

应变 Si/(001) Si_{1-x}Ge_x 电子迁移率*王晓艳^{1)2)†} 张鹤鸣¹⁾ 宋建军¹⁾ 马建立¹⁾ 王冠宇¹⁾ 安久华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) (宝鸡文理学院电子电气工程系, 宝鸡 721007)

(2010年8月3日收到; 2010年10月16日收到修改稿)

依据离化杂质散射、声学声子散射和谷间散射的散射模型, 在考虑电子谷间占有率的基础上, 通过求解玻尔兹曼方程计算了不同锗组分下, 不同杂质浓度时应变 Si/(001) Si_{1-x}Ge_x 的电子迁移率. 结果表明: 当锗组分达到 0.2 时, 电子几乎全部占据 Δ_2 能谷; 低掺杂时, 锗组分为 0.4 的应变 Si 电子迁移率与体硅相比增加约 64%; 对于张应变 Si NMOS 器件, 从电子迁移率角度来考虑不适合做垂直沟道. 选择相应的参数, 该方法同样适用于应变 Si 其他晶面任意方向电子迁移率的计算, 为应变 Si 器件、电路的设计提供了一定的设计依据.

关键词: 电子谷间占有率, 散射模型, 锗组分, 电子迁移率

PACS: 72.20.Fr, 72.10.-d

1. 引言

随着 Si 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, Ge, Si_{1-x}Ge_x) 应变材料具有带隙可调、载流子迁移率高、其应用与 Si 工艺兼容等优越的物理特性, 已经成为高速、高性能小尺寸 CMOS 器件与集成电路的研究发展重点^[1,2].

迁移率是应变 Si 材料的重要参数, 对迁移率的研究与能带结构^[3,4]、本征载流子浓度^[5]的研究同样重要, 是决定应变 Si 器件电学特性及衡量器件性能的重要参量. 关于应变 Si 迁移率的计算多采用 Monte Carlo 方法^[6,7], 本文从导带散射模型出发, 结合电子谷间占有率, 得到的应变 Si 电子迁移率计算模型物理过程更加清晰, 且计算过程简单. 该方法同样可适用于应变 Si 及 Si_{1-x}Ge_x 其他晶面及晶向电子迁移率的计算.

2. 散射模型

半导体中的散射机构有以下几种: 离化杂质散

射、晶格振动散射 (声学波和光学波散射)、谷间散射、中性杂质散射、位错散射和载流子之间的相互作用等. 由于 1) 光学波散射主要存在于离子型半导体如 III-V 族化合物半导体中; 2) 中性杂质散射只有在重掺杂半导体中, 当温度低时, 晶格振动散射和离化杂质散射都很微弱的情况下, 才起主要作用; 3) 位错密度低于 10^4 cm^{-2} 时, 位错散射并不显著, 现在的半导体 Si 加工工艺是可以满足这个条件的; 4) 载流子之间的散射只有在强简并半导体中才显著, 本文研究情况不属于强简并的情况. 所以研究室温下应变 Si 的导带的散射机理时, 考虑了离化杂质散射、声学声子散射 (声学波晶格振动散射) 和谷间散射.

碰撞过程中只有动能的交换, 粒子内部状态并没有改变的散射属于弹性散射, 如离化杂质散射. 另外, 在实际问题处理中, 某些类型的晶格散射吸收或发射声子的能量较 $k_B T$ 很小, 可视为准弹性散射处理, 如声学声子散射. 而对于谷间散射所涉及的声子能量在室温下与 $k_B T$ 有相同数量级, 因此这种散射必须作为非弹性散射处理.

