

室温下 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 共振隧穿二极管的数值模拟^{*}

李 涛[†] 余志平 王 燕 黄 雷 向采兰

(清华大学微电子学研究所, 北京 100084)

摘要: 采用量子水动力学(QHD)模型模拟了 35nm $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴型共振隧穿二极管(RTD)在室温下的 I - V 特性. 模拟过程中, 引入 second upwind, Schafetter-Gummel (SG)和二阶中心差分法相结合的离散对方程组进行离散, 保证了结果的收敛性. 还模拟了不同的器件结构, 对结果的分析表明器件的势垒厚度和载流子有效质量都会对 RTD 的负阻效应产生影响. 在室温下 ($T = 293\text{ K}$), 当 $x = 0.23$ 时, 模拟结果的峰谷电流比为 1.14, 与实验结果相吻合.

关键词: $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 共振隧穿二极管; 量子水动力学模型; 离散方法; 轻重空穴; 峰谷电流比

PACC: 7210B; 7340G; 7340L

中图分类号: TN313⁺. 2

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)05-0869-05

1 引言

基于 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 的空穴 RTD 结构简单, 在工艺上也容易与传统的 CMOS 制造工艺兼容, 是一种很有希望的器件结构. 近年来, 清华大学微电子所开展了对这种器件的研究工作, 研制出室温下即可观察到负阻效应的空穴型 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ RTD^[1]. 本文首次采用量子水动力学(QHD)模型对 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ RTD 进行数值模拟. QHD 模型^[2]通过在经典水动力学模型中引入量子修正来模拟载流子在半导体器件中的输运过程, 它采用载流子的浓度、温度、电势能和速度做为未知量, 模型方程的边界条件具有明确的物理意义, 离散后的方程组采用牛顿法求解, 计算过程具有较低的时间和空间复杂度.

2 器件结构和数值模拟

2.1 器件结构

$\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ RTD 是由清华大学微电子所自行研制的超高真空外延设备 GS400 制备^[1], 图 1 给出了器件截面的 TEM 图片. 图片中部颜色较深的三层材料为 SiGe 层, 位于它们中间两层颜色较浅的材料为 Si 势垒层, 图中显示的各层厚度不均匀主要原因是 TEM 测试样品表面不平整, 导致观察角度不同因而显示厚度不均匀. 靠近外面的两层 SiGe 厚度为 10nm; 中间两层 Si 和一层 SiGe 厚度均为

5nm, 整个 RTD 器件长度为 35nm, 不掺杂杂质. 器件两端为高掺杂的 Si, 掺杂 B 的浓度约为 $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. 图 2 给出了 B 的浓度分布, 其中的凹口位置为双势垒单量子阱结构所处的位置, 此结构的详细实现过程可以参考文献[3]. 根据材料的喇曼测试图谱和双晶衍射谱^[1]可以计算出 SiGe 层中 Ge 的组分为 23%.

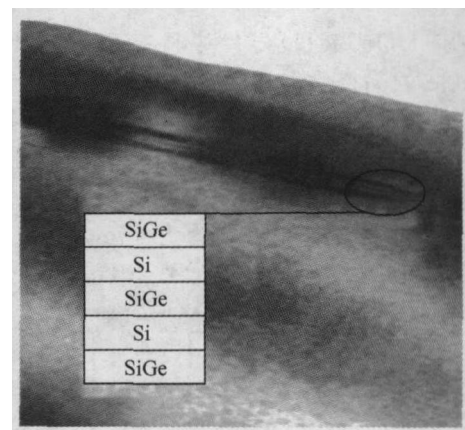


图 1 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ RTD 截面图

Fig. 1 Cross-section diagram of $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ RTD

2.2 导电机制

Si 和 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料中的空穴都有轻重两种状态, 纯 Si 或者 Ge 材料中轻重空穴的有效质量都可以精确得到, 对于 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 材料, 可以用线性插值的办法近似得到其中轻重空穴的有效质量:

^{*} 国家重点基础研究发展规划资助项目(批准号:041505002)

[†] 通信作者. Email: litaofrank99@mail. tsinghua. edu. cn

2005-09-19 收到, 2005-11-16 定稿

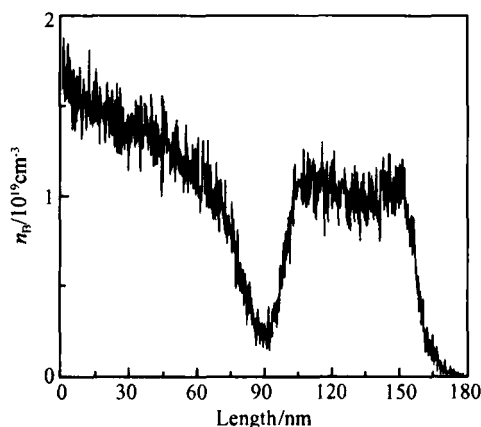


图 2 B 浓度分布

Fig. 2 B concentration distribution

$$m_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = (1-x)m_{\text{Si}} + xm_{\text{Ge}} \quad (1)$$

表 1 给出了 $x = 0.23$ 时室温下各种材料中空穴载流子的有效质量,其中 m_0 为自由电子质量.

