

应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 空穴有效质量模型^{*}

宋建军[†] 张鹤鸣 胡辉勇 宣荣喜 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重点实验室 西安 710071)

(2009 年 4 月 23 日收到, 2009 年 5 月 31 日收到修改稿)

利用应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 材料价带 $E(k)-k$ 关系, 研究获得了沿不同晶向的空穴有效质量, 并在此基础上, 建立了空穴各向同性有效质量模型. 结果表明, 与弛豫材料相比, 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 材料价带带边空穴有效质量各向异性更加显著, 带边空穴各向同性有效质量随 Ge 组分明显减小. 该研究成果可为 Si 基应变 PMOS 器件导电沟道的应力与晶向设计提供有价值的参考.

关键词: 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, 空穴有效质量, 价带

PACC: 7360F, 7125C, 7115M

1. 引言

Si 材料在半导体器件与集成电路中占据主导地位, 缩小特征尺寸一直是提高 Si 器件与集成电路的主要技术途径. 但随着器件特征尺寸不断减小, 器件的物理性能和工艺技术已经接近了极限, 如何在现有条件下提高器件的性能显得尤为重要. Si 基 (Si , Ge , $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$) 应变材料具有带隙可调、载流子迁移率高等优越的物理特性, 已经成为高速/高性能半导体器件与集成电路的研究发展重点^[1-3].

Si 基应变器件性能的增强主要得益于材料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其空穴迁移率增强机理和实现应用的理论基础, 意义重大. 目前, 国内外对该理论的研究报道多集中于 Si 基 (100) 应变材料, 且没有考虑空穴有效质量的各向异性, 因此, 其作为 Si 基应变 PMOS 器件导电沟道的应力与晶向设计的理论依据缺乏深入性和完整性^[4-6]. 事实上, Si 基应变材料空穴有效质量与应力类型及晶向密切相关, 在不同类型应力的作用下其各向异性显著不同. 因此, 本文基于 Si 基应变材料能带结构 $E(k)-k$ 关系模型, 探索研究了应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 材料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. 该研究拓展了用于器件设计的 Si 基应变材料的选择范围, 并为 Si 基应变 PMOS 器件及电路的研究与设计提供了理论参考.

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^[7], 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.

上式表明, 获得应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 空穴有效质量的关键是建立应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 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 KP 微扰理论, 获得了应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 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]). 同时, 考虑到应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 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. 本文重点研究应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111) Si 材料价带带边的空穴有效质量, 其 $E(k)-k$ 关系模型见下式^[8]:

^{*} 国家部委项目(批准号: 51308040203, 9140A08060407DZ0103, 6139801)资助的课题.

[†] E-mail: wsmshhsong@tom.com

$$E_V^1 = 2\sqrt{\frac{(p^2 - 3q)}{9}} \cos((\cos^{-1}((-2p^3 + 9pq - 27r)(54\sqrt{(p^2 - 3q)^3/729})))3) - \frac{p}{3}, \tag{2}$$

式中 E_V^1 为价带带边(“重空穴带”)的能量 p , q 和 r 由下式确定:

$$\begin{aligned} p &= \Delta - (a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\ q &= a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2 - (2\Delta/3)(a_{11} + a_{22} + a_{33}), \\ r &= a_{11}a_{23}^2 + a_{22}a_{13}^2 + a_{33}a_{12}^2 - a_{11}a_{22}a_{33} - 2a_{12}a_{23}a_{13} + (\Delta/3)(a_{11}a_{22} + a_{22}a_{33} + a_{33}a_{11} - a_{12}^2 - a_{13}^2 - a_{23}^2), \end{aligned} \tag{3}$$

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

$$\begin{bmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) + (l + 2m)\epsilon_{xx} & Nk_xk_y + n\epsilon_{xy} & Nk_zk_x + n\epsilon_{xz} \\ Nk_xk_y + n\epsilon_{xy} & Lk_y^2 + M(k_x^2 + k_z^2) + (l + 2m)\epsilon_{yy} & Nk_yk_z + n\epsilon_{yz} \\ Nk_zk_x + n\epsilon_{xz} & Nk_yk_z + n\epsilon_{yz} & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) + (l + 2m)\epsilon_{zz} \end{bmatrix}, \tag{4}$$

式中 $\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = -\frac{1}{3}[1 + 1/\sigma^{(111)}]\epsilon_{//}$,
 $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz} = \frac{1}{3}[2 - 1/\sigma^{(111)}]\epsilon_{//}$,
 $\epsilon_{//} = (a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} - a_{\text{Si}})/a_{\text{Si}}$,

符号 Δ , L , M , N , l , m , n , $a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}$, $\sigma^{(111)}$ 的数值(见

表 1)由相应的 Si ,Ge 参数线性插值获得.
基于上述应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si 价带带边 E (k)- k 关系 ,可以获得沿不同 k 矢方向的价带带边能带结构.再利用(1)式 ,可得应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si 材料沿不同晶向的带边空穴有效质量.