2.1. 弹性散射

对于弹性散射, 在弛豫时间近似中, 玻尔兹曼分布等式中的碰撞项可以表示为受扰分布函数除

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

† E-mail: wxyswallow7907@163.com

以弛豫时间 τ ,

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_c = -\frac{f - f_0}{\tau}, \quad (1)$$

f_0 是平衡态的 Fermi-Dirac 分布函数, f 是非平衡态的分布函数. (1) 式的广义表达式可以写成跃迁概率和非平衡态分布函数的表达式, 即

$$\begin{aligned} -\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_c &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int [p_{kk'} f_{k'} (1 - f_k) \\ &\quad - p_{k'k} f_k (1 - f_{k'})] d^3 k' \\ &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int p_{kk'} (f_{k'} - f_k) d^3 k', \end{aligned} \quad (2)$$

Ω 为晶体的体积, k 态的电子分布函数为 f_k , 而 k' 态的电子分布函数为 $f_{k'}$. k 态到 k' 态的跃迁概率为 $p_{kk'}$, k' 态到 k 态的跃迁概率为 $p_{k'k}$, 且 $p_{k'k}$ 等于 $p_{kk'}$, 单位时间内 k 态到 k' 态的跃迁概率可表示为

$$P_{kk'} = \frac{2\pi}{\hbar} |H_{kk'}|^2 \delta(E_{k'} - E_k), \quad (3)$$

\hbar 为普朗克常数, $\delta(E_{k'} - E_k)$ 函数当 $E_{k'} = E_k$ 时为 1, 其他情况下为 0, 此函数把能量守恒条件明显地表示出来. 对于弹性散射, 散射过程中的能量变化与电子的平均能量相比较小, 这种情况下, 可认为初态和末态的电子平均能量相等, 即 $E_{k'} = E_k$. (3) 式中的矩阵元 $H_{kk'}$ 可以表示为

$$H_{k'k} = \langle k' | H' | k \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \Phi_{k'}^* H' \Phi_k d^3 r, \quad (4)$$

H' 是微扰哈密顿量, Φ_k 是 k 态电子波函数, $\Phi_{k'}^*$ 是 k' 态电子波函数 $\Phi_{k'}$ 的虚部.

(2) 式不做进一步的近似, 没有办法得到解析解. 在小的扰动 (也就是低场的情况) 情况下, 非平衡态的分布函数可以表示为平衡态分布函数和一级扰动分布函数, 对于弹性散射, 初态和末态的分布函数近似, 假设散射过程是各向同性的, 则初态和末态的一级扰动分布函数之间的比例可以表示为 $\cos\theta'$, θ' 为 k' 和 k 之间的夹角, 从而可以得到弹性散射动量弛豫时间的倒数 (即散射概率) 为

$$\begin{aligned} P_{\text{elastic}} &= \frac{1}{\tau_{\text{elastic}}} \\ &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int p_{kk'} (1 - \cos\theta') d^3 k'. \end{aligned} \quad (5)$$

2.2. 非弹性散射

对于非弹性散射处理, 此时 k' 态到 k 态的散射情况, $k' = k + q$ 将不同于 $k' = k - q$. 非简并情况下, (2) 式变为

$$\begin{aligned} -\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_c &= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3 q \{ [p_-(k, k - q) \\ &\quad + p_+(k, k + q)] f(k) \\ &\quad - p_-(k + q, k) f(k + q) \\ &\quad - p_+(k - q, k) f(k - q) \}, \end{aligned} \quad (6)$$

其中跃迁概率 p 的下标“+”“−”分别表示吸收和发射声子. 对非弹性散射, 不能通过对末态函数作近似来求出 τ . 在 $|H_{kk'}|$ 与 q 无关时, 上式中电子分布函数 $f(k \pm q)$ 可通过对 q 积分化为 $f_0(k)$ 的形式, 而从可求出 τ . 对于各向同性上述条件满足, 因此可得到动量弛豫时间的倒数为

$$\frac{1}{\tau_{\text{inelastic}}} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar} \int_{q_1(q_1)}^{q_2(q_2)} |H_{k \pm q, k}|^2 \frac{2\pi m^* q}{\hbar^2 k} dq, \quad (7)$$

