物理学报 Acta Physica Sinica
Chinese Physical Society
Institute of Physics, CAS

(100) Si基应变p型金属氧化物半导体[110]晶向电导率有效质量双椭球模型

宋建军 包文涛 张静 唐昭焕 谭开洲 崔伟 胡辉勇 张鹤鸣

Double ellipsoid model for conductivity effective mass along [110] orientation in (100) Si-based strained p-channel metal-oxide-semiconductor

Song Jian-Jun Bao Wen-Tao Zhang Jing Tang Zhao-Huan Tan Kai-Zhou Cui Wei Hu Hui-Yong Zhang He-Ming

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 65, 018501 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.018501
在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.018501
当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I1

您可能感兴趣的其他文章
Articles you may be interested in

氮化硅膜致小尺寸金属氧化物半导体晶体管沟道单轴应变物理机理
Physical mechanism of uniaxial strain in nano-scale metal oxide semiconductor transistor caused by sin film
物理学报.2015, 64(23): 238502 http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.238502

Si/Ge/Si异质横向SPiN二极管固态等离子体解析模型
Analytic models for solid state plasma of Si/Ge/Si heterogeneous and lateral SPiN diode
物理学报.2015, 64(23): 238501 http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.238501

质子与金属布线层核反应对微纳级静态随机存储器单粒子效应的影响分析
Effects of nuclear reactions between protons and metal interconnect overlayers on single event effects of micro/nano scaled static random access memory
物理学报.2015, 64(17): 178501 http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.178501

压应变Ge/(001)$Si_{1-x}Ge_x$空穴散射与迁移率模型
Hole scattering and mobility in compressively strained Ge/(001)$Si_{1-x}Ge_x$
物理学报.2015, 64(3): 038501 http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.038501

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

(100) Si基应变p型金属氧化物半导体[110]晶向电导率有效质量双椭球模型*

宋建军[1)†] 包文涛[1)] 张静[2)] 唐昭焕[2)] 谭开洲[2)] 崔伟[2)]
胡辉勇[1)] 张鹤鸣[1)]

1)(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)

2)(中电集团24所模拟集成电路重点实验室, 重庆 400060)

(2015年6月27日收到; 2015年9月19日收到修改稿)

利用应变技术和沟道晶向工程技术, 均可有效增强Si基金属氧化物半导体器件的性能. 本文提出了(100) Si p型金属氧化物半导体(PMOS) [110]晶向电导率有效质量双椭球模型, 从理论上解释了Si PMOS [100]晶向沟道空穴迁移率为[110]晶向沟道空穴迁移率1.15倍的原因. 基于(100) Si基应变PMOS反型层E-$\boldsymbol{k}$关系, 拓展应用该模型, 首先获得了(100) Si基应变PMOS反型层价带第一子带等能图, 然后给出了(100) Si基应变PMOS器件反型层[110]晶向空穴电导率有效质量模型. 本文的模型方案合理可行, 可为Si基应变PMOS器件的研究与设计提供有价值的参考.

关键词: 应变, 电导率有效质量, 双椭球, 模型

PACS: 85.30.De, 85.30.Pq, 85.30.Tv **DOI:** 10.7498/aps.65.018501

1 引 言

随着Si基微电子技术的发展, 为了延续摩尔定律, 一系列新技术应运而生, 典型的如应变技术[1−4], 其可增强沟道载流子迁移率, 且与Si工艺兼容, 已经广泛应用于提升金属氧化物半导体(MOS)器件的性能. 通过采用不同晶向衬底以及不同晶向沟道[5−8], 即晶向工程技术, MOS器件性能也可得到有效的提升. 例如, 业界⟨100⟩晶向衬底Si p型金属氧化物半导体(PMOS)沟道通常采用[110]晶向, SunEdison公司将沟道晶向旋转45°(图1)——采用[100]晶向作为其沟道晶向, 后者Si PMOS沟道空穴迁移率是前者的1.15倍[9].

晶向工程技术可增强空穴迁移率的本质, 是由于沿不同晶向Si空穴有效质量不同, 采用低有效质量的晶向作为沟道晶向, 自然其载流子迁移率也会相应地得到提升. 然而理论研究滞后于应用研究, 依据现有文献[10, 11], Si [110]晶向空穴有效质量约为$0.6m_0$, 而[100]晶向空穴有效质量约为$0.29m_0$, 前者约为后者的两倍, 与上述1.15倍增强的实际效果明显不符.

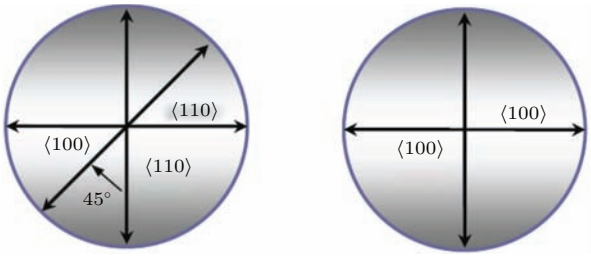

图1 SunEdison公司晶向工程技术示意图

Fig. 1. Schematic diagram of orientation engineering technique of SunEdison company.

