物理学报 Acta Physica Sinica



应变 (001) p 型金属氧化物半导体反型层空穴量子化与电导率有效质量 刘伟峰 宋建军 Hole quantization and conductivity effective mass of the inversion layer in (001) strained p-channel metal-oxid-semiconductor Liu Wei-Feng Song Jian-Jun

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica, 63, 238501 (2014) DOI: 10.7498/aps.63.238501 在线阅读 View online: http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.238501 当期内容 View table of contents: http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/volumn/home.shtml

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

对称三材料双栅应变硅金属氧化物半导体场效应晶体管二维解析模型 辛艳辉, 刘红侠, 王树龙, 范小娇 2014, 63(14): 148501. 全文: PDF (1083KB)

异质多晶 SiGe 栅应变 Si NMOSFET 物理模型研究 王斌, 张鹤鸣, 胡辉勇, 张玉明, 宋建军, 周春宇, 李妤晨 2013, 62(21): 218502. 全文: PDF (990KB)

非对称 Halo 异质栅应变 Si SOI MOSFET 的二维解析模型 辛艳辉, 刘红侠, 范小娇, 卓青青 2013, 62(15): 158502. 全文: PDF (493KB)

单 Halo 全耗尽应变 Si 绝缘硅金属氧化物半导体场效应管的阈值电压解析模型 辛艳辉, 刘红侠, 范小娇, 卓青青 2013, 62(10): 108501. 全文: PDF (363KB)

单轴应变 Si(001) 任意晶向电子电导有效质量模型 靳钊, 乔丽萍, 郭晨, 王江安, 刘策 2013, 62(5): 058501. 全文: PDF (4395KB)

应变(001) p型金属氧化物半导体反型层空穴 量子化与电导率有效质量*

刘伟峰 宋建军

(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)

(2014年7月4日收到; 2014年7月29日收到修改稿)

基于 k · p 微扰理论框架, 研究建立了单轴张/压应变 Si, Si 基双轴应变 p 型金属氧化物半导体 (PMOS) 反型层空穴量子化有效质量与空穴面内电导率有效质量模型.结果表明:对于单轴应力 PMOS, 选择单轴压应力可有效增强器件的性能;同等增强 PMOS 空穴迁移率, 需要施加的单轴力强度小于双轴力的强度;在选择双轴应力增强器件性能时,应优先选择应变 Si_{1-x}Ge_x 作为沟道材料.所获得的量化理论结论可为 Si 基及其他应变器件的物理理解及设计提供重要理论参考.

关键词: 应变, p型金属氧化物半导体, 沟道, 设计 PACS: 85.30.De, 85.30.Pq, 85.30.Tv

DOI: 10.7498/aps.63.238501

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 与 Si_{1-x}Ge_x)应变材料迁移率高、能带结构可调,且其应用与 Si 工艺兼容,在高速/高性能半导体器件及集成电路中有广泛的应用^[1-5].

从应力类型划分, 应变Si (s-Si) 材料可分为单 轴应变和双轴应变. 对于单轴应变来说, 应力类 型有压应力和张应力两种; 对于双轴应变来说, 有 应变Si 和应变Si_{1-x}Ge_x 两种应变材料可供选择. 单轴应变是Si 在一维方向受力, 双轴应变是Si 在 二维方向受力. 单轴应变和双轴应变均可使Si 材 料能带发生分裂, 物理参数发生变化, 进而引起 载流子迁移率的增强. 目前, 双轴应变Si和应变 Si_{1-x}Ge_x 主要应用于大尺寸互补金属氧化物半导 体 (CMOS) 器件和异质结双极型晶体管, 而纳米级 CMOS器件一般采用单轴应变Si^[6-8].

CMOS由n型金属氧化物半导体和p型金属 氧化物半导体 (PMOS)构成, PMOS性能决定了 CMOS的整体性能.因此,如何利用应变技术提高 PMOS性能显得尤为重要.由上所述,似乎只要采 用应变技术,无论是单轴应变Si、双轴应变Si、双轴 应变Si_{1-x}Ge_x技术均可实现PMOS性能的提升. 而值得思考的是,1)是否所有的应变技术均可实现 PMOS性能的提升?2)利用应变技术提升PMOS 性能,从应变致迁移率增强角度出发,哪类应变技 术更优?对于这些更为细节的应变致器件性能增 强机理,应变技术可提高器件和电路性能的普适性 结论^[9,10](应变Si材料导带、价带分裂,进而引起载 流子迁移率的显著增强是提高器件和电路性能的 本质因素)无法做出更进一步的解释.

