散射概率亦随应力的增加而显著减小. 这意味着, 压应变 Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x 空穴迁移率较未应变 Ge 空穴迁

移率将有较大幅度的提升.

图7为压应变Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x空穴各向同性、各向异性迁移率与Ge组分(x)的关系. 由图可见, 在应力的作用下, 压应变Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x空穴各向同性、各向异性迁移率均显著增强. 值得注意的是, 即使由Ge组分表征的应力达到0.6时, 沿[100]和[110]晶向二者的空穴迁移率之差仍约为2000 cm²/V·s, 压应变Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x空穴面内沿各晶向迁移率各向异性依然显著. 此外, 本文未应变Ge空穴平均迁移率(Ge组分为1时)约为2000 cm²/V·s, 与文献报道一致^[17], 可间接说明本文模型的正确性.

4 结 论

应变Ge材料因其载流子迁移率高, 且与硅工艺兼容等优点, 已成为硅基CMOS研究发展的重点和热点. 本文重点研究压应变Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x空穴各散射概率、空穴迁移率与Ge组分(x)的理论关系.

结果表明: 1) 压应变Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x空穴声学声子散射概率与非极性光学声子散射概率随应力的增加而显著减小. 特别是声子散射概率, 降低约一个数量级. 总散射概率方面, 在应力的作用下, 压应变Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x空穴总散射概率亦随应力的增加而显著减小. 2) 在应力的作用下, 压应变Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x空穴各向同性、各向异性迁移率均显著增强. 当应力持续增大时, 压应变Ge/(001)Si_{1-x}Ge_x空穴面内各向异性迁移仍然明显.

参考文献

[1] Hassan A H A, Morris R J H, Mironov O A, Beanland R, Walker D, Huband S, Dobbie A, Myronov M, Leadley

- D R 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 132108
- [2] Takaqi S, Takenaka M 2013 *ECST* **54** 39
- [3] Dian X Y, Yang Ch, Song J J, Zhang H M, Hao Y, Zheng R C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 237102 (in Chinese) [戴显英, 杨程, 宋建军, 张鹤鸣, 郝跃, 郑若川 2012 物理学报 **61** 237102]
- [4] Lucovsky G, Kim J W, Nordlund D 2013 *Microelectron. Eng.* **109** 370
- [5] Takenaka M, Zhang R, Takaqi S 2013 *IEEE Int. Reliab. Phys. Symp. Proc. Monterey, CA, United States*, April 14-18, 2013 p4C.11-4C.18
- [6] Dian X Y, Yang Ch, Song J J, Zhang H M, Hao Y, Zheng R C 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 137104 (in Chinese) [戴显英, 杨程, 宋建军, 张鹤鸣, 郝跃, 郑若川 2012 物理学报 **61** 137104]
- [7] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Wang X Y, Wang G Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **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]
- [8] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Wang X Y, Wang G Y 2012 *Sci China Phys Mech.* **55** 1399
- [9] Takaqi S, Zhang R, Takenaka M. 2013 *Microelectron. Eng.* **109** 389
- [10] Ji F, Xu J P, Lai P T, Li C X, Liu J G 2011 *IEEE Electr. Device L* **32** 122
- [11] Takaqi S, Zhang R, Iwasaki T, Taoka N, Takenaka M 2011 *ECST* **41** 3
- [12] Zhang R, Iwasaki T, Taoka N, Takenaka M, Takaqi S 2013 *Microelectron. Eng.* **88** 1533
- [13] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827
- [14] Song J J, Zhang H M, Dian 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 **57** 7228]
- [15] Song J J, Yang Ch, Zhang H M, Hu H Y, Zhou Ch Y, Wang B 2012 *Sci China Phys Mech.* **55** 2033
- [16] Ye L X 1997 *Monte Carlo simulation of the small-scale semiconductor devices* (Beijing: Science Press) p280 (in Chinese) [叶修良 1997 小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟 (北京: 科学出版社) 第280页]
- [17] Liu E K, Zhu B Sh, Luo J Sh 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) 第367页]

Hole scattering and mobility in compressively strained $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x^*$

Bai Min Xuan Rong-Xi Song Jian-Jun[†] Zhang He-Ming Hu Hui-Yong Shu Bin

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

(Received 12 July 2014; revised manuscript received 14 September 2014)

Abstract

Strained Ge attracts attention of researchers for its high mobility and compatibility with Si technology. Based on the valence band model for compressively strained $\text{Ge}/(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, the relationships between hole scattering, mobility, and Ge content (x) are established in this paper, including ionized impurity, acoustic phonon, non-polar optical phonon, total scattering rates, and the averaged and directional mobility of holes. Our quantitative data gained within the models can provide valuable references for the research of modified Ge materials physics and the design of the related devices.

Keywords: Ge, strain, scattering, mobility

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

DOI: [10.7498/aps.64.038501](https://doi.org/10.7498/aps.64.038501)

* Project supported by the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. JY0300122503), and the Natural Science Basic Research Plan in Shaanxi Province of China (Grant No. 2014JQ8329).

[†] Corresponding author. E-mail: jianjun_79_81@xidian.edu.cn