

B 在 SiGe 中的应变补偿作用*

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

(中国科学院半导体研究所 集成光电子学国家重点实验室, 北京 100083)

摘要: 用超高真空化学气相淀积方法生长出不同硼(B)掺杂浓度的应变 SiGe 合金材料,研究了 B 对 SiGe 合金的应变补偿作用. 结果表明, B 的掺入使 SiGe 的应变减小, B 对 Ge 的应变补偿率为 7.3, 即平均掺入 1 个 B 原子可以补偿 7.3 个 Ge 原子引起的应变. 同时获得 B 的晶格收缩系数为 $6.23 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$.

关键词: SiGe; 应变补偿; 掺杂

PACC: 6170T; 0630M; 6860

中图分类号: TN304.054 文献标识码: A 文章编号: 0253-4177(2005)S0-0039-03

1 引言

SiGe 材料使能带工程得以在 Si 基材料和器件中得到广泛的应用,使 Si 基材料和器件的研究和应用进入了一个崭新的时代. Ge 的原子半径比 Si 的原子半径大,因此,生长在 Si 衬底上的 SiGe 材料在生长平面内将受到压应变,应变的存在使其带隙和带结构均发生变化. B 是 Si 和 SiGe 中最重要的 p 型掺杂剂,由于 B 的原子半径比 Si 和 Ge 都小很多,它的掺入将使晶格收缩,如果在应变的 SiGe 中掺入 B,它将补偿晶格中原有的应变,使应变状态发生变化,进而改变 SiGe 的能隙,所以在 SiGe 器件的设计中,有必要考虑到 B 的掺入对 SiGe 应变的影响.

Maszara 等人^[1]研究了高掺 B 的 Si 材料中掺入 Ge 时,Ge 对应变的补偿作用,他们的结果表明 B 相对 Ge 的应变补偿率为 6.5,即在 Si 上生长 SiGeB 材料时,一个 B 原子引起的应变可以补偿 6.5 个 Ge 原子引起的应变. 他们生长的材料中 B 的掺杂浓度为 $1 \times 10^{20} \sim 1.7 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$,但没有载流子浓度的数据,由于掺入 B 的浓度很高,很可能有一部分 B 没有占据 Si 的替代位置,这样会低估 B 的应变补偿. Herzog 等人^[2]分别研究了掺 B 和掺 Ge 的 Si 材料的应变,并由此计算出 B 相对 Ge 的应变补偿率为 8. 同时他们研究了 B 和 Ge 共掺的 SiGeB 的应

变,得到的应变补偿率为 11,与分别掺杂时的应变补偿率差别很大,原因尚不清楚. Tillack 等人^[3]研究了 SiGe 中重掺 B 时对应变的补偿作用,掺入的 B 有很大一部分没有处于 Si 的替代位置,而是处于间隙位置,没有获得 B 与 Ge 的应变补偿率的数据. 本文的目的是要研究类似实际器件材料的 SiGe 样品中 B 的应变补偿效应,即生长条件为低温生长;生长的 SiGe 材料为薄层材料;B 的掺入量小于 $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$,以保障 SiGe 材料具有好的晶体质量,没有发生应力弛豫,掺入的 B 都处于替代位置. 在这样的条件下获得的 B 与 Ge 的应变补偿率才有较高的精确度.

2 实验

用 UHV/CVD(超高真空化学气相淀积)方法生长 SiGe 材料,衬底为 Si(100),生长温度为 620°C ,生长源气体为 Si_2H_6 , GeH_4 和用氢气稀释的 B_2H_6 . 各样品生长过程中 Si_2H_6 和 GeH_4 的流量保持不变,分别为 6 和 0.53sccm,通过调节生长过程中掺杂源 B_2H_6 的流量,使各样品中 SiGe 材料的 B 浓度不同, B 的浓度控制在 $0 \sim 3.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 之间. 详细的材料生长工艺过程可以参见文献[4]. 用 SIMS 测量材料中的组分,用 X 光双晶衍射测量材料的应变.

