

重掺 B 对应变 SiGe 材料能带结构的影响^{*}

姚 飞[†] 薛春来 成步文 王启明

(中国科学院半导体研究所集成光电子国家重点实验室,北京 100083)

(2007 年 2 月 21 日收到,2007 年 3 月 21 日收到修改稿)

硅锗异质结双极晶体管(SiGe HBT)一般以重掺硼(B)的应变 SiGe 层作为基区.精确表征 SiGe 材料能带结构对 SiGe HBT 的设计具有重要的意义.在应变 SiGe 材料中,B 的重掺杂一方面会因为重掺杂效应使带隙收缩,另一方面,B 的引入还会部分补偿 Ge 引起的应变,从而改变应变引起的带隙变化.在重掺 B 的应变 SiGe 能带结构研究中,采用半经验方法,考虑了 B 的应变补偿作用对能带的影响,对 Jain-Roulston 模型进行修正,并分析了重掺杂引起的带隙收缩在导带和价带的分布.

关键词:SiGe 材料,应变,带隙收缩(BGN),Jain-Roulston 模型

PACC:7340L,7360F,7155H

1. 引 言

硅锗异质结双极晶体管(SiGe HBT)以其优异的性能和价格优势使其在射频通讯和光纤通讯领域中具有广泛的用途^[1-3].在高频 SiGe HBT 设计中,为了提高 HBT 的高频和噪声性能,一般采用重掺 B 的应变 SiGe 层作为基区.为了优化 HBT 的设计,精确表征基区应变 SiGe 层的能带结构非常重要.对于重掺 B 的突变 SiGe/Si 异质结晶体管,一方面,B 的重掺杂导致的异质界面势垒高度和形状改变,产生带隙收缩;另一方面,B 又会对 SiGe 材料的应变起一定的补偿作用,使应变 SiGe 的应变程度减小,又使应变引入的带隙收缩变小.因此,基区重掺 B 对能带的影响受上述多种因素的影响.很多文献都对 B 的重掺杂导致的带隙收缩做了研究^[4-7],但目前在重掺 B 应变 SiGe 材料带隙结构的研究中尚未有同时考虑 B 的重掺杂效应和补偿作用引起应变带隙变化的报道.本文在研究 B 的重掺杂效应引起的带隙收缩的同时,考虑到 B 对 SiGe 材料的应变补偿作用,研究了重掺 B 对应变 SiGe 的能带产生的影响,并对 Jain-Roulston 模型进行修正.

2. 能带结构的理论修正

2.1. 重掺杂对弛豫 SiGe 材料能带的影响

根据 Jain-Roulston(J-R)的禁带收缩模型,重掺杂导致的带隙收缩可以表示为^[5]

$$\Delta E_g^{\text{dop}} = \Delta E_{\chi(\text{maj})} + \Delta E_{\chi(\text{maj})} + \Delta E_{\text{co}(\text{min})} + \Delta E_{\chi(\text{min})}, \quad (1)$$

其中 ΔE_g^{dop} 表示重掺杂在半导体材料中引起的带隙收缩; $\Delta E_{\chi(\text{maj})}$ 和 $\Delta E_{\chi(\text{maj})}$ 分别是多子库仑力引起的多子带边收缩和杂质相互作用引起的多子带边收缩; $\Delta E_{\text{co}(\text{min})}$ 和 $\Delta E_{\chi(\text{min})}$ 分别是相关能引起的少子带边收缩和杂质相互作用引起的少子带边收缩.计算可得

$$\Delta E_g^{\text{dop}} = \left[1.83 \frac{\Delta}{\Delta_b^{1/3}} \frac{1}{r_s} + \frac{0.95}{r_s^{3/4}} + \left[1 + \frac{R_{\text{min}}}{R} \right] \frac{1.57}{N_b r_s^{3/2}} \right] R, \quad (2)$$

(2)式对于所有半导体材料适用,其中 N_b 是简并因子.对于 p 型半导体, N_b 的值为 2.由重掺杂引起的导带和价带的带隙收缩分别为^[6]

$$\Delta E_c^{\text{dop}} = C_1 \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{1/\alpha} + C_2 \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{1/2}, \quad (3)$$

^{*} 国家高技术研究发展计划(批准号 2006AA03Z415),国家重点基础研究发展规划(批准号 2006CB302802 和 2007CB613404)和国家自然科学基金(批准号 60336010,60676005)资助的课题.

