

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМАЦИЙ И ЗОННОЙ ДИАГРАММЫ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ КРЕМНИЙ — ГЕРМАНИЙ

© 2010 В. В. Филиппов<sup>1</sup>, А. Н. Власов<sup>1</sup>, Е. Н. Бормонтгов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Липецкий государственный педагогический университет, ул. Ленина 42, 398020 Липецк, Россия

<sup>2</sup>Воронежский государственный университет, Университетская пл. 1, 394006 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию: 02.06.2010 г.

**Аннотация.** Предложена модель деформаций в напряженной полупроводниковой структуре, состоящей из произвольного числа слоев кремния и германия. Рассчитаны относительные деформации в слоях Si и Ge и их зависимости от отношения толщин контактирующих полупроводников. Исследовано влияние деформации и соотношения толщин композиционных слоев на основные параметры энергетической зонной диаграммы гетероперехода кремний-германий.

**Ключевые слова:** напряженная гетероструктура, кремний, германий, деформация, зонная диаграмма.

### ВВЕДЕНИЕ

Основу развивающейся нанoeлектроники составляют гетеропереходы и полупроводниковые сверхрешетки (СР) — структуры, состоящие из чередующихся слоев полупроводников с различными электрофизическими характеристиками [1, 2]. Особый интерес у исследователей вызывают псевдоморфные напряженные гетероструктуры, в частности, кремний-германиевые структуры с совмещенной решеткой [3], что обусловлено возможностью управлять широким спектром физических свойств композиционных слоев структуры изменением величины деформации и соотношением толщин контактирующих полупроводников.

Влияние деформаций на отдельно взятый полупроводник в литературе описано достаточно подробно, существуют как экспериментальные, так и теоретические исследования [4, 5]. Рассмотрены деформации и построена качественная картина смещения энергетических уровней в полупроводниковых кристаллах Si и SiGe [6—9], а также влияние деформаций на энергетическую зонную схему гетероперехода Si/SiGe [10—13]. Однако в литературе отсутствует достаточно полная модель, описывающая расчет внутренних деформаций в напряженных гетеропереходах и их влияние на основные энергетические параметры кремний — германиевых гетеропереходов и СР.

Настоящая работа посвящена моделированию механических деформаций и анализу зонной диа-

граммы структуры Si/Ge. Построена модель для расчета деформаций в структуре из произвольного числа тонких кристаллических слоев Si и Ge, исследовано влияние деформации и соотношения толщин композиционных слоев на основные параметры зонной диаграммы. Расчеты основаны на известных экспериментальных и теоретических данных, полученные результаты имеют практическое применение [14, 15].

### РАСЧЕТ ДЕФОРМАЦИЙ

Кристаллическая решетка большинства полупроводников (типа алмаза или цинковой обманки) обладает кубической симметрией. Если полупроводник подвергнут действию деформации, то его симметрия в общем случае понижается и спектр электронов изменяется [4, 5]. Для малых деформаций тензор деформации  $\epsilon_{ik}$  равен:

$$\epsilon_{ik} = \frac{1}{2} \left( \frac{du_i}{dx_k} + \frac{du_k}{dx_i} \right), \quad (1)$$

где  $u_i$  — составляющая вектора смещения точки кристаллической решетки при деформации.

Определим величины деформаций в полупроводниковой структуре из  $N$  слоев кремния и германия для случая, когда слоистая структура образуется путем сращивания по направлению [001] (рис. 1). Несоответствие постоянных решеток слоев ( $a_{Si} = 5,431 \text{ \AA}$ ,  $a_{Ge} = 5,658 \text{ \AA}$ ) вызывает механические напряжения. Симметрия кристаллических слоев понижается и необходимо вводить два пара-

