

# 应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 空穴有效质量各向异性\*

宋建军<sup>†</sup> 张鹤鸣 宣荣喜 胡辉勇 戴显英

(西安电子科技大学微电子学院, 宽禁带半导体材料与器件教育部重点实验室, 西安 710071)

(2008 年 10 月 22 日收到, 2008 年 12 月 8 日收到修改稿)

基于应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 材料价带  $E(k)$ - $k$  关系模型, 研究获得了其沿不同晶向的空穴有效质量. 结果表明, 与弛豫材料相比, 应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 材料价带带边(重空穴带)亚带边(轻空穴带)空穴有效质量在某些  $k$  矢方向变化显著, 各向异性更加明显. 价带空穴有效质量与迁移率密切相关, 该研究成果为 Si 基应变 PMOS 器件性能增强的研究及导电沟道的应力与晶向设计提供了重要理论依据.

关键词: 应变 Si, 价带, 空穴有效质量

PACC: 7360F, 7125C, 7115M

## 1. 引 言

随着 Si 基器件特征尺寸减小、集成度和复杂性的增强, 出现了一系列涉及材料、器件物理、器件结构和工艺技术等方面的新问题. 在传统 Si 工艺技术基础上, 为了延续摩尔定律, 需要理论与技术的创新. Si 基(Si, SiGe)应变材料迁移率高、能带结构可调, 且其应用与 Si 工艺兼容, 利用 Si 基应变材料提高载流子迁移率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<sup>[1-3]</sup>.

Si 基应变器件性能的增强主要得益于材料能带结构的改变和载流子迁移率的提高, 而载流子迁移率的增强与其电导率有效质量的减小密切相关. 因此, 建立 Si 基应变材料空穴有效质量模型是研究空穴迁移率增强机理和实现应用的理论基础, 意义重大. 但目前国内外对该理论的研究缺乏深入性和系统性, 理论研究滞后于应用研究. 文献常见“应变 Si 价带顶简并消除, 带顶有效质量减小”的报道没有考虑空穴有效质量的各向异性, 只能对 Si 基应变材料空穴迁移率增强的物理现象做出定性的解释, 不能作为 Si 基应变 PMOS 器件导电沟道的应力与晶向设计的理论依据<sup>[4-6]</sup>. 事实上, 与弛豫材料相比, Si 基应变材料空穴有效质量与应力类型及晶向密切相关, 在应力的作用下其各向异性变得更加显著. 因

此, 深入研究 Si 基应变材料空穴有效质量各向异性是合理选择 PMOS 器件导电沟道的关键技术, 研究意义重大. 本文以(001)面弛豫 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 衬底上生长的张应变 Si 为例, 基于其能带结构  $E(k)$ - $k$  关系模型, 研究分析了沿不同晶向的空穴有效质量, 获得了有实用价值的相关结论, 可为 Si 基应变 PMOS 器件及电路的研究与设计提供理论参考.

## 2. 物理模型

空穴有效质量决定于它们所处状态下的能带结构即  $E(k)$ - $k$  关系, 由不同晶向价带  $E(k)$ - $k$  关系中能量  $E(k)$  的二阶微分表征<sup>[7]</sup>, 即

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

式中,  $m_p^*$  为空穴有效质量,  $\hbar$  为普朗克常数.

因此, 获得应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 空穴有效质量需要研究建立应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 的能带结构  $E(k)$ - $k$  关系模型. 本文基于薛定谔方程, 通过引入应变哈密顿微扰项, 采用  $K \cdot P$  微扰理论, 获得了应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 价带  $E(k)$ - $k$  关系模型(由于本文重点讨论空穴有效质量, 价带  $E(k)$ - $k$  关系模型详见文献[8])

$$E_v^1 = 2\sqrt{(p^2 - 3q)9\cos((\cos^{-1}((-2p^3 + 9pq) - 27r))$$

\* 国家部委项目(批准号: 51308040203, 9140A08060407DZ0103)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: wsmshhsong@tom.com

$$\begin{aligned}
 & \left( 54\sqrt{(p^2 - 3q)^3/729} \right) \gamma_3 - \frac{p}{3}, \\
 E_V^2 &= 2\sqrt{(p^2 - 3q)^3} 9 \cos\left( \cos^{-1}\left[ (-2p^3 + 9pq - 27r) \right. \right. \\
 & \left. \left. \left( 54\sqrt{(p^2 - 3q)^3/729} \right) - 2\pi \right] \right) \gamma_3 - \frac{p}{3}, \\
 E_V^3 &= 2\sqrt{(p^2 - 3q)^3} 9 \cos\left( \cos^{-1}\left[ (-2p^3 + 9pq - 27r) \right. \right. \\
 & \left. \left. \left( 54\sqrt{(p^2 - 3q)^3/729} \right) + 2\pi \right] \right) \gamma_3 - \frac{p}{3}, \quad (2)
 \end{aligned}$$

