УДК 537.311.322

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЯВЛЕНИЙ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕНОСА В МЕХАНИЧЕСКИ НАПРЯЖЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МИКРОКРИСТАЛЛАХ

В. В. Филиппов[1], Б. К. Петров [2]

[1]*Липецкий государственный педагогический университет*
[2]*Воронежский государственный университет*

Рассмотрены эффекты, связанные с механическими напряжениями в полупроводниковых кристаллах и пленках. Выполнен качественный анализ эффекта изменения проводимости в растянутом кристаллическом кремнии. Получено и проанализировано распределение электрического поля в области анизотропного полупроводникового канала.

ВВЕДЕНИЕ

В современной электронике все большее применение находят полупроводники и полупроводниковые соединения, в кристаллах которых из-за сложности строения решеток, под давлением или под влиянием внешних полей наблюдается анизотропия электрических, термоэлектрических и гальваномагнитных свойств, в частности, большие перспективы имеют структуры на основе механически напряженных кремния и германия, а также их соединений [1, 2]. Как показывает обзор литературы, в данное время отсутствует подробно описанная теоретическая картина пьезосопротивления в растянутом нанокристаллическом кремнии.

Для проверки применимости теории линейного эффекта пьезопроводимости, необходимо определить долю поверхностной энергии в общей энергии кристалла, а также проверить квадратичность зависимости потенциальной энергии межатомного взаимодействия от величины деформации.

Согласно выполненным нами расчетам на основе экспериментальной зависимости межатомного потенциала Ми—Леннарда—Джонса [3], для кристаллического кремния при деформациях $\varepsilon \leq 2$ % отклонение от нелинейности законов механических деформаций не превосходит 5 %. Изменение зонной структуры от механических напряжений описывается в теории деформации полупроводниковых кристаллов [4, 5]. Численные соотношения указанных работ оказываются справедливы и для нанокристаллов толщин порядка десятков нанометров, когда доля энергии поверхностных атомов кристалла относительно общей энергии невелика. Так, для кристалла толщиной ~ 50 нм доля атомов на поверхности порядка 1 % относительно общего числа атомов кристалла и, соответственно, вкладом поверхностной энергии в общую энергию кристалла можно пренебречь [6, 7].

Таким образом, для кристаллического кремния величина относительного изменения ширины запрещенной зоны в зависимости от механического напряжения для наноструктур порядка 50 нм и более изменяется по тем же законам, что и для объемных кристаллов. Отклонение от нелинейности закона Гука упругих деформаций и эффекта пьзосопротивления не превышает 5 % при относительных деформациях не более 2 % и, как правило, лежит в пределах погрешности измерений. Одной из основных задач здесь является четкое определение деформаций и напряжений в используемом кристалле.

В данной работе рассмотрено влияние деформации кристаллического полупроводникового кремния на его кинетические параметры, а также выполнен расчет распределения электрического поля в механически напряженном полупроводниковом кристалле.

© Филиппов В.В., Петров Б.К., 2006

1. РАСЧЕТ КОМПОНЕНТ ТЕНЗОРА ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ НАПРЯЖЕННОГО КРЕМНИЯ

В настоящее время наиболее распространен метод получения напряженного (растянутого) кремния на подложке кристалла $Si_{1-x}Ge_x$ [1, 2]. В кремнии возникают деформации в плоскости, параллельной поверхности подложки, величина которых будет варьироваться в пределах $0 \div 5\%$ в зависимости от соотношения компонентов сплава $Si_{1-x}Ge_x$ [5].

При малых деформациях (для n-Si $\varepsilon \le 2$) тензор напряжений определяется выражением [5]:

$$P_{ij} = c_{ijnk}\varepsilon_{nk}, \qquad (1)$$

где c_{ijnk} и ε_{ij} — компоненты тензора жесткости и деформации соответственно, а относительное изменение электропроводности выражается через коэффициенты эластосопротивления (пьезосопротивления) π_{ijnk} [1]:

$$\Delta\sigma_{ij} / \sigma_0 = -\pi_{ijnk} P_{nk}. \qquad (2)$$

Для случая если кремний растянут только в направлениях [100], [010], а кристаллические плоскости подложки и кристалла совпадают, тензор деформаций имеет вид:

$$\hat{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \qquad (3)$$

В общем случае ориентации подложки и растянутого кристалла кремния методика вычисления тензора деформаций $\hat{\varepsilon}$ описана в работе [8].