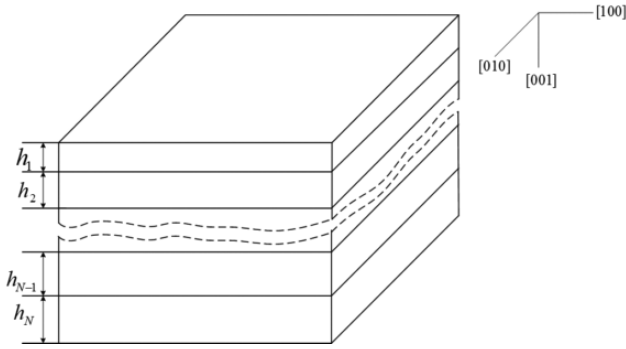


Рис. 1. Кристаллографическая ориентация полупроводниковой структуры

метра решетки. Постоянные решетки в направлениях [100], [010] обозначим  $a_{\parallel}$  (общие для всех слоев), в направлении [001] —  $a_{\perp i}$  (различные в каждом  $i$ -м слое). Будем считать, что деформации в каждом слое однородны по всей его толщине.

Согласно теории упругости [16] величина механического напряжения в однородной кристаллической пленке с первоначальной постоянной решетки  $a_i$  и толщиной  $h_i$  определяется выражением

$$\tau_i = \chi_i h_i \frac{(a_{\parallel} - a_i)}{a_i}, \quad \chi_i = \frac{E_i}{1 - \nu_i}, \quad (2)$$

где  $E_i$  и  $\nu_i$  — модуль Юнга и коэффициент Пуассона соответственно.

Условие равновесия механических напряжений дает равенство:

$$\sum_{i=1}^N \tau_i = 0, \quad (3)$$

где  $\tau_i$  — механическое напряжение в  $i$ -м слое на единицу толщины.

Отсюда получаем следующие выражения для постоянных решеток кристаллических слоев рассматриваемой структуры вдоль контактной плоскости  $a_{\parallel}$  и в перпендикулярном направлении  $a_{\perp i}$ :

$$a_{\parallel} = \frac{\sum_{i=1}^N \chi_i h_i}{\sum_{i=1}^N \chi_i h_i / a_i}, \quad a_{\perp i} = a_i + \frac{2\nu_i}{1 - \nu_i} \left( a_i - \frac{\sum_{i=1}^N \chi_i h_i}{\sum_{i=1}^N \chi_i h_i / a_i} \right). \quad (4)$$

Величины относительных деформаций в каждом из слоев определяются равенствами:

$$\begin{aligned} (\varepsilon_i)_{12} = (\varepsilon_i)_{23} = (\varepsilon_i)_{13} &= 0, \\ (\varepsilon_i)_{11} = (\varepsilon_i)_{22} &= \frac{a_{\parallel} - a_i}{a_i}, \\ (\varepsilon_i)_{33} &= \frac{a_{\perp i} - a_i}{a_i}, \end{aligned} \quad (5)$$

где индексы 1, 2, 3 определяют направления [100], [010], [001] соответственно.

Полученные выражения (4), (5) позволяют определять постоянные решетки и относительные деформации в слоистых структурах на основе полупроводниковых материалов с кристаллическими решетками типа алмаза или цинковой обманки.

В случае кремний-германиевой структуры, представляющей собой систему слоев Si и Ge, выражения (5), определяющие деформацию в кристаллических пленках кремния и германия, удобно представить в виде

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{\text{Si}})_{11} = (\varepsilon_{\text{Si}})_{22} &= \frac{a_{\text{Ge}} - a_{\text{Si}}}{\xi \cdot a_{\text{Ge}} + a_{\text{Si}}}, \\ (\varepsilon_{\text{Si}})_{33} &= -\frac{2\nu_{\text{Si}}}{1 - \nu_{\text{Si}}} \frac{a_{\text{Ge}} - a_{\text{Si}}}{\xi \cdot a_{\text{Ge}} + a_{\text{Si}}}, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{\text{Ge}})_{11} = (\varepsilon_{\text{Ge}})_{22} &= \frac{a_{\text{Si}} - a_{\text{Ge}}}{a_{\text{Si}} / \xi + a_{\text{Ge}}}, \\ (\varepsilon_{\text{Ge}})_{33} &= -\frac{2\nu_{\text{Ge}}}{1 - \nu_{\text{Ge}}} \frac{a_{\text{Si}} - a_{\text{Ge}}}{a_{\text{Si}} / \xi + a_{\text{Ge}}}, \end{aligned} \quad (7)$$

