

一种基于非平衡态格林函数的准三维 FinFET 模型*

邵 雪 余志平

(清华大学微电子学研究所, 北京 100084)

摘要: 提出了一种针对 FinFET 器件的准三维量子力学模型. 采用非平衡态格林函数方法计算器件中的弹道输运电流, 同时在器件垂直于沟道方向的横截面上求解二维的薛定谔方程来得到载流子的态密度分布, 最终实现与三维泊松方程的自洽求解. 模拟结果显示纳米尺度的 FinFET 器件具有良好的开关特性和亚阈值特性. 这个模型还能适用于量子线等其他三维结构的纳米器件.

关键词: 非平衡态格林函数; 量子力学效应; 超薄沟道; 三维; 数值模拟; FinFET

PACC: 7320D

中图分类号: TP4 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-4177(2005)06-1191-06

1 引言

从集成电路制造工艺发展的趋势来看, 双栅器件是在体硅 CMOS 器件基础上发展起来的能较好地解决短沟效应的一种结构, 但不易用目前广泛使用的硅平面工艺实现. 然而, 在双栅器件的基础之上加以改进而提出的三维 FinFET 或称为 trigate-FET 的器件结构则同时具有高性能和与平面工艺兼容的特点. 目前, 已经有很多文献报道了栅长小于 50nm 甚至 20nm 的 n 型 FinFET^[1] 和 p 型 FinFET 器件^[2,3].

在纳米尺度的双栅器件和 FinFET 器件中, 量子力学效应和弹道输运变得十分重要. 这些效应要求为纳米尺寸的 MOS 器件建立更加精确的量子力学模型, 建模需要考虑的问题: (1) 模拟具有超薄栅氧化层和沟道的 FinFET 器件需要考虑多维量子势阱的限制. (2) 超短的沟道长度使得沟道中的弹道输运和隧穿电流变得不可忽略. (3) 沟道中的反型层结构更加复杂, 经典的反型层近似不再适用. 除此之外, 一个具有严格物理意义的三维数值模型对建立量子力学修正的解析模型具有重要的指导意义. 但是现有的量子力学数值模型大多基于二维或者准二

维的薛定谔方程^[4], 在遇到 FinFET 这种需要在三个方向上同时考虑量子效应的器件显得无能为力. 而真正能够计算三维问题的模型则都基于经典理论或者量子势近似^[5], 并不能真正地求解量子力学方程. 因此针对 FinFET 结构来建立三维量子力学模型对研究纳米器件有着重要的意义.

针对 FinFET 器件结构, 通过将三维的薛定谔方程分离变量, 我们实现了准三维的量子力学模型. 在沿着沟道的方向上, 非平衡态格林函数 (NEGF, non-equilibrium Green's function) 理论提供了一种方法来求解开放边界条件下的薛定谔方程^[6-8], 而在垂直于器件沟道的截面上, 二维量子阱效应通过直接求解二维薛定谔方程来计算. 三维空间中的载流子密度则是通过沿沟道的一维非平衡态格林函数与截面上的二维薛定谔方程共同得到. 这种方法大大减少了数值计算的难度, 为建立实用的三维量子力学模型提供了可能. 利用牛顿迭代法将载流子浓度与三维的泊松方程进行自洽求解, 最终实现了这种为 FinFET 器件设计的准三维量子力学模型.

2 弹道输运的量子力学模型

模型的计算包含以下三个方面:

* 国家重点基础研究发展规划资助项目 (批准号: G200036502)

邵 雪 1978 年出生, 博士研究生, 从事纳米尺度半导体器件建模工作.

余志平 教授, 主要研究方向为集成电路 CAD, 半导体器件与纳电子结构物理与模型, 射频 CMOS 电路验证与设计软件开发.

2004-06-26 收到, 2005-01-12 定稿

©2005 中国电子学会

(1) 沿着器件沟道方向的一维非平衡态格林函数的求解;

(2) 垂直于沟道的截面上二维薛定谔方程的求解;

(3) 在实空间中三维泊松方程的求解.

