

应变硅 pMOS 反型层中空穴迁移率 $k \cdot p$ 及蒙特卡罗模拟研究

赵 寄[†] 邹建平 谭耀华 余志平

(清华大学微电子学研究所, 北京 100084)

摘要: 对应变硅 pMOS 反型层中的空穴迁移率进行了理论研究. 使用应力相关的 6 能带 $k \cdot p$ 模型, 自洽地求解垂直于沟道方向的一维薛定谔方程与泊松方程, 获得反型层中二维空穴气的能带结构. 采用蒙特卡罗方法对单轴压应力和双轴张应力情况下的空穴迁移率进行了模拟研究, 得出了沟道迁移率随垂直于沟道电场变化的曲线, 并与常规的非应变硅 pMOS 迁移率进行了比较. 模拟结果显示: 无论是单轴压应力还是双轴张应力, 都使得空穴迁移率增大. 当单轴压应力沿着 [110] 沟道时, 迁移率增大的幅度最大, 平均增幅可达到 170% 左右.

关键词: 应变硅; 迁移率; $k \cdot p$ 方法; 蒙特卡罗模拟

PACC: 7220F; 7115Q

中图分类号: TN386

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)12-2144-06

1 引言

信息技术的不断发展对微电子技术以及集成电路产业提出了更高的要求. 特征尺寸的不断缩小一直是 CMOS 器件性能提高的主要途径. 但是随着器件尺寸进入纳米量级, 器件尺寸的进一步缩小将面临着许多挑战. 因此, 在现有器件尺寸条件下, 探索新型器件结构和新材料对于提高 CMOS 器件的性能是十分重要的.

机械应力对硅材料特性的影响已经被研究了五十多年. 近年来, 应变 Si 沟道技术被应用到集成电路制造工艺中, 使得器件驱动电流增大, 性能得以提高^[1~3]. 这些研究主要集中在弛豫 SiGe 衬底外延生长应变 Si 沟道结构上. Si 与 SiGe 材料之间的晶格失配导致在 Si 层中产生双轴张应力, 使得载流子的迁移率得到提高. 双轴应力情况下 Si 反型层中载流子输运的理论模型研究^[4~7]显示: 应力诱导的能带简并度的解除使得能带分裂, 载流子重新分布, 导致输运有效质量减小, 因而迁移率得以提高. 除此之外, 迁移率提高还得益于能带分裂抑制了能谷间或带间的散射. 然而, 双轴应力使得 pMOS 器件性能的提高仍然远低于 nMOS 器件性能的提高. 这种性能提高上的差异以及双轴应力器件结构需要采用 SiGe 衬底的缺陷使得双轴应力工艺在 CMOS 集成电路中的应用受到限制.

与双轴应力相比, 近年来, 单轴应力工艺已经成

为 90nm 节点 pMOS 工艺中首选的迁移率增强方法^[8~10]. 单轴压应力可以更大程度地提高空穴的迁移率. 通过外延生长 SiGe 源漏区可以在沟道中引入单轴压应力, 使得 pMOS 器件的性能得到很大的提高. Giles 等人^[11]采用经验赝势方法计算了单轴压应力引起的空穴能带结构的变化, 并分析了迁移率提高的原因. Wang 等人^[12]则使用 $k \cdot p$ 的量子输运模型分析了单轴和双轴应力情况下空穴迁移率的变化. 然而, 到目前为止, 仍然缺少一个全面的物理模型来描述单轴和双轴应力情况下空穴的输运问题^[13].

本文使用应力相关的 6 能带 $k \cdot p$ 模型, 自洽求解一维薛定谔方程和泊松方程, 采用 Newton-Broyden 算法改进了自洽求解过程的收敛性, 最后得到反型层中各向异性的空穴能带结构. 基于获得的二维子带结构, 考虑声子形变势散射和表面粗糙度散射, 采用蒙特卡罗方法对单轴压应力和双轴张应力情况下反型层中的空穴输运问题进行了模拟研究. 从能带结构出发, 重点分析了单轴压应力和双轴张应力情况下空穴迁移率提高的原因, 并分析了单轴压应力沿着不同晶向沟道的空穴迁移率的变化情况.