表 1 室温下 Si, Ge 和 $\text{Si}_{0.77}\text{Ge}_{0.23}$ 材料中空穴有效质量Table 1 Effective mass for heavy and light holes in Si, Ge and $\text{Si}_{0.77}\text{Ge}_{0.23}$ at room temperature

	Si	Ge	$\text{Si}_{0.77}\text{Ge}_{0.23}$
Light hole	$0.160 m_0$	$0.044 m_0$	$0.133 m_0$
Heavy hole	$0.490 m_0$	$0.280 m_0$	$0.441 m_0$

$\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ RTD 器件生长在 Si 衬底上,由于 Si 和 SiGe 的晶格常数不同,在 SiGe 材料中会产生应力.应力的存在使空穴的能带结构发生变化,轻重空穴的能级在价带顶发生分裂,能带简并消除,图 3 给出了轻重空穴的平带能带图.当 Ge 的组分 $x = 0.23$ 时,轻重空穴的能级差约为 45meV ,大于室温下 $k_B T (26\text{meV})$ 的值^[41],这导致 SiGe 层中的重空

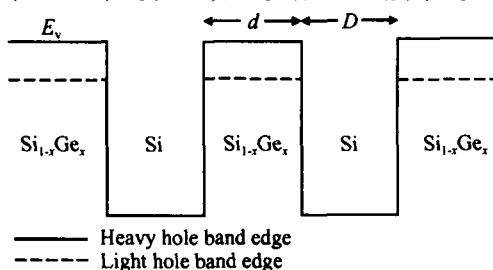


图 3 轻重空穴平带能带图

Fig. 3 Valance band edge profiles for heavy and light holes under flatband

穴浓度远大于轻空穴浓度,因此导电时 SiGe 层中起主要作用是重空穴载流子. Si 材料中不存在应力,轻重空穴的能级在价带顶依然是简并的,所以在 Si 中需要考虑轻重空穴混和导电的机制.在实际器件中空穴的传输方向为 $[100]$ 晶向,这时可以计算出

轻空穴占的比例约为 66% ^[5].在 QHD 模型中,载流子浓度多用来计算动量密度和能量密度,所以仍由插值法得到 Si 中混和空穴的等效质量为 $0.267 m_0$.异质结的势垒高度为 0.215V ,与重空穴的能带突变相等^[41].

2.3 数值模拟

一维空穴型 QHD 模型包含四个方程(这里只考虑空穴传输):

粒子数守恒方程:

$$d(u g_p) / dx = 0 \quad (2)$$

动量守恒方程:

$$d(u g_u) / dx + h_u + \frac{mpu}{\tau_p} = 0 \quad (3)$$

能量守恒方程:

$$d(u g_T) / dx - \frac{d}{dx} \left(\kappa \frac{dT}{dx} \right) + s_T = 0 \quad (4)$$

泊松方程:

$$\epsilon \frac{d^2 V}{dx^2} + e^2 (N_D - N_A + p) = 0 \quad (5)$$

其中:

$$g_p = p \quad (6)$$

$$g_u = mpu \quad (7)$$

$$g_T = \frac{5}{2} p T + \frac{1}{2} mpu^2 - \frac{h^2 p}{8m} \times \frac{d^2}{dx^2} \ln p + pV \quad (8)$$

$$h_u = \frac{d}{dx} (pT) + p \frac{dV}{dx} - \frac{d}{dx} \left(\frac{h^2 p}{12m} \times \frac{d^2}{dx^2} \ln p \right) \quad (9)$$

$$s_T = \left[\frac{3}{2} p T + \frac{1}{2} mpu^2 - \frac{h^2 p}{24m} \times \frac{d^2}{dx^2} \ln p - \frac{3}{2} p T_0 \right] / \tau_w \quad (10)$$

其中 p 代表载流子浓度; u 代表载流子速度; T 代表被归一化到能量单位的载流子温度; $V = e\phi$ 代表空穴的电势能,它们分别是方程组 (2) ~ (5) 的待求变量; m 代表载流子的有效质量; τ_p 和 τ_w 分别代表动量和能量弛豫时间^[2]; 热量传输系数 $\kappa = \kappa_0 \tau_p T_p / m$; T_0 代表归一化到能量单位的半导体晶格温度^[21].