式中 m^* 为电子的有效质量, “+”表示从 k 跃迁到 $k + q$ 吸收声子 $\hbar\omega_0$, 这种情况下积分上下限分别为

$$q_1 = -k + \sqrt{k^2 + 2m^* \omega_0 / \hbar} = (a - 1)k, \quad (8)$$

$$q_2 = +k + \sqrt{k^2 + 2m^* \omega_0 / \hbar} = (a + 1)k, \quad (9)$$

其中

$$\begin{aligned} a &= (1 + \hbar\omega_0 2m^* / \hbar^2 k^2)^{1/2} \\ &= (1 + \hbar\omega_0 / E)^{1/2}. \end{aligned}$$

“−”表示从 k 跃迁到 $k - q$ 发射声子 $\hbar\omega_0$, 积分上下限为

$$q'_1 = (1 - b)k, \quad q'_2 = (1 + b)k, \quad (10)$$

其中, $b = \text{Re}(1 - \hbar\omega_0 / E)^{1/2}$, Re 表示取实部, 由此知在 $E < \hbar\omega_0$ 时发射项为 0. 由积分得到非弹性散射动量弛豫时间的倒数 (即散射概率) 为

$$\begin{aligned} P_{\text{inelastic}} &= \frac{1}{\tau_{\text{inelastic}}} = \frac{2^{1/2} \Omega (m^*)^{3/2}}{\pi \hbar^4} |H_{k+q, k}|^2 \\ &\quad \times [(E + \hbar\omega_0)^{1/2} + \exp(\hbar\omega_0 / k_B T) \\ &\quad \times \text{Re}\{E - \hbar\omega_0\}^{1/2}]. \end{aligned} \quad (11)$$

2.3. 散射模型

对于弹性散射, 通过求解矩阵元 $H_{k'k}$, 进而求解跃迁概率为 $p_{kk'}$, 代入 (5) 式, 采用 BH 模型^[8], 可以得到离子杂质散射的散射概率为

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

式中, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为热力学温度, ϵ_0 为真空介电常数, ϵ 为 Si 的相对介电常数, n_i 为离子杂质浓度, E 为电子的能量.

同样的方法, 根据 (5) 式可得到声学声子散射

的散射概率为

$$\frac{1}{\tau_a} = \frac{m^{*3/2} \Xi^2 k_B T (2E)^{1/2}}{\pi \hbar^4 c_L}. \quad (13)$$

纵弹性模量 $c_L = \rho v_s^2$, ρ 为硅晶体的密度, v_s 为声子速度, Ξ 为电子的形变势常数, 取值为 $6.25 \text{ eV}^{[9]}$.

对于非弹性散射, 根据 (11) 式, 可以求得谷间散射概率为

$$\frac{1}{\tau_{in}} = \frac{D_i^2 (m^*)^{3/2} Z_{fi}}{2^{1/2} \pi \hbar^3 \rho \omega_i} \left(N_i + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \times (E \pm \hbar \omega_i - \Delta E_{fi})^{1/2}, \quad (14)$$

其中, Z_{fi} 为末态等价能谷数目, ω_i 为谷间声子角频率, D_i 为谷间散射形变势常数, N_i 为声子的数目, ΔE_{fi} 为初态与末态能谷之间的能量差. (14) 式中最后一个括号中的“+”“−”分别表示吸收和发射声子, 前面括号中的“−”和“+”号分别与能量项的“+”“−”对应, 是两种情况下对应的声学声子数目. 需要注意的是, 式中有效质量的取值是末态能谷的有效质量.

对于 Si 的 Δ 型谷, 有 g 型和 f 型两种类型的谷间声子. g 型谷间散射指电子由某一能谷散射到同一坐标轴上相对应的另一能谷中; f 型谷间散射指电子从该能谷散射到其余的一个能谷中去. 能够参与散射的声子的种类决定于选择定则. f 型谷间散射和 g 型谷间散射各有 3 种, 分别是: f1 即 TA (transverse-acoustic, 横声学支), f2 是 LA (longitudinal-acoustic, 纵声学支), f3 是 TO (transverse-optical, 纵光学支), g1 是 TA (transverse-acoustic, 横声学支), g2 是 LA (longitudinal-acoustic, 纵声学支) 和 g3 是 LO (longitudinal-optical, 纵光学支). 使用零阶转换矩阵, 选择定则只允许 f2, f3 和 g3 三种声子散射^[10], 其形变势常数和对应的能量 $\hbar \omega_i$ 的取值见表 1.

