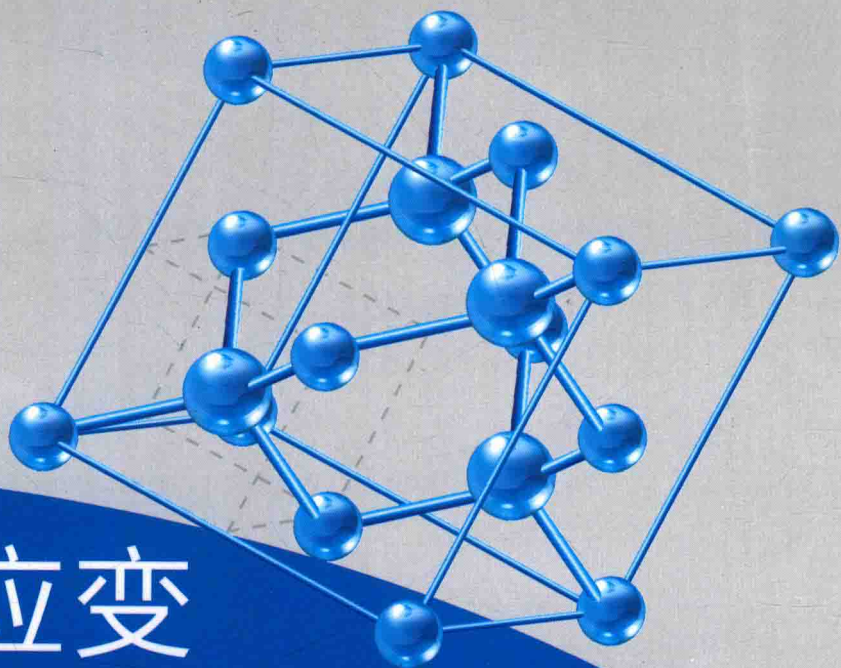


西安电子科技大学研究生精品教材建设项目



# 硅基应变 半导体物理

宋建军 杨 雯 赵新燕 著

非  
外  
借



西安电子科技大学出版社  
<http://www.xduph.com>

内容简介

西安电子科技大学研究生精品教材建设项目

# 硅基应变半导体物理

宋建军 杨 雯 赵新燕 著



西安电子科技大学出版社

## 内 容 简 介

本书共 6 章, 主要介绍了硅基应变半导体物理的相关内容, 重点讨论了如何建立硅基应变材料能带结构与载流子迁移率模型, 并分析了应变对硅基应变材料能带结构与载流子迁移率的影响。通过本书的学习, 可为读者以后学习应变器件物理奠定重要的理论基础。

本书可作为高等院校微电子学与固体电子学专业研究生的参考书, 也可供其他相关专业的学生参考。

## 图书在版编目(CIP)数据

硅基应变半导体物理/宋建军, 杨雯, 赵新燕著. —西安: 西安电子科技大学出版社, 2019. 4

ISBN 978 - 7 - 5606 - 5294 - 8

I. ① 硅… II. ① 宋… ② 杨… ③ 赵… III. ① 硅基材料—半导体物理学—研究 IV. ① O47

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 060122 号

策划编辑 戚文艳

责任编辑 王 瑛

出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路 2 号)

电 话 (029)88242885 88201467 邮 编 710071

网 址 www.xduph.com 电子邮箱 xdupfxb001@163.com

经 销 新华书店

印刷单位 陕西天意印务有限责任公司

版 次 2019 年 5 月第 1 版 2019 年 5 月第 1 次印刷

开 本 787 毫米×1092 毫米 1/16 印张 8.75

字 数 201 千字

印 数 1~3000 册

定 价 23.00 元

ISBN 978 - 7 - 5606 - 5294 - 8/O

**XDUP 5596001 - 1**

\*\*\* 如有印装问题可调换 \*\*\*

# 前 言

微电子技术面临物理与工艺极限的挑战,在传统 Si 工艺技术基础上,为了延续摩尔定律,需要理论与技术的创新。硅基( $\text{Si}$ 、 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ )应变材料迁移率高、能带结构可调,且其应用与 Si 工艺兼容,在高速/高性能器件和电路中应用广泛。

能带结构与载流子迁移率是深入研究硅基应变材料基本属性、发展高速/高性能器件和电路的重要理论基础。本书重点讨论如何建立硅基应变材料能带结构与载流子迁移率模型,并分析、讨论应变对硅基应变材料能带结构与载流子迁移率的影响。

本书主要面向微电子学与固体电子学专业学生,介绍硅基应变半导体物理的相关内容,具有深入、系统、全面三个特点。

全书共 6 章,各章具体内容如下:

第 1 章简要介绍 MOS 器件应力引入方法,以及应变材料的临界厚度和应变测定方法。

第 2 章基于薛定谔方程,在建立应变张量模型和势能算符的基础上,采用  $k \cdot p$  微扰法,建立硅基双轴应变材料导带底、价带顶  $E-k$  关系。