在器件两端的欧姆接触 x_L, x_R 处,方程的边界条件为: $p = N_A, du/dx = 0, T = T_0$; 当偏压为 $\Delta\phi$ 时, $V(x_L) = T \ln(p/n_i), V(x_R) = T \ln(p/n_i) + e\Delta\phi$, 其中 n_i 为载流子本征浓度.

设整个器件在一维方向上可以划分为 $0 \sim N$ 个节点, p, V 和 T 在格点上取值,共有 $3N + 3$ 个未知量; 速度 u 在格点之间取值: $u_{-1/2}, \dots, u_{i-1/2}, u_{i+1/2}, \dots, u_{N+1/2}$, 共有 $N + 2$ 个未知量,所以整个方程共有

未知量个数为 $4N + 5$. 粒子数守恒方程 (2), 能量守恒方程 (4) 和泊松方程 (5) 在格点 $1, 2, \dots, N - 2, N - 1$ 等于 0, 动量守恒方程 (3) 在格点间 $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, N - \frac{3}{2}, N - \frac{1}{2}$ 等于 0, 再加上边界条件, 可以得到的方程数目为 $4N + 5$, 与未知变量个数相等.

当 QHD 模型被用来模拟异质结结构时, 方程 (2) ~ (4) 中的变量 v 要被替换为 $v + \beta$, 其中 β 表示异质结势垒高度, 而泊松方程不变.

QHD 模型是以载流子浓度、温度、速度和电势能为未知量, 它们的数量级相差很大, 当采用牛顿法对方程组进行求解时, 很容易导致矩阵奇异, 无法得到收敛的结果. 因此, 这里引入归一化因子 $p^* = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $V^* = T^* = 0.026 \text{ eV}$, 把方程的未知量归一化到相近数量级, 为求解带来方便.

对于方程 (2) ~ (4) 中的 $d(ug)/dx$ 项, 可以采用 second upwind 方法进行离散^[2], 在第 i 个节点上, 该项可以离散为:

$$\frac{d}{dx}(ug)_i = (u_{i+1/2} g_R - u_{i-1/2} g_L) / \Delta x \quad (11)$$

其中:

$$g_R = \begin{cases} g_i, & u_{i+1/2} > 0 \\ g_{i+1}, & u_{i+1/2} < 0 \end{cases} \quad g_L = \begin{cases} g_{i-1}, & u_{i-1/2} > 0 \\ g_i, & u_{i-1/2} < 0 \end{cases}$$

方程 (9) 中的 $\frac{d}{dx}(pT) + p \frac{dV}{dx}$ 项代表两个格点间的载流子流. 其中载流子浓度 p 的大小以近指数方式变化, 离散时如果采用平均相邻两个格点上的空穴密度来获得格点间空穴密度会导致很大的误差, 方程不容易收敛, 而采用 SG 方法来离散粒子流这样的项, 已经被证明有很好的精度和稳定性, 于是节点 i 和 $i + 1$ 之间的粒子流可以被离散为^[6]:

$$\frac{d}{dx}(pT)_i + p \left(\frac{dV}{dx} \right)_i = \frac{(B(\eta) p_{i+1} T_{i+1} - B(-\eta) p_i T_i) / \Delta x}{(T_i + T_{i+1}) / 2} \quad (12)$$

其中: $B(\eta) = \frac{\eta}{e^\eta - 1}, \eta = \frac{V_i - V_{i+1}}{(T_i + T_{i+1}) / 2}$.

方程中的其他项可以采用二阶精度的中心差分法来离散.

离散后的方程组采用牛顿法求解. 当器件偏压很大时, 采用逐步增大偏压的方法来得到最后的结果. 例如, 当偏压 $\Delta\phi = 0.1 \text{ V}$ 时, 可以依次求得 $\Delta\phi_1 = 0.001 \text{ V}, \Delta\phi_2 = 0.002 \text{ V}, \dots, \Delta\phi_{100} = 0.1 \text{ V}$ 下的解. 当求偏压 $\Delta\phi_i$ 下的解时, 采用 $\Delta\phi_{i-1}$ 下的解作为牛顿迭代的初始解.

3 模拟结果

图 4 给出了 Si/ Si_{0.77}Ge_{0.23} 空穴型 RTD I - V 特性的模拟结果和实验结果. 其中模拟结果计算出来的峰谷电流比为 1.14, 与实验测得的结果 1.13 吻合.

