应变 Si_{1-x}Ge_x pMOSFET 反型沟道 空穴低场迁移率模型*

张雪锋 徐静平† 邹 晓 张兰君

(华中科技大学电子科学与技术系,武汉 430074)

摘要: 在考虑应变对 SiGe 合金能带结构参数影响的基础上,提出了一个半经验的应变 Si_{1-x}Ge_x/Si pMOSFET 反 型沟道空穴迁移率模型.在该模型中,给出了迁移率随应变的变化,并且考虑了界面陷阱电荷对载流子的库仑散射 作用.利用该模型对室温下空穴迁移率随应变的变化及影响空穴迁移率的因素进行了分析讨论.

关键词: p-MOSFET; 应变 Si_{1-x}Ge_x; 空穴迁移率
 PACC: 7340Q; 7220F EEACC: 2530N; 2560B; 2560R
 中图分类号: TN304 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2006)11-2000-05

1 引言

在 Si CMOS 工艺中,由于 Si 中空穴迁移率远 低于电子迁移率,使得 pMOSFET 必须具有更大的 沟道宽长比才能匹配 nMOSFET 的驱动电流和增 益,这给简化设计和提高集成度带来了困难.在 Si (100) 基底上赝晶生长的 SiGe 合金具有优良的空 穴迁移率,因此应变 Si_{1-x}Ge_x pMOSFET 的研究受 到人们的广泛关注.

由于 SiGe 与基底材料晶格常数的差异,会使 SiGe 在生长平面内产生压应变.应力的作用使 SiGe 的轻重空穴带分裂、能带结构的曲率发生变 化,从而减小了谷间声子散射和空穴的有效质量,使 SiGe 中空穴迁移率提高. 有人利用 Monte Carlo 方 法或采用弛豫时间近似,并结合 KP 微扰能带计 算^[1,2]对应变 SiGe 体材中空穴迁移率进行了研究, 预测 SiGe 中的空穴迁移率在低温(2K)下可高达 6000cm²/(V·s)^[3,4],然而他们均没有给出关于迁 移率的解析模型,因此不便于进行器件模拟.本文在 考虑应变对 SiGe 合金能带结构参数影响的基础上, 提出了一个半经验的室温(300K)Si1-, Ge,/Si pMOSFET 空穴低场迁移率模型,给出了迁移率随 应变的变化.通过适当选择模型参数,模拟结果与实 验数据呈现出较好的符合.利用该模型,对 Si1-x- Ge_x 反型层中空穴迁移率随应变(即 Ge 含量 x)、沟 道掺杂浓度以及界面电荷密度的变化进行了模拟, 分析了限制沟道空穴迁移率的主要因素.值得指出

的是,实际器件中,应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 沟道也可外延生 长在赝晶 $Si_{1-y}Ge_y(x > y)$ 基底上.这种情况下,模 型中有关参数将发生变化,将在后续工作中做进一 步研究.

2 迁移率模型

在 Si 基底上生长的 Si_{1-x}Ge_x 合金层的压应变 随 x 的变化而变化,因而由应变导致的能带结构改 变也会随着 Si_{1-x}Ge_x 合金中 Ge 的组分 x 变化.能 带的分裂会使谷间声子散射几率减小,同时能带曲 率的变化也使得载流子有效质量减小^[5,6].因此,有 效质量和能带结构参数是 x 的函数,导致应变 Si_{1-x}-Ge_x 中载流子迁移率随 x 变化^[5,7].考虑载流 子在沟道中受到的几种主要散射机制的影响,根据 Mathiessen's rule,空穴迁移率可表示为:

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_{\rm ph}} + \frac{1}{\mu_{\rm alloy}} + \frac{1}{\mu_{\rm ion}} + \frac{1}{\mu_{\rm sph}} + \frac{1}{\mu_{\rm SR}} + \frac{1}{\mu_{\rm c}} \quad (1)$$

其中 μ_{ph}, μ_{alloy}, μ_{ion}, μ_{sph}, μ_e, μ_{sR} 分别代表声子散 射、合金散射、离化杂质散射、表面声子散射、库仑散 射及表面粗糙散射迁移率.在本文中,声子散射、合 金散射、离化杂质散射一并归为等效体晶格散射.下 面将分别讨论各散射机制.

