p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层中重掺杂禁带窄变的计算 [1]

吴文刚 张万荣 * 江德生 罗晋生 *

(半导体超晶格国家重点实验室 中国科学院半导体研究所 北京 100083)
*(西安交通大学电子工程系微电子研究室 西安 710049)

摘 要 针对应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的应变致价带分裂和重掺杂对裂值的影响，提出了该合金价带结构的等价有效简并度模型。模型中考虑了非抛物线价带结构。应用这个模型，计算了赝晶生长在 < 100 >Si 衬底上的 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层的重掺杂禁带窄变，发现当杂质浓度超过约 $2\sim 3\times 10^{19}cm^{-3}$ 后，它在某一 Ge 组分下得到极大值，而当掺杂低于此浓度时，它则随 Ge 组分的增加单调下降。与实验报道的对比证实了本模型的有效性。

关键词 锗硅合金，应变，重掺杂，能带结构

中图号 TN304.23, TN301

1 引 言

$Si/Si_{1-x}Ge_x$ 异质结双极晶体管 (HBT) 的基区和 $Si/Si_{1-x}Ge_x$ 光探测器的光吸收区通常采用 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层，而且在这种窄禁带材料区还往往进行重掺杂，其浓度一般可到 $10^{18}\sim 10^{19}cm^{-3}$ [1,2]，甚至高达 $10^{20}cm^{-3}$ [3]。在这样高的杂质浓度下，半导体重掺杂禁带窄变 (BGN) 效应 [4] 不可忽略。

应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的价带是高度畸变的 [5]，并且其内部发生应变致价带分裂，这些因素都将显著影响 p 型合金重掺杂 BGN 的大小。当应用 S.C.Jain 和 D.J. Roulston[6] 的理论和公式计算 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层的重掺杂 BGN 时，上述因素的作用将体现在对价带带边 (价带顶) 有效简并度的“修正”上，本文首次称这个表观值为等价有效简并度 (Equivalent Effective Degeneracy, EED)。为了计算一定 Ge 组分和掺杂浓度下的价带顶的 EED 值，本文针对应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的应变致价带分裂和重掺杂对裂值的影响，提出了该合金价带结构的等价有效简并度模型。模型中考虑了非抛物线价带结构。求出了价带顶的 EED，然后直接代入文献 [6] 的公式，就能计算出 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层的重掺杂 BGN。

应用上述方法，本文详细计算了赝晶生长在 < 100 >Si 衬底上的 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层的重掺杂 BGN，并与实验报道进行了比较。

2 应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 价带结构的等价有效简并度模型

2·1 应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的应变致价带分裂和轻重两条空穴带的等价有效简并度模型

应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的应变致价带分裂将使价带中轻重两条空穴带在 k 空间的 Γ 点域不相重叠。因为赝晶生长在 < 100 >Si 衬底上的 $Si_{1-x}Ge_x$ 外延层中存在的是双轴压应变，所以价带中重空穴带移入禁带，形成新带边；而轻空穴带相对远离禁带，形成亚带边。此过程中，一方面

[1] 1994-12-31 收到，1996-02-07 定稿

导带底和新的价带顶相互靠近，使得非直接带隙变窄；另一方面，自由空穴必然在分裂了的价带中重新分布，从而引起方向都朝向禁带的轻、重空穴带重掺杂位移 [7,8] 的移动量各不相同，于是，在禁带进一步窄变的同时，应变致价带分裂的裂值也发生了变化并反过来影响空穴的再分布。当 Ge 组分和空穴浓度等一定时，这个耦合过程将逐渐趋于稳定。假设，在保持系统费米能级不变的前提下，单独以重空穴带等价实际的价带结构，则该带的等价空穴能谷数必然有所“改变”，而这个表观的等价空穴能谷数即定义为重空穴带的 EED，其表达式为

$$(M_E)_h = M_h + M_l \left[\frac{(m_{p0})_l}{(m_{p0})_h}\right]^{3/2} \frac{F(\lambda_l,\eta_l)}{F(\lambda_h,\eta_h)}. \tag{1}$$

将上式中参数的脚标 l 和 h 互换，即得到轻空穴带的 EED 表达式。

(1) 式中 M_l 、 M_h 分别是轻、重空穴带的有效简并度，且有 $M_l = M_h = 1$; $F(\lambda,\eta)$ 表示费米-狄拉克 (Fermi-Dirac) 积分。为了模拟应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的非抛物线价带结构，采用源于 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}$ 微扰理论的广义积分形式 [9]

$$F(\lambda,\eta) = F_{1/2}(\eta) + \frac{3.7500}{\lambda}F_{3/2}(\eta) + \frac{3.2812}{\lambda^2}F_{5/2}(\eta) - \frac{2.4609}{\lambda^3}F_{7/2}(\eta). \tag{2}$$