第 3 章建立硅基双轴应变材料基本物理参数模型,包括导带能谷能级,重空穴带、轻空穴带、旋轨劈裂带  $\Gamma$  点处能级,任意  $k$  矢方向的能量分布及空穴有效质量,导带底和价带顶的态密度有效质量、有效状态密度及本征载流子浓度模型。

第 4 章基于硅基双轴应变材料基本物理参数模型,探讨利用 CASTEP 软件分析应变 Si 能带结构的方法,并将所得结果与  $k \cdot p$  理论分析结果进行比对。

第 5 章建立 Ge 组分( $x$ )与应力转化模型,直接利用应力研究硅基应变材料能带结构等基本物理特性,拓宽模型的应用范围。

第 6 章基于费米黄金法则及玻尔兹曼方程碰撞项近似理论,推导建立硅基双轴应变材料载流子散射概率与应力及能量的理论关系模型,并进一步建立硅基双轴应变材料载流子迁移率与应力的理论模型。

本书的编写及出版得到了很多老师、学生以及西安电子科技大学出版社戚文艳编辑的大力协助,在此一并深表谢意。

由于作者水平有限,书中难免有疏漏之处,殷切希望各位专家、同行和读者批评指正。

宋建军

2019 年 2 月

# 目 录

第 1 章 应变实现方法 .....	1
1.1 应力引入方法 .....	1
1.1.1 通过机械力引入应力 .....	1
1.1.2 全局应变引入应力 .....	2
1.1.3 源/漏(S/D)植入引入应力 .....	2
1.1.4 SiN 帽层引入应力 .....	3
1.1.5 应力释放引入应力 .....	3
1.1.6 应力记忆引入应力 .....	4
1.1.7 Ge 预非晶化引入应力 .....	4
1.2 临界厚度及应变测定方法 .....	4
1.2.1 临界厚度 .....	4
1.2.2 应变测定方法 .....	6
1.3 本章小结 .....	8
习题 .....	8
第 2 章 硅基应变材料能带 $E-k$ 关系 .....	9
2.1 应变张量模型 .....	9
2.1.1 应变张量通解 .....	9
2.1.2 (001)、(111)、(101)面应变张量 .....	12
2.2 硅基应变材料赝晶结构模型 .....	15
2.3 形变势模型 .....	18
2.4 定态微扰理论 .....	19
2.4.1 能级非简并情况 .....	20
2.4.2 能级简并情况 .....	21
2.5 硅基应变材料导带 $E-k$ 关系 .....	22
2.6 硅基应变材料价带 $E-k$ 关系 .....	25
2.6.1 弛豫 Si 价带 $E-k$ 关系 .....	25
2.6.2 硅基应变材料价带 $E-k$ 关系 .....	31
2.7 本章小结 .....	38
习题 .....	38

第 3 章 硅基应变材料基本物理参数模型 .....	39
3.1 硅基应变材料导带结构模型 .....	39
3.1.1 硅基应变材料导带能谷简并度 .....	39
3.1.2 硅基应变材料导带能谷能级 .....	40
3.2 硅基应变材料价带结构模型 .....	42
3.2.1 硅基应变材料价带 $\Gamma$ 点处能级 .....	42
3.2.2 应变 Si 价带结构 .....	45
3.3 硅基应变材料空穴有效质量 .....	48
3.3.1 硅基应变材料空穴各向异性有效质量 .....	48
3.3.2 硅基应变材料空穴各向同性有效质量 .....	69
3.4 硅基应变材料态密度 .....	73
3.4.1 硅基应变材料导带底附近态密度 .....	73
3.4.2 硅基应变材料价带顶附近态密度 .....	76
3.5 硅基应变材料有效状态密度及本征载流子浓度 .....	78
3.6 本章小结 .....	84
习题 .....	84
第 4 章 基于 CASTEP 的应变 Si 能带结构分析 .....	85
4.1 CASTEP 软件的主要理论 .....	85
4.1.1 密度泛函理论(DFT) .....	85
4.1.2 赝势 .....	88
4.1.3 分子轨道的自洽求解 .....	89
4.1.4 CASTEP 软件的几项关键技术 .....	90
4.2 基于 CASTEP 的应变 Si 能带结构分析 .....	90
4.2.1 能带分析选项卡的设定 .....	90
4.2.2 能带分析结果 .....	93
4.3 结果分析与讨论 .....	98
4.3.1 (001)应变 Si 带边分析 .....	98
4.3.2 (101)应变 Si 带边分析 .....	101
4.3.3 (111)应变 Si 带边分析 .....	104
4.4 本章小结 .....	106
习题 .....	106
第 5 章 Ge 组分( $x$ )与应力转化模型 .....	107
5.1 转化原理及模型 .....	107
5.2 (101)面双轴应力与 Ge 组分的关系 .....	112
5.3 结果分析与讨论 .....	113

5.4 本章小结 .....	114
习题 .....	114
<b>第 6 章 硅基应变材料载流子散射机制与迁移率</b> .....	<b>115</b>
6.1 费米黄金法则 .....	115
6.2 跃迁概率及散射概率模型 .....	119
6.3 载流子迁移率模型 .....	128
6.4 本章小结 .....	129
习题 .....	129
<b>参考文献</b> .....	<b>130</b>