表 1 文中所用参数说明及其具体数值^[9]

晶格常数(Si ,Ge)	$a_{\text{Si}} ,a_{\text{Ge}}/\text{\AA}$	5.431 ,5.658
泊松比(Si ,Ge)	$\sigma^{(111)}$	2.275 ,2.691
形变势(Si ,Ge)	$(l, m, n)\text{eV}$	$(-0.15, 6.84, -5.89)(0.29, 6.53, -7.62)$
KP 系数(Si ,Ge)	(L, M, N)	$(-25.5, -15.2, -38.1)(-143.3, -22.9, -161.2)$
旋轨劈裂能(Si ,Ge)	Δ/eV	0.044 ,0.3

3. 结果分析与讨论

图 1 为所获得的应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si 材料带边沿不同晶向的空穴有效质量.由图可见 ,应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si 带边 $[111]$ $[001]$ $[1\bar{1}1]$ $[1\bar{1}0]$ 和 $[110]$ 晶向空穴有效质量在压应力的作用下变化明显 ,与弛豫 Si 材料相比 ,带边空穴有效质量各向异性更加显著.其中 $[1\bar{1}1]$ $[1\bar{1}0]$ 和 $[110]$ 三个晶向的带边空穴有效质量随着 Ge 组分的增加而显著减小.值得注意的是 ,虽然 $[001]$ 晶向带边空穴有效质量没有其他晶向带边空穴有效质量随 Ge 组分变化显著 ,但在同样应变的情况下 ,其绝对数值是各晶向中最小的 ,且与弛豫 Si $[001]$ 晶向带边空穴有效质量相比 ,应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si $[001]$ 晶向带边空穴有效质量随 Ge 组分明显减小.因此 ,从减小空穴

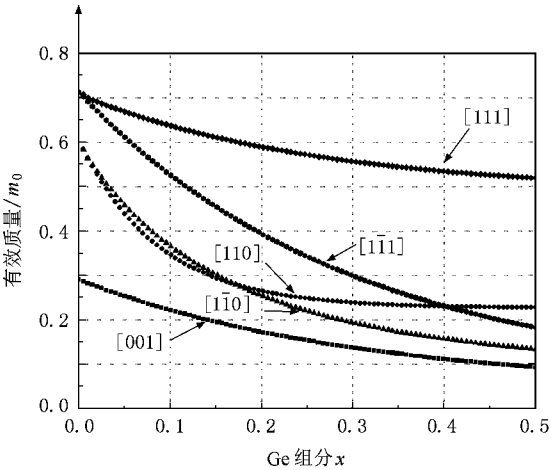


图 1 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si 带边各晶向空穴有效质量与 Ge 组分的关系
有效质量 ,增强空穴迁移率角度出发 ,基于应变

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料的 PMOS 器件应以其 [001] 晶向作为导电沟道的首选方案。

应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 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 (111) 压应力作用使得弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料由立方晶系结构转变为三角晶系结构, 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 Γ 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带边空穴有效质量的各向异性。图 2 为应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 价带带边 40 meV 三维等能图, 图 2 上所示等能面形状与图 1 提供的数据能够很好地对应。此外, 图中显示的应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料等能图的扭曲性说明, 在空穴输运研究中, 获得精确的应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料空穴输运模型, 必须考虑其价带结构的各向异性。

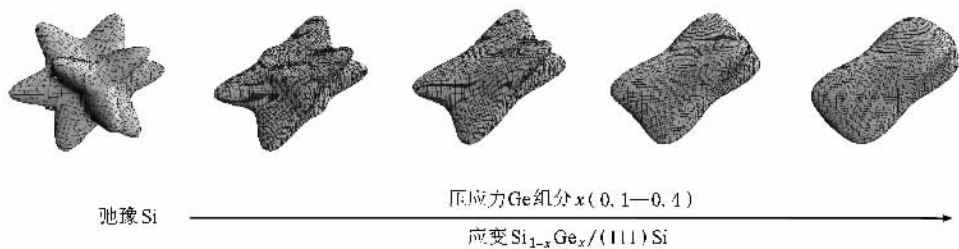


图 2 40 meV 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 带边等能图

建立价带顶的态密度有效质量、状态密度、有效状态密度及本征载流子浓度模型, 需要建立应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料带边空穴各向同性有效质量模型, 即将应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料带边空穴各向异性有效质量近似为各向同性有效质量。本文基于图 1 所得数据, 采用球形近似的办法^[10], 获得了应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料带边(“重空穴带”)各向同性有效质量(见图 3)。图 3 表明, 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 带边各向同性有效质量随着 Ge 组分的增加而显著减小, 与弛豫 Si 材料轻、重空穴有效质量相比(重空穴有效质量 $0.53m_0$, 轻空穴有效质量