где безразмерный параметр  $\xi$  определяется соотношением механических свойств ( $E_{\text{Si}} = 130$  ГПа,  $\nu_{\text{Si}} = 0,28$ ;  $E_{\text{Ge}} = 103$  ГПа,  $\nu_{\text{Ge}} = 0,26$  [4]) и суммарных толщин ( $h_{\text{Si}}$  и  $h_{\text{Ge}}$ ) контактирующих полупроводниковых слоев:

$$\xi = \frac{E_{\text{Si}}}{E_{\text{Ge}}} \frac{1 - \nu_{\text{Ge}}}{1 - \nu_{\text{Si}}} \frac{h_{\text{Si}}}{h_{\text{Ge}}}. \quad (8)$$

Необходимо отметить, что в случае  $h_{\text{Ge}} \gg h_{\text{Si}}$  величины деформаций определяются только упругими константами кремния, а в случае  $h_{\text{Si}} \gg h_{\text{Ge}}$  — только упругими константами германия и разницей постоянных решеток контактирующих материалов в обоих случаях.

На рис. 2 показаны зависимости величин деформаций от отношения общих толщин слоев кремния и германия в рассматриваемой структуре. Видно, что в кремнии в направлениях [100], [010] величина относительной деформации  $\varepsilon_{\parallel}$  положительна (слои растянуты), в направлении [001] деформация  $\varepsilon_{\perp}$  отрицательна (слои сжаты) (рис. 2а). В германии, наоборот, в направлениях [100], [010] происходит сжатие, в направлении [001] — растяжение (рис. 2б). Видно, что наибольшее изменение параметров решетки происходит при соотношении  $0,1 \ll h_{\text{Si}}/h_{\text{Ge}} \ll 10$ , поэтому в дальнейших вычислениях рассматривается только данный интервал.

**ЗОННАЯ ДИАГРАММА**

Используя данные о компонентах тензора деформации можно определить смещение уровней энергии в деформированных слоях кремния и германия исследуемой структуры и изменение ширины запрещенной зоны этих полупроводников под влиянием деформации.

Изменение энергетического спектра электронов в деформированном кристалле кремния определяется следующим образом [4, 5]:

$$\Delta E_i = \Xi_d (\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) + \Xi_u \varepsilon_{ii} \quad (9)$$

Константа  $\Xi_d$  характеризует влияние всестороннего сжатия, а  $\Xi_u$  — одноосной деформации (для кристаллического кремния  $\Xi_d = -3,2$  эВ,  $\Xi_u = -8,6$  эВ при температуре  $T = 300$  К [17,18]).

В кремнии энергетические минимумы зоны проводимости  $\Delta_1$  расположены по направлениям [100], [010] и [001] и их смещения под действием деформации определяются равенствами:

$$\left. \begin{aligned} \Delta E_1 [100] &= \Xi_d \Delta + \Xi_u \varepsilon_{11}; \\ \Delta E_2 [010] &= \Xi_d \Delta + \Xi_u \varepsilon_{22}; \\ \Delta E_3 [001] &= \Xi_d \Delta + \Xi_u \varepsilon_{33}, \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