表 1 谷间散射模型参数^[11]

D_2	D_3	D_{g3}	$\hbar \omega_{f2}$	$\hbar \omega_{f3}$	$\hbar \omega_{g3}$
$/(10^8 \text{ eV/cm})$	$/(10^8 \text{ eV/cm})$	$/(10^8 \text{ eV/cm})$	/eV	/eV	/eV
2	2	11	0.047	0.059	0.062

对于非应变情况, g 型散射的末态等价能谷数目 $Z_f = 1$, f 型散射 $Z_f = 4$. 应变情况下, 对于 Δ_2 来说, g 型散射的末态等价能谷数目 $Z_f = 1$, f 型散射 $Z_f = 4$; 对于 Δ_4 能谷来说, g 型散射末态等价能谷数目 $Z_f = 1$, 等效能谷间的 f 型散射 (除 g 型散射外的 Δ_4

能谷之间的散射) $Z_f = 2$, 非等效能谷间的 f 型散射 (Δ_4 能谷到 Δ_2 能谷之间的散射) $Z_f = 2$.

声子数目 N_i 遵循玻色-爱因斯坦统计, 其表达式为

$$N_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_i}{k_B T}\right) - 1}, \quad (15)$$

Δ_2 能谷与 Δ_4 能谷之间的能量差为^[12]

$$\Delta E_{2-4} = 0.67x. \quad (17)$$

3. 迁移率的计算及仿真结果

3.1. 迁移率计算模型

从前面公式可以看出, 散射概率跟电子的动能 E 有关, 因为电子的速度不是常数, 所以 E 也是变值. 因此, 通过对能量 E 进行积分, 来求解平均动量弛豫时间 $\langle \tau \rangle$,

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_{E_c}^{E_c'} \tau g(E - E_c) f(E) (E - E_c) dE}{\int_{E_c}^{E_c'} g(E - E_c) f(E) (E - E_c) dE}, \quad (17)$$

E_c 为导带底的能量, E_c' 为导带顶的能量, $g(E)$ 为导带状态密度函数, $f(E)$ 为电子的费米分布函数. 利用数学变换及 e 指数的特性, 上式可化简为

$$\langle \tau \rangle = \frac{\int_0^\infty \tau g(E) f(E) E dE}{\int_0^\infty g(E) f(E) E dE}. \quad (18)$$

根据上式, 分别求出离化杂质散射、声学声子散射和谷间散射的平均动量弛豫时间 $\langle \tau \rangle$, 然后, 利用迁移率的计算公式 $\mu = \frac{q \langle \tau \rangle}{m_c}$ (m_c 为电子的电导有效质量) 可求出其迁移率, 总的迁移率与各迁移率的关系为

$$\frac{1}{\mu_{total}} = \frac{1}{\mu_{II}} + \frac{1}{\mu_{ac}} + \frac{1}{\mu_{in}}, \quad (19)$$

其中, μ_{II} 为离化杂质散射引起的迁移率, μ_{ac} 为声学声子散射引起的迁移率, μ_{in} 为谷间散射引起的迁移率.

设电子浓度为 n , [001] 方向的 Δ_2 能谷电子占有率为 p , 则 [100], [010] 方向的 Δ_4 能谷电子占有率各为 $(1 - p)/2$, 这样, 沿电场 E 方向的电流密度为

$$J = npq\mu_{[001]} E + n \frac{1-p}{2} q\mu_{[010]} E$$

$$+ n \frac{1-p}{2} q \mu_{[100]} \mathbf{E}, \quad (20)$$

仍令

$$J = nq\mu\mathbf{E}, \quad (21)$$

与(20)式相比,得到

$$\mu = p\mu_{[001]} + \frac{1-p}{2}\mu_{[010]} + \frac{1-p}{2}\mu_{[100]}. \quad (22)$$