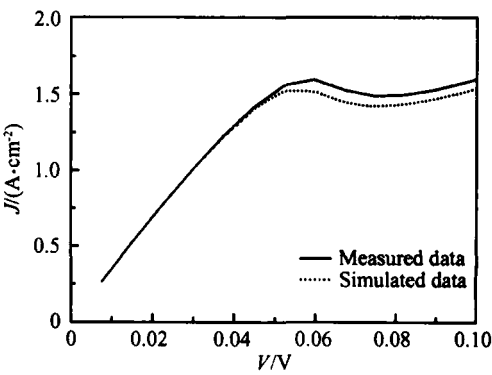


图 4 室温下 Si/ Si_{0.77}Ge_{0.23} RTD I - V 特性
Fig. 4 I - V characteristics of Si/ Si_{0.77}Ge_{0.23} RTD at room temperature

图 5 给出了电流峰值出现的电压附近空穴浓度在器件中的分布. 从图中可以观察到空穴载流子在势阱中的积累效应, 但是积累后的空穴浓度仍然远低于 Si 衬底中掺杂的受主杂质浓度, 文献[2]对电

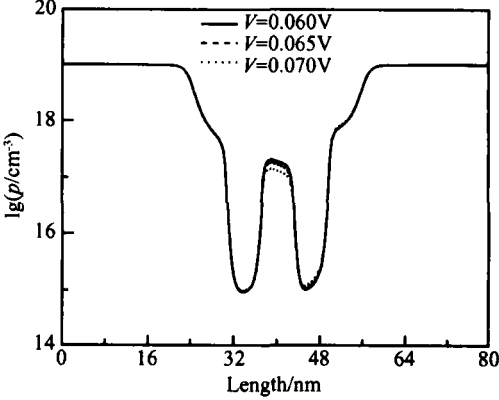


图 5 势垒厚度为 5nm 时载流子浓度分布
Fig. 5 Hole density distribution with a quantum barrier thickness of 5nm

子型 AlGaAs RTD 的模拟却有相反的结果, 当偏压达到电流峰值出现的电压时, RTD 势阱中的电子浓度可以超过衬底中掺杂的施主浓度. 这是因为在室温下, Si 的热导率为 $140 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$, SiGe 的热导率仅在 $10 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 左右的量级, 这样就会导致在 SiGe 层的热量积累, 使空穴发射区和量子阱区的温度升高, 空穴能量也会升高, 从而使非隧穿载

流子形成的热电流增大,因此影响了空穴在势阱区中的积累;低的载流子浓度限制了电流峰值的大小,因此空穴型 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ RTD 器件的峰谷电流比低于电子型 AlGaAs RTD 的值.

图 6 给出了不同势垒厚度下器件的 I - V 特性. 在势垒厚度从 5nm 变为 10nm 的过程中,电流峰值出现的偏压不断增大,峰谷电流比也有所增加. 另外,模拟结果还表明载流子的有效质量也可以影响器件的峰谷电流比. 由于 SiGe 层中存在应力,轻重空穴的简并消除,导电时只考虑重空穴传输是合理的;而在 Si 层中,随着载流子传输晶向的不同,轻重空穴的组分会产生变化,混合载流子的有效质量也会相应变化. 图 7 给出了 Si 中的载流子有效质量取不同值时,器件的 I - V 特性. 当只考虑 Si 中重空穴传输时,对应的曲线 并没有负阻特性,当轻空穴比例为 66 % 时,模拟的峰谷电流比为 1.14 (曲线),当只考虑轻空穴导电时,电流峰谷比达到最大. 于是,当器件中载流子的传输晶向未知时,可以采用曲线拟合的办法,得到 Si 中混合载流子轻重空穴各自的组分.

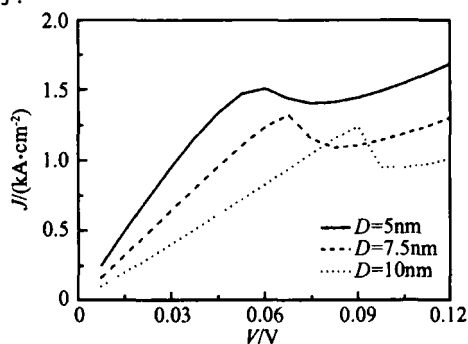


图 6 不同势垒厚度下 $\text{Si}/\text{Si}_{0.77}\text{Ge}_{0.23}$ RTD 的 I - V 特性

Fig. 6 I - V characteristics of $\text{Si}/\text{Si}_{0.77}\text{Ge}_{0.23}$ RTD with different quantum barrier thicknesses