[†] E-mail: sindy-yf@semi.ac.cn

$$\Delta E_v^{\text{dop}} = C_3 \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{1/\beta} + C_4 \left(\frac{N}{10^{18}} \right)^{1/2}. \quad (4)$$

(2)(3)和(4)式中,各参数见表 1 和表 2. 其中, m_e 和 m_h 为电子和空穴有效质量; m_{lh} 和 m_{hl} 分别是重空穴、轻空穴有效质量, ϵ 为相对介电常数; N_{ln} 和 N_{lp} 分别是电子、空穴简并因子. Δ 考虑能带非对称校正系数. R 和 R_{mino} 分别是有效 Rydberg 能和少子的 Rydberg 能; a 是有效 Bohr 半径; r_s 是多体参数, 且 $r_s = r_a/a$. 采用线性内插法, 使用 Si 和 Ge 参数得出 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的相应参数.

表 1 计算半导体带隙收缩使用的参数值

	n-Si	p-Si	n-Ge	p-Ge
ϵ	11.4	11.4	15.4	15.4
m_e	0.33	0.33	0.22	0.22
m_h	0.59	0.59	0.36	0.36
m_{lh}	0.53	0.53	0.53	0.53
m_{hl}	0.16	0.16	0.16	0.16
N_b	6	2	4	2
Δ	1	0.75	0.84	0.75
R/meV	34.5	61.7	12.6	20.6
$R_{\text{mino}}/\text{meV}$	35.4	34.5	11.2	12.6
$a(\text{\AA})$	18.3	10.2	37.1	22.7

表 2 计算导带和价带收缩的参数值

	n 型	p 型
α	3	4
β	4	3
$C1$	$\frac{0.2126}{\epsilon N_{ln}^{1/3}}$	$\frac{0.36307 m_h^{0.25}}{\epsilon^{1.25}}$
$C2$	$\frac{0.0186}{N_{ln}(\epsilon m_e)^{0.5}}$	$\frac{0.0186 m_e}{N_{lp} \epsilon^{0.5} m_{lh}^{1.5}}$
$C3$	$\frac{0.36307 m_e^{0.25}}{\epsilon^{1.25}}$	$\frac{0.2126}{\epsilon N_{lp}^{1/3}}$
$C4$	$\frac{0.0084(m_{lh} + m_{hl})}{N_{ln} \epsilon^{0.5} m_e^{1.5}}$	$\frac{0.0186}{N_{lp}(\epsilon m_{lh})^{0.5}}$

2.2. 重掺杂对应变 SiGe 材料能带结构的影响(不考虑 B 对 Ge 的补偿作用)

首先考虑应变对 SiGe 材料能带结构的影响. 对于在 Si(100)衬底上生长的 SiGe 材料, 由于 Ge 的晶格常数大于 Si, 首先存在静压应变, 使得导带和价带的能级都减小. 此外, 存在单轴压应变, 使导带的六重简并分裂成一个二重简并态和一个四重简并态, 且二重简并态高于四重简并态, 同时, 应变使价带的

重空穴带和轻空穴带带分裂, 轻空穴带上移, 自旋轨道分裂加大^[8], 见图 1. 与弛豫 SiGe 材料情况相比, 应变产生的价带和导带的分裂导致多子、少子的库仑相互作用和杂质相互作用发生改变, 因而需要对(2)式进行修正. 一般采用的处理方法是改变简并因子 N_b 的值. 由于价带边的分裂削弱了重空穴和轻