# 第1章 应变实现方法

半导体材料所受应力可以分为单轴应力、双轴应力和三维应力。三维应力可使半导体材料能级发生移动；单轴应力和双轴应力可使半导体能带结构发生分裂，从而提高载流子迁移率。单轴应变是指半导体材料在一维方向上发生的应变；双轴应变是指半导体材料在二维方向上发生的应变。应变可分为张应变和压应变，前者是使晶格常数增大的应变，后者是使晶格常数减小的应变。

应力是使半导体材料发生应变的原因。合理的应力引入是获得高载流子迁移率应变材料的关键技术。本章简要介绍7种MOS器件应力引入方法，以及应变材料的临界厚度和应变测定方法。

## 1.1 应力引入方法

应力引入方法主要有通过机械力引入应力、全局应变引入应力、源/漏(S/D)植入引入应力、SiN帽层引入应力、应力释放引入应力、应力记忆引入应力、Ge预非晶化引入应力等。

### 1.1.1 通过机械力引入应力

在MOS器件中引入应力，最简单的方法就是在Si圆片上直接施加一个机械力，使圆片产生形变，如图1.1所示。

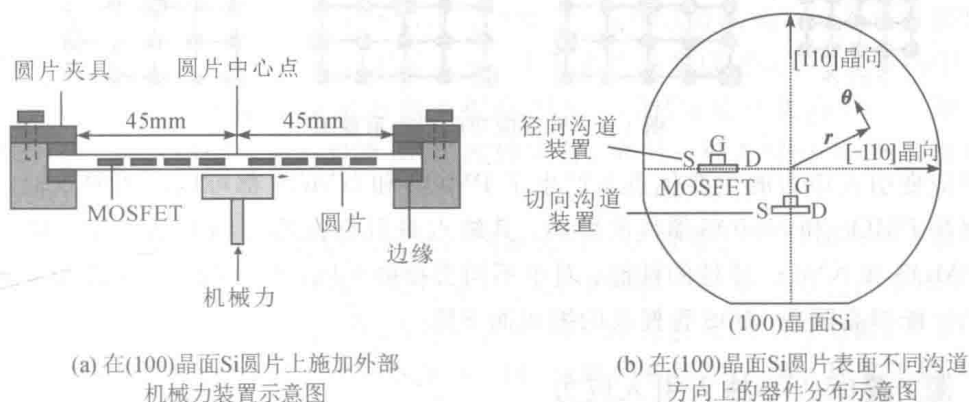


图 1.1 通过机械力引入应力示意图

圆片表面各点受到的应力的类型和大小都随着该点到圆片中心点的距离变化而变化。例如，圆片中心点在应力作用下产生 0.9 mm 的位移时，圆片表面其他各点产生的应变情况如图 1.2 所示。可以看到，圆片表面各点产生的应变可以分解为切向（即切线方向）和径向（即通过轴心线方向）两个方向。切向的应变始终是张应变，从中心到边缘逐渐减小；径



方向的应变从中心到边缘由张应变逐渐变为压应变。由此，可以在圆片上进行合理的器件布局，见图 1.1(b)。

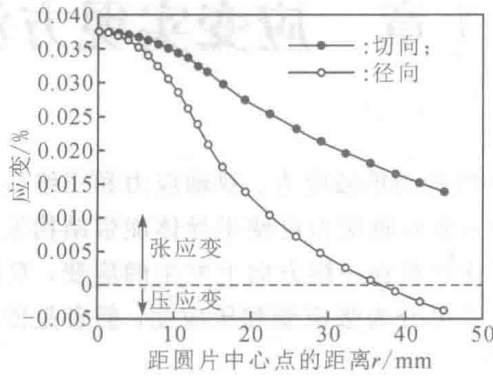


图 1.2 圆片表面各点产生的应变

### 1.1.2 全局应变引入应力

全局应变引入应力是指在弛豫  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  缓冲层上外延生长 Si 应变薄层，或者在 Si 衬底上外延生长  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  应变薄层。利用 Si 和  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  的晶格失配，在  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  上外延生长的 Si 层会受到双轴张应力的作用，而在 Si 上外延生长的  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  层会受到双轴压应力的作用，如图 1.3 所示。

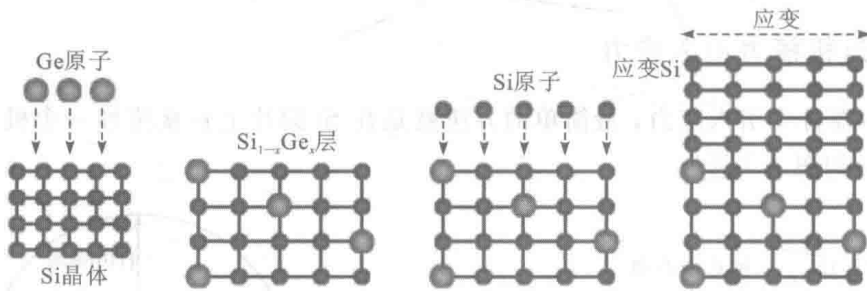


图 1.3 Si 层应变的产生示意图

全局应变引入应力的主要优点是产生了 PMOS 和 NMOS 都可以应用的双轴应力，并能同时提高 PMOS 和 NMOS 器件的性能。其缺点是只有在低电场和高应变的情况下，才能提高 PMOS 和 NMOS 器件的性能；对于不同类型的衬底，所有的工艺步骤都要调整；应变产生的性能提高随着 MOS 管栅长的缩短而下降。