(2) 式中参数 η 代表轻或重空穴带的费米动能，一般地，它可通过如下方程计算：

$$p = N_v(x,T)F(\lambda,\eta), \tag{3}$$

其中 p 代表自由空穴的总浓度， $N_v(x,T)$ 代表等价价带的有效状态密度， T 代表系统的绝对温度。

与 (1) 式对应的应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 重空穴带等价价带的空穴状态密度有效质量由下式给出：

$$(m_{dp})_h = (M_E)_h^{2/3}(m_{p0})_h. \tag{4}$$

(1) 、(4) 式中， $(m_{p0})_l$ 和 $(m_{p0})_h$ 分别表示轻、重空穴带的空穴状态密度有效质量，它们的取值与在 $\boldsymbol{k}$ 空间的 Γ 点域不相重叠的轻、重空穴带间相互作用的强弱有关：

$$(m_{p0})_l = 2^{-2/3}(m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2})^{2/3}[1-\exp(-\frac{\eta_{ve}}{S''/k_B})] + m_{lh}\exp(-\frac{\eta_{ve}}{S''/k_B}), \tag{5a}$$

$$(m_{p0})_h = 2^{-2/3}(m_{hh}^{3/2} + m_{lh}^{3/2})^{2/3}[1-\exp(-\frac{\eta_{ve}}{S''/k_B})] + m_{hh}\exp(-\frac{\eta_{ve}}{S''/k_B}), \tag{5b}$$

式中 η_{ve} 表示价带顶的 η 值； S'' 表示轻、重空穴带间的总裂距：

$$S'' = S' + (\Delta E_{hd})_h - (\Delta E_{hd})_l, \tag{6}$$

其中 S' 是应变致价带分裂的裂值 [10] ； ΔE_{hd} 是轻或重空穴带的重掺杂位移，可根据 S. C. Jain 和 D. J. Roulston[6] 的理论求得。

2·2 计算 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 价带带边和亚带边的等价有效简并度

价带顶上，参数 λ 定义如下：

$$\lambda = E_g''/(k_BT). \tag{7a}$$

(7a) 式中， E_g'' 是重掺杂 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层的禁带宽度，且有

$$E_g'' = E_g' - \mathrm{BGN}. \tag{7b}$$

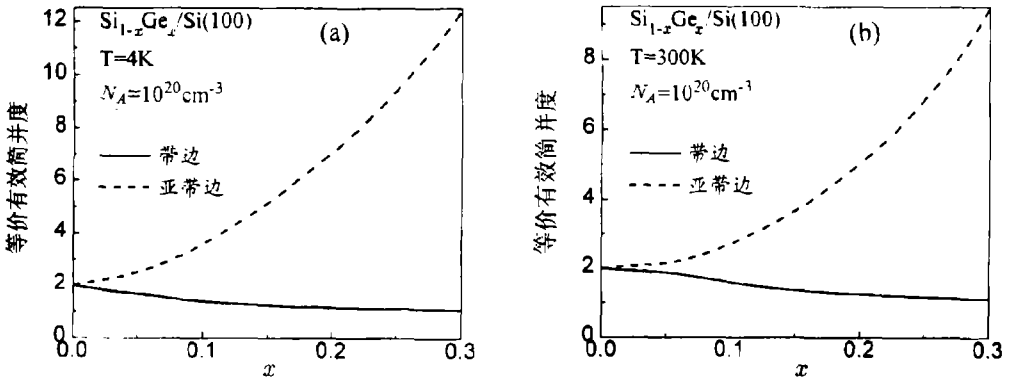

图 1 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 价带带边和亚带边的等价有效简并度与 Ge 组分 x 的函数关系

在上式等号右边，E_g' 是非重掺杂应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的禁带宽度，可从一些经验公式 [11,12] 求得。该合金的重掺杂 BGN 则利用文献 [6] 的有关公式计算。

对于赝晶生长在 < 100 >Si 衬底上的 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层，有

$$\lambda_{lh} = \lambda_{hh} + S''/(k_BT), \tag{8}$$

$$\eta_{lh} = \eta_{hh} - S''/(k_BT). \tag{9}$$

初猜 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 价带带边和亚带边的 EED 值，然后，通过以上一系列方程的自洽求解，就可同时得到该合金价带结构中轻重两条空穴带的 EED 、它们间的总裂距以及其重掺杂 BGN 。

