

# 基于能带计算的纳米尺度 MOS 器件模拟\*

余志平<sup>†</sup> 田立林

(清华大学微电子学研究所, 北京 100084)

**摘要:** 随着器件沟道长度的不断缩小,多栅结构(包括 FinFET)被普遍认为是有效改进  $I_{on}/I_{off}$  的手段.量子力学效应对 MOSFET 中载流子分布和运输的影响已被认识和研究多年.在沟道截面被局限在数纳米量级时,一个更基本的固体物理问题,即能带或电子结构对材料几何尺寸的依赖性,逐渐显现出来并对器件特性产生不可忽略的影响.本文讨论如何从第一原理出发,高效率地计算沟道区的能带结构.在得到载流子的输运参数(有效质量、迁移率等)的基础上,通过直接求解带开放边界条件的薛定谔方程以得到器件的电学特性.考虑到应力对能带结构和散射机制的影响,还研究了载流子迁移率与晶向的关系.

**关键词:** MOSFET; 能带结构; 纳米; 器件模拟

EEACC: 2560

中图分类号: TN386

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2006)S0-0248-04

## 1 引言

硅 CMOS 集成电路技术的进一步发展受限于两个因素:如何以大量生产的方式加工纳米量级的特征尺寸,以及在改进或保持驱动电流的前提下控制器件的关态(off-state)漏电流.前者的解决方案可尽可能延长 193nm 光刻技术的应用寿命,包括采用“沉浸”(immersion)技术用提高介电常数的办法来降低有效光波长.后一目标,则可通过改进材料(高  $k$  栅介质、高沟道迁移率材料,包括应变硅和锗沟道等)和器件结构(多栅)实现.

为了减少在新型材料和器件结构选择和优化上的实验成本和耗时,更主要的是为了避免研究的盲目性,需要在进行实验的同时甚或之前,有理论的导向和定量的分析.半导体器件计算机模拟和模型建立就是一个有力的辅助设计工具.尤其是当器件工作的基础物理机理发生迁涉时,基于物理的研究途径就更显示其良好的预测性.

在 MOS 器件处于深亚微米(0.35 $\mu$ m 技术节点及其后)范畴时,量子力学效应主要体现在影响载流子在垂直于沟道方向上衬底表面和多晶硅栅靠近栅介质处的分布<sup>[1]</sup>.近年来,因为沟道长度进一步缩小到亚 100nm,量子力学对载流子沿着沟道方向运输,包括隧穿的影响也引起了广泛的注意.在计算机模拟和 SPICE 电路集约模型的研究方面都有很好的进展<sup>[2]</sup>.

为了在沟道不断缩短的前提下,有效地控制关态漏电流,理论分析<sup>[3]</sup>已指出必须合理地设计器件结构以实现尽可能小的定量表征短沟效应的“特征长度”.采用超薄沟道层(ultra thin body)的双栅结构<sup>[4]</sup>或沟道截面在十几纳米量级的 FinFET<sup>[5]</sup>可以实现即使沟道长度短到 5nm 时的正常器件特性.在这样小的空间局限区域,不仅能带会解简并成低维度的子带,晶体中电子结构也会发生性质上的变化(如由间接带隙变为直接带隙),进而影响到载流子的输运参数.

因器件尺度在三维方向(沟道长度及沟道截面)都进入数纳米到数十纳米范畴带来的材料、器件特性的以上改变引入了新一代器件模拟器的概念.这种模拟器要结合基于原子层次(atomistic)能带计算和自洽求解薛定谔方程(以及其衍生的载流子输运、连续方程)、泊松方程以达到准确模拟器件电特性的目的.

## 2 二维量子力学效应模型

MOSFET 沿沟道方向的量子力学效应,主要表现在源漏之间的隧穿电流影响到了器件的漏端电流.然而,这一方向的量子效应也会影响垂直于沟道方向上表面势阱中基态能级这一事实却一直为人们忽略.这种二维量子力学效应直接影响了器件的阈值电压.其定量关系最近被建立在 SPICE 的集约模型中<sup>[2]</sup>.建模的过程基于 WKB 理论,得到沿沟道方

\* 国家高技术研究发展计划资助项目

<sup>†</sup> 通信作者, Email: yuzhip@tsinghua.edu.cn

2005-12-28 收到, 2006-05-18 定稿

向一维薛定谔方程的近似解. 然后利用“局域化”概念, 重新定义二维电子气的最低子能带(即基态)底, 从而将沿沟道方向的源漏间量子隧穿效应折算成对垂直沟道方向的阈电压的修正.