整个模型是基于真实空间中正交的均匀网格而离散化的,参见图 1. 首先,写出三维稳态下的薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_x^*} \times \frac{\partial}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_y^*} \times \frac{\partial}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m_z^*} \times \frac{\partial}{\partial z^2} + qV(x, y, z) \right] \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (1)$$

在沿着沟道的 x 方向上应用 WKB 近似理论^[9],并将波函数分离变量成如下的形式.

$$\psi(x, y, z) = X(x) \psi(y, z) = A(x) e^{ik(x)x} \psi(y, z) \quad (2)$$

于是就得到了 yz 截面上的二维薛定谔方程的形式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_y^*} \times \frac{\partial}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m_z^*} \times \frac{\partial}{\partial z^2} + qV_x(y, z) \right] \psi_x(y, z) = E_{x,t} \psi_x(y, z) \quad (3)$$

其中 下标 x 代表了截面沿沟道的坐标 x , 而横向能量 $E_{x,t} = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x}$ 是截面处载流子在 yz 平面上的本征能量, E 是总能量. 计算截面哈密顿矩阵的特征值和特征向量就可求得二维薛定谔方程的本征能量和对应的波函数. 本文所描述的器件是在 Si 沟道

的四周包围了一圈 SiO_2 绝缘层,因此在这个方程中有效质量在两个不同的区域中也是不同的. 截面边界,也就是栅氧化层与环境界面处的波函数设置为零,属于第一类边界条件. 而绝缘层与硅沟道之间的界面处则采用了波函数连续与导数连续这个连续性条件. 同时为了考虑载流子各向异性的有效质量对器件特性的影响,这个模型对硅材料三组不同的能谷(图 2)分别计算并累加. 图 3 中则给出了截面上对应于最低的三个能级的电子云分布.

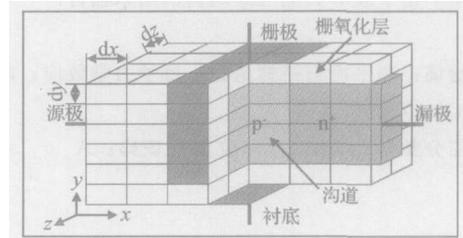


图 1 FinFET 器件结构以及离散网格示意图

Fig. 1 Schematic and mesh for the FinFET structure

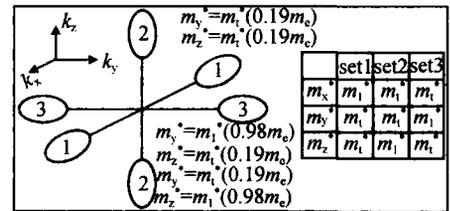


图 2 Si 材料在 k 空间中的能谷和有效质量示意图

Fig. 2 Valley and effective mass for silicon material in k space

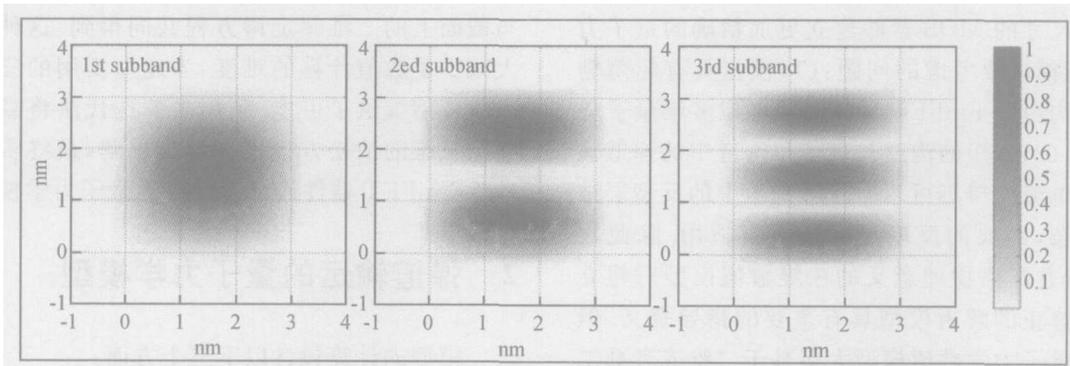


图 3 横坐标 $x=0$ 处的沟道截面上能谷 3 的最低的三个能级的电子态密度分布 器件的沟道截面为 $3\text{nm} \times 3\text{nm}$ 的正方形, $V_G = V_{DS} = 0$.

