

# 包含多子带结构的MOS器件开启电压量子力学效应修正模型

马玉涛 李志坚 刘理天

(清华大学微电子学研究所 北京 100084)

**摘要** 量子力学效应对于深亚微米MOSFET特性的影响随着衬底浓度的增加和栅氧层厚度的减小而日益显著。实验结果表明:量子力学效应能够导致开启电压明显的漂移。本文通过比较薛定谔方程在抛物线势垒下的数值解和三角势垒下的解析解验证了MOS结构弱反型区量子力学效应三角势垒近似的正确性。在计算弱反型区量化层内子带结构的基础上,提出量子化有效态密度和经典有效态密度的概念,分析了载流子在子带中的分布情况,讨论了量子力学效应影响开启电压的两个因素,并在此基础上给出了开启电压的量子力学修正模型。该模型准确地揭示了量子力学效应影响开启电压的物理实质,并给出了与实验数据吻合的结果。

EEACC: 2530F, 2560B

## 1 引言

随着MOS器件向深亚微米领域发展,按比例缩小规律要求衬底浓度不断增大栅氧厚度不断减小。当栅长减小到 $0.25\mu\text{m}$ 后,衬底浓度可达到 $5 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ ,栅氧厚度则下降到 $10\text{nm}$ 以下<sup>[1]</sup>。这样,即使在弱反型区MOS结构硅表面也能形成很强的电场。当沟道区垂直方向电势的变化尺度可以和电子波长相比拟时,沟道区出现量子化,能级产生分裂,原来连续的能带变成一系列二维子带<sup>[2,3]</sup>。

能带结构和态密度的变化,会影响载流子的分布,从而影响到MOS器件的开启特性。实验结果<sup>[3~5]</sup>表明,当衬底浓度达到 $5 \times 10^{17}\text{cm}^{-3}$ 时,开启电压的漂移可达到 $0.1\text{V}$ 以上。对开启电压漂移的物理实质作深入分析并在开启电压的解析模型中引入量子力学效应是非常重要的。

通常对于开启电压量子力学效应的解析修正都是基于以下假设<sup>[4,6]</sup>:(1)反型区采用三角势垒近似;(2)载流子只占据最低能带(基带);(3)载流子峰值浓度偏离界面将导致表面势有 $E_n\Delta z$ 的增量( $E_n$ 为表面电场, $\Delta z$ 为量子化导致的载流子厚度的增量)。

文献[4]中给出的开启电压量子力学修正模型中引入了三个修正项:第一项是由于分立

马玉涛 男,1974年出生,博士生,从事半导体器件物理特性、器件模型等研究  
李志坚 男,1928年出生,教授,中国科学院院士,从事半导体器件、微电子机械、系统集成等研究  
刘理天 男,1947年出生,教授,从事半导体器件、集成传感器、微电子机械研究  
1998-07-09收到,1998-11-23定稿

能级偏离导带底造成的等效禁带变宽,第二项是载流子峰值浓度偏离界面导致的  $E_n\Delta z$  的表面势的增量,第三项是衬底高掺杂引起的禁带变窄效应<sup>[7]</sup>.

我们认为以往的模型主要有下述三个问题:

- (1) 反型层采用三角势垒近似和载流子只占据基带的假设的正确性需要进行验证;
- (2) 在MOS器件刚刚开启时,载流子只占空间电荷区总电荷量的很小一部分,其分布导致  $E_n\Delta z$  的表面势的增量没有充分的理论依据;
- (3) 高掺杂引起的禁带变窄效应仅仅是在导带底产生带尾,其对开启电压漂移的影响需要进一步分析

深入分析表明:量子力学效应对开启电压的影响体现在两个反面:一方面,电子的第一个子带带底高于导带底,等效于禁带变宽,减小载流子的浓度;另一方面,二维多子带结构相对于三维连续带结构的差别直接导致载流子分布的变化,而后者在以往的模型中都没有考虑到

本文在耗尽近似下利用有限差分法求解薛定谔方程的基础上讨论了通常采用的三角势垒近似的正确性,并从子带结构出发分析了量子力学效应导致开启电压漂移的物理实质,进而在定量分析量子力学效应影响开启电压的两个因素的基础上引入量子化和经典有效态密度的概念,并给出了开启电压的量子力学效应修正模型