“局域化”的概念如图 1 所示. 隧穿几率因能量自势垒顶部往下而逐渐减小. 确定一个几率(比如说 4%), 所对应的能级  $E_d$ , 其上为非局域态, 其下则为局域态. 这个分隔非局域态和局域态的能量被称为“子带边界”. 这样, 由于水平方向上的量子力学效应使得二维电子气的子带边界由一维量子力学效应决定的  $E_{max}$  降低到  $E_d$ .

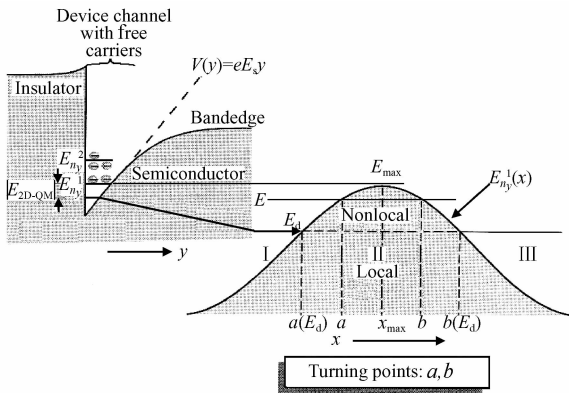


图 1 坐标系统和重新定义子带边界的示意图

Fig.1 Schematic of the coordinate system and redefinition of the lowest subband

由解得的  $E_d$ , 应用有效态密度概念<sup>[6]</sup>, 并在势垒最高点附近对子带形状做抛物线近似, 即可以得到阈电压的二维量子力学修正  $\Delta V_{2D-QM}$ . 图 2 是  $\Delta V_{2D-QM}$  随沟道长度  $L$  的变化关系. 可以看出, 解析模型和数值模拟的结果无论从定性趋势还是定量大小上都吻合得很好.

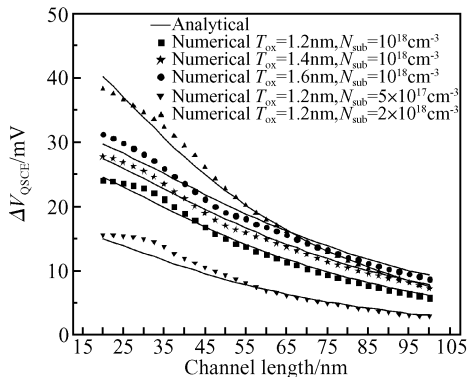


图 2  $\Delta V_{2D-QM}$  随沟道长度  $L$  的变化关系

Fig.2 Dependence of  $\Delta V_{2D-QM}$  on channel length  $L$

### 3 低维结构能带计算

目前在有限区域内计算固体能带结构的常用方

法有基于第一原理的密度泛函理论(density functional theory)和基于原子轨道波函数展开的紧束缚(tight-binding, TB)两种方法. 前者一般采用 LDA(local density approximation)求解多个单粒子薛定谔方程, 并用平面波函数展开. 其优点是不依赖于经验参数, 如结合分子动力学(MD)计算可以得到晶体的准确晶格常数和能带结构. 典型的计算程序包为 VASP(vienna *ab initio* simulation package)<sup>[7]</sup>. 这种方法的缺点是计算量很大, 而且得到的带隙需要经过修正(一般偏小数十 meV). TB 方法则具有计算速度快, 精度可以满足器件模拟的优点. 尽管理论上这种方法要依赖于一些经验参数, 但对常用的半导体材料硅和锗, 不是一个大的局限因素.