* 国家高技术研究发展计划(批准号:2002AA312010),国家重点基础研究发展规划(批准号:G2000036603)资助项目

2004-10-20 收到,2004-11-26 定稿

3 结果与讨论

图 1 为不同掺 B 浓度的 SiGe 合金样品的 X 光双晶衍射曲线,除生长过程中掺杂源 B_2H_6 的流量不同外,其余条件均一致.图中 69.148° 处的强衍射峰是 Si 衬底的衍射峰, 68.8° 处附近的强而比较宽的峰是 SiGe 的衍射峰,其余的小峰为 Pendellosung

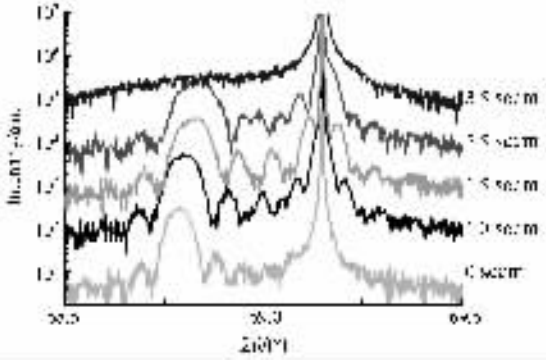


图 1 不同掺 B 浓度的 SiGe 材料的 X 光双晶衍射曲线 各样品生长时 Si_2H_6 和 GeH_4 的流量保持不变,分别为 6 和 0.53sccm,掺杂源 B_2H_6 的流量分别为 0, 1.0, 1.5, 2.5 和 3.5sccm.

Fig. 1 X-ray double crystal diffraction curves of SiGe layers doped with different B concentrations. To grow the samples, the flux of Si_2H_6 and GeH_4 was 6sccm and 0.53sccm respectively, while the flux of doping B_2H_6 source was varied from 1.0 to 3.5sccm.

条纹.从图 1 可知,当 B_2H_6 的流量在 2.5sccm 以下时, SiGe 的衍射峰和 Pendellosung 条纹清晰可见,说明 SiGe 合金的晶格质量很好.当 B_2H_6 的流量达到 3.5sccm 时, SiGe 的衍射峰变得很弱,而且 Pendellosung 条纹消失,说明此时的晶格质量显著下降.另外,从图 1 可以看出,随着 B_2H_6 流量的增加, SiGe 的衍射峰向衬底 Si 的衍射峰移动,说明 SiGe 合金的应变随着 B 掺入量的增加而减小.引起 SiGe 合金应变改变的因素可能有两个,其一是 B 的应变补偿作用;其二可能因 B 的掺入而改变了 SiGe 合金中 Ge 的含量,从而改变了应变的大小.所以我们用 SIMS 测试了不同 B_2H_6 流量的样品中 Ge 和 B 的含量,结果如图 2 所示.图 2 表明 SiGe 合金中 B 的含量随 B_2H_6 流量的增加而线性增加, Ge 的含量保持不变.所以,可以认为 SiGe 中应变的变化只是 B 的掺入引起应变补偿的结果.

图 3 示出了 SiGe 中的应变与其中的 B 含量的

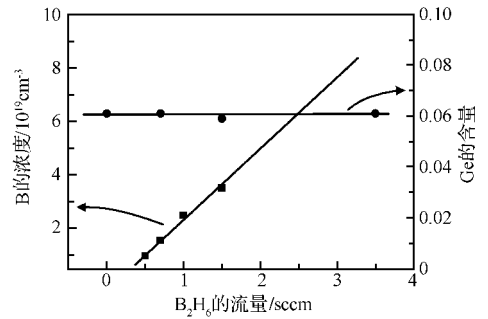


图 2 掺杂源气体 B_2H_6 流量不同时生长的 SiGe 材料中 Ge 和 B 的含量

Fig. 2 Compositions of Ge and B in SiGe layers doped with different B_2H_6 flux

关系,可见,随着 B 含量的增加, SiGe 的应变被补偿而变小.图 3 中同时给出了线性拟合曲线,根据拟合结果可以得出,在 Si 中 B 相对于 Ge 的应变补偿率为 7.3,即平均一个 B 原子可以补偿 7.3 个 Ge 原子产生的应变.

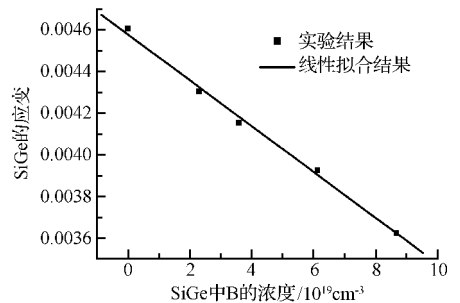


图 3 掺 B 浓度不同的 SiGe 材料中的应变

Fig. 3 Strain in the SiGe layers doped with different B compositions

人们用晶格收缩系数 (lattice-contraction coefficient) 来描述掺入的杂质对材料晶格常数的影响,它可以表示为:

$$\beta = -\frac{1}{a} \times \frac{\delta a}{\delta N}$$

其中 a 是晶格常数; N 为掺入的杂质的浓度.实验和理论表明 Ge 在 Si 中的收缩系数为 $\beta_{Ge} = -8.529 \times 10^{-25} \text{ cm}^3/\text{atom}$. 根据前面得到的结果, B 对 Ge 的应变补偿率为 7.3, 可以计算出 B 的收缩系数为 $\beta_B = 6.23 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$, 这与 Baribeau 等人^[5]得到的 B 的收缩系数 $6.2 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$ 以及 Sardela 等人^[6]获得的结果 $6.3 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$ 非常接近.