式中,  $E_V^1$ ,  $E_V^2$  和  $E_V^3$  分别为带边、亚带边和次带边的

$$\begin{bmatrix} -29.4k_x^2 - 17.5(k_y^2 + k_z^2) + 0.154x & -44k_x k_y & -44k_z k_x \\ -44k_x k_y & -29.4k_y^2 - 17.5(k_x^2 + k_z^2) + 0.154x & -44k_y k_z \\ -44k_z k_x & -44k_y k_z & -29.4k_z^2 - 17.5(k_x^2 + k_y^2) + 0.57x \end{bmatrix}, \quad (4)$$

式中,  $x$  为 Ge 组分。

基于上述应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 价带  $E(k)$ - $k$  关系, 可以获得沿不同  $k$  矢方向的价带结构. 再利用(1)式, 可得相应晶向的空穴有效质量.

### 3. 结果分析与讨论

表 1 和表 2 分别为所获得的应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 材料带边和亚带边沿不同晶向的空穴有效质量. 表 1 的结果表明, 应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 带边各晶向空穴有效质量在张应力的作用下变化明显.

111 和 110 晶向族空穴有效质量显著减小, 其绝对数值甚至小于弛豫 Si[001]晶向空穴有效质量. 虽然 001 晶向族空穴有效质量没有 111 和 110 晶向族空穴有效质量变化显著, 但同样应变的情况下, 其绝对数值是各晶向中最小的. 同时与弛豫 Si[001]晶向空穴有效质量相比, 应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub>[001]晶向空穴有效质量在应力的作用下显著减小.

从表 2 可以看到, 相较 101 和 111 晶向族, 应变显著减小沿 100 晶向族的亚带边空穴有效质量. 而且在相同应变情况下, 亚带边空穴有效质量与带边空穴有效质量在数值上已相差不大. 此外, 由于应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 材料带边和亚带边在应力的作用下发生了分裂, 空穴主要占据带边能级, 可以忽略亚带边空穴有效质量的贡献, 将带边有效质量视为空穴有效质量. 因此, 从减小空穴有效质量, 增强空穴迁移率角度出发, PMOS 器件应以应变 Si(001)

能量,  $p$ ,  $q$  和  $r$  由下式确定:

$$\begin{aligned}
 p &= 0.044 - (a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\
 q &= a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2 \\
 &\quad - (0.029)(a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\
 r &= a_{11}a_{23}^2 + a_{22}a_{13}^2 + a_{33}a_{12}^2 - a_{11}a_{22}a_{33} \\
 &\quad - 2a_{12}a_{23}a_{13} + (0.014)(a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} \\
 &\quad + a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2), \quad (3)
 \end{aligned}$$

式中,  $a_{ij}$  ( $i, j = 1, 2, 3$ ) 是矩阵(4)的元素.

Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 材料[001]晶向作为导电沟道的首选方案.

表 1 应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 带边空穴各向异性有效质量

Ge 组分( $x$ )	$m_p^* [001]$	$m_p^* [111]$	$m_p^* [010]$	$m_p^* [1\bar{1}0]$	$m_p^* [\bar{1}01]$
0	0.29	0.75	0.29	0.71	0.71
0.1	0.0782	0.19	0.093	0.14	0.14
0.2	0.0778	0.172	0.094	0.142	0.1337
0.3	0.0767	0.168	0.093	0.144	0.132
0.4	0.076	0.16	0.092	0.14	0.126

表 2 应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 亚带边各向异性空穴有效质量

Ge 组分( $x$ )	$m_p^* [001]$	$m_p^* [111]$	$m_p^* [010]$	$m_p^* [1\bar{1}0]$	$m_p^* [\bar{1}01]$
0	0.20	0.21	0.20	0.17	0.17
0.1	0.093	0.174	0.085	0.15	0.12
0.2	0.1	0.19	0.09	0.1658	0.133
0.3	0.11	0.2	0.098	0.18	0.139
0.4	0.105	0.2	0.094	0.174	0.139

应变 Si(001)Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 与弛豫 Si 空穴有效质量不同的物理现象可从微观上简单解释为 (001)面弛豫 Si<sub>1-x</sub>Ge<sub>x</sub> 衬底上外延生长产生的张应力使得立方晶系弛豫 Si 变为四方晶系应变 Si, 对称性的降低消除了价带顶简并, 引起了带边与亚带边的分裂. 带边和亚带边能级之间的相对移动改变了它们之间的耦合相互作用力, 使得价带带边和亚带边在  $\Gamma$  点附近沿不同  $k$  矢方向的曲率发生了变化, 相应的空穴有效质量随之改变.