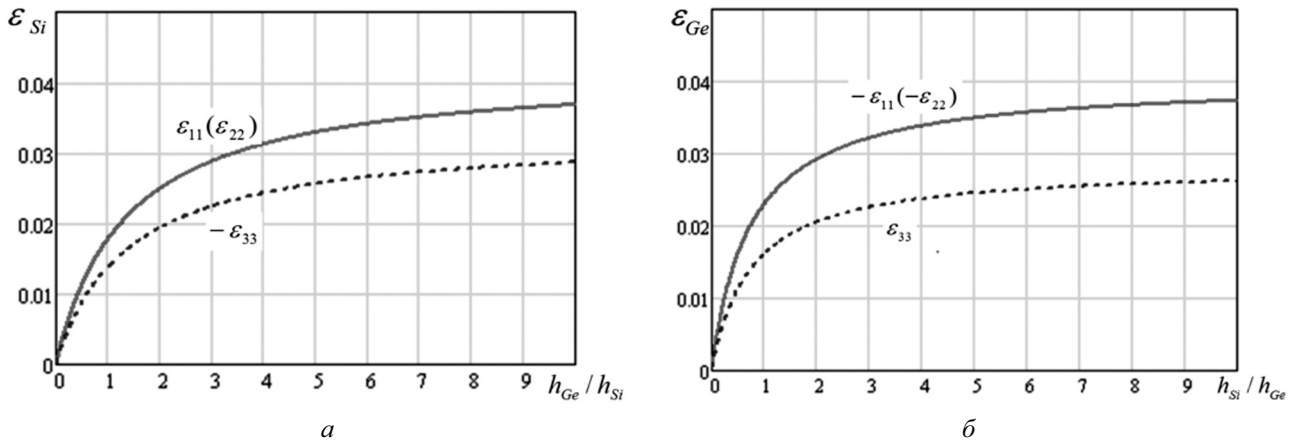
где  $\Delta = \varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}$  — изменение объема при деформации.

В германии простое сжатие или растяжение (без сдвиговых деформаций) приводит к одинаковому смещению энергетических минимумов  $L_1$  зоны проводимости в эквивалентных направлениях  $\langle 111 \rangle$

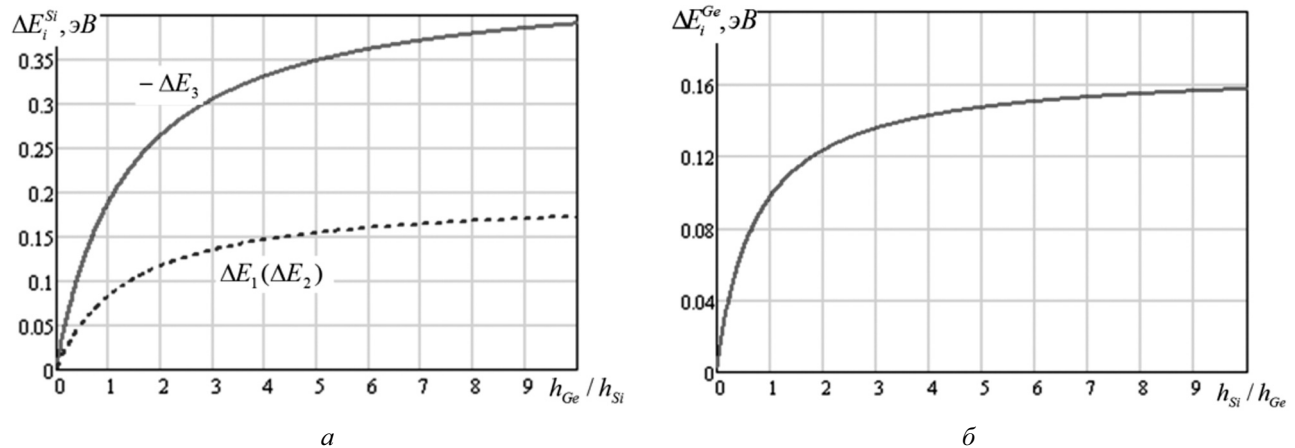
$$\Delta E_i = \left( \Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \Delta \quad (11)$$

Для кристаллического германия при температуре  $T = 300$  К параметры деформационного потенциала равны:  $\Xi_d = -8,64$  эВ,  $\Xi_u = 16,2$  эВ, [17, 18].