图 1 示出了给定掺杂浓度下 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 价带带边和亚带边的 EED 随组分 x 的变化关系。从图中可见，在相同的 Ge 组分范围内，$T = 300$K 时带边和亚带边 EED 的变化幅度都比 $T = 4$K 时小，这是因为随着温度的升高，在 k 空间的 Γ 点域不相重叠的轻、重空穴带间的相互作用增强了。

3 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层中重掺杂禁带窄变的计算和讨论

对于任何具有抛物线能带结构的非应变半导体，其重掺杂 BGN 可计算如下 [6] ：

$$\mathrm{BGN} = \Delta E_{x(\mathrm{maj})} + \Delta E_{\mathrm{cor}(\min o)} + \Delta E_{i(\mathrm{maj})} + \Delta E_{i(\min o)}.$$

上式等号右边 $\Delta E_{x(\mathrm{maj})}$ 表示交换相互作用引起的多子带带边位移，$\Delta E_{\mathrm{cor}(\min o)}$ 表示相关能引起的少子带带边位移，$\Delta E_{i(\mathrm{maj})}$ 和 $\Delta E_{i(\min o)}$ 分别表示载流子与电离杂质相互作用引起的多子带和少子带带边位移。上述各项可具体写成

$$\Delta E_{x(\mathrm{maj})}/R = 1.83(\Lambda/M^{1/3})(1/r_s), \tag{10a}$$

$$\Delta E_{\mathrm{cor}(\min o)}/R = 0.95/r_s^{0.75}, \tag{10b}$$

$$(\Delta E_{i(\mathrm{maj})} + \Delta E_{i(\min o)})/R = \left(1 + R_{(\min o)}/R\right)(1.57/M)(1/r_s^{1.5}), \tag{10c}$$

其中有效 Rydberg 能量 R 和无量纲参数 r_s 分别为

$$R = 13.6m_0/\varepsilon^2 \ \ (\mathrm{eV}), \tag{10d}$$

$$r_s = r_a/a. \tag{10e}$$

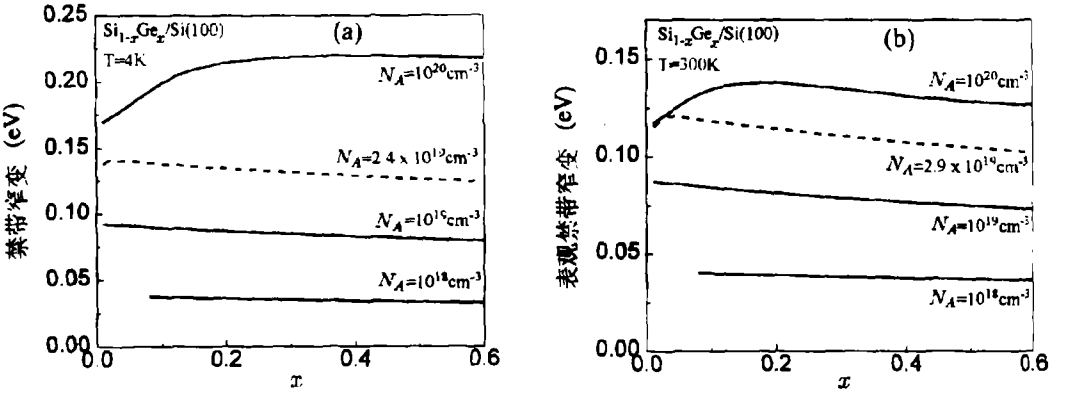

图 2　三种给定掺杂浓度下 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层中重掺杂禁带窄变与 Ge 组分 x 的函数关系

(10e) 式中 r_a 代表电离杂质原子间平均距离的一半， a 是有效 Bohr 半径，即

$$r_a = [3/(4\pi N)]^{1/3} \ \text{(cm)}, \tag{10f}$$

$$a = (0.53\varepsilon/m_0) \times 10^{-8} \ \text{(cm)}. \tag{10g}$$

(10) 式中 M 是多子带带边的有效简并度。设 $T = 4\text{K}$ ，那么当应用应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 价带结构的 EED 模型求出 p 型合金价带顶的 EED 值 M_B ，并将它代替 (10) 式中的 M 时，就可求得具有非抛物线价带结构且发生应变致价带分裂的该合金在这个温度下的重掺杂 BGN 。

对于 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ ， (10) 式中 m_0 表示轻或重空穴带的空穴状态密度有效质量， ε 表示介电常数， Λ 则用来描述价带中轻、重空穴带间的耦合效应。