观察图2所示Si PMOS反型层第一子带等能图, 不难发现, 当所施加电场方向为[110]晶向时,

* 模拟集成电路重点实验室基金(批准号: P140c090303110c0904)和陕西省自然科学基础研究计划(批准号: 2014JQ8329)资助的课题.

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

© 2016 中国物理学会 Chinese Physical Society

需要综合考虑[110]晶向长箭头方向空穴有效质量以及短箭头方向空穴有效质量两部分. 我们通常认为的[110]晶向空穴有效质量$0.6m_0$的数值, 仅能代表长箭头方向空穴有效质量. 因此, 如何将短箭头方向空穴有效质量考虑进来, 将是解决该问题的关键.

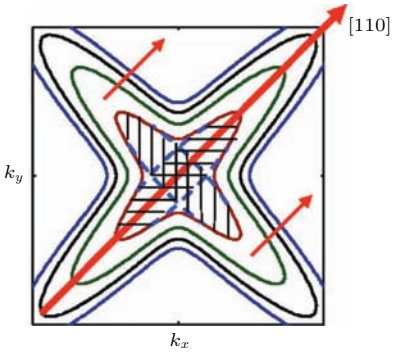

图2 (网刊彩色) Si PMOS反型层第一子带等能图

Fig. 2. (color online) Equal-energy surface of the first subband of inversion layer in Si PMOS.

值得注意的是, 当应变技术与晶向工程技术同时用于提升Si MOS性能时, 无论是单轴应变器件, 还是双轴应变器件, 该问题不可避免地也同样存在. 从理论上解决该问题, 将有利于应变MOS器件性能增强的研究与设计. 为此, 本文基于(100) Si PMOS器件反型层价带第一子带等能图, 提出(100) Si PMOS反型层[110]晶向空穴电导率有效质量模型, 并验证其正确性. 进一步拓展应用该方法, 先获取(100) Si基应变PMOS器件反型层价带第一子带等能图, 然后给出(100) Si基应变PMOS器件反型层[110]晶向空穴电导率有效质量模型.

本文的模型方案合理可行, 可为Si基应变PMOS器件的研究与设计提供有价值的参考.

2 模型方案

如上所述, 如何将短箭头方向空穴有效质量考虑进来, 将是解决该问题的关键. 本文另一个关键点是如何获取(100) Si基应变PMOS器件反型层价带第一子带等能图, 其关键在于给出(100) Si基应变PMOS反型层E-$\boldsymbol{k}$关系. 为此, 下面先推导给出(100) Si基应变PMOS反型层E-$\boldsymbol{k}$关系(当应变量取零时, 即为未应变PMOS反型层E-$\boldsymbol{k}$关系); 再提出(100) Si PMOS反型层[110]晶向空穴电导率有效质量求解方案, 并验证方案的正确性.

2.1 应变PMOS反型层E-$\boldsymbol{k}$关系

应变PMOS反型层能带色散关系(E-$\boldsymbol{k}$关系)的计算较为复杂, 需要数值计算. 将应变材料价带$\boldsymbol{k}$空间矢量分为两个部分, k_z (与纵向电场方向平行)和$k_{//}$ (面内$\boldsymbol{k}$矢量模值). 这样, 考虑量子化效应, 应变材料价带总哈密顿量$\boldsymbol{H}(k_z, k_{//}, s)$退化为$\boldsymbol{H}_0(k_z = \mathrm{i}\partial/\partial z, k_{//} = 0, s)$和$\boldsymbol{H}(k_z = \mathrm{i}\partial/\partial z, k_{//}, s)$两部分. 其中, s代表应变项; $\boldsymbol{H}_0$为布里渊区中心哈密顿量, 表征布里渊区中心能级; $\boldsymbol{H}$包含$k_{//}$项, 反映面内有效质量的情况.

计算MOS反型层E-$\boldsymbol{k}$关系时, 通常采用三角形势阱近似[12,13], 价带布里渊区中心各限制态由下式描述:

$$\frac{1}{2m_i^*}\frac{\partial^2 f_{im}}{\partial z^2} + E_{Vi} f_{im} = E_{im} f_{im}. \tag{1}$$

求解薛定谔方程(1)式可得包络函数f_{im}的形式为艾里函数. 布里渊区中心能级的解析表达式为

$$\begin{aligned} &E_{im}(k_{//} = 0) \\ =&E_i + \left(\frac{\hbar^2}{2m_i^*}\right)^{1/3} \\ &\times \left[\frac{3}{2}\pi q F_S\left(n + \frac{3}{4}\right)\right]^{2/3}_{n=0,1,2\cdots}, \end{aligned} \tag{2}$$