### 1.1.3 源/漏(S/D)植入引入应力

源/漏(S/D)植入引入应力是指在 PMOS 器件的 S/D 区分别进行  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  生长，而在 NMOS 器件的 S/D 区分别进行  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$  生长。由于  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  的晶格常数大于 Si 的晶格常数，因此在沟道中引入压应力；而  $\text{Si}_{1-x}\text{C}_x$  的晶格常数小于 Si 的晶格常数，因此在沟道中产生张应力。用这种方法引入的应力都是单轴应力。

众所周知，CMOS 电路的性能在很大程度上受 PMOS 的制约，因此，任何方法如果能

够把 PMOS 的性能提高到 NMOS 的水平,都被认为是有利的。相对于标准 PMOS 器件,采用源/漏植入  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  方法(见图 1.4),在短沟道器件中产生的应力可达 900 MPa,电流可提高 60%~90%。

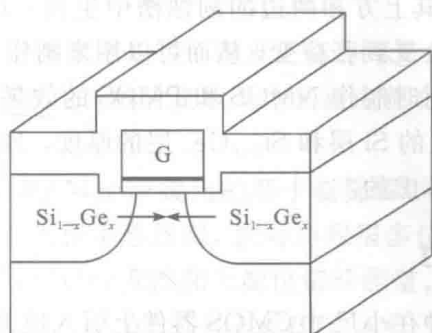


图 1.4 源/漏植入  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  PMOS 结构

#### 1.1.4 SiN 帽层引入应力

SiN 帽层引入应力是指通过在器件源/漏端淀积不同结构的 SiN 帽层,将张应力和压应力分别引入到 NMOS 和 PMOS 沟道中,如图 1.5 所示。

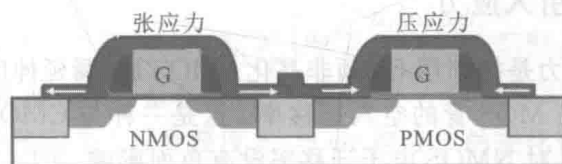


图 1.5 采用 SiN 帽层引入应力示意图

这种双应力线结构在 Si 沟道中产生纵向(即沿晶体管断面的垂直方向)单轴张应力和压应力,可同时提高 N 沟道和 P 沟道晶体管的性能。利用该方法制作的器件性能可以和采用源/漏植入引入应力的情况相比,但减少了工艺复杂性和集成问题。与未采用引入应力的情况相比,双应力线方法使得 NMOS 电流提高 11%,PMOS 电流提高 20%。如果采用一种应力线方法,则只能使一种类型的 MOS 性能提高,而另一种类型的 MOS 性能或者降低或者没有提高。

目前, SiN 帽层应力引入类型控制理论的研究和工艺控制技术的研究尚不清楚。由于该生长工艺的多样性,目前还没有一种理论能够解释所有 SiN 薄膜应力产生的具体原因。但有文献报道, SiN 薄膜中 H 组分的含量是控制 SiN 应力引入类型的关键。然而,对此的理论计算研究报道还尚未发现。因此,从  $\text{SiNH}_x$  材料结构设计入手,计算不同 H 组分下  $\text{SiNH}_x$  的晶格常数,并与硅的晶格常数进行比对,以期获得不同 H 组分下应力的类型,然后进行键能相关的动力学和热力学计算,并配合一些材料现代分析手段,结合目前已报道的一些工艺技术参数,优化出所需的  $\text{SiNH}_x$  材料的生长工艺,可能会是该类研究的一个突破口。

#### 1.1.5 应力释放引入应力

应力释放引入应力是一种在 CMOS 器件中引入应力的新方法。以  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  上形成张应

变 Si 为例，其原理是：在 Si 衬底上生长的  $Si_{1-x}Ge_x$  层由于受其下层 Si 的应力作用，会在  $Si_{1-x}Ge_x$  层中产生一个压应力，为了使在  $Si_{1-x}Ge_x$  层上方的 Si 沟道中能够产生张应力，可以先把两边的  $Si_{1-x}Ge_x$  层刻蚀掉一部分，这样  $Si_{1-x}Ge_x$  层在横向(即沿晶体管断面的水平方向)就会变成弛豫的；然后在其上方和两边的刻蚀槽中生长一层 Si，这样 Si 层由于受其下方弛豫  $Si_{1-x}Ge_x$  层的作用就会受到张应变，从而可以用来制作 NMOS 器件。这种方法也可以实现在相同的材料结构上同时制作 NMOS 和 PMOS 的效果。采用应力释放引入应力的方法时，在工艺上需选择合适的 Si 层和  $Si_{1-x}Ge_x$  层的厚度，另外小尺寸下的刻蚀方法和选择合适的退火温度也是需要考虑的。