2.1 等效体晶格散射迁移率

在 SiGe 合金中,空穴除了会受到晶格散射(声 学声子和光学声子)外,还会受到合金散射及离化杂 质散射.SiGe 中应变的存在,一方面会使空穴的有

^{*}国家自然科学基金资助项目(批准号:60576021)

^{*} 通信作者.Email:jpxu@mail.hust.edu.cn 2006-05-11 收到,2006-06-09 定稿

效质量减小,引起重空穴带和轻空穴带在 Γ 点的简 并消除,同时增大了重空穴带与自旋空穴带之间的 能量分裂,这些效应导致声子谷内散射和谷间散射 减弱,从而空穴在应变 SiGe 中有较高的迁移率;另 一方面,合金散射也会随组分而变化.根据 Nordheim 的虚晶模型^[8],合金散射迁移率 $\mu_{alloy} \propto [m_d^{5/2} x$ $(1 - x)]^{-1},其中, m_d 是态密度有效质量, x 是组$ 分.

考虑到 µph,µalloy 随组分 x 变化,通过分析文献 [7]的计算结果并进行拟合,得到一个综合了声子散 射、合金散射及离化杂质散射机制影响的经验公式, 即等效体晶格散射迁移率:

$$\mu_{\rm b} = \mu_{\rm min} + \frac{\mu_{\rm max} - \mu_{\rm min}}{1 + \left(\frac{N_{\rm d}}{N_{\rm ref}}\right)^{\gamma}} \tag{2}$$

式中 μ_b 为等效体晶格散射迁移率; μ_{max} 和 μ_{min} 随 组分变化,为了精确反映合金及声子散射的影响,将 它们拟合为组分 x 的多项式函数($\mu_{max} = A_1 x^3 + A_2 x^2 + A_3 x + A_4, \mu_{min} = B_1 x^3 + B_2 x^2 + B_3 x + B_4, x \le 0.5, 系数 A_1, A_2, A_3, A_4, B_1, B_2, B_3, B_4 见表$ $1); N_d 是衬底的掺杂浓度; N_{ref} 对应于迁移率取 <math>\mu_{min}$ 和 μ_{max} 平均值时的衬底掺杂浓度; Y 是一个拟合系数.(2)式中的有关参数取值如表 1 所示.

Table 1 Parameters for mobility model of SiGe pMOSFET $A_1/(\mathrm{cm}^2(\mathbf{V}\cdot\mathbf{s}))$ $B_1/(\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s}))$ $A_2/(\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s}))$ $B_2/(\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s}))$ $N_{\rm ref}/{
m cm^{-3}}$ $C_{\rm it}/((\mathbf{V} \cdot \mathbf{s})/\mathrm{cm}^3)$ γ $\delta/(cm/s)$ $A_3/(\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s}))$ $B_3/(\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s}))$ $A_4/(\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s}))$ $B_4/(\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s}))$ - 8138 - 870 8994 868 1. 2045×10^{17} 0.65668 $1.\;14\times10^8$ 4.5 \times 10⁻⁸ 2224 89 67 418

表 1 SiGe pMOSFET 迁移率模型参数

图1给出了由经验公式(2)得到的 µb(点线)和 文献[7]中结果(实线)的比较.可以看出,当采用表 1中的参数时,两者十分吻合,表明公式(2)正确反 映了等效体晶格迁移率随组分以及掺杂浓度的变化 关系.



图 1 体晶格散射迁移率随掺杂浓度的变化 Fig. 1 Variation of bulk mobility with doped concentration

2.2 表面声子散射迁移率

在沟道中运动的载流子除了受体晶格散射作用 外,还会遭到表面声子的散射.根据文献[9,10],表 面声子散射迁移率 μ_{sph}可表示为:

$$\mu_{\rm sph}^{-1} = \frac{\alpha_{\rm ac} E_{\rm eff}}{1 + \frac{\beta_{\rm ac}}{T} E_{\rm eff}^{2/3}} \tag{3}$$

式中

$$\alpha_{\rm ac} = \left(\frac{3\rho_{\rm bulk} h^3 u_1^2}{16\pi^3 m_{\rm d}^* m_{\mu} Z_{\rm A}^2}\right) \tag{4}$$

$$\beta_{\rm ac} = \frac{2}{3} \times \frac{q}{k_B} \times \left(\frac{9h^2}{16\pi^2 qm_1}\right)^{1/3}$$
(5)