有鉴于此,本文从薛定谔方程出发,考虑应变 产生的形变势场,基于 k·p微扰理论框架,研究单 轴张/压应变 Si, Si 基双轴应变 PMOS 反型层价带 *E-k*关系,建立其空穴量子化有效质量与空穴面内 电导率有效质量模型.基于应变 PMOS 反型层空

* 教育部博士点基金(批准号: JY0300122503)和陕西省自然科学基础研究计划(批准号: 2014JQ8329)资助的课题.

© 2014 中国物理学会 Chinese Physical Society

[†]通讯作者. E-mail: jianjun_79_81@xidian.edu.cn

穴有效质量的变化规律,提出应变(001) PMOS沟 道应力类型与应变材料的设计原理,揭示引言中所 描述的物理现象.

2 应变PMOS反型层价带*E-k*关系 模型

色散关系(*E-k*关系)是研究 PMOS 反型层物 理性质以及应力致反型层空穴有效质量变化的重 要理论基础.对于具有应变沟道的 PMOS 器件来 说,表面量子化效应与应变效应将共同作用,从而 使得反型层能带结构发生显著变化^[11,12].需要指 出的是,应变 PMOS 反型层能带色散关系(*E-k*关 系)的计算较为复杂,需要数值计算.

为方便考虑应变 MOS 反型层量子化效应,将 应变材料价带 k 空间矢量分为两部分, k_z (与纵向 电场方向平行)和 $k_{//}$ (面内k矢量模值).这样,考 虑量子化相应,应变材料价带总哈密顿量 $H(k_z, k_{//}, s)$ 退化为 H_0 ($k_z = -i\partial/\partial z, k_{//} = 0, s$)和H'($k_z = -i\partial/\partial z, k_{//}, s$)两部分.其中,s代表应变项; *H*₀为布里渊区中心哈密顿量,表征布里渊区中心 能级;*H*′包含*k*_{//}项,反映面内有效质量的情况.

下面求解应变PMOS价带*E-k*关系,计算 MOS反型层*E-k*关系时,通常采用三角形势阱近 似^[13,14].在布里渊区中心(*k*// = 0),价带重空穴 态与轻空穴态简并消除,而轻空穴态与旋轨分裂态 在应力和*k*_z(量子化)作用下发生耦合作用.价带布 里渊区中心各限制态由下式描述:

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

通过求解(1)式薛定谔方程可得包络函数 f_{im}的形式为艾利函数. 布里渊区中心能级的解析表达 式为

$$E_{im}(k_{//} = 0)$$

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

式中, $E_i 和 m_i^*$ 的值通过6带 $k \cdot p$ 模型 ($H_{\rm KP} + H_{\rm Str} + H_{\rm SO}$)的本征值求解获得 ^[15], 其中,

$$H' = \begin{bmatrix} Lk_x^2 + M\left(k_y^2 + k_z^2\right) & Nk_x k_y & Nk_z k_x \\ Nk_x k_y & Lk_y^2 + M\left(k_z^2 + k_x^2\right) & Nk_y k_z \\ Nk_z k_x & Nk_y k_z & Lk_z^2 + M\left(k_x^2 + k_y^2\right) \end{bmatrix},$$
(3)
$$H'' = \begin{bmatrix} l\varepsilon_{xx} + m\left(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}\right) & n\varepsilon_{xy} & n\varepsilon_{zx} \\ n\varepsilon_{xy} & l\varepsilon_{yy} + m\left(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}\right) & n\varepsilon_{yz} \\ n\varepsilon_{zx} & n\varepsilon_{yz} & l\varepsilon_{zz} + m\left(\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{xx}\right) \end{bmatrix},$$
(4)

$$\begin{cases} H_{\rm KP} = \begin{bmatrix} H' & 0_{3\times3} \\ 0_{3\times3} & H' \end{bmatrix} \stackrel{\uparrow}{\downarrow}, \\ H_{\rm Str} = \begin{bmatrix} H'' & 0_{3\times3} \\ 0_{3\times3} & H'' \end{bmatrix} \stackrel{\uparrow}{\downarrow}, \\ H_{\rm SO} = -\frac{\Delta}{3} \begin{bmatrix} 0 & i & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -i & 0 & 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & i & i & 0 & 0 \\ -1 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$
(5)