С учетом симметрии кубических кристаллов, для n-Si зависимость механического напряжения и относительного изменения электропроводности вдоль плоскости подложки от величины деформации можно представить в виде:

$$P_{11} = P_{22} = c_{11}\varepsilon, \qquad \Delta\sigma_{11} / \sigma_0 = \Delta\sigma_{22} / \sigma_0 = -\pi_{11} c_{11} \varepsilon. \qquad (4)$$

На рис. 1 представлена рассчитанная нами зависимость электропроводности кристаллического n-Si от относительного удлинения (данные для c_{11}, π_{11} взяты из работ [4, 5])

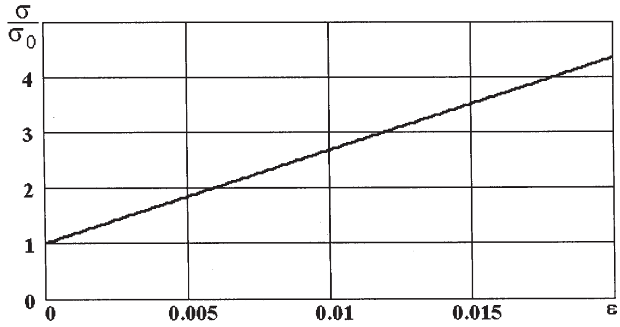

Рис. 1

2. РАСЧЕТ ПОТЕНЦИАЛА В МЕХАНИЧЕСКИ НАПРЯЖЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Изменение электропроводности кристалла вдоль какого-либо из направлений не может не сказаться на распределении электрического поля в приборах, в которых применяется данный полупроводник.

Определим распределение потенциала электрического поля, создаваемое двумя токовыми электродами на противоположных гранях в анизотропном полупроводниковом кристалле (рис. 2). В рассматриваемом случае полупроводниковый образец деформирован в плоскости xy. На рис. 2 указано пространственное расположение токового канала напряженного кремния и расположение контактов на его поверхности. Решетка растянута в направлениях [100] и [010].

В установившемся режиме электрического тока плотность тока $\vec{j}$, напряженность электрического поля $\vec{E}$ и потенциал φ связаны соотношениями [9]:

$$\vec{j} = \hat{\sigma} \cdot \vec{E}, \ \vec{E} = \operatorname{grad}\varphi, \ \operatorname{div}\vec{j} = 0, \qquad (5)$$

где $\hat{\sigma}$ — симметричный тензор электропроводимости кристалла. В нашем случае система координат выбрана так, что тензор $\hat{\sigma}$ имеет диагональный вид

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_y & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_0 + \Delta\sigma & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 + \Delta\sigma & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_0 \end{pmatrix}. \qquad (6)$$

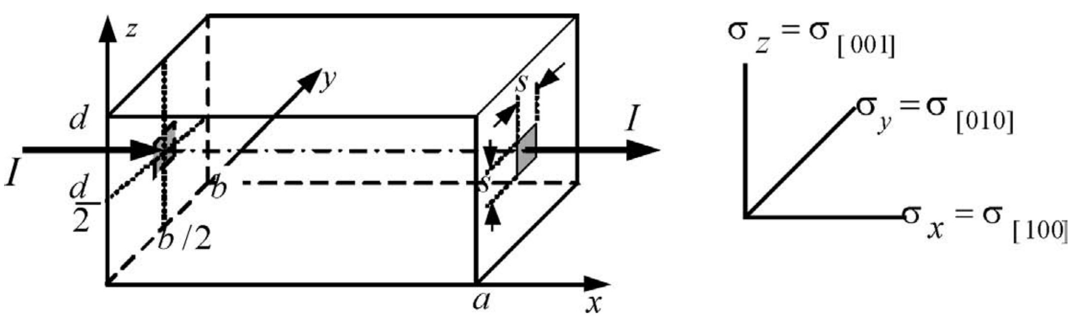

Рис. 2

Отсюда имеем дифференциальное уравнение для потенциала

$$\sigma_x \frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2} + \sigma_y \frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2} + \sigma_z \frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2} = 0. \qquad (7)$$

Граничные условия для потенциала следуют из требования, что нормальная составляющая плотности тока на поверхности образца всюду равна нулю, кроме точек под токовыми электродами [9]:

$$-\sigma_y \left.\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right|_{y=0,b} = -\sigma_z \left.\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right|_{z=0,d} = 0, \qquad (8)$$

$$-\sigma_x \left.\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right|_{x=0,a} = \begin{cases} \dfrac{I}{s^2}, y \in [b/2 - s/2; b/2 + s/2], \\ \quad z \in [d/2 - s/2; d/2 + s/2], \\ 0, \text{ в остальной площади} \end{cases} \qquad (9)$$

где a, b, d, s — геометрические параметры растянутого полупроводникового канала и токовых электродов (рис. 2).