(2)式中E_i和m_i^*的数值可通过哈密顿矩阵$(\boldsymbol{H}_{\mathrm{KP}} + \boldsymbol{H}_{\mathrm{Str}} + \boldsymbol{H}_{\mathrm{SO}})$本征值的求解获得[14], 其中,

$$\boldsymbol{H}' = \begin{bmatrix} Lk_x^2 + M(k_y^2 + k_z^2) & Nk_xk_y & Nk_zk_x \\ Nk_xk_y & Lk_y^2 + M(k_z^2 + k_x^2) & Nk_yk_z \\ Nk_zk_x & Nk_yk_z & Lk_z^2 + M(k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix}, \tag{3}$$

$$\boldsymbol{H}'' = \begin{bmatrix} l\varepsilon_{xx} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{xy} & n\varepsilon_{zx} \\ n\varepsilon_{xy} & l\varepsilon_{yy} + m(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) & n\varepsilon_{yz} \\ n\varepsilon_{zx} & n\varepsilon_{yz} & l\varepsilon_{zz} + m(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}) \end{bmatrix}, \tag{4}$$

$$\begin{cases} \boldsymbol{H}_{\rm KP} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{H}' & \boldsymbol{0}_{3\times3} \\ \boldsymbol{0}_{3\times3} & \boldsymbol{H}' \end{bmatrix}_{\downarrow}^{\uparrow}, \\ \boldsymbol{H}_{\rm Str} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{H}'' & \boldsymbol{0}_{3\times3} \\ \boldsymbol{0}_{3\times3} & \boldsymbol{H}'' \end{bmatrix}_{\downarrow}^{\uparrow}, \end{cases} \quad \boldsymbol{H}_{\rm SO} = -\frac{\Delta}{3} \begin{bmatrix} 0 & {\rm i} & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -{\rm i} & 0 & 0 & 0 & 0 & {\rm i} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -{\rm i} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -{\rm i} & 0 \\ 0 & 0 & {\rm i} & {\rm i} & 0 & 0 \\ -1 & -{\rm i} & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{5}$$

对于(100)面来说, E_i和m_i^*的值见(6)和(7)式, (3)—(7)式中各符号的物理意义详见文献[14].

$$\begin{cases} E_1 = s, \\ E_2 = -\dfrac{1}{2}[s+\Delta+\sqrt{9s^2+\Delta^2-2s\Delta}], \\ E_3 = -\dfrac{1}{2}[s+\Delta+\sqrt{9s^2+\Delta^2-2s\Delta}]; \end{cases} \tag{6}$$

$$\begin{cases} 1/m_1^* = -(\gamma_1-2\gamma_2), \\ 1/m_2^* = -(\gamma_1+\gamma_2) - \dfrac{9\gamma_2 s-\gamma_2\Delta}{\sqrt{9s^2+\Delta^2-2s\Delta}}, \\ 1/m_3^* = -(\gamma_1+\gamma_2) + \dfrac{9\gamma_2 s-\gamma_2\Delta}{\sqrt{9s^2+\Delta^2-2s\Delta}}. \end{cases} \tag{7}$$

面内有效质量是应变PMOS价带E-$\boldsymbol{k}$关系包含的另一重要参量, 对其进行求解需要将微扰项$\boldsymbol{H}(k_z = {\rm i}\partial/\partial z, k_{//}, s)$考虑进来. 总哈密顿项中$U_i$各态$\left(\frac{3}{2},\pm\frac{3}{2}\right)$, $\left(\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}\right)$, $\left(\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right)$之间由于$\boldsymbol{H}(k_z = {\rm i}\partial/\partial z, k_{//}, s)$项而产生耦合作用

$$\langle U_i|\boldsymbol{H}'|U_j\rangle = H'_{ij}. \tag{8}$$

子带之间的互作用由$\langle\phi_{im}|\boldsymbol{H}'|\phi_{jn}\rangle$决定. 将两个因素同时考虑进来, 布里渊区中心态对角矩阵元由下式确定:

$$\begin{aligned} &\langle U_i f_{km}|\boldsymbol{H}'|U_i f_{lm}\rangle \\ &= \begin{cases} -\dfrac{1}{2}(\gamma_1+\gamma_2)k_{//}^2, & i=1, \\ -\dfrac{1}{2}(\gamma_1-\gamma_2)k_{//}^2, & i=2, \\ -\dfrac{1}{2}\gamma_1 k_{//}^2, & i=3, \end{cases} \end{aligned} \tag{9}$$

此外,

$$\langle U_i f_{km}|\boldsymbol{H}'|U_i f_{ln}\rangle = 0, \quad m\neq n. \tag{10}$$

现在考虑非对角矩阵元, 其表达式如下:

$$\begin{aligned} &\langle U_i f_{km}|\boldsymbol{H}'|U_i f_{ln}\rangle \\ &= \alpha\gamma_3 k_{//}\langle f_{km}|\partial/\partial z|f_{ln}\rangle + \beta\gamma k_{//}^2\langle f_{km}|f_{ln}\rangle. \end{aligned} \tag{11}$$

仍然基于哈密顿矩阵模型($\boldsymbol{H}_{\rm KP}+\boldsymbol{H}_{\rm Str}+\boldsymbol{H}_{\rm SO}$), 利用中心态对角矩阵元及非对角矩阵元表达式, 可构建仅包含$k_{//}$项的$6N$阶本征值矩阵(由于矩阵规模庞大, 这里仅给出矩阵元表达式, 详细矩阵未予列出). 基于(2), (9), (10)和(11)式, 数值求解矩阵本征值即可获得应变(100) PMOS反型层价带子带E-$\boldsymbol{k}$关系.