## 2 三角势垒近似的正确性

三角势垒情况下求解薛定谔方程可以得到解析解<sup>[2]</sup>. 假定势垒为:

$$\mathcal{Q}(z) = \begin{cases} q F_s z & z \geq 0 \\ 0 & z < 0 \end{cases} \quad (1)$$

在有效质量近似下求解薛定谔方程:

$$\frac{\hbar^2}{2m_3} \frac{d^2 \xi_i}{dz^2} + [E_i + q\mathcal{Q}(z)] \xi_i = 0 \quad (2)$$

可以得到:

$$\xi_i(z) = A_i \{ (2m_3 q F_s / \hbar^2)^{1/3} [z - (E_i / q F_s)] \} \quad (3)$$

其中  $E_i$  是第  $i$  个能级:

$$E_i = \left[ \frac{\hbar^2}{2m_3} \right]^{1/3} \left[ \frac{3}{2} \pi q F_s \left( i + \frac{3}{4} \right) \right]^{2/3} \quad (4)$$

(3)式中的  $A_i(x)$  为 Airy 函数

但在实际的MOS结构耗尽区或反型区,其势垒为抛物线型. 抛物线势垒下是得不到解析解的. 经典统计理论表明:载流子大部分分布在距  $\text{SiO}_2\text{-Si}$  界面  $k_B T / (q F_s)$  的范围内. 量子力学理论的分析同样得出: 较低的几个能级其能态也主要取决于势垒底部的电势分布. 因此,在三角势垒近似中  $F_s$  通常取表面电场. 我们在抛物线势垒下用有限差分法求解薛定谔方程,并同三角势垒近似下的解析解比较,结果在图1中给出

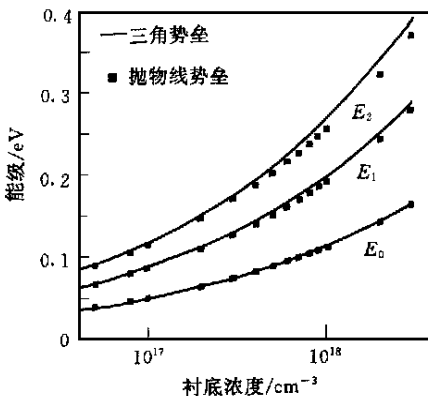


图 1 三角近似和抛物线近似结果比较

由图1可以看出,三角势垒近似下的解析解和

抛物线近似下的数值解在衬底浓度小于  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时, 误差是很小的 当衬底浓度大于  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时, 最低能级仍能有非常好的近似, 计算结果表明, 当衬底浓度大于  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  时, 80% 以上的载流子占据在最低能级上 因此, 以三角势垒近似来计算弱反型区的能带结构是合理的

### 3 子带结构及电子分布模型

量子化后的电子能态由一系列的二维子带组成, 其能带结构和状态密度明显不同于经典理论 势垒区的电子能带结构的变化引起载流子分布的变化, 从而影响表面达到强反型的条件, 导致开启电压的漂移 已有的对开启电压的量子力学修正模型中都没有考虑到二维能带结构对电子分布的影响, 同时总是假定只有最低能级被电子占据 我们引入有效态密度的概念来表征载流子在多个能级下的分布情况, 并同经典分布作比较, 进而导出开启电压的量子力学修正解析模型

以 Si(100) 表面为例, 量子化前的 6 个简并的导带分裂成两组能谷 ( $i= 1, 2$ ), 其简并度分别为  $g = (2, 4)$ , 两种能谷的态密度分别为:

$$D_i = \frac{g m_{\text{dei}}}{\pi \hbar^2} \quad i = 1, 2 \tag{5}$$

式中  $m_{\text{dei}}$  是第  $i$  个能谷的态密度有效质量

$E_{ij}$  为第  $i$  个能谷的第  $j$  个能级, 以  $E_{10}$  为带底的二维子带上分布的电子数为:

$$N_{ij} = \int_{E_{ij}} D_i \exp\left(\frac{E_f + q\varphi_s - E}{k_B T}\right) dE = D_i k_B T \exp\left(\frac{E_f + q\varphi_s - E_{ij}}{k_B T}\right) \tag{6}$$