Fig. 3 Density of states in cross-section at $x=0$ for the lowest three subbands of valley set 3 The cross-section is $3\text{nm} \times 3\text{nm}$, $V_G = V_{DS} = 0$.

将每一个截面上求解得到的横向能量在 x 方向上连接起来就得到了载流子在 x 方向上的一维的势能分布. 因此沟道方向上的一维薛定谔方程为

$$HX(x) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_x^*} \times \frac{\partial^2}{\partial x^2} + E_t(x) \right] X(x) = EX(x) \tag{4}$$

这是一个开放边界条件的问题, 可以用非平衡态格林函数的办法来求解. 其中 E_t 是由各截面 $E_{x,i}$ 连接得到的势能曲线, 写成 x 的函数形式 $E_t(x)$. 在开放边界条件的情况下, 应用 NEGF 方法求解系统的密度矩阵, 避免了求解开放系统哈密顿量的解特征值与特征能量, 转而利用自能矩阵来计算开放边界条件对系统的影响^[7].

格林函数的表达式可以写成如下的形式:

$$G(E) = [EI - H - J^{-1}]^{-1} \tag{5}$$

这里 $G(E)$ 是系统的自能函数, 在不考虑散射机制的情况下(弹道输运)很容易进行计算^[8]. 系统中能量为 E 的载流子所对应的密度矩阵为

$$\rho(E) = \frac{1}{i\hbar} [F(\mu_s - E)A_s + F(\mu_b - E)A_D] \tag{6}$$

其中 $A_s = G[i(\mu_s - E)G^+]$, $A_D = G[i(\mu_D - E)G^+]$, 而 $F(\mu - E)$ 是费米分布函数, 代表能量为 E 的载流子态密度. 将这个密度矩阵在能量 E 上积分就得到了系统的密度矩阵. 而密度矩阵的对角线值就是沿沟道方向一维的载流子密度. 沟道中的输运电流的表达式为:

$$I = \frac{2q}{h} \int [F(\mu_s - E) - F(\mu_b - E)] \text{Trace}(A_s A_D) dE = \frac{2q}{h} \int [F(\mu_s - E) - F(\mu_b - E)] \text{Trace}(A_D A_s) dE \tag{7}$$

通过将沿沟道方向的一维密度与每个截面上相应子带的本征波函数相乘并累加可以得到载流子在三维实空间中的密度分布. 最后将载流子密度代入泊松方程实现与三维泊松方程的自治求解, 从而完成整个模型计算.

泊松方程的求解过程中, 边界条件设置如下:

(1) 在有栅电极接触的边界处, 应用第一类边界条件, 也就是说电势是固定的已知值.

(2) 在沟道两端的源漏接触区, 应用第二类边界条件. 这里没有给出确定的电势, 但是在求解格林函数的过程中我们设置源漏区的态密度分布与边界满足热平衡条件. 这也就保证了我们在源漏边界处加了所希望的电压. 而泊松方程的第二类边界条件保

证这个过程是自治的.

(3) 在其他没有电极接触的边界处, 应用第二类边界条件. 也就是说边界上的电势梯度的法向分量为零. 电势可以浮动到满足电中性条件的任意值^[10].

最后整个求解过程可以总结为:

初值(电势) 截面薛定谔方程(横向能量) 沟道一维 NEGF 方法(载流子浓度) 泊松方程(电势) 截面薛定谔方程(横向能量) 收敛(电势, 载流子浓度, 电流)

3 模拟结果

本节给出了 FinFET 器件的一些模拟结果, 并对这些结果进行了分析. 首先图 4 给出了几种不同尺寸下器件的 $I_{DS} - V_G$ 曲线, 器件的沟道截面分别为 $3\text{nm} \times 3\text{nm}$ 和 $2\text{nm} \times 2\text{nm}$ 的正方形, 栅长分别为 $5, 7.5$ 和 10nm , 栅氧厚度均为 1nm , 源漏电压 $V_{DS} = 0.7\text{V}$. 模拟结果显示沟道较细的 FinFET 结构具有