2.2 双椭球模型方案

基于2.1节Si PMOS反型层E-$\boldsymbol{k}$关系模型, 可获得Si PMOS反型层第一子带等能图(见图2). 如上所述, 如何将图2中短箭头方向空穴有效质量考虑进来, 将是解决本文核心问题的关键.

观察发现, 图2等能图可类似为图3双椭球图案, 即可将等能图等效为两个椭球的叠加. 在计算[110]晶向有效质量时, 可用椭球横有效质量(即短箭头方向空穴有效质量)和纵有效质量(即长箭头方向空穴有效质量)进行等效.

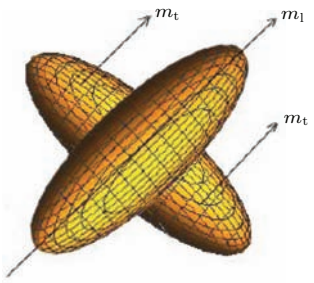

图3 (网刊彩色) 双椭球模型示意图

Fig. 3. (color online) Schematic diagram of the double ellipsoid model.

具体为, 施加电场方向为[110]晶向, 两个椭球有效质量均有贡献, 但贡献各不相同. 沿[110]晶向的椭球, 由于短轴与电场方向垂直, 而长轴与电场方向平行, 所以贡献的是纵有效质量$m_{\rm l}$; 与之垂直的另一个椭球, 由于长轴与电场方向垂直, 而短轴与电场方向平行, 所以贡献的是横有效质量$m_{\rm t}$.

所以, (100) Si PMOS反型层[110]晶向电导率有效质量为

$$\frac{1}{m_{\rm c}}=\frac{1}{m_{\rm t}}+\frac{1}{m_{\rm l}}, \tag{12}$$

化简后可得

$$m_{\rm c}=\frac{m_{\rm t}m_{\rm l}}{m_{\rm t}+m_{\rm l}}, \tag{13}$$

其中$m_{\rm l}$为[110]晶向空穴有效质量. $m_{\rm t}$的值可通过椭球几何原理计算获得, 其与能带系数相关的表达式如下:

$$\frac{1}{m_{\rm t}}=\frac{\gamma_1-(7\gamma_2^2-3\gamma_3^2)}{\sqrt{\gamma_2^2+3\gamma_3^2}}. \tag{14}$$

计算可得$m_{\rm t}$为$0.26m_0$, 将$m_{\rm l}$和$m_{\rm t}$代入(13)式, 可得(100) Si PMOS反型层[110]晶向电导率有效质量为$0.34m_0$, 该结果与SunEdison公司的报道结果符合.

3 模型拓展应用

基于第2节双椭球模型, 进一步拓展应用该方法. 先获取(100) Si基应变PMOS器件反型层价带第一子带等能图, 包括双轴应变Si、双轴应变$Si_{1-x}Ge_x$和单轴压应变Si三类器件, 然后给出(100) Si基应变PMOS器件反型层[110]晶向空穴电导率有效质量模型.

图4为应变Si PMOS在不同组分下第一子带等能图. 由图4可见, 应变Si PMOS第一子带等能图为球形, 应变状态下Si PMOS反型层无需使用本文提出的双椭球模型, 即可直接计算获得[110]晶向空穴电导率有效质量模型. 图7(a)为(100)应变Si PMOS器件反型层[110]晶向空穴电导率有效质量与应力(Ge组分x表征)的关系模型.

图5为应变$Si_{1-x}Ge_x$ PMOS在不同组分下第一子带等能图. 由图5可见, 应变$Si_{1-x}Ge_x$ PMOS第一子带等能图为双椭球型, 需利用本文模型求解. 求解之前, 有必要对应变Si和应变$Si_{1-x}Ge_x$材料空穴等能图的形成及应变导致等能图发生畸变的物理机理予以简要说明. 半导体材料物理性质具有各向异性, 等能图可直观反映半导体材料沿各晶向的载流子有效质量. 通过哈密顿能量本征值二阶微分求解, 可获得Si PMOS反型层空穴第一子带等能图(图2), 该等能图可反映Si沿各晶向空穴有效质量的不同.

对于应变材料来说, 无论是应变Si还是应变$Si_{1-x}Ge_x$材料, 其获得等能图的方法与Si的类似, 只是需要将应变因素考虑进来. 当考虑应变因素后, 应变Si 和应变$Si_{1-x}Ge_x$材料空穴等能图就与Si的明显不同, 即应变致等能图畸变. 当然, 对于$Si_{1-x}Ge_x$材料来说, 与Si材料相比, 等能图还需考