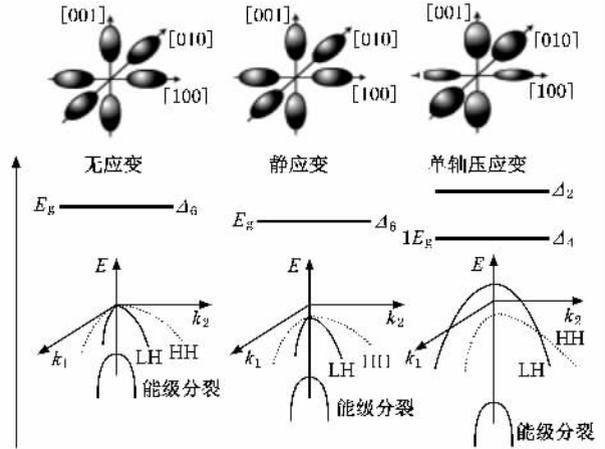


图 1 应变的对能带的影响 (a)无应变时价带自旋轨道分裂; (b)静压应变使能级位置平移 (c)单轴压应变使导带、价带能级分裂

空穴带之间的耦合, 所以简并因子 N_b 的值减小, 带隙收缩增大. 对于 p 型应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料, 一般而言, 应变越大, 即 x 的值越大, 则简并因子越小. 根据文献[5, 6]等, 总结出经验公式

$$N'_b = N_b - 1.667x, \quad (5)$$

其中 N'_b 是应变时的简并因子. 将(5)式代入(2)式, 便是经典 J-R 模型表达式.

2.3. 重掺杂对应变 SiGe 材料能带结构的影响(考虑 B 对 Ge 的补偿作用)

在 Si(100)衬底上生长应变 SiGe 材料并重掺 B, 因为 Ge 的原子半径比 Si 大, Si 中掺 Ge 材料会受压应变, 而 B 的原子半径比 Si 小, 在 Si 中掺 B 材料会受张应变, 所以, B 的掺杂会部分地补偿 Ge. 很多文献都研究了 B 对 Ge 的补偿问题^[9, 10], 我们也对应变 SiGe 材料中 B 对 Ge 的应变补偿问题做过深入研究^[11, 12], 得出如下结论: 在 Si 中 B 原子相对于 Ge 原子的应变补偿率为 $\nu = 7.3$, 即一个 B 原子可以补偿 7.3 个 Ge 原子引起的应变. 在此后的讨论中, 采用这一补偿率进行计算. 考虑应变程度时, 重掺 B 的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 应变材料可以等效为 $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ 应变材料,

其中

$$y = \frac{N_{\text{Ge}} - N_{\text{Ge}}^{\text{com}}}{N_{\text{SiGe}}} = \frac{xN_{\text{SiGe}} - vN}{N_{\text{SiGe}}}, \quad (6)$$

显然, $y < x$. 此时, 我们假设 B 的对 Ge 的补偿作用对异质结引入 (Ge 引入的) 的带隙收缩没有影响, 而只对应变引起的带隙收缩起作用. 补偿后, 等效 Ge 含量 y 引入的应变减小. 因此 (2) 式的修正, 并不是采用 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 应变材料的简并因子 N_{b}^x , 而是选用等效应变 $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ 材料的简并因子 N_{b}^y . 从 (5) 式可以得出 N_{b}^y 大于 N_{b}^x , 因此 $\Delta E_{\text{g}}^{\text{dop}}$ 变小. 事实上, J-R 模型高估了应变产生的能带分裂对 N_{b} 的影响, 对此, 本文做出一定修正.

在文献 [12] 中我们得出应变引起的带隙收缩与应变成正比, 可以表示如下:

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{g}}^{\text{str}} &= \left[(a_{\text{c}} - a_{\text{v}}) \chi (2 - D) - b(D + 1) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{3} \Xi_{\text{u}}^{\Delta} (D + 1) \right] \epsilon_{//} \\ &= A \epsilon_{//}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{v}}^{\text{str}} &= [a_{\text{v}}(2 - D) + b(D + 1)] \epsilon_{//} \\ &= A_1 \epsilon_{//}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{c}}^{\text{str}} &= \left[a_{\text{c}}(2 - D) + \frac{1}{3} \Xi_{\text{u}}^{\Delta} (D + 1) \right] \epsilon_{//} \\ &= A_2 \epsilon_{//}, \end{aligned} \quad (9)$$