所得结果如下:

$$\begin{cases} E_{1} = s, \\ E_{2} = -\frac{1}{2} \left[s + \Delta + \sqrt{9s^{2} + \Delta^{2} - 2s\Delta} \right], \quad (6) \\ E_{3} = -\frac{1}{2} \left[s + \Delta - \sqrt{9s^{2} + \Delta^{2} - 2s\Delta} \right]; \\ \begin{cases} 1/m_{1}^{*} = -(\gamma_{1} - 2\gamma_{2}), \\ 1/m_{2}^{*} = -(\gamma_{1} + \gamma_{2}) \\ -\frac{9\gamma_{2}s - \gamma_{2}\Delta}{\sqrt{9s^{2} + \Delta^{2} - 2s\Delta}}, \\ 1/m_{1}^{*} = -(\gamma_{1} + \gamma_{2}) \\ +\frac{9\gamma_{2}s - \gamma_{2}\Delta}{\sqrt{9s^{2} + \Delta^{2} - 2s\Delta}}. \end{cases}$$

238501-2

式中各符号物理意义详见文献[15].

面内有效质量是应变 PMOS 价带 E-k 关系包含的另一重要参量,对其进行求解需要考虑微扰项 $H'(k_z = -i\partial/\partial z, k_{//}, s)$. 总哈密顿项中 U_i 各态

$$\left(\frac{3}{2},\pm\frac{3}{2}\right), \quad \left(\frac{3}{2},\pm\frac{1}{2}\right), \quad \left(\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right)$$

之间由于 $H'(k_z = -i\partial/\partial z, k_{//}, s)$ 项而产生耦合作用.

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

子带之间的互作用由 〈 ϕ_{im} | $H' | \phi_{jn}$ 〉 决定. 同 时考虑两个因素, 布里渊区中心态对角矩阵元由下 式确定:

$$\langle U_i f_{km} | H' | U_i f_{lm} \rangle$$

$$= \begin{cases} -\frac{1}{2} (\gamma_1 + \gamma_2) k_{//}^2 & (i = 1), \\ -\frac{1}{2} (\gamma_1 - \gamma_2) k_{//}^2 & (i = 2), \\ -\frac{1}{2} \gamma_1 k_{//}^2 & (i = 3). \end{cases}$$
(9)

此外,

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

现在考虑非对角矩阵元,其表达式如下:

$$\langle U_i f_{km} | H' | U_j f_{ln} \rangle$$

= $\alpha \gamma_3 k_{//} \langle f_{km} | \partial \partial z | f_{ln} \rangle$
+ $\beta \bar{\gamma} k_{//}^2 \langle f_{km} | f_{ln} \rangle$. (11)

仍然是基于6带kp模型($H_{\rm KP} + H_{\rm Str} + H_{\rm SO}$), 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). 通过对该矩阵进行 Matlab 本征值求解, 可进一步获得面内有效质量的结果 (见图1,图2).

3 结果与讨论

基于第2节所建应变PMOS反型层价带*E-k* 模型,可获得应变PMOS空穴量子化有效质量与空 穴面内电导率有效质量模型.下面通过应变PMOS 反型层空穴有效质量的变化规律,提出应变(100) PMOS沟道应力类型与应变材料的设计原理.

3.1 空穴面内电导率有效质量模型

图1为单轴应变Si PMOS 反型层张/压应力情况下,面内沿各晶向空穴有效质量随应力的变化情况(图1(a)为二维(2D)图,图1(b)为相对应的三维(3D)图,包含有单轴应力所施加晶向的信息). 由图1可见,单轴压应力可有效降低Si PMOS沿各晶向的空穴有效质量,这是单轴应力可增强反型层空穴迁移率的本质因素.相比而言,单轴张应力对空穴有效质量的影响可以忽略.因此,对于单轴应力PMOS 来说,我们应该选择单轴压应力,可有效增强器件的性能.

图 2 为 Si 基双轴应变 PMOS 面内沿各晶向空 穴电导率有效质量与应力(由 Ge 组分 x 表征)的 关系. 由图 2 可见,双轴应力可使应变 Si 和应变 Si_{1-x}Ge_x PMOS 沿各晶向的空穴有效质量减小, 与单轴应力类似,[110] 晶向比[100] 晶向减小的幅 度大. 而对比应变 Si 和应变 Si_{1-x}Ge_x PMOS 可以 发现,相同的晶向,应变 Si_{1-x}Ge_x 空穴有效质量小 于应变 Si,表明其更有利于空穴迁移率的增强.