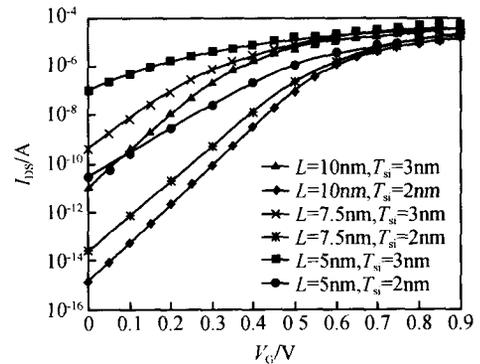


图 4 $3\text{nm} \times 3\text{nm}$ 与 $2\text{nm} \times 2\text{nm}$ 截面的 FinFET 器件的漏极电流与栅极电压的曲线关系. 器件的栅氧化层厚度均为 1nm , 栅长分别为 $10, 7.5$ 和 5nm , 栅极功函数为 4.05eV , 源漏电压 $V_{DS} = 0.7\text{V}$.

Fig. 4 $I_{DS} - V_G$ curves for FinFET of $3\text{nm} \times 3\text{nm}$ and $2\text{nm} \times 2\text{nm}$. The oxide thickness is 1nm , the gate length is $10, 7.5$ and 5nm , and gate work function is 4.05eV for all the devices. $V_{DS} = 0.7\text{V}$.

更高的阈值电压, 这一结果表明截面上二维量子阱对载流子能级的影响. 图 5 中我们用一种近似的方法估算了双栅器件以及 FinFET 器件的栅压控制能力, 器件和模拟的条件与图 4 中的器件相同. 图中给出了器件中沿沟道方向上势垒最高点电势随着栅电压的变化比率. 这一比率越大也就说明沟道势垒随

着栅压的变化越大,意味着栅极对沟道的开启和关断的控制能力越强.结果显示 FinFET 结构相对于双栅器件的优势十分明显,更细的沟道也能够得到更高的栅控制能力.相同的沟道截面下,随着栅长的减小,DIBL 效应的增大使得这一比率略有下降.

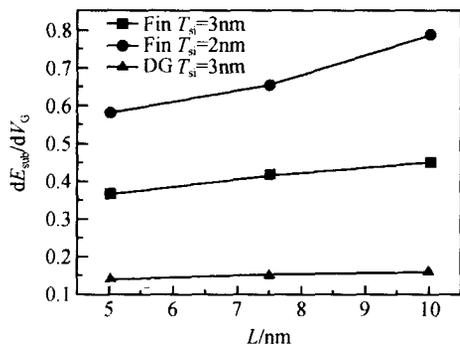


图 5 沟道中最低子带的势垒高度随栅压的变化率. 器件参数与图 4 相同, $V_{DS} = 0.7V$.

Fig. 5 Ratio of potential barrier peak and gate bias vs. gate length curves for FinFETs and DG MOSFETs. $V_{DS} = 0.7V$.

图 6 给出了 10nm 栅长的 FinFET 在不同栅压下的一组输出特性曲线. 沟道截面为 $3nm \times 3nm$, 栅压从 0.3V 开始以 0.2V 为步长模拟至 0.9V. 对于有效栅长为 10nm 的 FinFET 器件来说, 模拟结果仍然有着很好的饱和特性和亚阈值区特性, 与实验结果^[3,11] 没有很好地吻合. 这可以从两个方面来分析: (1) 源漏区的掺杂扩散对有效栅长的影响. 模拟中并未考虑源漏区的掺杂扩散, 而直接采用了突变结, 而实际的器件中这种横向扩散是不可避免的.

当沟道长度达到纳米尺度时, 这种有效栅长的减少对器件的影响也会更加明显. (2) 实验中较厚的 FinFET 沟道减弱了栅电压对沟道势垒的控制, 导致了器件亚阈值区特性的下降. 因此模拟结果是合理的.

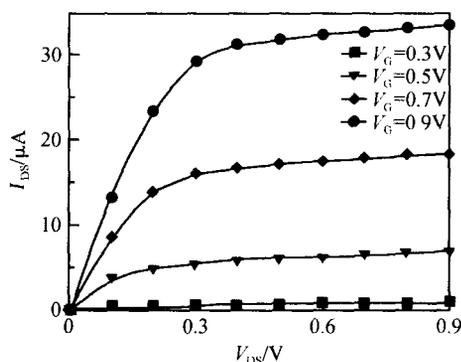


图 6 10nm 栅长的 FinFET 器件的输出特性曲线. 沟道截面 $3nm \times 3nm$, 栅氧厚度 1nm.