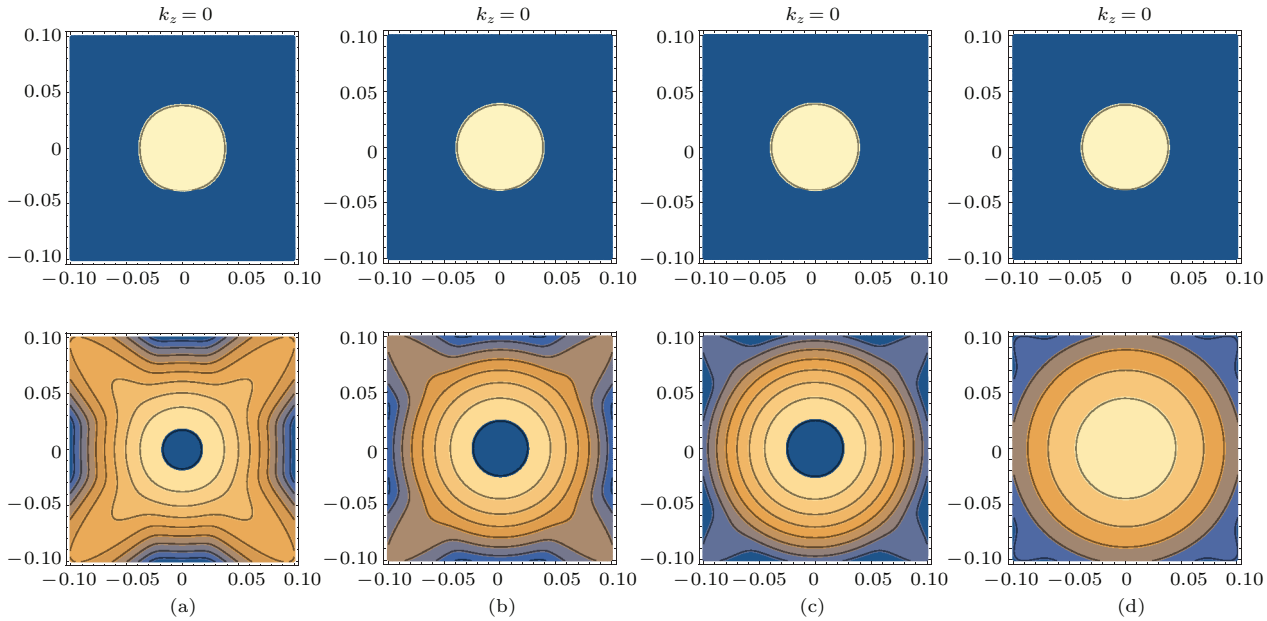

图4 (网刊彩色) 双轴应变Si PMOS在不同组分下第一子带等能图 (a) 应变$Si/Si_{0.9}Ge_{0.1}$; (b) 应变$Si/Si_{0.8}Ge_{0.2}$; (c) 应变$Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}$; (d) 应变$Si/Si_{0.6}Ge_{0.4}$

Fig. 4. (color online) Equal-energy surfaces of the first subband of inversion layer in biaxially strained Si PMOS: (a) Strained $Si/Si_{0.9}Ge_{0.1}$; (b) strained $Si/Si_{0.8}Ge_{0.2}$; (c) strained $Si/Si_{0.7}Ge_{0.3}$; (d) strained $Si/Si_{0.6}Ge_{0.4}$.

虑Ge合金化的因素. 所以, 从结果上看, 应变Si、应变$Si_{1-x}Ge_x$和Si三者的等能图各不相同, 所反映的空穴有效质量各向异性情况也不相同.

首先将图5等能图近似为双椭球(见图6), 然后基于m_l数值, 利用椭球几何关系获得m_t, 最后利用(10)式计算获得m_c(结果见图7).