总的载流子浓度为:

$$N_{\text{qm}} = \sum_i \sum_j N_{ij} = \sum_i \sum_j D_i k_B T \exp\left(\frac{E_f + q\varphi_s - E_{10}}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{E_{10} - E_{ij}}{k_B T}\right) \tag{7}$$

其中  $E_{10}$  为第一个分立能级;  $\varphi_s$  为表面势 (注: 式中能级  $E_{ij}$  的值是相对于界面处导带底的值).

我们计算了  $T = 300\text{K}$ , 表面刚达到强反型时最低能级上分布的电子占电子总量的比例, 结果在图 2 中给出 由结果可以看出, 电子只分布在基带的假设, 在很大的浓度范围内, 并不能反映 MOS 结构弱反型区的电子分布的实际情况

定义量子化有效态密度  $N_{\text{qm}}$ :

$$N_{\text{qm}} = \sum_i \sum_j D_i k_B T \exp\left(\frac{E_{10} - E_{ij}}{k_B T}\right) \tag{8}$$

则:

$$N_{\text{qm}} = N_{\text{qm}} \exp\left(\frac{E_f + q\varphi_s}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{E_{10}}{k_B T}\right) \tag{9}$$

经典理论下:

$$N_{\text{class}}(z) = N_c \exp\left(\frac{E_f + q\varphi_s}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{q(\varphi_s - \varphi(z))}{k_B T}\right) \tag{10}$$

经典分布的载流子浓度为:

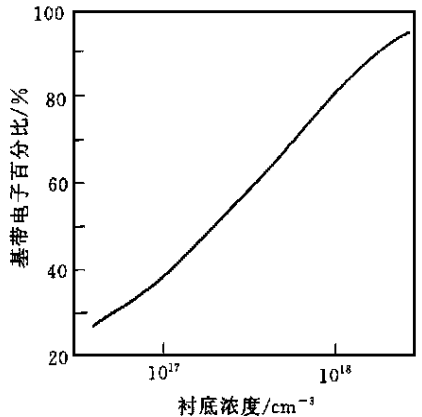


图 2 基带电子占电子总量的比例

$$N_{\text{class}} = \int_0^d N_{\text{class}}(z) dz = \exp\left(\frac{E_f + q\varphi_s}{k_B T}\right) \int_0^d N_c \exp\left(-\frac{q(\varphi_s - \varphi(z))}{k_B T}\right) dz \quad (11)$$

定义经典有效态密度  $N_{\text{cclass}}$ :

$$N_{\text{cclass}} = \int_0^d N_c \exp\left(-\frac{q(\varphi_s - \varphi(z))}{k_B T}\right) dz \quad (12)$$

则:

$$N_{\text{class}} = N_{\text{cclass}} \exp\left(\frac{E_f + q\varphi_s}{k_B T}\right) \quad (13)$$

比较(9)式和(13)式可以看出:影响载流子面密度的因素有两个,一个是第一个分立能

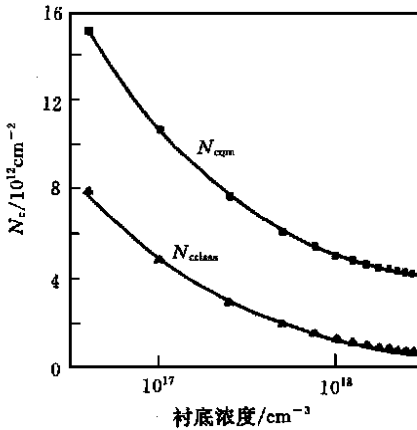


图 3 量子化和经典有效态密度的比较

级与导带底之差  $\exp\left(-\frac{E_{10}}{k_B T}\right)$ , 另一个就是  $N_{\text{cqm}}$  和  $N_{\text{cclass}}$  之间的差别 而后者正是反映电子在多个二维子带中的分布相对于经典分布的差异 图 3 中给出了量子化有效态密度和经典有效态密度的计算结果 从图中可以看出,在整个浓度范围内  $N_{\text{cqm}}$  大于  $N_{\text{cclass}}$ , 表明考虑电子在多个子带中的分布相对于经典分布其浓度增加了,等效为禁带变窄 而通常文献中假定的量子力学效应引起的载流子分布的变化(峰值偏离界面)导致表面势有  $E_n \Delta z$  的增量,其作用等效为禁带变宽 可见,该假定不能真实地反映量子力学效应对载流子分布的影响 文献[4]中引入高掺杂导致禁带变窄效应来补偿该项假定引起的误差