Краевая задача (7)—(9) решается методом Фурье разделения переменных. В данном случае выражение для потенциала $\varphi(x,y,z)$ представимо в виде двойного ряда Фурье по косинусам:

$$\varphi(x,y,z) = \sum_{n,k=0}^{\infty} X_{nk}(x)\cos(\alpha_n y)\cdot\cos(\beta_k z),$$
$$\alpha_n = \frac{\pi\cdot n}{b},\ \beta_k = \frac{\pi\cdot k}{d}. \qquad (10)$$

Подставляя ряд в уравнение (10) и учитывая граничные условия (8), (9) получаем выражение для $X_{nk}(x)$.

Опуская громоздкие математические преобразования, запишем выражение для распределения потенциала в объеме анизотропного полупроводникового канала в окончательном виде:

$$\varphi(x,y,z) = -\frac{I}{\sigma_x bd}\left(x - \frac{a}{2}\right) - \frac{16\cdot I}{\sigma_x bd}\times$$
$$\times\sum_{n,k=0,2,4...}^{\infty}\left\{\Theta_{n,k}\frac{(-1)^{(n+k)/2}}{\eta_{nk} sh(\eta_{nk}a)}[ch(\eta_{nk}x) - \right.$$
$$-ch(\eta_{nk}(a-x))]\cdot\frac{\sin(\alpha_n s/2)}{\alpha_n s}\cdot\frac{\sin(\beta_k s/2)}{\beta_k s}\times \qquad (11)$$
$$\left.\times\cos(\alpha_n y)\cdot\cos(\beta_k z)\right\},$$

$$\alpha_n = \frac{\pi\cdot n}{b},\ \beta_k = \frac{\pi\cdot k}{d},\ \eta_{nk} = \sqrt{\gamma_1\alpha_n^2 + \gamma_2\beta_k^2},$$
$$\gamma_1 = \frac{\sigma_y}{\sigma_x},\ \gamma_2 = \frac{\sigma_z}{\sigma_x}, \qquad (12)$$
$$\Theta_{n,k} = \begin{cases} 1, n,k \neq 0; \\ 1/2, n,k = 0, n \neq k; \\ 0, n = k = 0. \end{cases}$$

В соответствии с полученным распределением потенциала определено сопротивление анизотропного кристалла:

$$R = \frac{a}{\sigma_x bd} + \frac{128}{\sigma_x bd}\cdot\sum_{n,k=0,2,4...}^{\infty}\left\{\Theta_{n,k}\frac{cth(\eta_{nk}a)}{\eta_{nk}}\times\right.$$
$$\left.\times\left(\frac{\sin(\beta_k s/2)}{\beta_k s}\right)^2\left(\frac{\sin(\alpha_n s/2)}{\alpha_n s}\right)^2\right\}. \qquad (13)$$

Представленное аналитическое решение в виде (11) позволяет проанализировать распределение потенциала электрического поля в анизотропных полупроводниковых пленках, а также моделировать его с помощью ЭВМ. Построим распределение эквипотенциалей и линий тока в двух плоскостях $z = d/2$ и $y = b/2$ (в среднем сечении канала).

На рис. 3 изображены распределение электрического потенциала (пунктир) и электрического тока (сплошные линии) в анизотропном полупроводниковом кристалле ($a/b = 1{,}5;\ d/b = 1;\ s/b = 0{,}1;\ \sigma_x = \sigma_y = 4\sigma_z$). На данной модели между двумя токовыми линиями протекает равный ток — $I/12$, шаг построения эквипотенциалей — $\Delta\varphi_к/20$, где — I общий ток через полупроводник, $\Delta\varphi_к$ — разность потенциалов на токовых контактах. Выбор параметра анизотропии $\sigma_x/\sigma_z = \sigma_y/\sigma_z = 4$ вполне оправдан и соответствует известным литературным данным [3, 8].

3. ВЫВОДЫ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Как показывает проведенное моделирование, электрический ток в растянутом n-Si протекает по более узкому каналу, чем в недеформированном состоянии. Данное распределение тока вдоль узких каналов в растянутых кремниевых каналах полупроводниковых структур приводит к следующим физическим эффектам:

1) концентрация носителей заряда становится неравномерной по объему кристалла — она максимальна вдоль токовых каналов небольшой ширины;