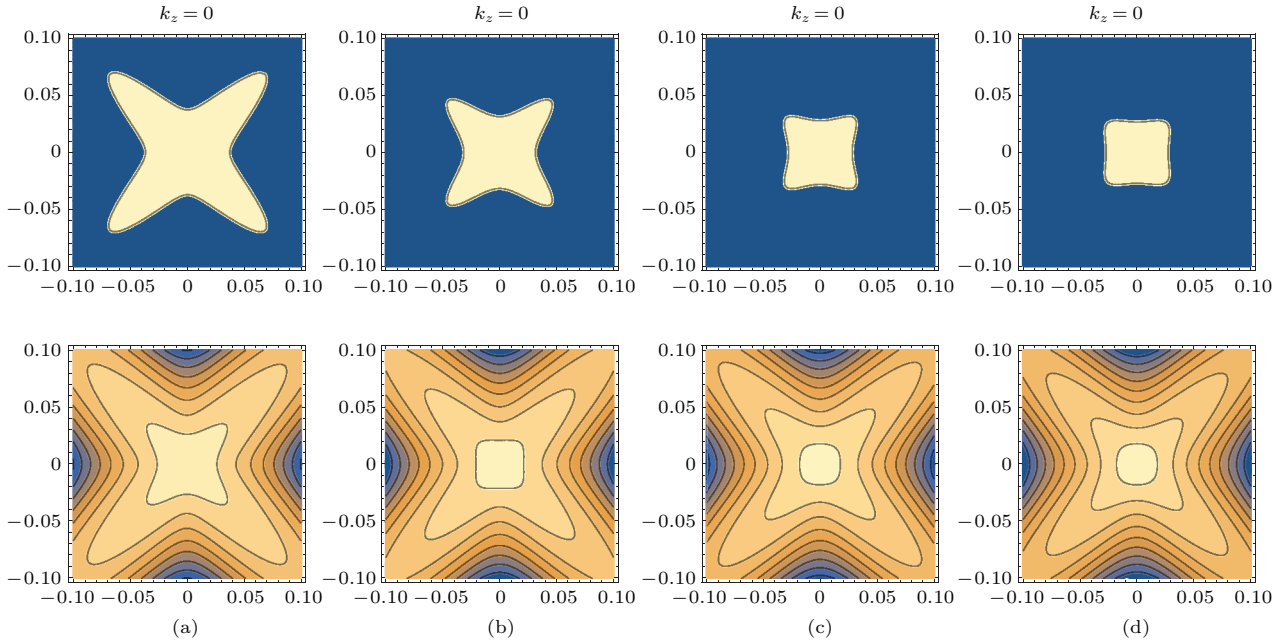

图5 (网刊彩色) 应变$Si_{1-x}Ge_x$ PMOS在不同组分下第一子带等能图 (a) 应变$Si_{0.9}Ge_{0.1}$/Si; (b) 应变$Si_{0.8}Ge_{0.2}$/Si; (c) 应变$Si_{0.7}Ge_{0.3}$/Si; (d) 应变$Si_{0.6}Ge_{0.4}$/Si

Fig. 5. (color online) Equal-energy surfaces of the first subband of inversion layer in biaxially strained $Si_{1-x}Ge_x$ PMOS: (a) Strained $Si_{0.9}Ge_{0.1}$/Si; (b) strained $Si_{0.8}Ge_{0.2}$/Si; (c) strained $Si_{0.7}Ge_{0.3}$/Si; (d) strained $Si_{0.6}Ge_{0.4}$/Si.

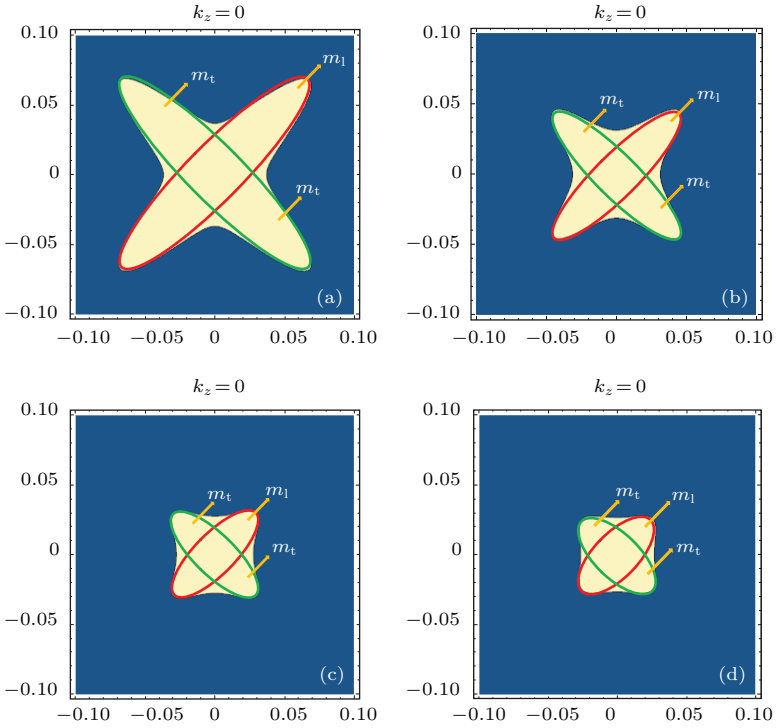

图6 (网刊彩色) 应变$Si_{1-x}Ge_x$ PMOS反型层第一子带等能图椭球近似 (a) 应变$Si_{0.9}Ge_{0.1}$/Si; (b) 应变$Si_{0.8}Ge_{0.2}$/Si; (c) 应变$Si_{0.7}Ge_{0.3}$/Si; (d) 应变$Si_{0.6}Ge_{0.4}$/Si

Fig. 6. (color online) Double ellipsoid model for equal-energy surfaces of the first subband of inversion layer in strained $Si_{1-x}Ge_x$ PMOS: (a) Strained $Si_{0.9}Ge_{0.1}$/Si; (b) strained $Si_{0.8}Ge_{0.2}$/Si; (c) strained $Si_{0.7}Ge_{0.3}$/Si; (d) strained $Si_{0.6}Ge_{0.4}$/Si.