Fig. 6 $I-V$ curve for FinFET of gate length 10nm with channel cross-section $3nm \times 3nm$. The thickness of the gate oxide is 1nm.

图 7 中我们将 $3nm \times 3nm$ 及 $2nm \times 2nm$ 的 FinFET 器件与二维量子力学模型的模拟结果 (NANOMOS 2.0, 美国 Purdue 大学)^[12] 进行了一些比较. 双栅器件的沟道厚度为 3nm, 栅氧厚度 1nm, 栅极材料的功函数与 FinFET 器件均为 4.05eV. 结果显示 FinFET 器件能够提供比相同厚度的双栅器件更好的器件特性, 它的开/关电流比相对双栅器件来说要高得多. 随着沟道截面的缩小, 双栅器件性能严重下降, 而 FinFET 则仍然工作得较

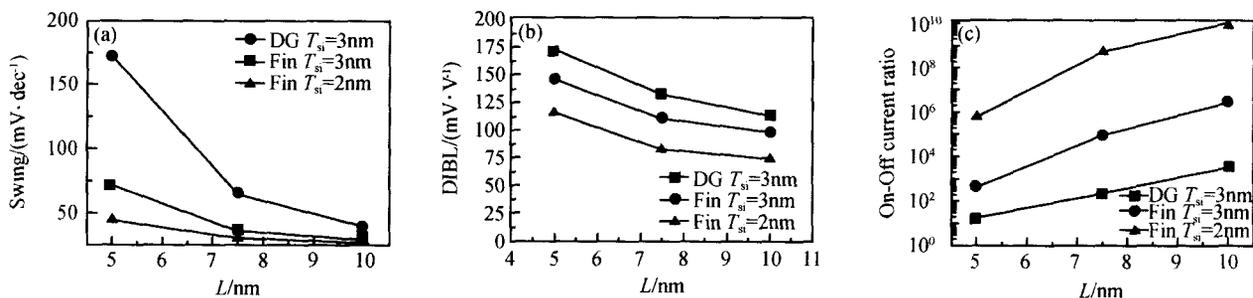


图 7 不同栅长器件特性曲线 (a) 亚阈值区特性; (b) 漏场感应势垒降低效应; (c) 开关电流比. $V_{DS} = 0.7V$, 开(关)电流被定义为 $V_G = 0.9V/0.0V$ 时的漏极电流.

Fig. 7 Device characteristics versus gate length curves for FinFETs and DG MOSFETs (a) Swing; (b) DIBL; (c) On-off current ratio. $V_{DS} = 0.7V$, the On(Off) current is defined to be the drain current when $V_G = 0.9V(0.0V)$.

好.从器件的亚阈值区特性上来看,随着栅长的减少,器件的性能均迅速下降.考虑量子力学效应所带来的隧穿电流,这一结果的原因是在短沟器件中,通过沟道的电流由两部分组成:由能量高于势垒的载流子所构成的漂移扩散电流和能量低于沟道势垒的载流子直接穿透势垒所形成的量子隧穿电流.随着

沟道长度的减少,隧穿电流急剧地增大,变得不可忽略.因此器件变得更加难以关断,关断电流增大.同时 DIBL 效应也变得严重.随着沟道长度的减少,FinFET 器件更好的栅控能力相对于双栅器件显示出更大的优势.表 1 将近年来一些 10nm 以下器件的试验数据与本文的模拟结果进行了比较.

表 1 10nm 以下的 FinFETs 实验数据与模拟结果比较

Table 1 Comparison between experiment data and simulation result of sub 10nm FinFETs