B 在 Si 中的收缩系数的研究比较多,但得到的

结果差别很大^[7],从 $2.6 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$ 到 $6.3 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$,主要原因在于材料制备的方法和条件不同,使有的材料中 B 没有占据 Si 的替代位置而是在间隙位置,而有的材料中 B 的分布不均匀,使测量误差很大.用低温生长方法(如分子束外延、超高真空化学气相淀积)生长的掺杂薄层材料,其杂质分布均匀,当掺杂浓度比较低时,掺入的 B 的浓度与载流子浓度相等,说明 B 都占据了 Si 的替代位置,用这样的样品测得的结果更可信.分析前人关于 Si 中掺入 B 时 B 的晶格收缩系数的研究结果,可以认为文献[5]和文献[6]的结果是比较准确的.本文得到的结果与他们相一致.

4 结论

研究了生长于 Si 衬底上的应变的 SiGe 合金中原位掺入 B 时, B 对 SiGe 中的应变的补偿作用, B 相对 Ge 的应变补偿率为 7.3. 同时可以推算出 B 的晶格收缩系数为 $6.23 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$, 与其他研究小组研究的掺 B 的 Si 材料中 B 的晶格收缩系数结果吻合很好. 该研究结果有助于获知掺 B 的 SiGe 材料的应变状态, 进而了解掺 B 对 SiGe 带隙的影响, 对 SiGe 器件的设计和研制具有重要意义.

参考文献

- [1] Maszara W P, Thompson T. Strain compensation by Ge in B-doped silicon epitaxial films. *J Appl Phys*, 1992, 72(9): 4477
- [2] Herzog H J, Csepregi L, Seidel H. X-ray investigation of boron- and germanium-doped silicon epitaxial layers. *J Electrochem Soc*, 1984, 131: 2969
- [3] Tillack B, Zaumseil P, Morgenstern G, et al. Strain compensation in $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ by heavy boron doping. *Appl Phys Lett*, 1995, 67(8): 1143
- [4] Cheng Buwen, Li Daizong, Huang Changjun, et al. Growth of SiGe/Si heterostructures by UHV/CVD. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2000, 21(3): 250 (in Chinese) [成步文, 李代宗, 黄昌俊, 等. UHV/CVD 生长 SiGe/Si 异质结构材料. *半导体学报*, 2000, 21(3): 250]
- [5] Baribeau J M, Rolfe S J. Characterization of boron-doped silicon epitaxial layers by X-ray diffraction. *Appl Phys Lett*, 1991, 58(19): 2129
- [6] Sardela M R Jr, Radamson H H, Ekberg J O, et al. Growth, electrical properties and reciprocal lattice mapping characterization of heavily B-doped, highly strained silicon-molecular beam epitaxial structures. *J Cryst Growth*, 1994, 143: 184
- [7] Holloway H, McCarthy S L. Determination of the lattice contraction of boron-doped silicon. *J Appl Phys*, 1993, 73(1): 103

Strain Compensation in SiGe by Boron Doping*

Cheng Buwen, Yao Fei, Xue Chunlai, Zhang Jianguo, Li Chuanbo, Mao Rongwei,
Zuo Yuhua, Luo Liping, and Wang Qiming

(*Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100083, China*)

Abstract: Strained SiGe alloy doped with different boron concentrations is grown by UHV/CVD (ultra-high vacuum chemical vapor deposition). Strain compensation of B in SiGe is studied. The compensation ratio of B to Ge is 7.3. The lattice-contraction coefficient of B in Si, $6.23 \times 10^{-24} \text{ cm}^3/\text{atom}$, is obtained.

Key words: SiGe; strain compensation; doping

PACC: 6170T; 0630M; 6860

Article ID: 0253-4177(2005)S0-0039-03

* Project supported by the National High Technology Research and Development Program of China (No. 2002AA312010) and the State Key Development Program for Basic Research of China (No. G2000036603)