因此, 在考虑 B 对 SiGe 材料应变的补偿作用之后, 应变引起的带隙收缩的变化为

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{g}}^{\text{str}, x, y} &= \Delta E_{\text{g}}^{\text{str}}(y) - \Delta E_{\text{g}}^{\text{str}}(x) \\ &= A(y) \epsilon_{//}(y) - A(x) \epsilon_{//}(x), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{v}}^{\text{str}, x, y} &= \Delta E_{\text{v}}^{\text{str}}(y) - \Delta E_{\text{v}}^{\text{str}}(x) \\ &= A_1(y) \epsilon_{//}(y) - A_1(x) \epsilon_{//}(x), \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{c}}^{\text{str}, x, y} &= \Delta E_{\text{c}}^{\text{str}}(y) - \Delta E_{\text{c}}^{\text{str}}(x) \\ &= A_2(y) \epsilon_{//}(y) - A_2(x) \epsilon_{//}(x), \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $\Delta E_{\text{g}}^{\text{str}, x, y}$ 表示考虑 B 的补偿前后由应变减小导致的带隙收缩; $\Delta E_{\text{v}}^{\text{str}, x, y}$ 和 $\Delta E_{\text{c}}^{\text{str}, x, y}$ 分别表示考虑 B 的补偿前后由应变减小导致的价带和导带收缩. 各个参数的意义及数值见表 3. $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料的参数通过线性内插法获得. 应变的表达式如下:

$$\epsilon_{//} = \frac{a_{\text{SiGe}} - a_{\text{Si}}}{a_{\text{SiGe}}}, \quad (13)$$

其中 a_{Si} 和 a_{SiGe} 分别为 Si 衬底和无应变的 SiGe 合金的晶格常数.

因为 $y < x$, 所以 $\Delta E_{\text{g}}^{\text{str}, x, y}$, $\Delta E_{\text{v}}^{\text{str}, x, y}$ 和 $\Delta E_{\text{c}}^{\text{str}, x, y}$ 均为负值.

表 3 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的物理参数

物理量	Si	Ge
晶格常数 $a_0/\text{\AA}$	5.431	5.658
密度 (g/cm^3)	2.329	5.323
原子体密度 $/\text{cm}^{-3}$	5.0×10^{22}	4.4×10^{22}
原子面密度 $/\text{cm}^{-2}$	6.8×10^{14}	6.2×10^{14}
C_{11}/GPa	165.77	128.53
C_{12}/GPa	63.93	48.26
剪切模量 μ/GPa	50.92	40.14
泊松比 ν	0.278	0.273
价带分裂能 Δ_0/eV	0.04	0.30
弹性常数决定的量 D_{001}	0.776	0.751
价带静压形变势 a_{v}/eV	1.8	1.24
剪切形变势 b/eV	-2.1	-2.86
导带静压形变势 a_{c}/eV	3.3	2.55
导带带边形变势 Ξ_{u}^{Δ}	8.7	9.42

综上所述, 重掺杂 B 引起的应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的带隙收缩表示为

$$\Delta E_{\text{g}}^{\text{dop}} = \Delta E_{\text{g}}^{\text{dop}}(y) + \Delta E_{\text{g}}^{\text{str}, x, y}, \quad (14)$$

$$\Delta E_{\text{v}}^{\text{dop}} = \Delta E_{\text{v}}^{\text{dop}}(y) + \Delta E_{\text{v}}^{\text{str}, x, y}, \quad (15)$$

$$\Delta E_{\text{c}}^{\text{dop}} = \Delta E_{\text{c}}^{\text{dop}}(y) + \Delta E_{\text{c}}^{\text{str}, x, y}, \quad (16)$$