由此可见,能谷对中电子的占有率对迁移率有一定的影响,其表达式为

$$p^{(i)} = \frac{n_{\text{str}}^{(i)}}{\sum_{i=1}^3 n_{\text{str}}^{(i)}}, \quad (23)$$

其中

$$n_{\text{str}}^{(i)} = N_c^{(i)} \cdot \exp\left[\frac{\Delta E_c^{(i)}}{k_B T}\right], \quad (24)$$

$n_{\text{str}}^{(i)}$ 为第 i 个能谷对的载流子浓度, $N_c^{(i)}$ 为第 i 个能谷对的导带有效状态密度, $\Delta E_c^{(i)}$ 为对应导带底与费米能级之间的能量偏差.

3.2. 仿真结果

本文计算了常温,即 $T = 300 \text{ K}$ 时的电子迁移率,计算中需用的基本物理参数取值如表 2.

表 2 物理参数取值

q/C	1.602×10^{-19}	$\epsilon_0/(\text{F/m})$	8.854×10^{-12}
m_0/kg	9.108×10^{-31}	$\epsilon_{\text{Si}}/\epsilon_0$	11.9
$k_B/(\text{J/K})$	1.380×10^{-23}	$\rho/(\text{g/cm}^3)$	2.329
$\hbar/\text{J}\cdot\text{s}$	1.054×10^{-34}	$v_s/(\text{cm/s})$	9.04×10^5

不同锗组分下,应变 Si 导带单个能谷的电子有效质量及态密度有效质量见表 3. $m_{\Delta_2l}, m_{\Delta_2t}, m_{\Delta_2}$ 分别为 Δ_2 能谷的纵向有效质量、横向有效质量和态密度有效质量, $m_{\Delta_4l}, m_{\Delta_4tp}, m_{\Delta_4tv}, m_{\Delta_4}$ 为别为 Δ_4 能谷的纵向有效质量、横向平行有效质量、横向垂直有效质量和态密度有效质量.

表 3 应变 Si 中导带单个能谷的电子有效质量及态密度有效质量^[13]

锗组分	0	0.05	0.1	0.15	0.2	0.3	0.4
m_{Δ_2l}/m_0	0.9176	0.9265	0.9390	0.9480	0.9622	0.9872	1.0112
m_{Δ_2t}/m_0	0.1906	0.1888	0.1870	0.1852	0.1833	0.1797	0.1761
m_{Δ_2}/m_0	0.3218	0.3208	0.3202	0.3192	0.3186	0.3171	0.3153
m_{Δ_4l}/m_0	0.9176	0.9105	0.9026	0.8962	0.8855	0.8719	0.8580
m_{Δ_4tp}/m_0	0.1906	0.19	0.1894	0.1888	0.1882	0.1870	0.1858
m_{Δ_4tv}/m_0	0.1906	0.1931	0.1957	0.1982	0.2007	0.2058	0.2109
m_{Δ_4}/m_0	0.3218	0.3221	0.3222	0.3225	0.3222	0.3225	0.3228

根据(23)式,计算得到 Δ_2 能谷的电子占有率如图 1 所示.可以看出,未应变情况下,各能谷对的电子占有率相等;随着锗组分的增加, Δ_2 能谷的电

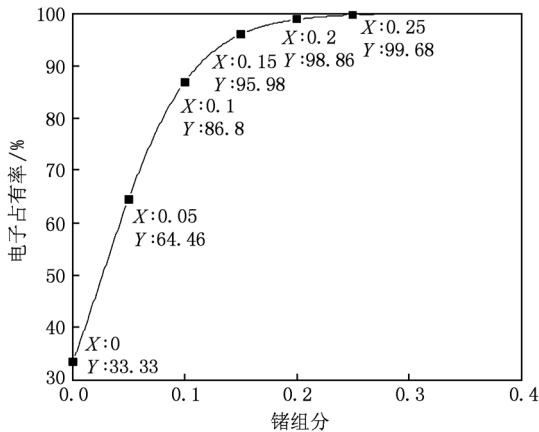


图 1 Δ_2 能谷的电子占有率

子占有率增加,当锗组分达到 0.2 时,电子几乎全部占据 Δ_2 能谷.这说明 Δ_2 能谷与 Δ_4 能谷之间的能量差越大,电子越容易占据能量较低的 Δ_2 能谷.