等能面可以直观的反映出价带空穴有效质量的

各向异性<sup>[9]</sup>. 图 1 和图 2 分别为应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  带边、亚带边的 40 meV 三维等能图, 其形状与表 1、表 2 提供的数据能够很好地对应起来. 如图 1 所示, 在应力的作用下, 弛豫 Si 带边等能面 101 晶向族突出部分明显收缩, 应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  带边  $k_x - k_y$  二维等能面 ( $k_z = 0$  平面) 越来越接近球形, 这与表 1 显示的 111 和 110 晶向族空穴有效质量显著减小的结论相一致. 值得一提的是, 虽然应变  $\text{Si}(001)$

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  111 和 110 晶向族空穴有效质量与 001 晶向族空穴有效质量的绝对数值逐渐接近, 但仍高一个数量级, 因此, 在空穴运输研究中, 应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  价带结构的各向异性仍需考虑. 总之, 在空穴运输研究中, 40meV 等能面接近空穴的平均能量, 图 1 显示的应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  材料等能面的扭曲性说明, 获得精确的应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  材料空穴运输模型, 必需考虑其价带结构的各向异性.

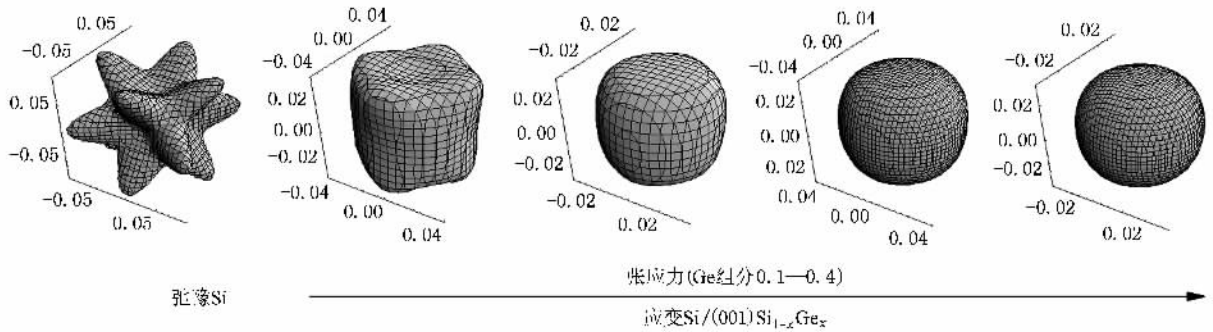


图 1 40 meV 应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  带边等能图

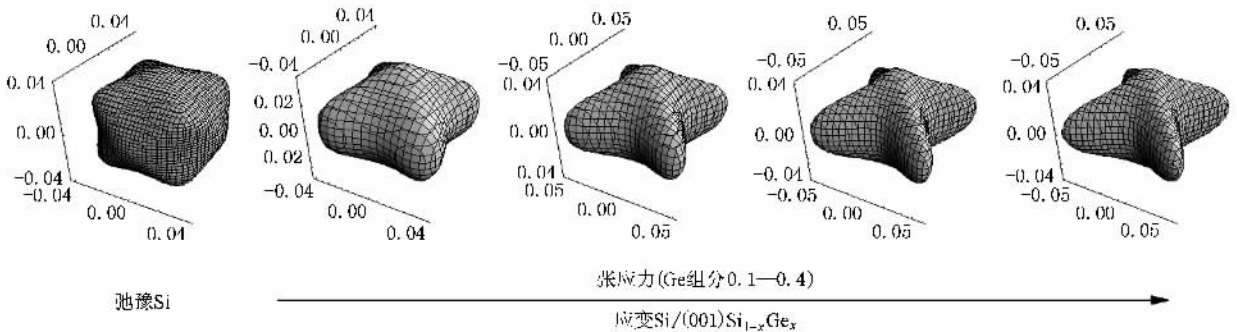


图 2 40 meV 应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  亚带边等能图

以下验证本文所得结果的正确性. 有关应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  空穴有效质量的文献常见带顶有效质量减小的报道, 利用其无法直接对比所得结果. 有鉴于此, 本文将表 1 和表 2 所得数据进行球形近似<sup>[9]</sup>, 得到了带边(重空穴带)和亚带边(轻空穴带)各向同性有效质量(见图 3). 图 3 表明, 应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  轻空穴带有效质量在应力作用下变化不大, 而重空穴带有效质量随着 Ge 组分增加明显变小. 当 Ge 组分大于 0.06 左右后, 重空穴带有效质量小于轻空穴带有效质量, 传统的重空穴和轻空穴概念失去意义. 该结论与文献报道一致<sup>[4-6]</sup>, 间接说明了本文所得结果的正确性.