4 结论

本文采用 QHD 模型对室温下 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴型 RTD 器件的 I - V 特性进行模拟,求解方程过程中采用 second up wind 和 SG 相结合的离散方法保证了结果的收敛性. 在实验过程中,模拟了势垒厚

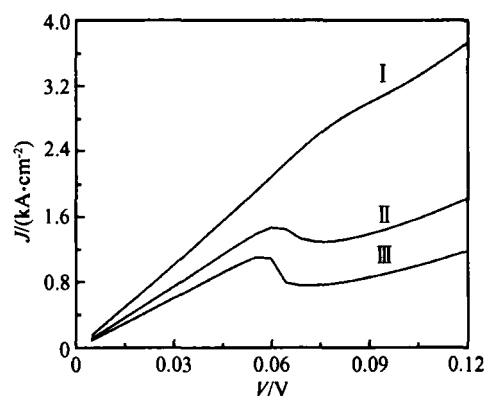


图 7 不同载流子有效质量下 $\text{Si}/\text{Si}_{0.77}\text{Ge}_{0.23}$ RTD I - V 特性
曲线 中 $m = 0.490m_0$; 曲线 中 $m = 0.267m_0$; 曲线 中 $m = 0.160m_0$.

Fig. 7 I - V characteristics of $\text{Si}/\text{Si}_{0.77}\text{Ge}_{0.23}$ RTD with different carrier effective masses $m = 0.490m_0$ in Curve , $m = 0.267m_0$ in Curve , and $m = 0.160m_0$ in Curve .

度变化和载流子有效质量变化对器件负阻效应的影响. 对实验结果的分析说明了 $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 空穴型 RTD 器件峰谷电流比偏低的原因,并提出了一种计算混合载流子中轻重空穴组分的办法.

参考文献

- [1] Xiong Chenrong, Wang Minsheng, Huang Wentao, et al. P-type Si/SiGe resonant tunnelling diodes. Chinese Journal of Semiconductors, 2003, 24 (Supplement) : 128 (in Chinese) [熊晨荣, 王民生, 黄文韬, 等. 基于 SiGe/Si 的空穴型共振隧穿二极管. 半导体学报, 2003, 24 (增刊) : 128]
- [2] Gardner C L. The quantum hydrodynamic model for semiconductor devices. SIAM Journal on Applied Mathematics, 1994, 54: 409
- [3] Xiong Chenrong, Wang Yan, Chen Peiyi, et al. Fabrication of p-well resonant tunneling diode based on SiGe/Si and its DC-parameter extraction. Materials Science in Semiconductor Processing, 2004, 7: 379
- [4] Liu H C, Landheer D, Buchanan M. Resonant tunneling in $\text{Si}/\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ double barrier structures. Appl Phys Lett, 1988, 52: 1809
- [5] Erich Kasper. Properties of strained and relaxed silicon germanium. Beijing: National Defense Industry Press, 2002
- [6] Huang Lei, Yu Zhiping, Xiang Cailan. Simulation of RTD using quantum hydrodynamic model. ICSICT, 2004: 999

Numerical Simulation of Si/Si_{1-x}Ge_x Resonant Tunneling Diode at Room Temperature^{*}

Li Tao[†], Yu Zhiping, Wang Yan, Huang Lei, and Xiang Cailan

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

Abstract: I-V curves of a 35nm p-type Si/Si_{1-x}Ge_x resonant tunneling diode (RTD) are simulated with the quantum hydrodynamic (QHD) model. An integrated difference scheme including the Schafetter-Gummel method, second upwind method, and second-order central difference method is used to discretize the QHD equations, maintaining both accuracy and stability. Investigations of some structural modifications are also carried out. The analytical results indicate that both quantum barrier thickness and hole effective mass affect the NDR characteristics of Si/Si_{1-x}Ge_x RTDs. The simulated peak-to-valley current ratio of 1.14 at 293K agrees with the experimental result when $x=0.23$.

Key words: Si/Si_{1-x}Ge_x resonant tunneling diode; quantum hydrodynamic model; discretization scheme; heavy- and light-hole; peak-to-valley current ratio

PACC: 7210B; 7340G; 7340L

Article ID: 0253-4177(2006)05-0869-05

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 041505002)

[†] Corresponding author. Email: litaofrank99@mails.tsinghua.edu.cn

Received 19 September 2005, revised manuscript received 16 November 2005

©2006 Chinese Institute of Electronics