在下一节中可以看到:不借助高掺杂引起的禁带变窄效应,只从量子力学效应的物理实质出发,我们的模型给出了同样的结果

#### 4 开启电压的量子力学修正模型及计算结果

我们应用前面给出的次开启区载流子分布的量子力学模型和经典模型计算刚达到强反型时表面势之差,并推导开启电压的量子力学修正公式 定义:

$$\Delta E_{N_c} = -k_B T \ln(N_{\text{cqm}}/N_{\text{cclass}}) \quad (14)$$

则:

$$N_{\text{cqm}} = N_{\text{cclass}} \exp\left(\frac{-\Delta E_{N_c}}{k_B T}\right) \quad (15)$$

比较(9)、(13)、(15)可得到MOS结构Si表面刚达到强反型时由于量子力学效应而产生的表面势的增量:

$$\Delta\varphi_s^m = \frac{(\Delta E_{N_c} + E_{10})}{q} \quad (16)$$

忽略可动电荷的影响,在耗尽近似下得到开启电压的量子力学修正公式为:

$$\Delta V_T = \Delta\varphi_s^m \left[ 1 + \frac{1}{2C_{\text{ox}}} \sqrt{\frac{\epsilon_{\text{Si}} q N_A}{\varphi_b}} \right] \quad (17)$$

其中:

$$\varphi_b = \frac{k_B T}{q} \ln \left( \frac{N_A}{n_i} \right) \tag{18}$$

在模型实际应用中, 必须简化  $\Delta E_{N_c}$  的计算 我们在  $4 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$  到  $3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$  范围内计算了  $\Delta E_{N_c}$  的值并用  $\log(N_{\text{sub}})$  的二次函数进行拟合, 拟合结果由图 4 给出, 拟合的最大相对误差 不超过 3%.

图 5 中给出了考虑量子力学效应(曲线(a)) 和不考虑量子力学效应(曲线(b)) 以及量子力学效应中只考虑单个子带能级抬升影响(曲线(c)) 三种情况下, 表面刚刚达到强反型时表面势随衬底浓度的变化情况 图中可以看出, 量子力学效应对表面强反型的条件影响是很大的, 同时可以看出: 如果不考虑有效态密度的影响(即  $\Delta E_{N_c}$ ), 将导致更高的表面势, 从而使开启电压的量子力学修正结果偏大