2 能带模型和迁移率计算

图 1 显示了两种应力器件的结构. 图 1(a) 是双轴张应力器件的结构示意图, 应变 Si 层外延生长在

[†] 通信作者. Email: zhaoji03@mails.tsinghua.edu.cn

2006-03-26 收到, 2006-08-16 定稿

弛豫 SiGe 衬底上, 由于两种材料的晶格失配, 在 Si 层中产生双轴张应力. 图 1(b) 是单轴压应力器件的结构示意图, 器件源漏区是外延生长的 SiGe 材料,

这样沿着沟道方向引入单轴压应力. 两种器件的生长方向都是 [001] 晶向, 栅氧厚度为 5 nm. 器件沟道区均匀施主掺杂, 掺杂浓度为 $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

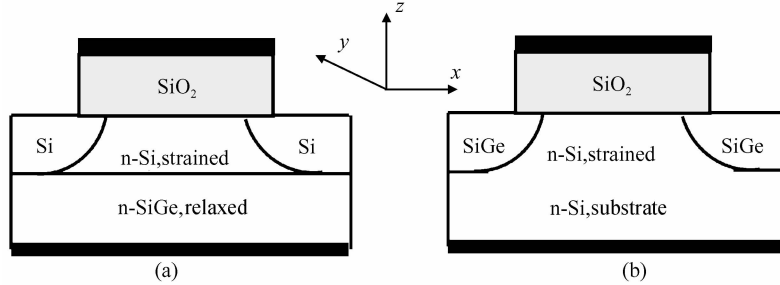


图 1 应力硅 pMOS 器件结构示意图 (a) 双轴张应力器件结构; (b) 单轴压应力器件结构

Fig. 1 Schematic geometry of silicon pMOS transistors under biaxial tension (a) and uniaxial compression (b)

载流子输运特性的理论研究需要精确的能带结构信息. 由于栅电场的作用, 在垂直于沟道的方向 (z 方向) 产生一个类三角形量子阱, 因此在反型层中, 垂直于沟道方向 (z 方向) 是量化的. 通过垂直于沟道方向 (z 方向) 的一维薛定谔方程和泊松方程的自洽求解, 可以得到器件反型层中二维空穴气的子带结构信息. 能带计算采用标准的 6 能带 $k \cdot p$ 模型^[14,15], 相应的哈密顿量考虑了轻、重空穴带, 自旋轨道分裂带以及三个带的自旋简并度. 应变对能带结构的影响是通过价带形变势理论引入的. 薛定谔方程的形式如下:

$$[\hat{H}(\mathbf{K}, k_z) + \mathbf{IV}(z)] \cdot \psi_n(\mathbf{K}, z) = E_n(\mathbf{K})\psi_n(\mathbf{K}, z), \quad n = 1, 2, \dots, 5, 6 \quad (1)$$

其中 \mathbf{I} 代表一个 6×6 的单位矩阵; $\mathbf{K} = (k_x, k_y)$ 是沟道平面内的载流子波矢; $\psi_n(\mathbf{K}, z) = [\psi_n^1, \dots, \psi_n^6]^T$ 是具有 6 个分量的一维本征列向量; $E_n(\mathbf{K})$ 是本征能量, $n = 1, 2, \dots$ 是本征量的指标; $V(z)$ 是自洽求解的静电势. 6×6 的哈密顿量 \hat{H} 由三部分组成:

$$\hat{H} = \hat{H}_{kp} + \hat{H}_{strain} + \hat{H}_{SO} \quad (2)$$

其中 \hat{H}_{kp} 是 $k \cdot p$ 哈密顿量; \hat{H}_{strain} 对应于应变微扰哈密顿量; \hat{H}_{SO} 则是自旋轨道相互作用微扰哈密顿量. 文献[16, 17] 给出了这三个哈密顿量的 6×6 矩阵表示形式以及模型所使用的 Luttinger 价带参数和价带形变势参数.