	B. Yu IEDM 2002		B. Doris IEDM 2002		B. Doris IEDM 2003	Fuliang Yang VLSI Symposium 2004		本文
栅长/ nm	10		8		6	5 (p 型), 10(n 型)		5 ~ 10
结构	Double Gate		Planar SOI		Planar SOI	Nanowire FinFET		FinFET
V_{dd}/ V	1.2		1.2		1.2	1		1
栅氧厚度/ nm	1.7		1.2		1.2	1.9		1.0
类型	n 型	p 型	n 型	p 型	p 型	n 型	p 型	n 型
开态电流/ ($\mu A \cdot \mu m^{-1}$)	446	356	260 *	240 *	80 *	522	115	2500
关态电流/ ($nA \cdot \mu m^{-1}$)	$1.5 \times 10^5 *$	$2.0 \times 10^5 *$	300 *	300 *	4,000 *	10	0.5	25
开关电流比	3 *	1.8 *	867 *	800 *	20 *	5.2×10^4	2.3×10^5	1.0×10^5
亚阈值特性/ ($mV \cdot dec^{-1}$)	125	101	90	80		75	63	25
DIBL/ ($mV \cdot V^{-1}$)	71	120				80	14	110

4 结论

通过这些结果的比较,我们得出结论:尽管制造的工艺难度更高,FinFET 器件比双栅器件在尺寸按比例缩小方面具有更大的潜力.由于沟道长度减少所带来的短沟效应以及隧穿电流的增加可以通过减小沟道的厚度来加以抑制.同时模拟结果显示:二维量子阱效应对器件特性的影响很大,不能简单地采用二维器件模型来进行近似.

致谢 特别感谢清华大学微电子学研究所的王燕老师在本文完成过程中所给予的帮助.

参考文献

[1] Hisamoto D, Lee W C. FinFET ——A self-aligned double-gate MOSFET scalable to 20nm. IEEE Trans Electron Devices, 2000, 27(12) :2320
 [2] Huang X, Lee W C, Kuo C, et al. Sub 50-nm FinFET: PMOS. IEDM Tech Dig, 1999: 67

[3] Choi Y K, Lindert N, Xuan P, et al. Sub-20nm CMOS FinFET technologies. IEDM Technical Digest, 2001 :421
 [4] Rahman A, Guo Jing, Datta S. Theory of ballistic nanotransistors. IEEE Trans Electron Devices, 2003, 50(9) :1853
 [5] Ancona M G. Macroscopic description of quantum mechanical tunneling. Phys Rev, 1990, B42(2) :1222
 [6] Lake R K, Datta S. The non-equilibrium Green 's function method applied to double barrier resonant tunneling diodes. Phys Rev B, 1992, 45 :6670
 [7] Datta S. Nanoscale device modeling: the Green 's function method. Super Lattices and Microstructures, 2000, 28 :253
 [8] Datta S. Electronic transport in mesoscopic system. Cambridge: Cambridge University Press, 1995 :151
 [9] Natori K. Ballistic metal-oxide-semiconductor field effect transistor. J Appl Phys, 1994, 76(8) :4879
 [10] Brown G W, Lindsay B W. The numerical solution of Poisson 's equation for two-dimensional semiconductor devices. Solid State Electron, 1976: 991
 [11] Yu Bin, Chang L, Ahmed S, et al. FinFET scaling to 10nm gate length. IEDM Tech. Digest, 2002 :251
 [12] Ren Zhibin. Nanoscale MOSFETs: Physics, simulation, and design. PhD Thesis, Purdue University, West Lafayette, IN, 2001 :55

A Quasi-3D Model for a FinFET Device Based on the NEGF Method^{*}

Shao Xue and Yu Zhiping

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

Abstract : A quasi-3D model for a FinFET device is proposed, this model is based on the non-equilibrium Green's function (NEGF) method along the channel and the 2D Schrödinger equation in the cross-sections of the channel. With the 3D Poisson's equation solved self-consistently, the model provides the possibility of numerical simulation for FinFETs and nanowires, which are similar to FinFET in structure. Simulation results show that the nano-scaled FinFET has excellent switching and subthreshold characteristics.

Key words : NEGF; quantum effects; ultra-thin channel; 3D; numerical simulation; FinFET

PACC : 7320D

Article ID : 0253-4177(2005)06-1191-06

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. G200036502)

Shao Xue was born in 1978, PhD candidate. His research focuses on modeling of nanoscale semiconductor devices.

Yu Zhiping professor, a senior member of IEEE. His research interests include IC CAD, device physics and modeling for micro- and nano-electronic structures, and development of verification and design software for silicon CMOS RF circuits.

Received 26 June 2004, revised manuscript received 12 January 2005

©2005 Chinese Institute of Electronics