取电场分别位于和垂直 xy 平面,如图 2 所示,根据迁移率的公式,应变 Si/(001) $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 电子迁移率的计算结果如图 3 和图 4 所示.

图 3 和图 4 中,“—”线为电场位于 xy 平面的仿真结果,“*—”线为电场垂直 xy 平面的仿真结果.由图 3 可以看出,未应变时,由于各能谷对的电子占有率相同,所以电场位于 xy 平面的电子迁移率和电场垂直于 xy 平面的迁移率相差不多,当电场位于 xy 面时,沿着 $[110]$ 方向(图 3 中极坐标为 45°)的迁移率较 $[100], [010]$ 高约 10%,差别不是很大.这是由电子的有效质量各向异性引起的.

随着应力增加,当电场位于 xy 平面时,电子迁移率要远远大于电场垂直于 xy 平面时的迁移率,如

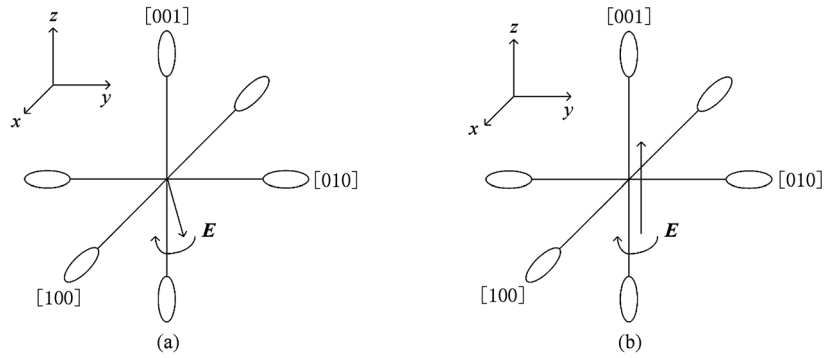


图2 (a)电场位于xy平面;(b)电场垂直于xy平面

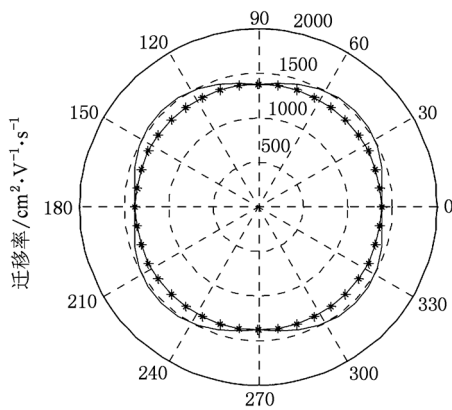


图3 体Si电子迁移率

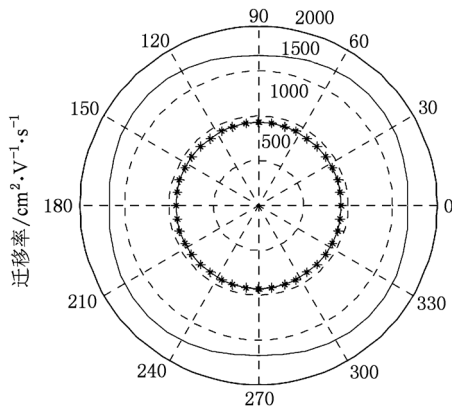


图4 锗组分为0.05的应变Si电子迁移率

图4所示为锗组分为0.05的应变Si迁移率.这是由于前者的电导有效质量远远小于后者,同时电子占据 Δ_2 能谷的概率增大,如果电场垂直于xy平面,由于其电导有效质量较高,电子迁移率会较未应变时更加减小.电场垂直于xy平面在应变Si NMOS器件中即为垂直沟道的情况,所以从电子迁移率方面来考虑,张应变Si NMOS器件不适合做垂直沟道.