(1) 式中的自洽静电势由器件中的电荷分布决定, 泊松方程具有如下形式:

$$-\frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} = \frac{e}{\epsilon} [p(z) - n(z) + N_D(z)] \quad (3)$$

其中 $p(z)$ 是费米统计计算得到的空穴浓度分布, 如(4)式所示; $n(z)$ 是自由电子浓度分布; $N_D(z)$ 是电离施主的浓度分布.

$$p(z) = \sum_v \frac{1}{2\pi^2} \int d\mathbf{K} f(E_F - E_v(\mathbf{K})) |\zeta_v(\mathbf{K}, \mathbf{r}, z)|^2 \quad (4)$$

其中 f 为费米分布函数; E_F 为费米能量; $\zeta_v(\mathbf{K}, \mathbf{r}, z)$ 为各子带的波函数, 形式如下:

$$\zeta_n(\mathbf{K}, \mathbf{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{v=1}^6 \psi_n^v(\mathbf{K}, z) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \quad (5)$$

其中 \mathbf{r} 为沟道平面 (x, y) 内的实空间坐标; L 为归一化长度.

薛定谔方程是在非均匀网格划分的基础上采用有限差分方法进行求解, 将所得到的波函数与本征能级输入到泊松方程, 用牛顿迭代算法求解电势的分布. 这两个步骤构成整体迭代过程的一个环节, 反复循环, 直到得到自洽的电势与波函数解. 在泊松方程迭代求解时, 雅可比矩阵必须包括空穴浓度对电势的依赖关系, 否则, 收敛效果十分不好. 不仅收敛速度慢, 而且当栅电压逐渐增大时, 求解过程变得很容易发散, 也就是说很难在强反型的情况下得到自洽的电势分布. 本文同时在牛顿迭代法的基础上采用了 Broyden 数值方法进一步改善程序的收敛性^[18]. 栅电压在 $-1.0 \sim -6.0 \text{ V}$ 的范围内, 强反型情况下, 程序可以在偏压长至 4 V (绝对值) 的情况下很快收敛. 通过对收敛方法的改进, 使得程序的运行速度从原来的计算一个自洽值需要一两个小时缩短为十几分钟, 大大提高了程序的运算效率, 使得分析模拟结果变得更为快捷. 通过自洽求解, 可以得到反型层中二维空穴气的各子带的能量-波矢关系, 波函数, 有效质量以及空穴浓度分布. 由于薛定谔方程中的哈密顿量是与应变相关的, 所以上述能带计算得到的物理量都包含有应力的影响, 而这些物理量则决定了载流子的输运过程.

蒙特卡罗方法被用来研究反型层中空穴的输运

过程. 载流子的输运与其受到的散射密切相关. 在模拟过程中, 考虑的散射机制包括了声学声子和光学声子的形变势散射以及表面粗糙度散射. 每一种散射机制又考虑带内和带间跃迁. 各种散射机制的散射率计算依赖于能带计算所得到的量子化子带波函数和能量. 空穴能量和波矢之间的对应关系由二维波矢空间的离散化决定. 输运研究考虑了最低的 12 个子带. 能带计算得到的各子带的空穴占据率显示: 考虑 12 个子带足以保证计算的准确度.

对于声子散射主要考虑声学声子形变势的带内散射和光学声子形变势的带内以及带间散射. (6) 式给出了声学声子形变势带内散射率的计算公式:

$$\gamma_{ii} = \frac{m_i D_{ac}^2 k_B T}{\hbar^3 v^2 \rho \times 10^{-11}} \int |\xi_i(z)|^2 |\xi_i(z)|^2 dz \times u_0(E) \quad (6)$$

其中 m_i 是第 i 个子带的有效质量; D_{ac} 是声学声子形变势; ρ 为 Si 的密度; v 为 Si 中的声速; $\xi_i(z)$ 为第 i 个子带的波函数; $u_0(E)$ 为阶跃函数, E 为载流子能量.