### 1.1.6 应力记忆引入应力

应力记忆引入应力是一种在小尺寸 CMOS 器件上引入应力的方法，它通过淀积再牺牲 SiN 薄膜来引入应力。该方法的主要工艺过程是在 MOS 器件上先生长一层无定型 Si，然后在这层 Si 上面淀积张应力或压应力的 SiN 薄膜，这层 SiN 薄膜会对下面的无定型 Si 产生张应力或者压应力。当刻蚀掉 SiN 薄膜后，无定型的 Si 层由于分子的重新排列会对薄膜的压力产生一个记忆效果，从而继续对其下的 MOS 沟道层产生应力。这种方法在制作工艺上需考虑如何淀积无定型 Si，以及如何获取能够产生张应力和压应力的 SiN 薄膜。

### 1.1.7 Ge 预非晶化引入应力

Ge 预非晶化引入应力是指利用 Ge 预非晶化 PMOS 源/漏延伸区对 Si 沟道诱生一个大的压应力，从而显著提高 MOS 管的空穴迁移率。这是一种与 CMOS 非常兼容的方法，而且不需要增加光刻掩膜，对 NMOS 电子迁移率没有负面影响。图 1.6 所示为 Ge 预非晶化 S/D 延伸区对沟道诱生单轴压应力的 PMOS 器件结构剖面示意图。

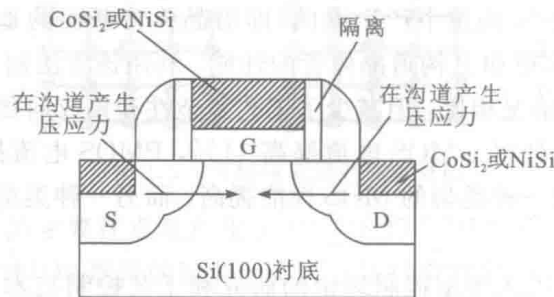


图 1.6 Ge 预非晶化引入应力示意图

## 1.2 临界厚度及应变测定方法

### 1.2.1 临界厚度

无论是生长在弛豫  $Si_{1-x}Ge_x$  上的 Si 还是生长在弛豫 Si 上的  $Si_{1-x}Ge_x$ ，其引入应力的方

法都是利用晶格失配来实现的,此时生长的 Si 层或者  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  层称为外延层。应力的存在使得晶格处于一种不稳定的状态,当晶格形变不足以补偿不断积累的应变弹性能量时,通过在某些点上的位错结核来释放应变能量,恢复它原有的立方晶格常数,此时的外延层厚度称为临界厚度  $h_c$ 。

硅基应变材料的优异特性来源于应变,因此,临界厚度的确定是十分重要的。据文献报道,应变层的临界厚度与 Ge 组分的含量以及生长温度都有密切的关系。目前,有两种较为流行的临界厚度计算模型。

一种是由 Frank 和 Ver der Merwe 提出的基于能量最小原则的计算模型。由于应变层与衬底的晶格失配,界面会产生很多悬挂键,同时出现很多位错缺陷,因此,该理论认为外延层总能量由两部分组成:外延层应变能和失配位错的能量。其临界厚度表达式为

$$h_c = \frac{b^2(1-\nu\cos^2B)}{8\pi(1+\nu)b_1f_m} \ln \frac{\rho_c h_c}{q} \quad (1-1)$$

其中:  $b_1 = -b\sin A \times \sin B$ ,  $A$  为滑移面与正常面的夹角,  $B$  为伯格矢量与位错线间的夹角;  $b$  为滑移间距;  $f_m$  为失配系数;  $\nu$  为泊松比;  $q$  为位错半径;  $\rho_c$  为位错中心系数。

另一种是由 Matthews 和 Blakeslee 提出的基于力平衡理论的计算模型。该理论认为线位错可通过基底外延层结构穿过界面,移动并产生失配位错。据此,他们得出了如下的临界厚度计算公式:

$$h_c = \frac{1}{8\pi(1+\nu)b_1f_m} \left( a_0 + \frac{a_1 \ln 2 \rho_c h_c}{q} - a_2 \right) \quad (1-2)$$

式中,  $a_0$ 、 $a_1$ 、 $a_2$  为伯格矢量分量系数。

图 1.7 给出了理论和实验上临界厚度  $h_c$  与 Ge 组分  $x$  的变化情况。当  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  层厚度小于 Matthews-Blakeslee 理论值时,  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  薄膜具有很好的单晶质量(赝晶结构),并具有很好的稳定性;当  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  层厚度增加但仍小于图中虚线值时,  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  薄膜经过严格的非平衡生长过程可以形成很好的单晶结构,但是不具有很好的稳定性,比如热稳定性等;当  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  层厚度增加到图中虚线值以上时,  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  薄膜将不能形成很好的单晶结构,在生长过程中会发生弛豫现象,应变释放并在薄膜中产生大量缺陷。当然,图中的虚线是随不同生长设备、生长条件等多种因素的变化而变化的。