Рассчитанные зависимости для величин смещений минимумов зоны проводимости в кремнии и германии от отношения  $h_{Ge}/h_{Si}$  представлены на рис. 3. Из рисунка видно, что край зоны проводи-



**Рис. 2.** Зависимости относительных деформаций в пленках кремния (а) и германия (б) от отношения толщин Ge и Si



**Рис. 3.** Смещения дна зоны проводимости в кремнии (а) и германии (б)

мости в кремнии в направлении [001] опускается с ростом деформации сжатия вдоль этого направления и поднимается в направлениях [100], [010] с увеличением растяжения вдоль данных направлений (рис. 3а). В германии с увеличением рассматриваемых деформаций край зоны проводимости поднимается (рис. 3б).

Изменение валентной зоны под действием деформации носит сложный характер. Для рассматриваемых однородных деформаций выражение для расщепления валентной зоны представляется в виде [4, 5]

$$\Delta E_v = a_v \Delta \pm b_v |(\epsilon_{11} - \epsilon_{33})|, \quad (12)$$

где  $a_v, b_v$  — константы деформационного потенциала (для кремния и германия  $a_v(\text{Si}) = 1,8$  эВ,  $b_v(\text{Si}) = -2,1$  эВ и  $a_v(\text{Ge}) = -1,24$  эВ,  $b_v(\text{Ge}) = -2,86$  эВ при  $T = 300$  К [17, 18]), знак «+» соответствует легким дыркам, знак «-» — тяжелым.

Действие деформаций в Si и Ge приводит к снятию вырождения валентных зон легких и тяжелых дырок в точке Г и их расщеплению. При этом в кремнии (рис. 4а) с увеличением отношения

$h_{\text{Ge}}/h_{\text{Si}}$  максимум зоны легких дырок ( $E_{v1}$ ) под влиянием деформации поднимается, тяжелых ( $E_{v2}$ ) — опускается. В германии (рис. 4б) наблюдается обратная картина. С увеличением отношения  $h_{\text{Ge}}/h_{\text{Si}}$  край зоны легких дырок опускается ниже края зоны тяжелых дырок.

Рассчитанные величины смещений краев зоны проводимости и расщепления валентной зоны кремния и германия позволяют определить зависимости ширины запрещенной зоны  $E_g$  этих полупроводников в условиях деформации от соотношения толщин Si и Ge и построить зонную диаграмму гетероперехода Si/Ge. Зависимости  $E_g$  от отношения  $h_{\text{Ge}}/h_{\text{Si}}$  в Si и Ge (при температуре  $T = 300$  К) приведены на рис. 5. Видно, что в кремнии (рис. 5а) с увеличением деформации растяжения ширина запрещенной зоны значительно уменьшается. В предельном случае при  $h_{\text{Ge}} \gg h_{\text{Si}}$  ширина запрещенной зоны кремния  $E_g(\text{Si}) \approx 0,5$  эВ, т.е. становится примерно вдвое меньше, чем в недеформированном кремнии. Полученные зависимости хорошо согласуются с экспериментальными