对于光学声子形变势散射, 除了要考虑带内散射, 还要考虑带间散射. 由于散射涉及的光学声子能量可比拟于载流子能量, 所以计算散射率时还需要考虑吸收声子和发射声子两种情况. 计算公式由 (7) 式给出:

$$\gamma_{if} = \frac{m_f D_{op}^2 \times 10^{11}}{\hbar^2 \rho \omega} \left| N_i + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right| \int |\xi_f(z)|^2 \times |\xi_i(z)|^2 dz \times u_0(E - E_{fi} \mp \hbar\omega) \quad (7)$$

其中 i 代表散射初态子带; f 代表散射终态子带; D_{op} 是光学声子形变势; $\hbar\omega$ 是光学声子能量; N_i 是平均声子数; $E_{fi} = E_f - E_i$ 代表终态子带和初态子带的能量差.

对于表面粗糙度散射, (8) 式给出了散射计算公式:

$$\gamma_{surf} = \frac{\pi m \Lambda^2 \Delta^2 E_{eff}^2}{\hbar^3 q} u_0(E) \quad (8)$$

其中 Λ 和 Δ 都是表面散射相关的参数; E_{eff} 是垂直于沟道平面的有效电场; q 代表电子电量. 以上散射模型使用的参数在表 1 中给出.

表 1 载流子散射模型中的相关物理参数

Table 1 Carrier scattering related parameters for Si

参数	数值	参数	数值
$\rho/(g/cm^3)$	2.329	$v/(cm/s)$	9.04×10^5
D_{ac}/eV	5.0	$D_{op}/(eV/cm)$	7.63×10^8
Λ/m	22.0×10^{-10}	$\hbar\omega/eV$	0.063
Δ/m	1.8×10^{-10}		

3 模拟结果与讨论

采用上述研究方法, 对单轴压应力器件结构和

双轴张应力器件结构中空穴的低场迁移率进行了计算. 为了进行对比, 也计算了常规的非应变硅 pMOS 器件的空穴迁移率. 模拟计算的温度为 300K. 栅电压的变化范围为 $-1.0 \sim -6.0V$, 对应的垂直于沟道方向的有效电场的变化范围大约在 $1 \times 10^5 \sim 1 \times 10^6 V/cm$.

图 2 给出了计算得到非应变 Si、双轴张应力和单轴压应力情况下的空穴迁移率与垂直沟道方向的有效电场之间的关系. 图中的单轴压应力沿着 [110] 晶向. 为了比较, 图中同时给出了非应变硅空穴迁移率的实验数据^[19]. 从图中可以看出计算得到的非应变硅空穴迁移率数据与实验数据吻合得很好. 无论是双轴张应力还是单轴压应力, 反型沟道中应力的引入都使得空穴迁移率相比于非应变情况有所增大, 并且单轴压应力情况下的迁移率提高效果好于双轴张应力的情况. 从图中还可以看出: 在较高的有效电场情况下, 由于表面粗糙度散射在各种散射机制中起主要作用, 所以各种情况下的迁移率数值都有所降低.

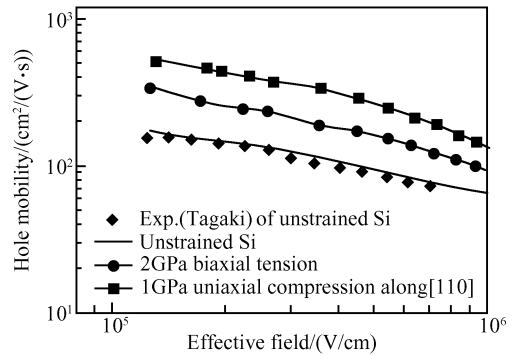


图 2 非应变 Si、双轴张应力和单轴压应力情况下计算所得的空穴迁移率与垂直沟道方向有效电场之间的关系. 为了检验模拟的准确性, 在非应变硅情况下与实验结果进行了比较. 模拟与实验结果符合得很好.