其中 $\Delta E_{\text{g}}^{\text{dop}}$, $\Delta E_{\text{v}}^{\text{dop}}$ 和 $\Delta E_{\text{c}}^{\text{dop}}$ 分别表示重掺 B 引起的带隙收缩、价带收缩和导带收缩. (14) (15) 和 (16) 式考虑了 B 对 SiGe 材料的应变补偿效果, 是对 J-R 模型的修正. 一方面, 应变减小会导致简并因子 N_{b} 增大, 使 $\Delta E_{\text{g}, \text{c}, \text{v}}^{\text{dop}}$ 减小, 首先对 $\Delta E_{\text{g}, \text{c}, \text{v}}^{\text{dop}}(x)$ 进行了修正, 代之以 $\Delta E_{\text{g}, \text{c}, \text{v}}^{\text{dop}}(y)$; 另一方面, B 导致的应变补偿又使应变本身引入了带隙收缩, 所以增加了应变补偿项 $\Delta E_{\text{g}, \text{c}, \text{v}}^{\text{str}, x, y}$. 注意上述三式都与等效 Ge 含量 y 有关. 由于上述两方面的原因, J-R 模型高估了掺杂导致的带隙收缩, 这在重掺杂时尤为明显.

3. 计算结果与讨论

图 2 给出了相对于弛豫 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, 当 $x = 0.1$, 0.2 和 0.3 时由应变和重掺杂引起的总带隙收缩随掺杂浓度的变化, 图 3 则示出了重掺杂引起的带隙收缩随掺杂浓度的变化. 图 2, 3 中比较了 J-R 模型和本工作所得到的结果. 由于考虑了 B 的应变补偿效果, 致使应变减小, 部分地抵消了重掺杂引起的带隙收缩, 所以本工作计算的带隙收缩值小于 J-R 模

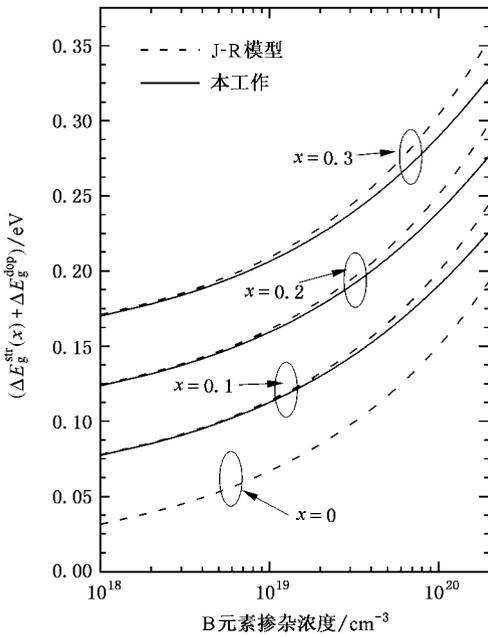


图 2 应变 Si_{1-x}Ge_x 中重掺杂和应变引起的总带隙收缩

电流特性高达数个数量级的差异.由此可见,在重掺杂情况,考虑 B 对 Ge 的应变补偿作用是必要的.