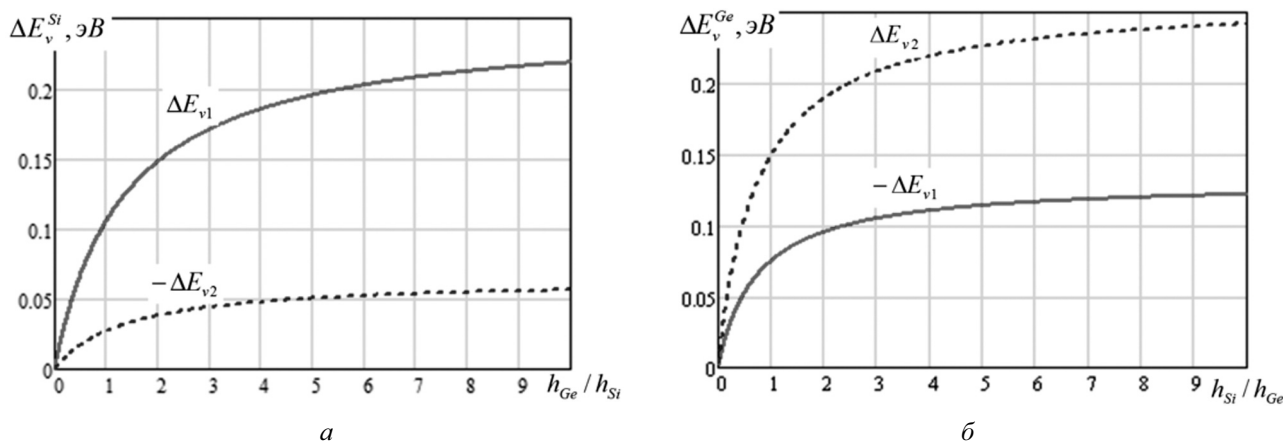


Рис. 4. Смещения краев валентных зон в кремнии (а) и германии (б)

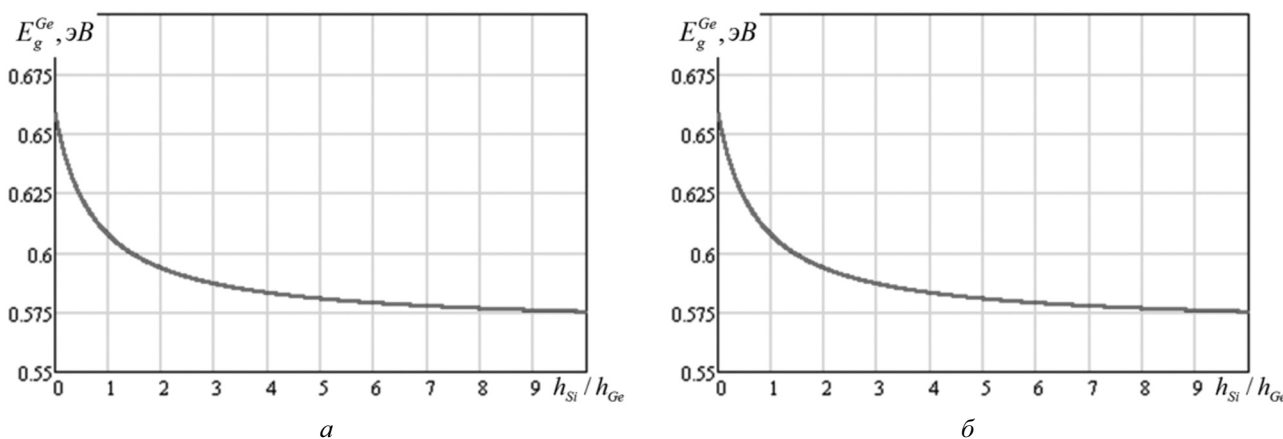
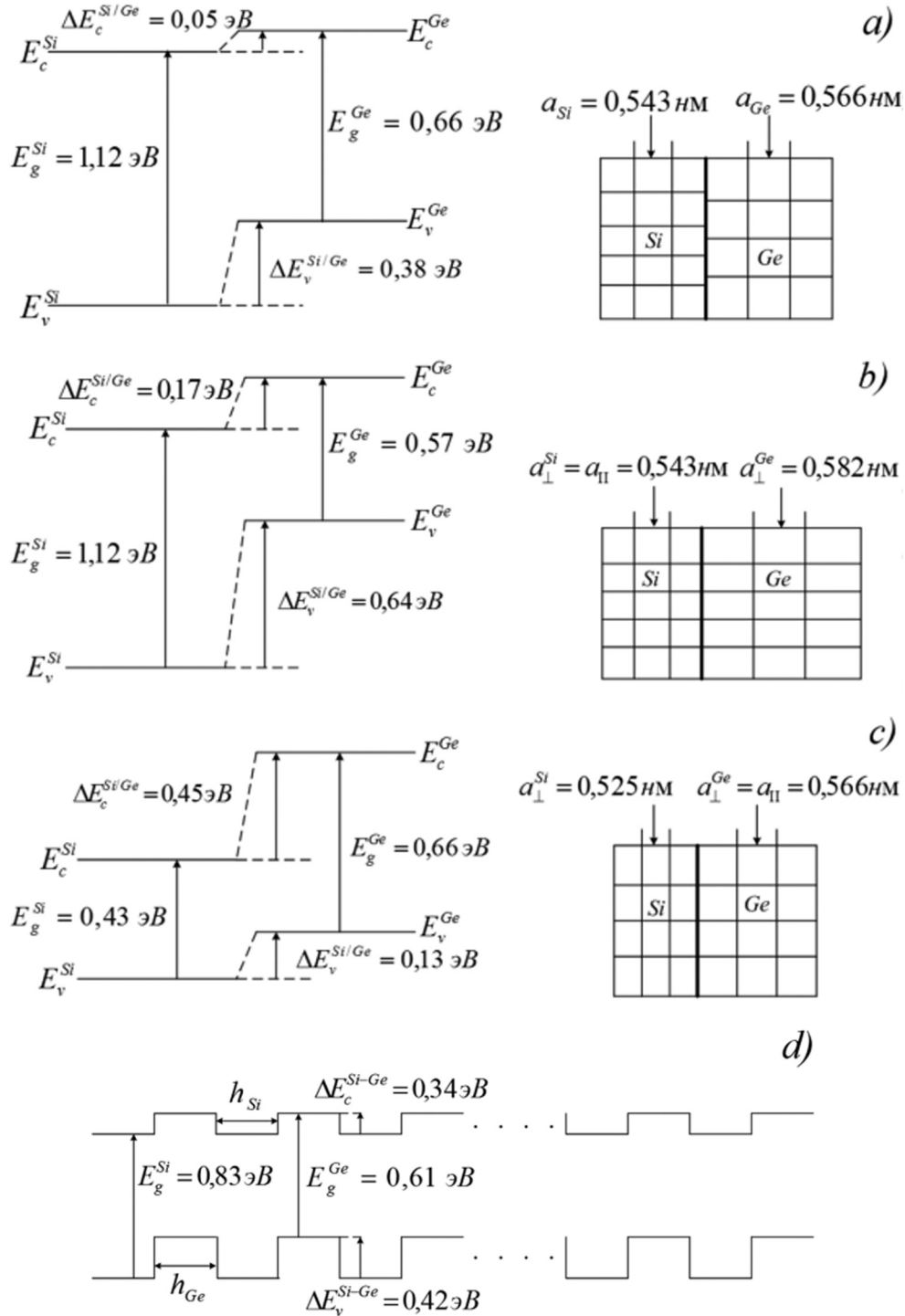