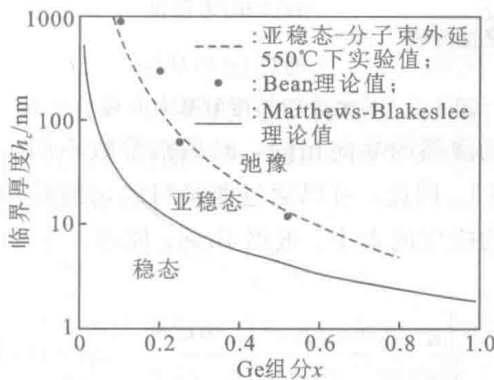


图 1.7 应变  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  临界厚度

### 1.2.2 应变测定方法

应变测定方法有 X 射线多晶衍射法、激光束偏转法和双折射法等。

#### 1. X 射线多晶衍射法

X 射线多晶衍射法是研究近完整晶体结构的有力工具，使用该方法对衬底双轴应变进行测定较为理想。下面以弛豫 Si 衬底生长应变  $Si_{1-x}Ge_x$  为例对其进行介绍。

单色 X 射线平面波在完整晶体中的 Bragg 衍射角非常窄，对垂直于工作平面的晶格应变非常敏锐，当晶格的应变超过  $10^{-5}$  时就可以检测到。X 射线多晶衍射法广泛应用于离子注入、外延单晶膜、超晶格以及其他一些近单晶样品的晶格完整度、晶格应变等方面的研究中。对于外延  $Si_{1-x}Ge_x$  薄膜，由于多晶衍射对晶格常数的微弱变化非常敏锐，即对  $Si_{1-x}Ge_x$  层的组分和应变变化很灵敏，而且多晶衍射是一种无损检测，因此 X 射线多晶衍射法是表征  $Si_{1-x}Ge_x$  /Si 及  $Si_{1-x}Ge_x$  多量子阱材料的重要手段。对硅基异质外延  $Si_{1-x}Ge_x$  薄膜的表征，实际上，通过对实验曲线的拟合，可同时获得薄膜组分、厚度、应变情况等多方面的信息。因此，X 射线多晶衍射法是表征  $Si_{1-x}Ge_x$  /Si 异质结构非常重要的手段。X 射线四晶衍射仪的单色性比一般的 X 射线双晶衍射仪有很大的提高，因而具有更高的角分辨率和更高的测量精度。

#### 1) X 射线四晶衍射基本原理

对于单晶 Si 衬底的异质外延，由于衬底材料和外延材料间的晶格失配，外延薄膜中必然存在一定的应变，而四晶衍射对该应变是非常敏感的。图 1.8 所示为 X 射线四晶衍射基本原理示意图。从 X 射线管中射出来的 X 射线，经两组单晶  $Ge[220]$  单色仪后，得到单色性、准直度很好的 X 射线。该射线以 Bragg 衍射角入射至样品表面，并在探测器中探测衍射信号。

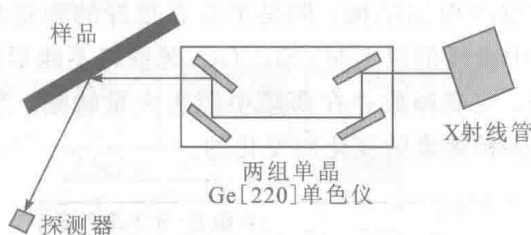


图 1.8 X 射线四晶衍射基本原理示意图

因为衬底的晶向与外延薄膜的晶向相同，但晶格常数不同，所以外延  $Si_{1-x}Ge_x$  薄膜与衬底 Si 的 Bragg 衍射角不同。因此，可以通过测量衬底衍射峰和表面  $Si_{1-x}Ge_x$  薄膜衍射峰的间距来推算薄膜中存在的应变的大小。根据 Bragg 原理，并考虑  $\Delta\theta$  绝对值很小，推算得到以下公式：

$$\epsilon = \frac{\delta d}{d_{Si}} = \frac{d_{Si_{1-x}Ge_x} \cdot \sin\theta_B - d_{Si}}{d_{Si}} = -\Delta\theta \cdot \cot\theta_B \tag{1-3}$$

式中： $\epsilon$  是垂直于样品测量时的工作平面的应变（注意是外延薄膜相对于衬底的应变）； $\delta d$  是工作平面间距的改变量； $d$  是测量时晶体的工作平面的间距； $\theta_B$  是工作平面的 Bragg 角； $\Delta\theta$

是衬底衍射峰与应变层 Bragg 衍射峰的间距(见图 1.9)。

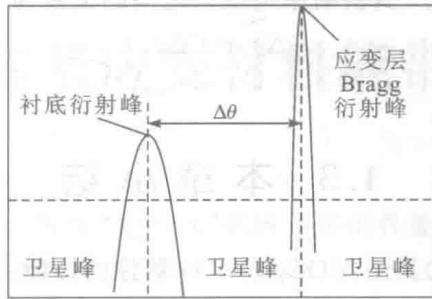


图 1.9 样品四晶衍射示意图

2)  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  薄膜应变状态的判断与应变率、应变释放率的定义