室温下的重掺杂 BGN 常被称为表观 BGN 。 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的重掺杂表观 BGN 由下式给出

$$\text{ABGN} = k_B T \{\ln [p/N_v(x,T)] - \eta\} + \text{BGN}(p,x). \tag{11}$$

上式中 $\text{BGN}(p,x)$ 表示极低温 ($T \le 4\text{K}$) 下的重掺杂禁带窄变值。另外，在室温下可以认为杂质已完全电离，故 $p = N_A$ 。

p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层中重掺杂 BGN 的计算结果示于图 2(a) 和图 3(a) ，重掺杂表观 BGN 的计算结果示于图 2(b) 和图 3(b) 。从图 2 可见，不论是 $T = 4\text{K}$ 还是 $T = 300\text{K}$ ，在相对较低的掺杂浓度 (比如 $1 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ 和 $1 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$) 下，重掺杂禁带窄变随组分 x 的增加单调下降；但是，当掺杂超过一定浓度 (如图 2 虚线所示， $T = 4\text{K}$ 时，这个浓度约为 $2.4 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ ； $T = 300\text{K}$ 时，这个浓度约为 $2.9 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$) 后，重掺杂禁带窄变则在某一组分 x' 处出现极大值，并且杂质浓度越高该 x' 越大。

如图 3 所示，当杂质浓度相对较低时， Ge 组分越大的合金，其重掺杂禁带窄变越接近 Si 的；但是，当杂质浓度逐渐升高并超过一定数值区间时， Ge 组分越大的合金，其重掺杂禁带窄变却转而越远离 Si 的。这种相互关系的转换与图 2 中的情形相一致。图 3 说明，对于 Ge 组分在一定范围 (针对某最高掺杂浓度，有 $0 < x < x'$) 内缓变的 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ ，如果杂质浓度或杂质的浓度分布取得适当，就能明显增强或缓和该合金禁带宽度的变化趋势。

图 4 示出了 $T = 4\text{K}$ 时不同 Ge 组分的三种 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 禁带宽度的计算结果 (曲线) 与实验数据 [13](符号 △ 、 ○ 、□标示的数据点) 的比较，可见它们符合得较好。因为在计算

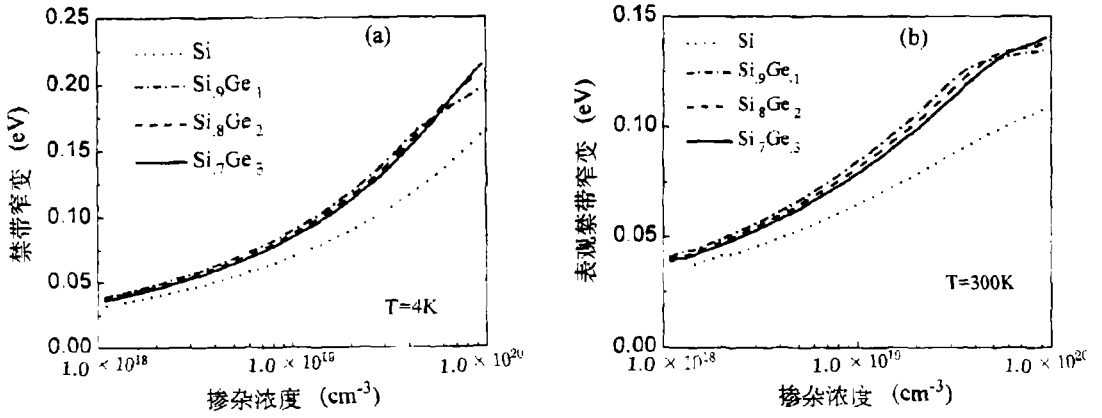

图 3 Ge 组分 x 分别是 0 、 0.1 、 0.2 和 0.3 的四种 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层中重掺杂禁带窄变与掺杂浓度的函数关系

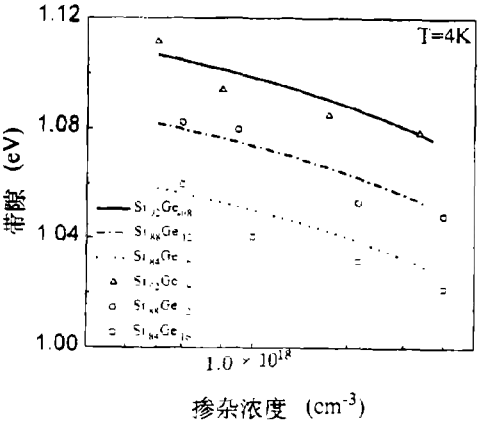

图 4 Ge 组分 x 分别是 0.08 、 0.12 和 0.16 的三种 p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 禁带宽度的计算结果与实验数据 [13] 的比较