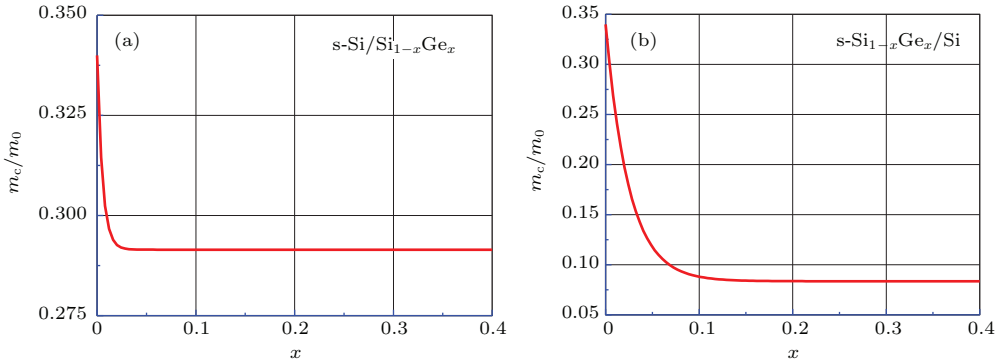

图 7 Si 基应变 PMOS [110] 空穴电导率有效质量 (a) 应变 Si; (b) 应变 $Si_{1-x}Ge_x$

Fig. 7. Hole conductivity effective masses along [110] direction in Si-based PMOS: (a) Strained Si; (b) strained $Si_{1-x}Ge_x$.

由图 7 可见, 无论是应变 Si 还是应变 $Si_{1-x}Ge_x$, 其 PMOS 器件反型层 [110] 晶向空穴电导率有效质量均随着应力的增加而减小. 其中, 应变 $Si_{1-x}Ge_x$ PMOS 器件反型层 [110] 晶向空穴电导率有效质量明显小于应变 Si 的相关数值. 该结果提示我们, 不考虑空穴散射机制, 若选用双轴应变技术时, 应变 $Si_{1-x}Ge_x$ PMOS 性能将明显优于应变 Si PMOS 性能.

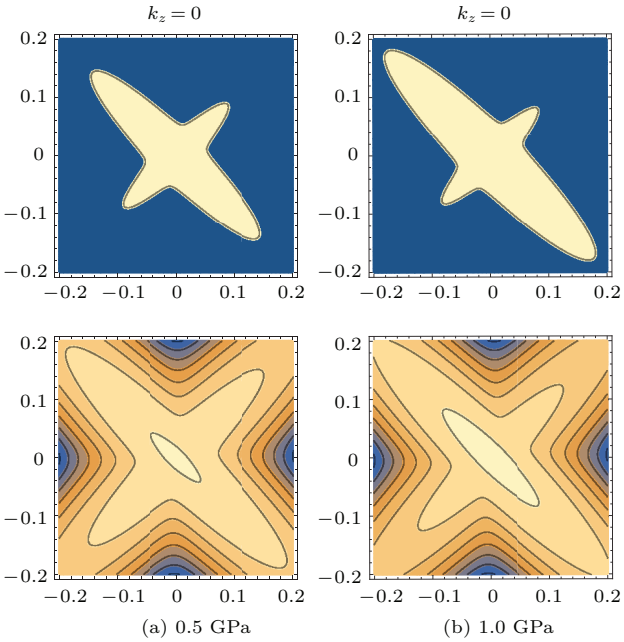

图 8 (网刊彩色) 单轴应变 Si PMOS 在不同应力下第一子带等能图

Fig. 8. (color online) Equal-energy surfaces of the first subband of inversion layer in uniaxially strained Si PMOS.

进一步讨论单轴应变 Si PMOS 不同应力状态下的情况, 图 8 为 [110] 单轴应变 Si PMOS 在不同组分下第一子带等能图. 由图 8 可见, [110] 单轴应变 Si PMOS 第一子带等能图可由两个大小不同的椭球进行近似 (见图 9).

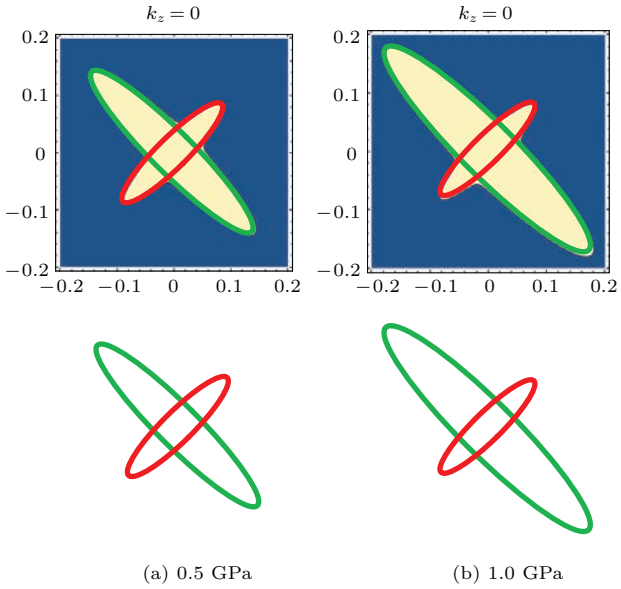

图 9 (网刊彩色) 单轴应变 Si PMOS 第一子带等能图椭球近似

Fig. 9. (color online) Double ellipsoid model for equal-energy surfaces of the first subband of inversion layer in uniaxially strained Si PMOS.

4 结 论

应变技术和晶向工程技术是 Si 基 CMOS 延续摩尔定律的重要技术手段. 本文针对其理论上存在的问题, 提出采用双椭球模型近似的方案, 从理论上合理解释了 Si PMOS [100] 晶向沟道空穴迁移率为 [110] 晶向沟道空穴迁移率 1.15 倍的原因.