式(1-3)中定义的  $\epsilon$  是相对于衬底 Si 的晶格应变的,但实际上它不能反映  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  薄膜真实的应变状态,为此,定义  $\epsilon'$  为

$$\epsilon' = \frac{\delta d'}{d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}} = \frac{d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x, \perp} - d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}}{d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}} \quad (1-4)$$

将式(1-3)代入,得

$$\epsilon' = \frac{d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x, \perp} - d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}}{d_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}} = \frac{d_{\text{Si}}(1 - \Delta\theta \cdot \cot\theta_B)}{d_{\text{Si}} + x(d_{\text{Ge}} - d_{\text{Si}})} - 1 \quad (1-5)$$

式中,  $x$  为  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  层 Ge 的组分。

当  $\epsilon' > 0$  时,薄膜在生长方向上为张应变(单轴),而在生长平面内为压应变(双轴);反之,当  $\epsilon' < 0$  时,应变反向。

另外,还可以定义实际  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  薄膜的应变率  $S$  和应变释放率  $R$ :

$$S = \frac{\epsilon'}{\epsilon_{\max}} \times 100\% \quad (1-6)$$

$$R = 1 - S = \left(1 - \frac{\epsilon'}{\epsilon_{\max}}\right) \times 100\% \quad (1-7)$$

式中,  $\epsilon'_{\max}$  为最大应变变量。

## 2. 激光束偏转法

当半导体基片表面淀积或生长一定厚度的薄膜时,由于薄膜应力的存在将使半导体基片发生弯曲,而基片弯曲的大小直接与应力相关,弯曲方向不同,应力则表现为张应力或压应力。激光束偏转法就是用激光束测量基片弯曲的程度和方向,从而得到薄膜应力。薄膜应力与基片的曲率半径关系如下:

$$\sigma = \frac{E_s t_s^2}{6(1 - \nu_s) t_f} \left( \frac{1}{R_f} - \frac{1}{R_0} \right) \quad (1-8)$$

其中:  $E_s$  和  $\nu_s$  分别为衬底材料的杨氏模量和泊松比;  $t_s$  和  $t_f$  分别为衬底和薄膜厚度;  $R_f$  和  $R_0$  分别为有无薄膜存在时的衬底曲率半径。因此,通过测量曲率半径即可得到薄膜应力。

## 3. 双折射法

双折射法就是采用应力双折射仪,对样品的光程差进行定量测定,从而确定样品应力

双折射的大小。Si、Ge 和 GaAs 等半导体材料具有对称的晶格结构，当受到薄膜应力作用时，材料的折射率会发生变化。其折射率与应力之间的关系为

$$\Delta n = C\Delta\sigma$$

其中， $C$  是材料的光弹性常数。

### 1.3 本章小结

为了提高半导体器件，尤其是 MOS、CMOS 器件的性能，常采用单轴或双轴应变。本章首先简要介绍了 MOS 器件应力引入方法，然后简要介绍了应变材料的临界厚度和应变测定方法。

### 习 题

1. 请列举 Si 实现应变的各种技术，并讨论不同应变技术在作用效果上的区别。
2. 何谓应变 Si 外延层临界厚度？应变 Si 外延层厚度大于临界厚度有何缺点？
3. 请列举应变 Si 外延层应力强度表征的各种技术，并讨论它们之间的区别。

## 第2章 硅基应变材料能带 $E-k$ 关系

为了提高半导体器件,尤其是 MOS、CMOS 器件的性能,可以采用单轴或双轴应变。单轴应变一般利用后续工艺引入,主要适用于纳米级 MOS、CMOS。双轴应变是全局应变,一般通过异质材料外延引入,应用面宽。基于双轴应变理论的重要性,且其可以为单轴应变的研究奠定理论基础,同时又鉴于国内集成电路工艺水平,本章主要介绍硅基双轴应变材料能带结构及其相关的关键理论。

要获得硅基应变材料能带结构,关键是研究建立其  $E-k$  关系,且载流子的有效质量和迁移率等都与它所处状态下的  $E-k$  关系密切相关。本章基于薛定谔方程,在建立应变张量模型和势能算符的基础上,采用  $k \cdot p$  微扰法,建立硅基双轴应变材料导带底、价带顶  $E-k$  关系。

另外,基于当前双轴应变材料的结构,同时为了便于理论分析研究,本书以弛豫  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  上外延生长应变 Si 和弛豫 Si 上外延生长应变  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  为研究对象和基础。由于应变层可以外延生长在任意晶向衬底上,因此,所建  $E-k$  关系适用于任意晶向的硅基应变材料。

### 2.1 应变张量模型

#### 2.1.1 应变张量通解

为了使应变张量适用于任意晶向的硅基应变材料,本节首先研究应变张量通解。

为了便于研究,首先建立辅助坐标系  $(x', y', z')$ , 其中  $z'$  轴垂直于衬底表面。该坐标系与惯用原胞坐标系  $(x, y, z)$  可以通过矩阵  $U$  实现坐标变换。矩阵  $U$  为

$$U = \begin{pmatrix} \cos\varphi\cos\theta & -\sin\varphi & \cos\varphi\sin\theta \\ \sin\varphi\cos\theta & \cos\varphi & \sin\varphi\sin\theta \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \quad (2-1)$$