Fig. 2 Calculated hole mobility under uniaxial compression, biaxial tension, and unstrained Si as a function of the effective electric field

应力的存在改变了反型层中的子带结构, 使得输运有效质量以及载流子散射发生变化, 导致迁移率改变. 图 3(a) 给出了计算得到的非应变、有效电场 $0.8MV/cm$ 情况下 (001) 输运平面内第一子带的等能线示意图. 图中用 I1, I2, I3, I4 标志了沿着 $\langle 110 \rangle$ 晶向的 4 个能量区域, 而用 O1, O2, O3, O4 标志了沿着 $\langle 100 \rangle$ 方向的 4 个能量区域.

图 3(b) 给出了在 1.0GPa 的沿着 [110] 方向的单轴压应力情况下的 (001) 平面内第一子带的等能线示意图, 垂直沟道方向的有效电场为 $0.8MV/cm$. 由图中可以看到, 沿着 [110] 方向的单轴压应力

的作用使得 I1 和 I3 区域的能量降低, I2 和 I4 区域的能量升高. 这种能量的差异, 使得空穴重新分布, 更多的空穴进入低能量的 I1 和 I3 区域. 应力造成的能带扭曲使得 I1 和 I3 能量区域在 $[110]$ 方向的曲率远大于 I2 和 I4 区域在 $[110]$ 方向的曲率, 这也意味着位于 I1 和 I3 区域中的载流子在 $[110]$ 方向的输运有效质量远低于 I2 和 I4 区域中的载流子在 $[110]$ 方向的输运有效质量. 可见, 由于重新分布进入低能量的 I1 和 I3 区域的空穴将拥有较小的输运有效质量, 从而大大地提高沿着 $[110]$ 输运方向的迁移率. 单轴应力对于 O1, O2, O3, O4 能量区域的影响较小, 但也使得其中的一部分空穴重新分布进入 I1 和 I3 区域, 对于迁移率的提高也起到了积极的作用. 此外, 单轴压应力造成的能带扭曲破坏了原有的对称性, 降低了态密度, 导致散射率的减小以及输运特性的增强. 所以说单轴压应力导致的迁移率增大来源于两个主要的因素: 输运有效质量的减小以及受到抑制的散射.

图 3(c) 给出了 2.0 GPa 双轴张应力、有效电场 0.8 MV/cm 情况下 (001) 输运平面内第一子带的等能线示意图. 与图 3(a) 给出的非应变情况相比, 双轴张应力使得由 I1, I2, I3, I4 区域的能量相对于 O1, O2, O3, O4 区域的能量有所提高, 驱动空穴重新分布, 由 I1, I2, I3, I4 区域进入 O1, O2, O3, O4 区域. 因为 O1, O2, O3, O4 区域具有较高的有效质量, 所以空穴的重新分布对于迁移率改善是不利的^[12]. 然而, 图 3(c) 中值得注意的现象是: 在双轴张应力情况下, 最内层的等能线形状为近似圆形; 而图 3(a) 所展示的非应变情况下, 最内层的等能线形状为近似星形. 这也表明了第一子带由非应变情况下的重空穴特性转变为双轴张应力情况下的轻空穴特性. 最低子带的这种由重空穴特性向轻空穴特性的转变很大程度上弥补了空穴重新分布引起的有效质量增大对迁移率提高的不利影响. 双轴张应力情况下空穴迁移率的变化正是这两种因素相互竞争, 共同作用的结果. 此外, 散射受到抑制也是双轴张应力情况下空穴迁移率提高的原因.