图 1 单轴应变 Si PMOS 面内沿各晶向空穴电导率有效质量 *m*_c 与张/压应力*T* 的关系 (*m*₀ 为电子有效质量, *θ* 为 面内施加单轴应力的角度) (a) 2D 图; (b) 3D 图

238501-3



图 2 Si 基双轴应变 PMOS 面内沿各晶向空穴电导率有效质量 m_c^* 与应力 (由 Ge 组分 x 表征)的关系 (a) 应变 Si/(001)Si_{1-x}Ge_x; (b) 应变 Si_{1-x}Ge_x/(001)Si

3.2 空穴量子化有效质量模型

基于应变 PMOS 价带 *E-k* 关系,还可以获得价 带空穴量子化有效质量与应力的关系.下面基于该 有效质量模型,进一步讨论应变(100) PMOS 沟道 应力类型与应变材料的设计原理.

对于未应变Si材料来说,未施加电场时,重空 穴带与轻空穴带在Γ处简并.在电场力的作用下, 重空穴带与轻空穴带简并消除(有效质量大的子带 为能级最低处,重空穴第一子带有效质量大于轻空 穴第一子带有效质量,故为能级最低处),且沿电 场方向能级发生量子化.电场致能带分裂,可降低 空穴带间散射概率,空穴迁移率获得一定程度的 提升.

若将双轴应力的作用考虑进来,轻、重空穴带 发生"反转"(见图3轻重空穴有效质量的数据),双 轴应力对Si材料价带产生的作用与电场力对价带 产生的作用相反.这就意味着当双轴应力作用于 PMOS上时,会首先消除重空穴第一子带与轻空穴 第一子带之间由于电场力而产生的能级差.在一定



图 3 双轴应变 Si (001) 空穴量子化有效质量 (*E* 为价带能量, *k* 为波矢量, 波矢 *k* 沿 [001] 晶向, *a* 为 Si 材料的晶 格常数) (a) 未应变 Si; (b) 应变 Si/(001)Si_{0.9}Ge_{0.1}; (c) 应变 Si/(001)Si_{0.8}Ge_{0.2}; (d) 应变 Si/(001)Si_{0.6}Ge_{0.4}

应力强度下,重空穴第一子带与轻空穴第一子带会 重新发生简并.随着应力的进一步增大,简并又再 次消除,重空穴第一子带与轻空穴第一子带发生 分裂,且分裂能随应力的增加而增大.这表明对Si PMOS 施加双轴应力时,应力的作用会首先降低空 穴迁移率,然后再增强空穴迁移率.

基于该原理,观察图4所示的单轴应变Si(001) 空穴量子化有效质量(仅观察压应力部分)发现,单 轴压应变(001) PMOS 沿电场方向空穴量子化有 效质量在应力的作用下未发生"反转".由于无须补 偿电场产生的能级差,只要施加较小强度的单轴压 应力即可达到双轴应力产生的效果.从以上分析可 以看出,对于PMOS来说,同等空穴迁移率的增强, 需要施加的单轴力强度小于双轴力的强度.



图 4 单轴应变 Si (001) 空穴量子化有效质量 (a) 重空 穴量子化有效质量 m_h; (b) 轻空穴量子化有效质量 m_l

在进一步讨论双轴应变Si和应变Si_{1-x}Ge_x之前,先将本文模拟结果与已有文献结果进行比较,以说明本文结果的正确性.文献[16]报道了应变Si空穴量子化的结果:1 GPa双轴张应力条件下,重、轻空穴有效质量分别为0.18m₀和0.29m₀;1 GPa单轴压应力条件下,重、轻空穴有效质量分别为0.28m₀和0.22m₀.文献[16]结果分别与本文图3(c)(重、轻空穴有效质量分别为0.175m₀和0.291m₀)和图4结果(重、轻空穴有效质量分别为0.283m₀和0.217m₀)一致.还验证了本文模拟结果

的正确性.

进一步比较双轴应变Si和应变Si_{1-x}Ge_x,具体结果列于表1.由表1可见,应变Si_{1-x}Ge_x空穴量子化有效质量在应力的作用下也未发生"反转".因此,在选择双轴应力增强器件性能时,应优先选择应变Si_{1-x}Ge_x作为沟道材料.需要说明的是,虽然双轴应变Si_{1-x}Ge_x面内空穴有效质量和量子化空穴有效质量指标均优于双轴应变Si 的情况,但由于双轴应变Si_{1-x}Ge_x载流子输运存在合金无序散射机理,前者优于后者的程度会略有下降.