因此,对于电子迁移率与杂质浓度之间的关系只考虑电场位于xy平面的情况,且由于在这个平面内电子的迁移率与电场的方向关系不是很大,选取电场方向为x方向.

体Si电子迁移率与杂质浓度之间的关系如图5所示.仿真结果表明,掺杂浓度在 10^{16} — $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时,电子的迁移率比实验数据^[14]要大,这是由于BH模型对离化杂质散射引起的迁移率的影响估计过高. BH模型是基于以下几点:1)屏蔽库仑势跟动量没有关系;2)散射中心之间没有相互作用;3)一级玻尔近似;4)杂质中心被处理为点电荷.正因为这些假设,对离化杂质的散射影响估计太低.

当掺杂浓度低于 10^{16} cm^{-3} 时,离化杂质散射引起的迁移率较小,因此对总迁移率的影响不大,而当杂质浓度大于 $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ 时,杂质离子之间的相互作用增强,会对电子迁移率会产生一定的影响.当杂质浓度高于 10^{18} cm^{-3} 时,如文献[8]所言,由于简并的发生, BH模型不再适用.

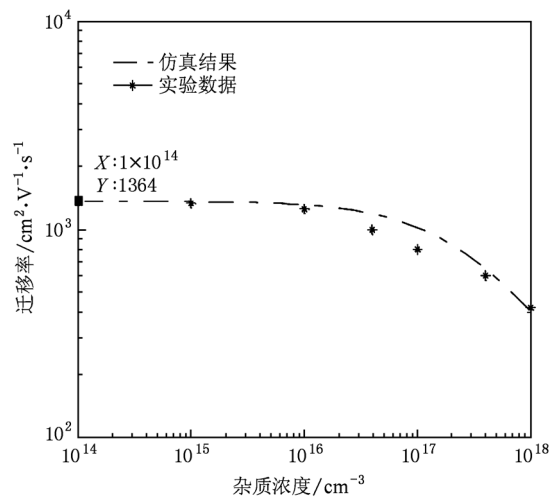


图5 体Si迁移率与杂质浓度的关系

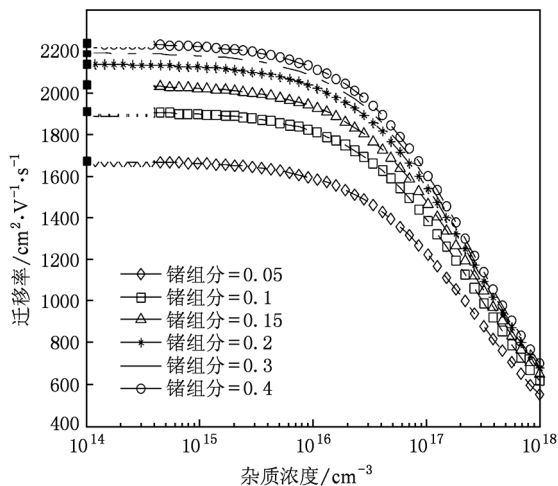


图6 应变 Si 迁移率与杂质浓度的关系

应变 Si 电子迁移率与杂质浓度之间的关系如图 6 所示. 当锗组分为 0.4 时, 迁移率增强约 64%, 与文献[15]所报道的增强因子 1.68 接近. 当锗组分大于 0.2 时, 电子几乎全部占据 Δ_2 能谷, 另外, 电

子的有效质量随锗组分的变化不大, 因此电子迁移率变化较小. 电子迁移率的增加主要是由于 Δ_2 能谷电子占有率的增加和 Δ_2, Δ_4 能谷之间能量差变大引起的谷间散射减小.