中应用本文的理论计及了这些合金的重掺杂 BGN，所以前文提出的应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 价带结构的 EED 模型的有效性得到了证实。

< 100 >Si 衬底上 $Si_{1-x}Ge_x$ 外延层的赝晶生长，就是要求合金层的厚度不能厚于一临界值 h_c[14]，从而保证其中存在应变。一般地， Ge 组分 x 越高，临界厚度 h_c 越窄。当 $x > 0.6$ 时，上述 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层的 $h_c < 100$ Å[15]，于是量子效应等变得十分显著，这时已不宜简单采用本文的理论计算它的重掺杂禁带窄变。假设 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层组分缓变以使其 $h_c > 100$ Å，那么对于该层中 $x > 0.6$ 的部分，本文的理论和方法仍然适用。

4 结 论

本文通过应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 价带结构等价有效简并度模型的建立，把应变致价带分裂和非抛物线价带结构等因素引入了对 p 型 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变层中重掺杂禁带窄变的理论计算。研究中发现，当掺杂低于一定浓度 N' 时， p 型应变 $Si_{1-x}Ge_x$ 的重掺杂禁带窄变随组分 x 的增加单调

下降；但是，当掺杂超过这个浓度 ($N' \approx 2 \sim 3 \times 10^{19}cm^{-3}$) 后，合金的重掺杂禁带窄变则在某一组分 x' 处出现极大值，并且杂质浓度越高该 x' 越大。

参 考 文 献

[1] Patton G L, Comfort J H, Meyerson B S, *et al.* IEEE Electron. Device Lett., 1990, EDL-11(4): 171–173.
[2] King C A, Hoyt J L, Gronet C M, *et al.* IEEE Electron. Device Lett., 1989, EDL-10(2): 52–54.
[3] Lin T -L, Ksendzov A, Dejewsky S M, *et al.* IEEE Trans. on Electron Devices, 1992, ED-38(5): 1141–1144.
[4] Sze S M. Physics of Semiconductor Devices. 2nd Ed, New York: Wiley, 1981, Ch. 2.
[5] Manku T, Nathan A. Phys. Rev., 1991, B43(15): 12634–12637.
[6] Jain S C, Roulston D J. Solid-State Electron., 1991, 34(5): 453–465.
[7] Mahan G D. J. Appl. Phys., 1980, 51(5): 2634–2646.
[8] Berggren K -F, Sernelius B E. Phys. Rev., 1981, B24(4): 1971–1986.
[9] Barry H Bebb, Ratliff C R. J. Appl. Phys., 1971, 42(8): 3189–3194.
[10] People R. Phys. Rev., 1985, B32(2): 1405–1408.
[11] Karlsteen M, Willander M. Solid-State Electron., 1990, 33(2): 199–204.
[12] Bean J C. Proc. IEEE, 1992, 80(4): 571–587.
[13] Poortmans J, Jain S C, Totterdell D H J, *et al.* Solid-State Electron., 1993, 36(12): 1763–1771.
[14] People R, Bean J C. Appl. Phys. Lett., 1985, 47(3): 322–324.
[15] People R. IEEE J. of Quantum Electron., 1986, QE-22(9): 1696–1710.

CALCULATION OF THE BANDGAP NARROWING DUE TO HEAVY DOPING IN p-TYPE STRAINED $Si_{1-x}Ge_x$ LAYERS

Wu Wengang　Zhang Wanrong*　Jiang Desheng　Luo Jinsheng*

(*National Lab. for Supperlattices and Microstructures, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100083)

*(*Department of Electronic Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an* 710049)

Abstract To take the effects of strain induced splitting and non-parabolicity of valence band into account when calculating the bandgap narrowing (BGN) due to heavy doping in p-type pseudomorphic $Si_{1-x}Ge_x$ layers grown on $< 100 >$ Si substrate, an equivalent effective degeneracy (EED) model is proposed for the valence band structure of the strained alloy. The calculation results agree very well with published experimental data and show that there is a maximum value of the BGN at a certain Ge fraction if dopant concentration exceeds about $2 \sim 3 \times 10^{19}cm^{-3}$, and that, otherwise, it will decrease continuously as Ge fraction increases.

Key words SiGe alloy, Strain, Heavy doping, Band structure

吴文刚：　男，1966 年生，博士后，现从事超晶格量子阱器件的研究.
张万荣：　男，1964 年生，博士生，现从事化合物半导体器件的研究.
江德生：　男，1940 年生，研究员，博士生导师，现从事半导体低维量子结构物理的研究.
罗晋生：　男，1924 年生，教授，博士生导师，现从事半导体器件物理的研究.