清华大学开发的 TB 程序已对直径为 1~6nm 的硅和锗纳米线以及碳纳米管的能带结构进行了计算, 并研究了能隙(间接或直接)对纳米线轴晶向的依赖关系<sup>[8]</sup>. 计算结果与实验及 DFT 方法的比较都表明了 TB 方法可用来快速、正确计算纳米尺度器件的材料能带结构. TB 方法也被用来研究 UTB 双栅 MOS 中的空穴迁移率与晶向关系, 并得出了沟道层厚度影响阈值电压的定量关系<sup>[4]</sup>. 图 3 和图 4 给出了 TB 方法对硅纳米线的计算结果.

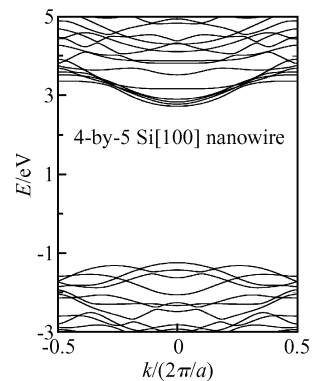


图 3 [100]晶向, 截面为 1nm 边长的硅纳米线的计算能带图 已可见直接带隙.

Fig.3 Calculated bandstructure for silicon nanowire with 1-by-1nm cross-section and [100] crystal. The direct bandgap can be seen.

### 4 基于量子输运方程的器件模拟

完全基于粒子图像的肖克莱(Shockley)半导体方程组尽管可以保证载流子连续性和静电自洽原理, 但是在纳米尺度的器件中载流子已呈现出波动特性. 其中一个表现即是超薄体(UTB)双栅 MOS-FET 的体反型(相对于体 MOS 器件的表面反型). 引入量子势的半经典玻尔兹曼方程或 Wigner 函数

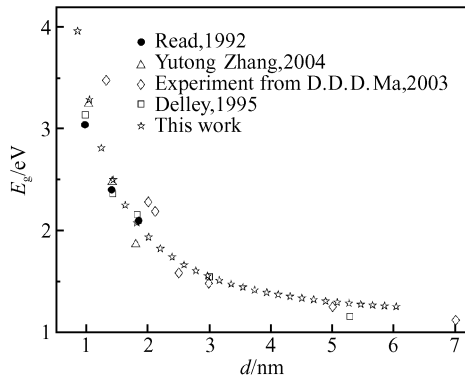


图 4 TB 方法计算得到的禁带宽度与实验及其他方法(包括 DFT)结果的比较

Fig.4 Comparison of bandgap between TB calculation and results from measurement and other methods

在一定程度上反映了量子力学效应,也是过去近二十年来的主要研究方向和方法之一.近年来,两个以直接求解带开放边界条件的薛定谔方程来模拟器件特性的方法表现出很好的潜力.一个方法是用非平衡格林函数(non-equilibrium Green's function, NEGF)来求解波函数.另一方法是在 QTBM(quantum transmitting boundary method)的基础上加以改进以适用于器件模拟的 QDAME(quantum device analysis with modal evaluation)<sup>[9]</sup>.

在文献[10]中,NEGF 法被用来求解沿着 FinFET 沟道方向的载流子输运.本征能级则是通过解沟道二维截面上的薛定谔方程来得到.静电势通过解这个器件在偏置下的三维泊松方程得到.这个过程经过数值迭代得到自洽的解.所以称为准三维量子力学模拟.模拟得到的在沟道截面上态密度(最低能量的第 3 子带)和电子分布见图 5 和图 6.

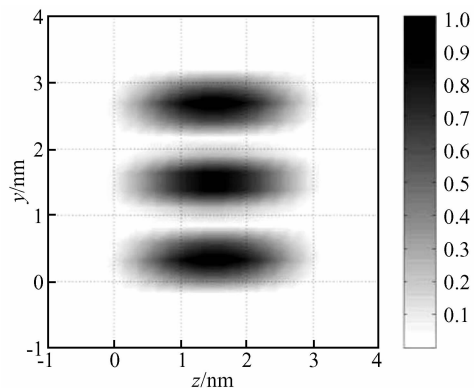


图 5 FinFET 沟道截面的态密度(相应与最低能量的第 3 子带)

Fig.5 Density-of-states (DOS) on the cross-section of FinFET channel (corresponding to the lowest 3rd subband in energy)