表1 应变 $Si_{1-x}Ge_x$ PMOS 空穴量子化有效质量

x	重空穴有效质量/m0	轻空穴有效质量/m0
0	0.2900	0.2024
0.1	0.2792	0.2054
0.2	0.2687	0.2024
0.3	0.2589	0.1919
0.4	0.2500	0.1849

4 结 论

本文从薛定谔方程出发,基于*k*·*p*微扰理论 框架,研究建立了单轴张/压应变Si,Si基双轴应变 PMOS反型层价带*E-k*关系模型.在此基础上,分 析获得了应变PMOS反型层空穴量子化有效质量 与空穴面内电导率有效质量随应力的变化规律,提 出了应变(001) PMOS沟道应力类型与应变材料的 设计原理,揭示了应力致迁移率增强机理:

1) 对于单轴应力 PMOS, 选择单轴压应力可有 效增强器件的性能;

2) 同等增强 PMOS 空穴迁移率, 需要施加的 单轴力强度小于双轴力的强度;

3) 在选择双轴应力增强器件性能时, 应优先选择应变 Si_{1-x}Ge_x 作为沟道材料.

本文所获得的量化理论结论可为Si基及其他 应变器件的物理理解及设计提供重要理论参考.

参考文献

- Wu W R, Liu Ch, Sun J B, Yu W J, Wang X, Shi Y, Zhao Y 2014 IEEE Electron Dev. Lett. 35 714
- [2] Cai W L, Takenaka M, Takagi S 2014 J. Appl. Phys. 115 094509
- [3] EngSiew K A, Sohail I R 2013 J. Comput. Theor. Nanos 10 1231

238501-5

- [4] 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]
- [5] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Dian X Y, Xuan R X 2007 Chin. Phys. 16 3827
- [6] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Wang X Y, Wang G Y 2012 Sci. China: Phys. Mech. 55 1399
- [7] Song J J, Zhang H M, Hu H Y, Wang X Y, Wang G Y
 2012 Acta Phys. Sin. 61 057304 (in Chinese) [宋建军, 张 鹤鸣, 胡辉勇, 王晓艳, 王冠宇 2012 物理学报 61 057304]
- [8] 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
- [9] Huang S H, Lu T M, Lu S C, Lee C H, Liu C W, Tsui D C 2012 Appl. Phys. Lett. 101 042111

- [10] Wang E X, Matagne P, Shifren L 2006 IEEE Trans. Electron Dev. 53 1840
- [11] Hou Y T, Li M F 2001 IEEE Trans. Electron Dev. 48 2893
- [12] Chaudhry A, Sangwan S 2013 J. Comput. Theor. Nanos 10 1085
- [13] Li S J, Chang C C, Tsai Y T 2006 Int. J. Numer. Model. Eletron. 19 229
- [14] Ma Y T, Li Z J, Liu L T, Yu Z P 2001 Solid State Electron 45 267
- [15] 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]
- [16] Sun Y, Thompson S E, Nishida T 2007 J. Appl. Phys. 101 104503

Hole quantization and conductivity effective mass of the inversion layer in (001) strained p-channel metal-oxid-semiconductor^{*}

Liu Wei-Feng Song Jian-Jun[†]

 $(Key\ Lab\ of\ Wide\ Band-Gap\ Semiconductor\ Materials\ and\ Devices,\ School\ of\ Microelectronics,\ Xidian\ University,\ School\ Semiconductor\ Materials\ and\ Devices,\ School\ School\ Semiconductor\ Microelectronics,\ Microelectronics$

Xi'an 710071, China)

(Received 4 July 2014; revised manuscript received 29 July 2014)

Abstract

Within the framework of $k \cdot p$ perturbation theory, models of the hole quantization and conductivity effective mass for the inversion layer in uniaxially tensile/compressive and Si-based baixially strained p-channel metal-oxid-semiconductor (PMOS) have been established. Results show that: 1) uniaxially compressive technique should be chosen for the carrier mobility enhancement in uniaxially strained PMOS; 2) the magnitude of uniaxial stress will be less than that of the biaxial case to improve PMOS performance using strained technique; 3) strained Si_{1-x}Ge_x is preferred to use instead of using strained Si, when we choose the biaxially strained materials for the PMOS channel. Our results can provide valuable references to Si-based and other strained device and materials design.

Keywords: strain, p-channel metal-oxid-semiconductor, channel, design

PACS: 85.30.De, 85.30.Pq, 85.30.Tv

DOI: 10.7498/aps.63.238501

^{*} Project supported by the Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China (Grant No. JY0300122503) and the Natural Science Basic Research Plan of Shaanxi Province, China (Grant No. 2014JQ8329).

[†] Corresponding author. E-mail: jianjun_79_81@xidian.edu.cn