进一步拓展应用该模型, 获得了 (100) 应变 Si 和应变 $Si_{1-x}Ge_x$ PMOS 器件反型层 [110] 晶向空穴电导率有效质量与应力 (Ge 组分 x 表征) 的关系模型. 本文的模型方案合理可行, 结论数据量化,

可为Si基应变PMOS器件的研究与设计提供有价值的参考.

参考文献

[1] Cai W L, Takenaka M, Takagi S 2014 *J. Appl. Phys.* **115** 094509

[2] Wu W R, Liu C, Sun J B, Yu W J, Wang X, Shi Y, Zhao Y 2014 *IEEE Electron Dev. Lett.* **35** 714

[3] Song J J, Yang C, Wang G Y, Zhou C Y, Wang B, Hu H Y, Zhang H M 2012 *Jpn. J. Appl. Phys.* **51** 104301

[4] EngSiew K A, Sohail I R 2013 *J. Comput. Theor. Nanos.* **10** 1231

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

[6] Smirnov S, Kosina H 2004 *Solid State Electron.* **48** 1325

[7] Song J J, Yang C, Zhu H, Zhang H M, Xuan R X, Hu H Y, Shu B 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 118501 (in Chinese) [宋建军, 杨超, 朱贺, 张鹤鸣, 宣荣喜, 胡辉勇, 舒斌 2014 物理学报 **63** 118501]

[8] Song J J, Yang C, Hu H Y, Dai X Y, Wang C, Zhang H M 2013 *Sci. China: Phys. Mech.* **56** 1

[9] SunEdison Semiconductor, Ltd. http://www.memc. com [2015-6-27]

[10] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Fu Q 2009 *Sci. China: Phys. Mech.* **52** 546

[11] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2010 *Sci. China: Phys. Mech.* **53** 454

[12] Li S J, Chang C C, Tsai Y T 2006 *Int. J. Numer. Modell.* **19** 229

[13] Ma Y T, Li Z J, Liu L T, Yu Z P 2001 *Solid State Electron.* **45** 267

[14] Liu W F, Song J J 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 238501 (in Chinese) [刘伟峰, 宋建军 2014 物理学报 **63** 238501]

Double ellipsoid model for conductivity effective mass along [110] orientation in (100) Si-based strained p-channel metal-oxide-semiconductor*

Song Jian-Jun[1)†] Bao Wen-Tao[1)] Zhang Jing[2)] Tang Zhao-Huan[2)] Tan Kai-Zhou[2)]
Cui Wei[2)] Hu Hui-Yong[1)] Zhang He-Ming[1)]

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

2) (*National Key Laboratory of Analog Integrated Circuitry, No. 24 Research Institute of CETC, Chongqing 400060, China*)

(Received 27 June 2015; revised manuscript received 19 September 2015)

Abstract

The performance of a Si metal-oxide-semiconductor field-effect transistor can be enhanced effectively by the strain technology and the orientation engineering. For example, the [110] direction is usually used as the channel direction in the Si p-channel metal-oxide-semiconductor (PMOS) on ⟨100⟩ oriented substrate. While SunEdison company rotates the channel direction 45 degrees to the [100] direction, its hole mobility is 1.15 times larger than the hole mobility of the former.

The orientation engineering is based on the anisotropy of the hole effective mass along different directions. The enhancement of carrier mobility naturally occurs when we choose the direction with the smaller carrier effective mass as the channel direction.

However, according to the reported results in the literature, the hole effective mass values along the [110] and [100] orientation are about $0.6m_0$ and $0.29m_0$, respectively. The former is twice larger than the latter, which cannot explain that the experimental result increases 1.15 times.

We find that the effective mass values along both the long axis and the short axis should be taken into consideration, and the value of $0.6m_0$ can only represent the long axis term by observing the equivalent energy diagram of the first sub-band in Si PMOS.

In view of this, the double ellipsoid model is given for the conductivity effective mass along the [110] direction in (100) Si PMOS, which explains the reason why the hole mobility along the [100] direction is 1.15 times larger than that along the [110] direction in Si PMOS. And then, based on the E-$\boldsymbol{k}$ relation of the inversion layer in Si-based strained PMOS, we study the conductivity effective mass along the [110] direction in (100) Si-based strained PMOS by the above method.

The results show that 1) the [110] oriented hole conductivity effective mass of biaxially strained Si PMOS can be calculated directly by its spherical equivalent energy diagram; 2) in the case of biaxially strained $Si_{1-x}Ge_x$ PMOS, its conductivity effective mass needs to be calculated by the double ellipsoid method; 3) the [110] oriented hole conductivity effective mass of uniaxially strained Si PMOS should be solved approximately by two different sizes of ellipsoid.

Our valid models can provide the valuable references for studying and designing the Si-based strained PMOS device.

Keywords: strain, conductivity effective mass, double ellipsoid, model

PACS: 85.30.De, 85.30.Pq, 85.30.Tv **DOI:** 10.7498/aps.65.018501

* Project supported by the Foundation of National Key Laboratory of Analog Integrated Circuitry, China (Grant No. P140c090303110c0904) 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