其中 $\rho_{\text{bulk}} \ge \operatorname{Si}_{1-x}\operatorname{Ge}_x$ 的密度; Z_A 为表面声学形变势; $\beta_{\text{ac}} \ge \operatorname{Si}_{1-x}\operatorname{Ge}_x$ 的质量面密度; u_1 是声子速度; m_1 是空穴纵向有效质量; m_c 是电导有效质量.由于自旋空穴带和轻、重空穴带之间有较大的能量分裂,所以总空穴浓度可以认为是轻、重空穴带中空穴浓度之和,据此可以得到 m_d^* 与轻、重空穴有效质量的关系.设 m_{hl} 和 m_{hh} 分别表示轻、重空穴有效质量(它们随 x 的变化见参考文献[5]),则态密度有效质量:

$$(m_{\rm d}^{*})^{3/2} = m_{\rm hh}^{3/2} + m_{\rm hl}^{3/2} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\rm split}}{k_{\rm B}T}\right)$$
 (6)

其中 $E_{v1} = E_{v2} - \Delta E_{split}$, ΔE_{split} 是轻、重空穴带的劈裂, 与 x 有近似线性的关系^[5]: $\Delta E_{split} = 0.1216x$ (eV), 纵 向 有 效 质 量 $m_1/m_0 = 0.29184 - 0.0857143x$, m_0 是电子静止质量.

2.3 表面粗糙散射迁移率

表面粗糙散射是由于界面的不平整而产生的扰

动势对载流子产生的散射作用.在强的垂直电场作用下,这种散射机制对载流子的迁移率起决定作用. 根据表面粗糙散射理论及有关实验结果,可以将表面粗糙散射迁移率经验地表示为:

$$\mu_{\rm SR} = \frac{\delta}{E_{\rm eff}} \tag{7}$$

δ是一个与表面粗糙程度相关联的系数,它的取值与具体的工艺条件有关,通过与实验^[11,12] 拟合得到 δ值如表1所示. *E*_{eff} 是反型沟道的有效垂直电场:

$$E_{\rm eff} = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon} (Q_{\rm d} + \frac{1}{3} \mid Q_{\rm i} + Q_{\rm it} + Q_{\rm f} \mid) \quad (8)$$

其中 Q_d , Q_i , Q_{ii} 和 Q_f 分别为耗尽层电荷、反型层 电荷、界面陷阱电荷和固定电荷面密度; ε 为 Si_{1-x}-Ge_x的相对介电常数.

2.4 库仑散射迁移率

通过分析 SiGe 和 Ge 沟道 MOSFET 有效迁移 率的实验结果^[11~13]发现,库仑散射对总有效迁移率 的影响不能忽略(特别是在弱反型时).界面陷阱电 荷以及氧化层中固定电荷都会对载流子产生库仑散 射,在反型电荷浓度较低时它们是重要的散射机制. 考虑到反型载流子对界面陷阱电荷(包括氧化层固 定电荷)散射的屏蔽作用,界面陷阱电荷(及氧化层 固定电荷)的库仑散射迁移率表示为^[14,15]:

$$\mu_{\rm c}^{-1} = C_{\rm it} \frac{N_{\rm it}}{\sqrt{N_s}} \tag{9}$$

其中 N_{it} 是陷阱电荷面密度; C_{it} 是经验参数.(1) ~(9)式即组成了应变 SiGe pMOSFET 空穴迁移率的完整模型.

3 模拟结果及分析

值得指出的是,为改善界面质量,通常在应变 SiGe 沟道上面外延一层 Si 作为盖帽层.因此,为了 得到 SiGe 沟道中的反型载流子迁移率,要求 Si 盖 帽层中不能形成寄生沟道.图 2 是模拟结果与实验 数据的比较,其中实验数据取自 Weber 等人^[12]的 表面 沟道 SiGe pMOSFET 迁移率和 Huang 等 人^[11]的超薄 Si-cap SiGe pMOSFET 迁移率.通过 与实验结果(方块符号:x = 0.25和三角符号:x =0.28)的拟合得到模型中的待定参数 δ , C_{ii} 如表 1 所 示.可见,模拟结果与实验数据吻合得较好,表明所 建立的模型是合理的.

图 3 给出了各种散射机制对有效迁移率的影响.实线是总的有效迁移率,下三角符号表示界面陷 阱电荷的库仑散射迁移率,圆圈符号表示等效体晶 格散射和表面声子散射迁移率,空心方块为表面粗 糙散射迁移率,实心方块是实验数据.比较几条曲线



图 2 模拟结果和实验数据的比较

Fig. 2 Compare between the simulated and measured effective mobility



图 3 各种散射机制对总有效迁移率的影响($N_{it} = 2 \times 10^{12}$ cm⁻², $N_d = 1 \times 10^{17}$ cm⁻³)

Fig. 3 Effects of various scattering mechanisms on total effective mobility ($N_{\rm it} = 2 \times 10^{12} \, {\rm cm}^{-2}$, $N_{\rm d} = 1 \times 10^{17} \, {\rm cm}^{-3}$)

可以得出:

(1)界面态电荷的库仑散射决定了弱反型时的 有效迁移率;

(2)在中等场强(E_{eff} = 3~4kV/cm)下,等效体 晶格散射迁移率对总的有效迁移率有一定影响,但 它不是限制迁移率的主要因素,

(3)当垂直沟道的有效场较大时,有效迁移率主要由表面粗糙散射决定.