$0.16m_0$), 传统的“重空穴”和“轻空穴”概念对应应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料失去意义。

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 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 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。通过对应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料带边各向异性有效质量进行球形近似, 本文还建立了其带边各向同性有效质量模型。结果表明: 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 带边各晶向空穴有效质量在压应力的作用下变化明显, 与弛豫 Si 材料相比, 带边空穴有效质量各向异性更加显著。在同样应变的情况下 [001] 晶向带边空穴有效质量绝对数值是各晶向中最小的, 且与弛豫 Si [001] 晶向带边空穴有效质量相比, 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si [001] 晶向带边空穴有效质量随 Ge 组分明显减小。因此, 从减小空穴有效质量, 增强空穴迁移率角度出发, 基于应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 材料的 PMOS 器件应以其 [001] 晶向作为导电沟道的首选方案。此外, 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 带边各向同性有效质量随着 Ge 组分的增加而显著减小, 与弛豫 Si 材料轻、重空穴有效质量相比(重空穴有效质量 $0.53m_0$, 轻空穴有

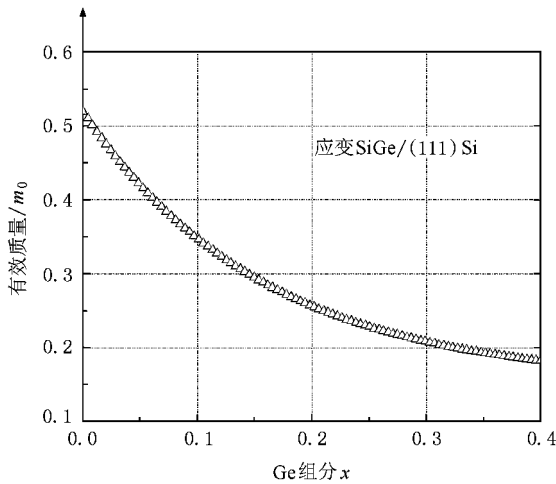


图 3 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ /(111)Si 带边各向同性空穴有效质量

效质量 $0.16m_0$),传统的“重空穴”和“轻空穴”概念 对应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si 材料失去意义.

[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 , Hu H Y , Dai X Y , Xuan R X 2007 *Chin. Phys.* **16** 3827

[3] Liu H H , Duan X F , Xu Q X 2009 *Micron* **40** 274

[4] Manku T , Nathan A 1991 *Phys. Rev. B* **43** 634

[5] Lee M L , Fitzgerald E A , Bulsara M T 2005 *Appl. Phys.* **97** 1

[6] Mohta N , Thompson S E 2005 *IEEE Circuits Syst.* **21** 21

[7] Liu E K , Zhu B Sh , Luo J Sh 1994 *Semiconductor Physics* (Beijing : Defense Industry Press)(in Chinese) p16 [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** 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]

[9] Lawaetz P 1971 *Phys. Rev. B* **4** 3460

[10] 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]

Model of hole effective mass of strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si*

Song Jian-Jun† Zhang He-Ming Hu Hui-Yong Xuan Rong-Xi Dai Xian-Ying
(Key Lab of Wide Band-Gap Semiconductor Materials and Devices ,
School of Microelectronics , Xidian University , Xi ' an 710071 , China)
(Received 23 April 2009 ; revised manuscript received 31 May 2009)

Abstract

There has been much interest in the Si-based strained technology lately. The research on the hole effective mass of Si-based strained material is the theoretical basis for the performance enhancement of Si-based strained PMOS devices. Based on the valence band $E(k)-k$ relation of strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si, the hole effective mass along arbitrarily k wavevector direction were obtained. And the hole isotropic effective mass models were established. It was found that in comparison with relaxed Si, the more obvious anisotropy of the hole effective mass occurs in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (111)Si and the hole isotropic effective mass of the top valence band decreases obviously with increasing Ge fraction. The results can supply valuable references to the conduction channel design related to stress and orientation in the Si-based strained PMOS devices.

Keywords : strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, hole effective mass, valence band

PACC : 7360F, 7125C, 7115M

* Project supported by the National Ministries and Commissions (Grant Nos. 51308040203, 9140A08060407DZ0103, 6139801).
† E-mail : wmshhsong@tom.com