Рис. 5. Изменение ширины запрещенной зоны в кремнии (а) и германии (б)

результатами [17, 18], в частности, ширина запрещенной зоны в деформированной пленке кремния на германиевой подложке примерно в два раза меньше, чем в недеформированном кристалле [17, 18]. Деформации в германии также приводят к изменению ширины запрещенной зоны  $E_g(\text{Ge})$ , однако их влияние меньше (рис. 5b).

Зонные диаграммы гетероперехода Si/Ge без учета деформаций, для псевдоморфных пленок Ge на подложке Si (001) и Si на подложке Ge(001), а также для СР с одинаковой толщиной слоев Si и Ge представлены на рис. 6. Из рисунка видно, что расположение зон благоприятствует созданию двухмерного дырочного газа в псевдоморфных



**Рис. 6.** Зонные диаграммы гетероперехода Si — Ge: *a* — без учета деформаций; *b* — для псевдоморфных пленок Ge на подложке Si(001); *c* — Si на подложке Ge(001); *d* — для периода СР с одинаковой толщиной слоев Ge и Si

пленках Ge, выращенных на подложке Si, и двухмерного электронного газа в псевдоморфных пленках Si, выращенных на подложке Ge. Очевидно также, что деформации приводят не только к количественным, но также к качественным изменениям в зонной структуре деформированных полупроводников, что должно привести, в свою очередь, к существенному изменению электронных свойств напряженного гетероперехода Si/Ge.