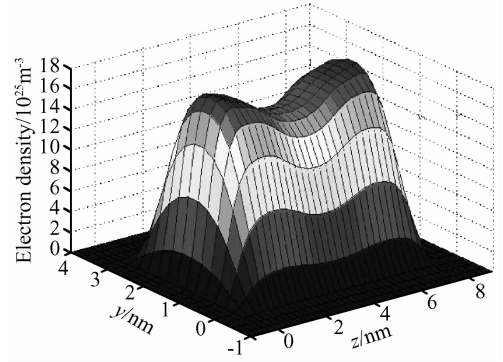


图 6 沟道截面上的电子分布

Fig.6 Electron distribution on the channel cross-section

## 5 结论

本文综述了适用于 CMOS 工艺节点在 65nm (相应沟道长度 35nm) 及其后的器件模拟所要求的物理过程和数值方法.强调了结合能带计算进行模拟的必要性.在数值模拟的基础上提出的电路解析模型有助于采用纳米尺度 MOS 器件电路的正确设计.

## 参考文献

- [1] Yu Zhiping, Dutton R W, Kiehl R A. Circuit/device modeling at the quantum level. IEEE Trans Electron Devices, 2000, 40(10): 1819
- [2] Zhang Dawei, Zhang Hao, Yu Zhiping, et al. A unified charge model comprising both 2D quantum mechanical effects in channels and in poly-silicon gates of MOSFETs. Solid-State Electron, 2005, 49(10): 1581
- [3] Wong P. MOSFET fundamentals. In: Chang C Y, Sze S M, ed. ULSI devices. New York: John Wiley & Sons, Inc, 2000
- [4] Rahman A, Klimeck G, Lundstrom M. Bandstructure effects in ballistic nanoscale MOSFETs. IEDM Digest, 2004
- [5] Yang F L, Lee D H, Hu C, et al. 5nm-gate nanowire FinFET. Symp VLSI Technology, 2004: 196
- [6] Ma Yutao, Li Zhijian, Liu Litian, et al. Effective density-of-states approach to QM correction in MOS structure. Solid-State Electron, 2000, 44(3): 401
- [7] <http://cms.mpi.univie.ac.at/VASP>
- [8] Guan Ximeng, Yu Zhiping. Supercell approach in tight-binding (TB) calculation of Si and Ge nanowire bandstructures. Chinese Physics Letters, 2005, 22(10): 2651
- [9] Laux S E, Kumar A, Fischetti M V. Analysis of quantum ballistic electron transport in ultrasmall silicon devices including space-charge and geometric effects. J Appl Phys, 2004, 95(10): 5545
- [10] Shao Xue, Yu Zhiping. Nanoscale FinFET simulation: a quasi-3D quantum mechanical model using NEGF. Solid-State Electron, 2005, 49(8): 1435

## Device Simulation of Nano-Scale MOSFETs Based on Bandstructure Calculation \*

Yu Zhiping<sup>†</sup> and Tian Lilin

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

**Abstract:** As the device channel length keeps shrunk from several tens nanometers to a few nanometers, it has been commonly agreed upon that the multi-gate structure (including FinFET) is an effective means for improving the device  $I_{on}/I_{off}$  ratio. For many years, the effects of quantum mechanics (QM) on the carrier distribution and transport in MOSFETs have been recognized and studied. When the cross-section of a channel is confined to an order of a few nanometers, a more fundamental issue in solid-state physics arises. That is, the dependence of bandstructure or electronic structure on the geometry of the material can no longer be ignored and has non-negligible effects on device characteristics. In this paper, the efficient calculation of bandstructure in the channel region using the first principles is discussed. The electrical characteristics of devices are obtained through the solution of Schrödinger equation with open boundary conditions, based on the carrier transport parameters (such as effective mass and mobility) from bandstructure calculation. The relationship between carrier mobilities and the crystal orientation is also studied, taking into consideration the stress effects on the bandstructure and scattering mechanisms.

**Key words:** MOSFET; bandstructure; nano-scale; device simulation

**EEACC:** 2560

**Article ID:** 0253-4177(2006)S0-0248-04

---

\* Project supported by the National High Technology Research and Development Plan of China

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: yuzhip@tsinghua.edu.cn

Received 28 December 2005, revised manuscript received 18 May 2006