其中,  $\theta$  和  $\varphi$  分别是  $z'$  轴相对于  $(x, y, z)$  坐标系的极角和方位角。

在  $(x', y', z')$  坐标系下,由于晶格失配,外延层在平行于衬底的平面内发生了应变,但不存在面内剪切应变。面内应变张量分量  $\epsilon_{\parallel}$  可以由下式确定:

$$\epsilon_{\parallel} = (a_{\text{衬底}} - a_{\text{外延层}}) / a_{\text{外延层}} \quad (2-2)$$

式中,  $a$  为材料的晶格常数。 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$  的晶格常数由 Si 和 Ge 晶格常数(见表 2.1)的线性插值得到。于是得到应变张量分量:

$$\epsilon'_{11} = \epsilon'_{22} = \epsilon_{\parallel} \quad (2-3)$$

$$\epsilon'_{12} = 0 \quad (2-4)$$

$(x', y', z')$  坐标系下其余三个独立的应变张量分量  $\epsilon'_{13}$ 、 $\epsilon'_{23}$ 、 $\epsilon'_{33}$  需要联立方程才能确定。



由于外延层在垂直衬底的方向上没有受到外力  $T$  的作用, 因此沿该方向的应力张量分量为零, 即

$$T'_{33} = T'_{23} = T'_{13} = 0 \quad (2-5)$$

其余三个独立的应力张量分量  $T'_{11}$ 、 $T'_{22}$ 、 $T'_{12}$  仍需确定。

在线性弹性范围内, 应力张量分量与应变张量分量满足胡克定律, 存在如下关系:

$$T'_{\alpha\beta} + c'_{\alpha\beta ij} \epsilon'_{ij} = 0 \quad (2-6)$$

其中:  $\alpha, \beta=1, 2, 3$ ;  $c'_{\alpha\beta ij}$  是  $(x', y', z')$  坐标系下的弹性劲度系数。

对于  $(\alpha\beta)=(33)$ 、 $(23)$ 、 $(13)$ , 根据式(2-5)和式(2-6), 可以得到

$$\begin{cases} c'_{33ij} \epsilon'_{ij} = 0 \\ c'_{23ij} \epsilon'_{ij} = 0 \\ c'_{13ij} \epsilon'_{ij} = 0 \end{cases} \quad (2-7(a))$$

对于  $(ij)=(11)$ 、 $(22)$ 、 $(12)$ ,  $\epsilon'_{ij}$  是已知的, 利用张量对称性, 并对  $(ij)$  展开求和, 可得

$$c'_{\alpha\beta 33} \epsilon'_{33} + 2c'_{\alpha\beta 23} \epsilon'_{23} + 2c'_{\alpha\beta 13} \epsilon'_{13} = -(c'_{\alpha\beta 11} + c'_{\alpha\beta 22}) \epsilon_{\parallel} \quad (2-7(b))$$

其矩阵形式为

$$\begin{pmatrix} c'_{3333} & c'_{3323} & c'_{3313} \\ c'_{2333} & c'_{2323} & c'_{2313} \\ c'_{1333} & c'_{1323} & c'_{1313} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon'_{33}/2 \\ \epsilon'_{23} \\ \epsilon'_{13} \end{pmatrix} = -\frac{\epsilon_{\parallel}}{2} \begin{pmatrix} c'_{3311} + c'_{3322} \\ c'_{2311} + c'_{2322} \\ c'_{1311} + c'_{1322} \end{pmatrix} \quad (2-7(c))$$

文献中通常给出的弹性劲度系数  $c_{\alpha\beta ij}$  是  $(x, y, z)$  坐标系下的, 式(2-6)中的  $c'_{\alpha\beta ij}$  需要通过坐标变换来求取, 利用式(2-1)的变换矩阵  $U$  可得

$$c'_{\gamma\delta kl} = U_{\alpha\gamma} U_{\beta\delta} U_{ik} U_{jl} c_{\alpha\beta ij} \quad (2-8(a))$$

式中:  $U_{\alpha\gamma}$ 、 $U_{\beta\delta}$ 、 $U_{ik}$ 、 $U_{jl}$  为变换矩阵  $U$  中的元素; 弹性劲度系数张量  $c_{\alpha\beta ij}$  的形式为

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & C_{44} & 0 & 0 \\ & & & & C_{44} & 0 \\ & & & & & C_{44} \end{pmatrix} \quad (2-8(b))$$

弹性劲度系数分量  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{44}$  见表 2.1。

表 2.1 本节所用参数

参数	符号	单位	数值
Si 晶格常数	$a_{Si}$	Å	5.431
Ge 晶格常数	$a_{Ge}$	Å	5.658
弹性劲度系数	$C_{12}$	dyne/cm <sup>2</sup> ( $\times 10^{11}$ )	6.39
	$C_{44}$	dyne/cm <sup>2</sup> ( $\times 10^{11}$ )	7.95
	$C_{11}$	dyne/cm <sup>2</sup> ( $\times 10^{11}$ )	16.56

将三角恒等法则应用到  $U$  的分量中, 式(2-8(a))可被展开和化简为