上述分析显示, 对于空穴来说, 单轴压应力更适合于提升迁移率, 改善器件性能. 然而, 对于单轴压应力, 采用不同晶向的沟道所引起的迁移率变化也是不同的. 图 4 给出了非应变、沿着 $[110]$ 沟道的单轴压应力以及沿着 $[100]$ 沟道的单轴压应力情况下空穴迁移率随有效电场的变化行为. 图中可以看出虽然单轴压应力使得迁移率都有所提高, 但是不同的沟道晶向所带来的迁移率提高还是有所差异的. 单轴压应力沿着 $[110]$ 沟道的迁移率提高幅度明显大于沿 $[100]$ 沟道的迁移率提高的幅度. 沿着 $[100]$ 沟道方向的单轴压应力使得迁移率增加了

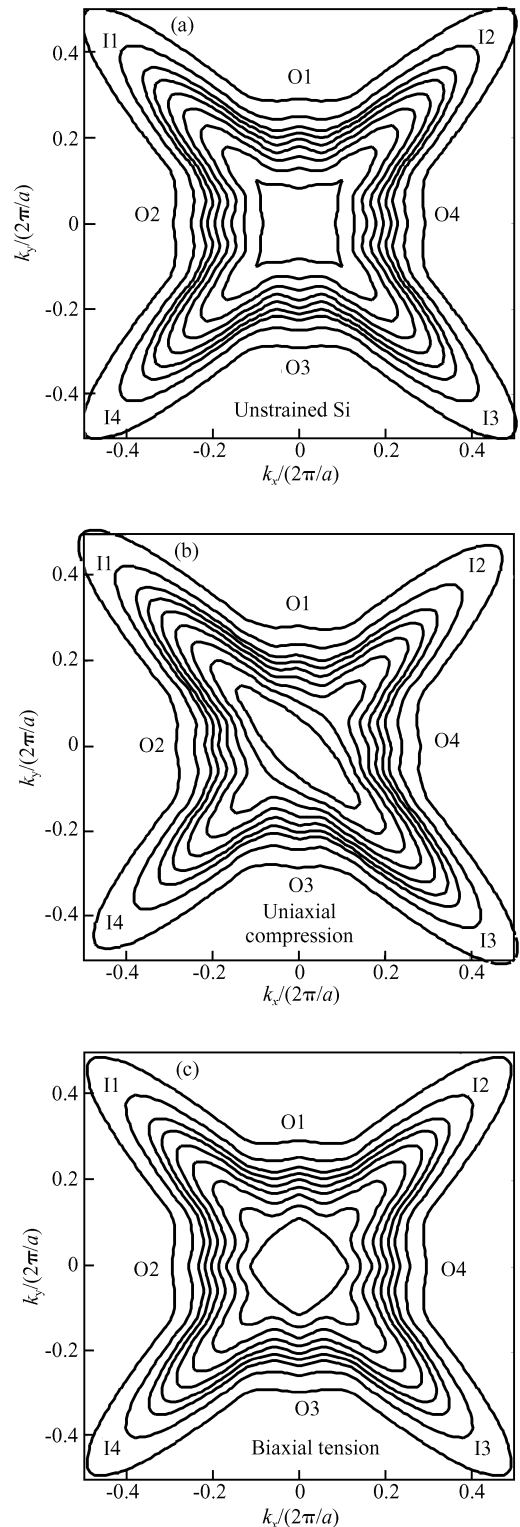


图 3 有效电场 0.8 MV/cm 情况下 (001) 输运平面内第一子带的等能线示意图 (a) 非应变情况; (b) 沿着 $[110]$ 方向的 1 GPa 单轴压应力情况; (c) 2 GPa 双轴张应力情况

Fig. 3 Energy contours in the (001) plane for the first subband (a) Under no stress; (b) 1 GPa uniaxial compression along the $[110]$ direction; (c) 2 GPa biaxial tension

30%~40%，而沿着[110]沟道方向的单轴压应力却可以使得迁移率的增加平均达到170%。在关于图3(b)的讨论中已知：输运有效质量的减小是单轴压应力引起空穴迁移率提高的决定性因素。图5则给出了单轴压应力沿着[110]沟道和[100]沟道情况下，第一子带的输运有效质量随有效电场的变化。图中可以明显看出单轴压应力沿着[110]沟道时，第一子带的输运有效质量远远小于单轴压应力沿着[100]沟道的情况。这种有效质量上的差异反过来印证了图4中两种情况下的迁移率增大的差异。