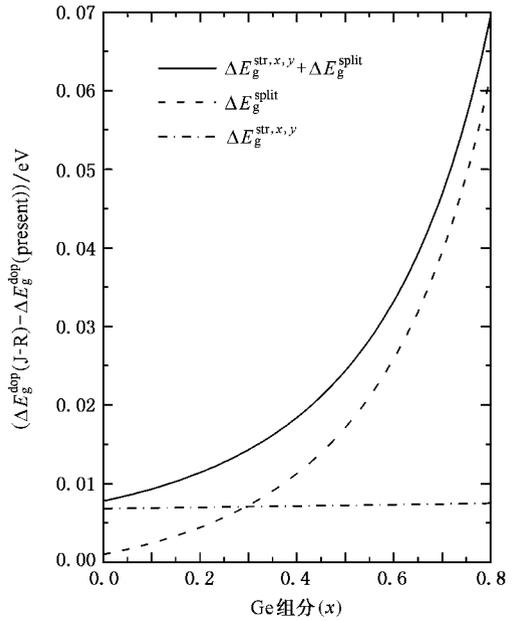


图 4 B 对 Ge 的应变补偿作用

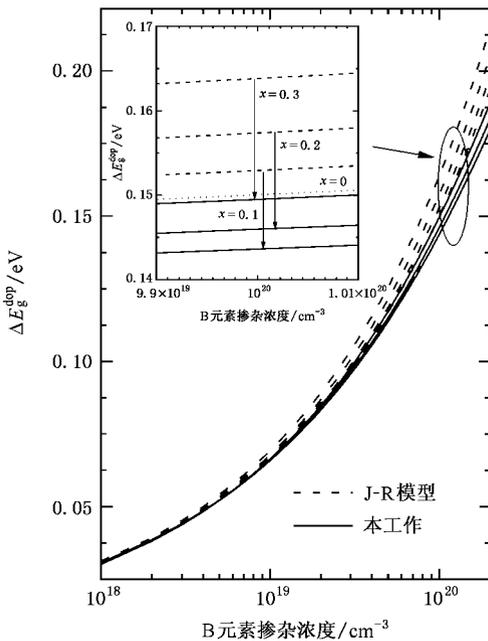


图 3 应变 Si_{1-x}Ge_x 材料中重掺杂引起的带隙收缩

图 4 示出了掺杂浓度 $N = 1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时, B 对 Ge 的应变补偿作用对能带的影响.图中示出了本工作与 J-R 模型计算的掺杂导致的带隙收缩的差值.二者的差异主要体现在两方面,一方面是应变补偿前后由于应变改变了带隙收缩,这在图 4 中以 Δ_{strain} 表示;另一方面是由应变改变了简并因子 N_b 产生的带隙收缩,这在图 4 中以 Δ_{doping} 表示,两者相加才是考虑 B 对 Ge 的应变补偿引起的带隙收缩的总的影响,图中以 $\Delta_{\text{strain} + \text{doping}}$ 表示.

图 5 示出了应变 Si_{1-x}Ge_x 材料中 B 重掺杂引起的带隙收缩随 Ge 含量的变化关系.比较了 J-R 模型和本文所用方法的结果.可以看出,本文比 J-R 模型计算的结果小.计算了 B 对 Ge 的应变补偿以后,带隙收缩变小.在低掺杂时,应变补偿对带隙收缩的影响很小.但在高掺杂情况,考虑应变补偿前后带隙收缩的差异变大.当掺杂大于 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时,由 B 对 Ge 的应变补偿引起的带隙收缩的减小将会超过 15 meV,因此在重掺杂的情况,应考虑 B 对 Ge 的应变补偿效应.从图中还可以看出:掺杂浓度越高,带隙收缩越明显,Ge 含量 x 越高,带隙收缩越明显.

虽然重掺杂引起的带隙收缩的研究很多,但往往没有考虑带隙收缩在导带和价带的分布随杂质浓度不同而变化,一般在计算 SiGe HBT 的电学输运

型计算值.当掺杂 B 浓度为 $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 时,Ge 含量 x 分别为 0.1, 0.2 和 0.3 时,两种方法计算的重掺杂导致的带隙收缩的差分别为 9.30 meV, 11.39 meV 和 14.31 meV, 分别占重掺杂引起的带隙收缩的 6.3%, 7.8% 和 9.6% (见图 3 的插图).而在 SiGe 材料用作基区的 SiGe HBT 中,电流特性是与带隙收缩的指数项成比例的.带隙收缩的这些偏差将导致 SiGe HBT