为了进一步研究界面态陷阱电荷对迁移率的影响,图 4 模拟了迁移率随界面陷阱电荷密度的变化 关系.随 N_{it} 的增大,迁移率(包括峰值)减小,在强 场下趋于一致.这是因为强场下迁移率主要决定于 表面粗糙散射,这与前面的结果和分析一致.此外, 由于 $N_{it}(Q_{it} = qN_{it})$ 增加使反型所要求的电场增 加,从而导致迁移率峰值随 N_{it} 增加向强场方向移 动,这与 Weber 的结果相符.在图 4 中, $N_{it} = 5 \times$ 10^{10} cm⁻²和 $N_{it} = 1 \times 10^{11}$ cm⁻²两条曲线基本重合, 表明当 $N_{it} \leq 1 \times 10^{11}$ cm⁻²时,界面陷阱电荷的库仑 散射作用可以忽略.



图 4 不同界面陷阱电荷密度下迁移率随有效场的变化(N_d = 1×10¹⁷ cm⁻³)





图 5 不同沟道掺杂浓度下迁移率随有效场的变化 Fig. 5 Change of effective mobility with effective electrical field under different doped concentrations

图 5 给出了界面陷阱密度 $N_{it} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ 时 迁移率与掺杂浓度的关系. 随沟道掺杂浓度的增加, 迁移率峰值迅速减小,峰值右移更加明显,这是因为 N_d 越高,离化杂质散射越严重(见公式(2)),同时反 型所需加的电场越强.因此,低的沟道掺杂更有利于 载流子迁移率的提高.但为了抑制短沟效应需要高 的沟道掺杂,所以需折中地选取沟道掺杂浓度.在低 陷阱电荷密度下(如 $N_{it} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$),SiGe 沟道 迁移率与电场之间的变化趋势与 Si pMOSFET 的 "普适曲线" (universal curve)^[16]类似.

利用上面的迁移率模型,可对 Si_{1-x}Ge_x pMOS-FET 的有效迁移率 μeff 随组分 x 的变化进行模拟, 如图 6 所示.在弱反型及中等场强区,μeff 明显地随 x 增加而增加,特别是峰值迁移率差别较大;随界面 电荷密度的增加,不同 x 下迁移率的差别减小(见 图 6(b)),这是由于界面陷阱电荷散射影响增强;随 着 Eeff 增大,不同组分对应的有效迁移率差别逐渐 减小,最终趋于一致.这种变化趋势在于低有效场 下,等效体迁移率随 x 的增加而增加,体现了由应 变而导致的声子散射和合金散射的减弱;但在高场 下,由于界面粗糙散射的影响增强,使不同 x 值的 迁移率差别减小,表面粗糙散射成为限制迁移率的 主要因素.



图 6 有效迁移率随组份 x 的变化 (a) $N_{it} = 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$; (b) $N_{it} = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_d = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

Fig. 6 Dependence of effective mobility on Ge content x (a) $N_{\rm it} = 2 \times 10^{11} \,{\rm cm}^{-2}$, $N_{\rm d} = 1 \times 10^{17} \,{\rm cm}^{-3}$; (b) $N_{\rm it} = 1 \times 10^{12} \,{\rm cm}^{-2}$, $N_{\rm d} = 1 \times 10^{17} \,{\rm cm}^{-3}$

4 总结

本文提出了一个半经验的室温(300K)应变 Si_{1-x}Ge_x/Si pMOSFET 反型沟道空穴迁移率模型. 模型考虑了应变对 Si_{1-x}Ge_x 中空穴迁移率的影响; 并考虑了界面陷阱电荷(包括固定电荷)库仑散射在 弱反型时对迁移率的限制作用.模拟结果与实验数 据呈现出好的符合.模拟分析表明,减小界面态密度 和界面粗糙度,适当选取沟道掺杂浓度以及增加应 变(即增大 x 值)是提高 Si_{1-x}Ge_x 沟道 pMOSFET 空穴迁移率的有效途径.