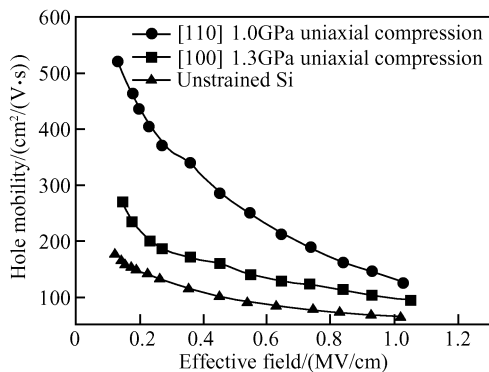


图4 非应变硅、[110]沟道和[100]沟道单轴压应力情况下的空穴迁移率与有效电场之间的关系

Fig. 4 Hole mobility under unstrained Si, uniaxial compression along the [110] and [100] channels as a function of the effective electric field

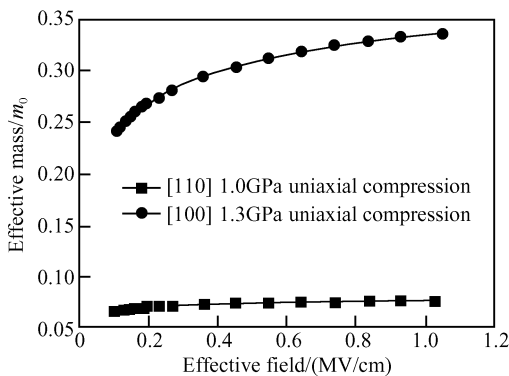


图5 [110]沟道和[100]沟道单轴压应力情况下的第一子带输运有效质量与有效电场之间的关系

Fig. 5 Transport effective mass of the first subband under uniaxial compression along the [110] and [100] channels as a function of the effective electric field

4 结论

采用应力相关的6能带 $k \cdot p$ 模型,自洽地求解一维薛定谔方程和泊松方程,得到反型层中空穴的子带结构.基于能带计算的结果,采用蒙特卡罗方

法研究了单轴压应力器件结构和双轴张应力器件结构反型层中的空穴迁移率增大行为.能带结构分析显示:输运有效质量的减小以及散射受到抑制是单轴压应力下迁移率增大的主要原因,而双轴张应力下的迁移率变化行为除了受到散射的影响外,还取决于输运有效质量增大和最低子带轻空穴特性这两种竞争机制的共同作用.当单轴压应力沿着[110]沟道时,空穴迁移率的增大幅度最大,平均增幅可达到170%左右.