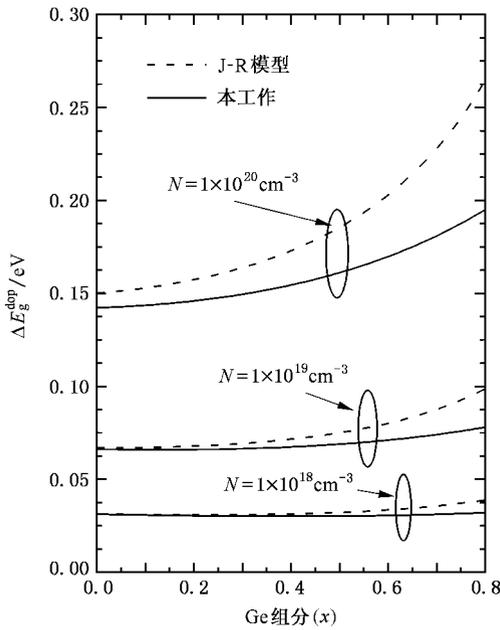


图5 应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料中重掺杂引起的带隙收缩

时,通常都是假设带隙收缩完全落在导带或价带,而带隙收缩在导带和价带是具有特定分布的,且导带和价带的带隙收缩对异质结器件的电学特性的影响程度是不同的.以 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ HBT 为例,以带隙收缩完全落在导带和价带为例两种不同模型计算,电流特性曲线相差高达数个数量级.所以考虑导带、价带的带隙收缩分布是十分必要的.本文考虑 B 对 Ge 的应变补偿,计算了 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 材料中重掺杂引起的

带隙收缩及导带和价带的收缩.重掺杂引起的带隙收缩在导带和价带的分布与掺杂浓度的关系见图6.可见,带隙收缩并不是总在导带或价带,而是分布在导带和价带上,且导带和价带的带隙收缩也并不相同.事实上,在计算 npn 型 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ HBT 运输特性时,不仅要考虑重掺杂引入的带隙收缩,还因考虑 Ge 引入的带隙收缩以及应变引起的带隙收缩.

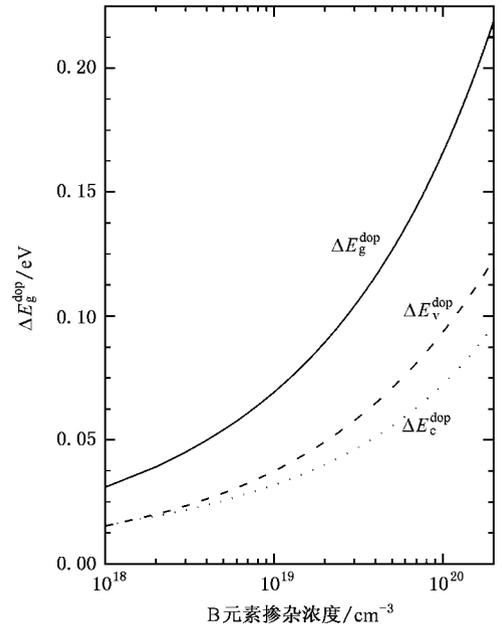


图6 应变 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 材料中掺杂引起的带隙收缩的导带和价带的分布

表4 各种因素引起的带隙收缩的值

x	Ge 引入 BGN/eV	应变引入的 BGN/eV	重掺杂引入的 BGN/eV		
			$N = 1 \times 18 \text{ cm}^{-3}$	$N = 1 \times 19 \text{ cm}^{-3}$	$N = 1 \times 20 \text{ cm}^{-3}$
0.1	0.0409	0.0466	0.0308	0.0664	0.1447
0.2	0.0778	0.0932	0.0309	0.0671	0.1489
0.3	0.1105	0.1398	0.0308	0.0685	0.1551

表4列出了相对于低掺 Si 而言,在 $x = 0.1, 0.2$ 和 0.3 时各因素引起的带隙收缩.其中,异质结(Ge)引入的带隙收缩和应变引入的带隙收缩随 x 的增大而增大,且应变引起的带隙收缩大于异质结引入的带隙收缩,掺杂引起的带隙收缩随 x 的变化比较平缓,这与很多研究结果相符^[13].当掺杂浓度较低时,重掺杂引起的带隙收缩变化在小于异质结(Ge)引入的带隙收缩和应变引入的带隙收缩,但重掺杂时,引入的带隙收缩甚至比由异质结(Ge)引入的带隙收缩和应变引入的带隙收缩要大.因此,在设计基

区为 p 型应变 SiGe 的 npn SiGe/Si HBT 时,充分考虑 Ge 的含量、B 的浓度、B 对 Ge 的应变补偿作用、考虑由 Ge 含量 x 和 B 的浓度 N 引起的能带结构的变化、带隙收缩在价带和导带的分布,对精确计算异质结器件的电学特性是必要的.