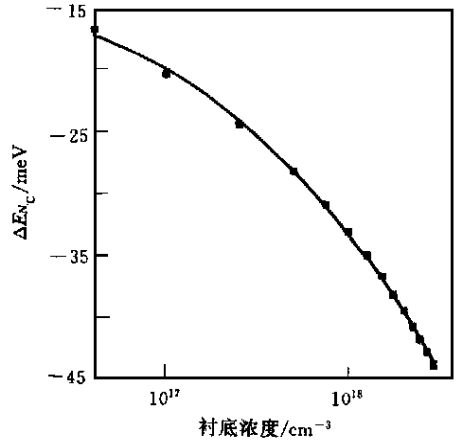


图 4  $\Delta E_{N_c}$  的二次曲线拟合结果

我们利用拟合的结果, 按照上面给出的模型 计算开启电压的量子力学效应修正, 并与文献[4]中给出的实验结果相比较, 结果见图 6

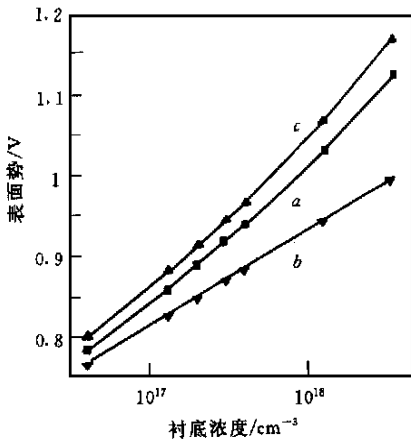


图 5 量子化效应对表面势的影响

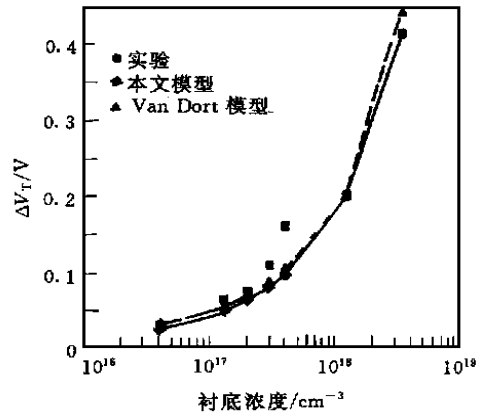


图 6 开启电压量子力学修正模型结果

文献[4]中的开启电压定义为给定源漏电压(0.1V)和源漏电流(100nA ( $w/L$ ))下的栅电压, 开启电压的漂移量是实测结果与不考虑量子力学效应时的模拟结果之差 可以看出, 不借助高掺杂导致禁带变窄效应, 只从量子力学效应的物理实质出发, 我们的模型具有与文献[4]中的模型相同的准确度

### 5 结论

本文首次通过对薛定谔方程的数值求解验证了MOS 结构弱反型下量子力学效应分析中采用三角势垒近似的正确性, 并在分析量子化层中的子带结构和电子分布的基础上引入

量子化有效态密度的概念,进而给出了开启电压的量子力学修正模型.该模型首次计及了电子在多个子带上分布的影响,反映了量子力学效应对开启电压的影响的真实的物理图象,并给出了与实验比较吻合的结果.

**致谢** 本文作者感谢本所的杨之廉老师和田立林老师、斯坦福大学的余志平博士给予的关心和帮助,以及与陈文松同学进行的有益的讨论.

### 参 考 文 献

- [ 1 ] G. Baccarani *et al.*, IEEE Trans. Electron Devices, 1984, **31**(4): 452.
- [ 2 ] F. Stern, Phys. Rev. B, 1972, **5**(12): 4891.
- [ 3 ] T. Ando *et al.*, Rev. Mod. Phys., 1982, **54**: 437.
- [ 4 ] M. J. Van Dort *et al.*, IEEE Trans. Electron Devices, 1992, **39**(4): 932.
- [ 5 ] S. Jallepalli *et al.*, IEEE Trans. Electron Devices, 1997, **44**(3): 297.
- [ 6 ] M. J. Van Dort *et al.*, Solid-State Electron., 1994, **37**(3): 435.
- [ 7 ] J. W. Slotboom and H. C. de Graaf, Solid-State Electron., 1976, **19**: 857.

## MOS Device Threshold Voltage Model Considering Quantum Mechanical Effect Including Multi-Subband Occupation

Ma Yutao, Li Zhijian, Liu Litian

(Institute of Microelectronics, Tsinghua University, Beijing 100084)

Received 9 July 1998, revised manuscript received 23 November 1998

**Abstract** With increasing of the substrate dopant concentration and decreasing of the gate oxide thickness, the influence of Quantum Mechanical Effects (QME) on deep-submicron MOSFET characteristics are getting more and more significant. Experiments results show that QME can result in noticeable threshold voltage ( $V_{th}$ ) shift. In this paper, numerical solution with parabolic potential well and analytical solution with triangular well are compared, and the validity of triangular well approximation is demonstrated. Based on the calculation of the subband structure in the quantized region in weak inversion regime, the concepts of Quantum Effective State Density and Classical Effective State Density are proposed, the carrier distribution in subbands is analyzed and the two factors that influence the  $V_{th}$  shift are discussed. Finally, a quantum correction model to threshold voltage is given, which reveals the physical nature of the influence of QME on the  $V_{th}$  shift and gives consistent results with experiments.