参考文献

Hinckley J M, Singh J. Hole transport theory in pseudomorphic Si_{1-x}Ge_x alloys grown on Si(001) substrate. Phys Rev B,1990,41(5);2912

- [2] Briggs P J, Walker A B, Herbert D C. Calculation of hole mobilities in relaxed and strained SiGe by Monte Carlo simulation. Semicond Sci Technol, 1998, 13(7):680
- Mishima T, Fredriksz C W, Walle G, et al. Effect of interface quality on the electrical properties of p-Si/SiGe two-dimensional hole gas systems. Appl Phys Lett, 1990, 57 (24): 2567
- [4] Emeleus C J, Whall T E, Smith D W, et al. Hole transport in Si_{0.8} Ge_{0.2} quantum wells at low temperatures. Thin Solid Films, 1992, 222(1/2):24
- [5] Yang L F, Watling J R, Wilkins R C W, et al. Si/SiGe heterostructure parameters for device simulations. Semicond Sci Technol, 2004, 19(10): 1174
- [6] Laikhtman B, Kiehl R A. Theoretical hole mobility in a narrow Si/SiGe quantum well. Phys Rev B, 1993, 47(16):10515
- [7] Chun S K, Wang K L. Effective mass and mobility of holes in strained Si_{1-x}Ge_x layers on (001) Si_{1-y}Ge_y substrate. IEEE Trans Electron Devices, 1992, 39(9);2153
- [8] Ye Liangxiu. Semiconductor physics. Beijing: Higher Education Press, 1987(in Chinese)[叶良修.半导体物理学.北京: 高等教育出版社, 1987]
- [9] Xu Jingping, Wu Haiping, Li Peitao, et al. Effect of SiO₂/SiC interface on inversion channel electron mobility of 4H-SiC n-MOSFET. Chinese Journal of Semiconductors, 2004, 25 (2):200 (in Chinese)[徐静平,吴海平,黎沛涛,等.SiO₂/SiC 界面对 4H-SiC n-MOSFET 反型沟道电子迁移率的影响.半 导体学报,2004,25(2):200]

- [10] Powell S K, Goldsman N, McGarrity J M, et al. Physicsbased modeling and characterization of 6H-silicon-carbide metal-oxide-semiconductor field-effect transistors. J Appl Phys,2002,92:4053
- [11] Huang C C, Yeo Y C, Chen S C, et al. Design and integration of strained SiGe/Si hetero-structure CMOS transistor. IEEE VLSI-TSA-International Symposium on VLSI Technology-VLSI-TSA-TECH, Proceedings of Technical Papers, 2005;23
- [12] Weber O, Damlencourt J F, Andrieu F, et al. Fabrication and mobility characteristics of SiGe surface channel pMOSFETs with a HfO₂/TiN gate stack. IEEE Trans Electron Devices, 2006,53(3):449
- [13] Persson S, Wu D, Hellström S, et al. Quantifying hole mobility degradation in pMOSFETs with a strained-Si_{0.7} Ge_{0.3} surface-channel under an ALD TiN/Al₂O₃/HfAlO_x/Al₂O₃ gate stack. Solid-Stae Electron, 2004, 48(5);721
- [14] Koga J, Takagi S, Toriumi A. A comprehensive study of MOSFET electron mobility in both weak and strong inversion regimes. IEDM, 1994:475
- [15] Vandamme E P, Vandamme L K J. Critical discussion on unified 1/f noise models for MOSFETs. IEEE Trans Electron Devices, 2000, 47(11):2146
- [16] Takagi S, Toriumi 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(12):2357

A Low-Field Hole Mobility Model of Strained Si_{1-x}Ge_x pMOSFET^{*}

Zhang Xuefeng, Xu Jingping[†], Zou Xiao, and Zhang Lanjun

(Department of Electronic Science & Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: A semi-experienced low-field hole mobility model of a strained $Si_{1-x} Ge_x/Si pMOSFET$ is proposed by considering the effect of the strain on the energy-band structure of SiGe alloy. This model includes the variation of mobility with strain (Ge content) and the coulomb-scattering mechanism of interface-trapped charges on inversion carriers. Using the model, the change of the hole mobility with strain (Ge content) is simulated at room temperature, and the influence of some factors on mobility is discussed.

 Key words:
 p-MOSFET;
 strained Si_{1-x} Ge_x;
 hole mobility

 PACC:
 7340Q;
 7220F
 EEACC:
 2530N;
 2560B;
 2560R

 Article ID:
 0253-4177(2006)11-2000-05
 11-2000-05
 11-2000-05
 11-2000-05

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No.60576021)

[†] Corresponding author. Email: jpxu@mail. hust. edu. cn

Received 11 May 2006, revised manuscript received 9 June 2006