4. 结 论

依据离化杂质散射、声学声子散射和谷间散射的散射模型, 在考虑电子谷间占有率的基础上, 计算了不同锗组分下, 不同杂质浓度时应变 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的电子迁移率. 结果表明: 锗组分 $x < 0.2$ 时, Δ_2 能谷谷间占有率随锗组分的增加而增加, 锗组分达到 0.2 时, 所有电子几乎全部占据能级较低的 Δ_2 能谷, 此后迁移率的增加幅度不是很大; 低掺杂时, 应变 Si 在锗组分为 0.4 时迁移率增加约 64%; 并且由于 Δ_2 能谷电子占有率的增加, 垂直 xy 平面的电子迁移率由于电导有效质量较大而比 xy 平面的电子迁移率小, 因此, 对于张应变 Si NMOS 器件, 就迁移率而言不适合做垂直沟道器件.

[1] Hu H Y, Zhang H M, Jia X Z 2007 *Chinese Journal of Semiconductors* **28** 36
 [2] Shu Zh Y, Yang H D 2006 *Chin. Phys.* **15** 1374
 [3] Song J J, Zhang H M, Xuan R X, Hu H Y, Dai X Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 7947 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、宣荣喜、胡辉勇、戴显英 2009 物理学报 **58** 7947]
 [4] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Xuan R X, Dai X Y 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4958 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、胡辉勇、宣荣喜、戴显英 2009 物理学报 **58** 4958]
 [5] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dai X Y, Xuan R X 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2064 (in Chinese) [宋建军、张鹤鸣、胡辉勇、戴显英、宣荣喜 2010 物理学报 **59** 2064]
 [6] Philippe D 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 3911
 [7] Siddhartha D, Hans K, Vassil P, Stephan E U, Siegfried S 2005 *IEEE Transactions on Electron Devices* **52** 527
 [8] Karlheinz S 1982 *Semiconductor Physics: An Introduction* p163

[9] Phuong H N, Hofmann K R 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 375
 [10] Ye L X 1992 *Monte Carlo Simulation of Small-Size Devices* (Beijing: Science Press) p369 (in Chinese) [叶良修 1992 小尺寸半导体器件的蒙特卡罗模拟. 第一版(北京:科学出版社)第 369 页]
 [11] Tang J Y, Hess K 1983 *J. Appl. Phys.* **54** 5145
 [12] Vogelsang Th, Hofman K R 1992 *IEEE Transactions on Electron Devices* **39** 2641
 [13] Soline R Nicolas C, Frederic A, Guy F 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 5088
 [14] Liu E K, Zhu B S, Luo J S 1994 *Semiconductor Physics* (Beijing: Defense Industry Press) p98 (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 98 页]
 [15] Karlowatz G, Ungersboeck E, Wessner W, Kosina H 2006 *IEEE* **63**

Electron mobility of strained Si/(001) Si_{1-x}Ge_x*

Wang Xiao-Yan^{1)2)†} Zhang He-Ming¹⁾ Song Jian-Jun¹⁾ Ma Jian-Li¹⁾

Wang Guan-Yu¹⁾ An Jiu-Hua¹⁾

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

2) (Department of Electron and Electricity Engineering, Baoji University of Arts and Sciences, Baoji 721007, China)

(Received 3 August 2010; revised manuscript received 16 October 2010)

Abstract

According to the model of ionized impurity scattering, acoustic phonon intravalley scattering and optical phonon intervalley scattering, the dependences of electron mobility of strained Si/(001) Si_{1-x}Ge_x with different germanium constituents on impurity concentration are studied based on Subband occupation by solving Boltzmann equation. The results show that electrons almost totally occupy the Δ_2 valley when germanium constituent is up to 0.2, and the mobility with germanium constituent 0.4 is 64% higher than that of the unstrained silicon at low impurity concentration; and vertical channel is not so good for tensile strained Si devices. The model can also be used to calculate the electron mobility of other crystal face with an arbitrarily orientation if the parameters are correctly chosen, so the model offers some useful foundation for strained silicon devices and circuits.

Keywords: subband occupancy, scattering model, germanium constituent, electron mobility

PACS: 72.20.Fr, 72.10.-d

* Project supported by the National Ministries and Commissions (Grant Nos. 51308040203, 9140A08060407DZ0103, 6139801).

† E-mail: wxyswallow7907@163.com