4. 结 论

考虑重掺 B 对 SiGe 的应变补偿作用,研究了掺 B 的 p 型应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料的能带结构,对 J-R 模

型进行了修正.和 J-R 模型相比,因为存在应变补偿,由掺杂引起的带隙收缩减小,这种减小体现在简并因子增大和应变收缩减小两个方面.此外,研究了重掺杂引起带隙收缩在导带和价带的分布.Ge 的引

入、应变的引入以及 B 的掺杂使能带结构发生改变,因而影响着异质结界面载流子输运机制.上述结果对 SiGe 异质结晶体管器件的设计具有重要的指导意义.

- [1] Yao F , Cheng B W , Wang Q M 2003 *Micronanoelectronic Technology* **40** 5 (in Chinese) [姚 飞、成步文、王启明 2003 微纳电子技术 **40** 5]
- [2] Dong W F , Yang Q Q , Li J , Wang Q M , Chui Q , Zhou J M , Huang Q 1996 *Chin. Phys.* **5** 456
- [3] Ma L , Gao Y , Wang C L 2004 *Chin. Phys.* **13** 1114
- [4] Zhou S L , Cui H L , Huang Y Q , Ren X M 2006 *Chin. J. Semicond* **27** 110 (in Chinese) [周守利、崔海林、黄永清、任晓敏 2006 半导体学报 **27** 110]
- [5] Jain S C , Roulston D J 1991 *Solid-State Electron* **34** 453
- [6] Zelika M K , Venkataraman V , Prinz E J , Sturm J C , Magee C W 1996 *IEEE Trans. Electron. Devices* **43** 457
- [7] Van Teeffelen S , Persson C , Eriksson O , Johansson B 2003 *Journal of Physics-Condensed Matter* **15** 489
- [8] Paul D J 2004 *Semicond. Sci. Technol.* **19** R75
- [9] Maszara W P , Thompson T 1992 *J. Appl. Phys.* **9** 4477
- [10] Herzog H J , Csepregi L , Seidel H 1984 *J. Electrochem. Soc.* **131** 2969
- [11] Cheng B W , Yao F , Xue C L , Zhang J G , Li C B , Wao R W , Zuo Y H , Luo L P , Wang Q M 2005 *Chin. J. Semicond* **26** 39 (in Chinese) [成步文、姚 飞、薛春来、张建国、李传波、毛容伟、左玉华、罗丽萍、王启明 2005 半导体学报 **26** 39]
- [12] Cheng B W , Yao F , Xue C L , Zhang J G , Li C B , Wao R W , Zuo Y H , Luo L P , Wang Q M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4350 (in Chinese) [成步文、姚飞、薛春来、张建国、李传波、毛容伟、左玉华、罗丽萍、王启明 2005 物理学报 **54** 4350]
- [13] Jain S C , Mehra A , Decoutere S , Schoenmaker W , Willander M 2001 *Mat. Res. Soc. Symp. Proc. Materials Research Society* **677** AA4. 24.1

Band gap Narrowing in heavily B doped $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ strained layers *

Yao Fei[†] Xue Chun-Lai Cheng Bu-Wen Wang Qi-Ming

(State Key Laboratory on Integrated Optoelectronics , Institute of Semiconductors , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100083 , China)

(Received 21 February 2007 ; revised manuscript received 21 March 2007)

Abstract

This paper presents a comprehensive study of the effect of heavy B doping and strain in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ strained layers. On the one hand, bandgap narrowing (BGN) will be generated due to the heavy doping , on the other hand , the dopant boron causes shrinkage in the lattice constant of SiGe materials , thus will compensate for part of the strain. Taking the strain compensation of B into account for the first time and using the with semi-empirical method , the Jain-Roulston model is modified. And the real BGN distributed between the conduction and valence bands is calculated , which is important for the accurate design of SiGe HBTs.

Keywords : SiGe layer , strain , band gap narrowing , Jain-Roulston model

PACC : 7340L , 7360F , 7155H

* Supported by the National High Technology Research and Development Programme of China (Grant No. 2006AA03Z0415) , the Major State Basic Research Programme of China (Grant Nos. 2006CB302802 , 2007CB613404) , and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60336010 and 60676005).

[†] E-mail :sindy-yf@semi.ac.cn