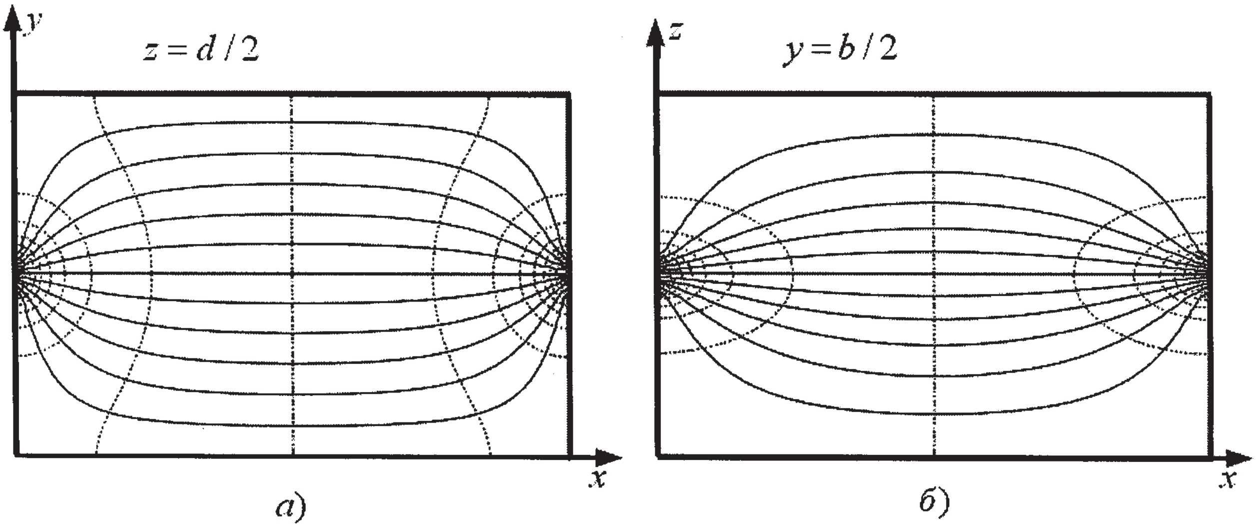

Рис. 3

2) неравномерный разогрев по объему полупроводника;

3) уменьшение тока утечки через границы полупроводник—диэлектрик в МДП структурах (т.к. плотность тока на границе растянутого n-Si меньше, чем для недеформированного полупроводника).

Подробное рассмотрение влияния анизотропии кристаллов на распределение электрического поля выполнено в работах [10, 11].

Как показывает выполненный анализ, использование растянутых n-Si каналов в МДП структурах не только позволяет увеличить их быстродействие, за счет миниатюризации и увеличения величины электропроводности, но и уменьшить ток утечки. Изменение сопротивления кристалла n-Si согласно выражению (13) зависит от параметров анизотропии нелинейно, следовательно, данную нелинейность необходимо учитывать и при определении изменения электропроводности в результате деформации канала. При этом, изменение величины электрического поля вблизи границ канала, а также изменение его сопротивления можно определить по представленным выражениям для потенциала и сопротивления.

Таким образом, результаты представленной работы позволяют количественно оценить концентрацию электрического тока и изменение сопротивления кремниевого канала электронного типа в результате его деформации. Выражения, полученные для распределения потенциала в токовом канале, являются электродинамическими по своему характеру, поэтому не зависят от рода вещества и могут быть применимы для различных типов анизотропных полупроводниковых кристаллов, используемых в качестве структурных элементов различных полупроводниковых приборов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Гридчин В.А., Любимский В.М.* Пьезосопротивление в пленках поликристаллического кремния p-типа // ФТП. — 2004. — Т. 38, № 8. — С. 1013—1017.

2. *Валах М.Я., Джаган В.Н, Матвеева Л.А., Оберемок А.С., Романюк Б.Н., Юхимчук В.А.* Исследования влияние углерода на свойства гетероструктур Si/SiGe // ФТП. — 2003. — Т. 37, № 4. — С. 460—464.

3. *Магомедов М.Н.* О природе ковалентной связи в кристаллах подгруппы углерода // Журнал неорг. химии. — 2004. — Т. 49, № 12. — С. 2057—2067.

4. *Полякова А.Л.* Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов. — М.: Энергия, 1979. — 168 с.

5. *Баранский П.И., Клочков В.П., Потыкевич И.В.* Полупроводниковая электроника. Свойства материалов. — Киев: Наукова думка, 1975. — 704 с.

6. *Магомедов М.Н.* О поверхностной энергии нанокристалла // Журнал физ. химии. — 2005. — Т. 79, № 5. — С. 829—838.

7. *Сиротин С.Ю., Шаскольская П.М.* Основы кристаллофизики. — М.: Наука, 1979. — 639 с.

8. *Драгунов В.П.* Моделирование переноса носителей заряда в напряженных слоях на основе Ge и Si // Науч. вестн. НГТУ. — 2003. — № 2. — С. 71—84.

9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред. — М.: Наука, 1982. — 620 с.

10. *Поляков Н.Н., Филиппов В.В.* Особенности явлений электронного переноса в анизотропных монокристаллах и пленках // Электронный журнал «Исследовано в России». — 2003. — 046. С. 539—548. http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2003/046.pdf

11. *Поляков Н.Н., Шевченко А.Е., Олейников В.Е., Фролов П.В.* Влияние анизотропии кристаллов на явления электронного переноса в полупроводниках // Известия вузов. Материалы электронной техники. — 2000. — № 4. — С. 63—68.