参考文献

- [1] Rim K, Hoyt J L, Gibbons J F. Fabrication and analysis of deep submicron strained-Si n-MOSFET's. *IEEE Trans Electron Devices*, 2000, 47: 1406
- [2] Sugii N, Hisamoto D, Washio K, et al. Performance enhancement of strained-Si MOSFETs fabricated on a chemical-mechanical-polished SiGe substrate. *IEEE Trans Electron Devices*, 2002, 49: 2237
- [3] Hoyt J L, Nayfeh H M, Eguchi S, et al. Strained silicon MOSFET technology. *IEDM Technical Digest*, 2002: 23
- [4] Takagi S, Hoyt J L, Welser J J, et al. Comparative study of phonon-limited mobility of two-dimensional electrons in strained and unstrained Si metal-oxide-semiconductor field-effect transistors. *J Appl Phys*, 1996, 80: 1567
- [5] Fischetti M V, Gamiz F, Hansch W. On the enhanced electron mobility in strained-silicon inversion layers. *J Appl Phys*, 2002, 92: 7320
- [6] Oberhuber R, Zandler G, Vogl P. Subband structure and mobility of two-dimensional holes in strained Si/SiGe MOSFET's. *Phys Rev B*, 1998, 58: 9941
- [7] Fischetti M V, Ren Z, Solomon P, et al. Six-band $k \cdot p$ calculation of the hole mobility in silicon inversion layers: Dependence on surface orientation, strain, and silicon thickness. *J Appl Phys*, 2003, 94: 1079
- [8] Thompson S, Anand N, Armstrong M, et al. A 90nm logic technology featuring 50nm strained silicon channel transistors, 7 layers of Cu interconnects, low k ILD, and $1\mu\text{m}^2$ SRAM cell. *IEDM Technical Digest*, 2002: 61
- [9] Ghani T, Armstrong M, Auth C, et al. A 90nm high volume manufacturing logic technology featuring novel 45nm gate length strained silicon CMOS transistors. *IEDM Technical Digest*, 2003: 978
- [10] Chidambaram P R, Smith B A, Hall L H, et al. 35% drive current improvement from recessed-SiGe drain extensions on 37nm gate length PMOS. *Symposium on VLSI Technology*, 2004: 48
- [11] Giles M D, Armstrong M, Auth C, et al. Understanding stress enhanced performance in Intel 90nm CMOS Technology. *Symposium on VLSI Technology*, 2004: 118
- [12] Wang E, Matagne P, Shifren L, et al. Quantum mechanical calculation of hole mobility in silicon inversion layers under arbitrary stress. *IEDM Technical Digest*, 2004: 147
- [13] Lee M, Fitzgerald E, Bulsara M T, et al. Strained Si, SiGe, and Ge channels for high-mobility metal-oxide-semiconductor field-effect transistors. *J Appl Phys*, 2005, 97: 011101
- [14] Dresselhaus G, Kip A F, Kittel C. Cyclotron resonance of electrons and holes in silicon and germanium crystals. *Phys Rev*, 1955, 98: 368

- [15] Bir G L, Pikus G E. Symmetry and strain-induced effects in semiconductors. New York: John Wiley, 1974
- [16] Hinckley J M, Singh J. Hole transport theory in pseudomorphic SiGe alloys grown on Si(001) substrates. Phys Rev B, 1990, 41: 2912
- [17] Hinckley J M, Singh J. Monte Carlo studies of ohmic hole mobility in silicon and germanium; examination of the optical phonon deformation potential. J Appl Phys, 1994, 76: 4192
- [18] Singh D, Krakauer H, Wang C S. Accelerating the convergence of self-consistent linearized augmented-plane-wave calculations. Phys Rev B, 1986, 34: 8391
- [19] Takagi S, Torimuri A, Iwase M, et al. On the universality of inversion layer mobility in Si MOSFET's; Part I-effects of substrate impurity concentration. IEEE Trans Electron Devices, 1994, 41: 2357

$k \cdot p$ and Monte Carlo Studies of Hole Mobility in Strained-Si pMOS Inversion Layers

Zhao Ji[†], Zou Jianping, Tan Yaohua, and Yu Zhiping

(Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Hole mobility in strained silicon pMOS inversion layers is investigated theoretically. Using a six-band stress-dependent $k \cdot p$ model, the subband structures of 2DHG in inversion layers are computed from a self-consistent solution to the one-dimensional Schrödinger and Poisson equations. The hole mobility dependence on the transverse electric field for both uniaxial compression and biaxial tension is studied with the Monte Carlo method and compared with the case of unstrained silicon. The simulation results show that both uniaxial compression and biaxial tension can enhance the hole mobility. Uniaxial compression along the [110] direction enhances the hole mobility much more than in any other crystalline orientation.

Key words: strained silicon; mobility; $k \cdot p$ method; Monte Carlo simulation

PACC: 7220F; 7115Q

Article ID: 0253-4177(2006)12-2144-06

[†] Corresponding author. Email: zhaoji03@mails.tsinghua.edu.cn

Received 26 March 2006, revised manuscript received 16 August 2006