Таким образом, деформации в напряженных гетеропереходах или сверхрешетках Si/Ge приводят к заметным изменениям в энергетической зонной структуре псевдоморфных слоев Si и Ge. Подбор соотношений толщин кремния и германия позволяет прогнозировать и управлять параметрами зонной диаграммы и, следовательно, электронными свойствами гетеропереходов Si/Ge. Приведенные в работе выражения для деформаций и параметров зонной диаграммы напряженных гетеропереходов могут быть полезны для моделирования физических свойств деформированных полупроводников и электрических характеристик приборов на основе напряженных полупроводниковых гетероструктур [6—15].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы нанoeлектроники. М.: Логос, 2006. 494 с.
2. Нанотехнологии в электронике / под ред. Чаплыгина Ю.А. М.: Техносфера, 2005. 448 с.
3. Герасименко Н.Н., Пархоменко Ю.Н. Кремний — материал нанoeлектроники. М.: Техносфера, 2007. 352 с.
4. Полякова А.Л. Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов. М.: Энергия, 1979. 168 с.
5. Бур Г.Л., Пукис Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.
6. Jankovic N.D., O'Neill A. // *Semicond. Sci. Technol.* 2003. V. 18. № 9. P. 901.
7. Lee M.L., Fitzgerald E.A. // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 94. № 4. P. 2590.
8. Richard S., Cavassilas N., Aniel F., Fishman G. // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 94. № 8. P. 5088.
9. Payet F., Cavassilas N., Autran J.-L. // *J. Appl. Phys.* 2004. V. 95. № 2. P. 713.
10. Sugii N., Hisamoto D., Washio K., Yokoyama N., Kimura S. // *IEEE Trans. on Electron Devices.* 2002. V. 49. № 12. P. 2237.
11. Yina H., Hobart K. D., Kub F. J., Shieh S. R., Duffy T. S., Sturm J. C. // *Appl. Phys. Letters.* 2003. V. 82. № 22. P. 3853.
12. Rehder E. M., Inoki C. K., Kuan T. S., Kuech T. F. // *J. Appl. Phys.* 2003. V. 94. № 12. P. 7892.
13. Bera L.K., Mathew S., Balasubramanian N., Braithwaite G., Currie M.T., Singaporewala F., Yap J., Hammond R., Lochtefeld A., Bulsara M.T., Fitzgerald E.A. // *Appl. Surface Sci.* 2004. V. 224. № 4. P. 278.
14. Iwata H., Matsuda T., Ohzone T. // *Solid-State Electronics.* 2009. V. 53. №10. P. 1130.
15. Feste S.F., Knoch J., Habicht S., Buca D., Zhao Q.-T., Mantl S. // *Solid-State Electronics.* 2009. V. 53. № 12. P. 1257.
16. Безухов Н.И. Основы теории упругости, пластичности и ползучести. М.: Высшая школа, 1988. 522 с.
17. Niquet Y.M., Rideau D., Tavernier C., Jaouen H., Blase X. // *Phys. Rev.* 2009. V. 79. № 24. P. 245201.
18. Brehm M., Suzuki T., Fromherz T., Zhong Z., Hrauda N., Hackl F., Stangl J., Schäffler F., G Bauer G. // *New Journal of Physics.* 2009. V.11. № 6. P. 063021.

Филиппов Владимир Владимирович — доцент Липецкого государственного педагогического университета, тел.: (4742) 328385, e-mail: wwfilippow@mail.ru

Власов Артур Николаевич — аспирант Липецкого государственного педагогического университета, тел.: (4742) 328383, e-mail: wlasow\_a\_n@mail.ru

Бормонтов Евгений Николаевич — профессор Воронежского государственного университета, тел.: (4732) 208633, e-mail: me144@phys.vsu.ru

Filippov Vladimir V. — associate professor, Lipetsk State Pedagogical University, tel.: (4742) 328385, e-mail: wwfilippow@mail.ru

Vlasov Arthur N. — the post graduate student, Lipetsk State Pedagogical University, tel.: (4742) 328383, e-mail: wlasow\_a\_n@mail.ru

Bormontov Evgeniy N. — the professor, Voronezh State University, tel.: (4732) 208633, e-mail: me144@phys.vsu.ru