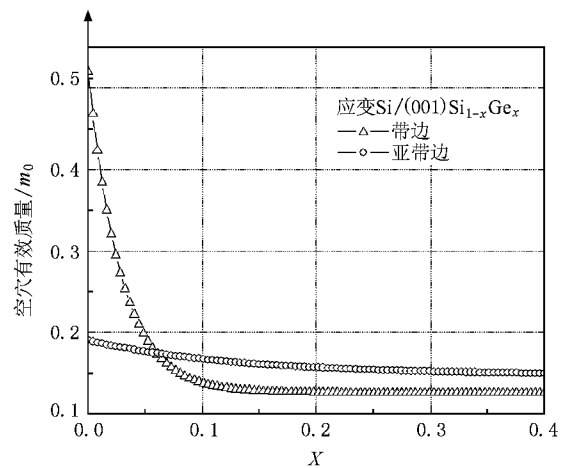


图 3 张应变  $\text{Si}(001)\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  带边、亚带边各向同性空穴有效质量

## 4. 结 论

空穴有效质量由不同晶向价带  $E(k)-k$  关系中能量  $E(k)$  的二阶微分表征, 本文基于应变  $\text{Si}(\text{001})\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  价带  $E(k)-k$  关系模型, 研究获得了其沿不同晶向的空穴有效质量. 结果表明: 应力的作用显著减小了应变  $\text{Si}(\text{001})\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  沿不同晶向的带边空穴有效质量, 且在同样应变的情况下, 沿 100 晶向

族的带边空穴有效质量较 101 和 111 的小一个数量级, 因此, 从减小空穴有效质量, 增强空穴迁移率角度出发, PMOS 器件应以应变  $\text{Si}(\text{001})\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  材料 [001] 晶向作为导电沟道的首选方案. 对应变  $\text{Si}(\text{001})\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  带边(重空穴带)、亚带边(轻空穴带)各向异性有效质量的球形近似表明: 当 Ge 组分大于 0.06 时, 重空穴带有效质量小于轻空穴带有效质量, 传统的重空穴和轻空穴概念失去意义. 该结论与文献报道一致, 间接说明了本文所得结果的正确性.

- [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] Guillaume T, Mouis M 2006 *Solid-State Electronics* **50** 701
- [3] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dian X Y, Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827
- [4] Yang L F, Jeremy R W, Richard C W 2004 *Semiconductor Science and Technology* **19** 1174
- [5] Thompson S E, Sun G, Wu K, Lim J, Nishida T 2004 *Tech. Digest IEEE Int. Electron Devices Meeting* p221
- [6] Nayak D K, Chun S K 1994 *Appl. Phys. Lett.* **64** 2514

- [7] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 1994 *Semiconductor Physics* (Beijing: Defense Industry Press) p16 (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 16 页]
- [8] Song J J, Zhang H M, Dian X Y, Hu H Y, Xuan R X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 5918, 7228 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、戴显英、胡辉勇、宣荣喜 2008 物理学报 **57** 5918, 7228]
- [9] 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]

# Anisotropy of hole effective mass of strained $\text{Si}(\text{001})\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ \*

Song Jian-Jun<sup>†</sup> Zhang He-Ming Xuan Rong-Xi Hu Hui-Yong Dai Xian-Ying

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

(Received 22 October 2008; revised manuscript received 8 December 2008)

## Abstract

There has been much interest in the Si-based strained materials lately, which was widely adopted in the high-speed and high-performance devices and circuits. Based on the valence band  $E(k)-k$  relation of strained  $\text{Si}(\text{001})\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ , the hole effective mass along arbitrarily  $k$  wavevector direction were obtained. It was found that in comparison with relaxed Si, the obvious change occurs in the hole effective mass of first and second valence band in strained  $\text{Si}(\text{001})\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  along specific  $k$  wavevector directions. The hole effective mass plays a significant role in the hole mobility enhancement. The results can supply valuable references to the investigation on the Si-based strained PMOS device performance and the conduction channel design related to stress and orientation.

**Keywords**: strained Si, valence band, hole effective mass

**PACC**: 7360F, 7125C, 7115M

\* Project supported by the National Ministries and Commissions (Nos. 51308040203, 9140A08060407DZ0103).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: wmslhhsong@tom.com