

课程内容

- **研究主体：半导体中的电子**
- 第一部分：晶体结构
- 第二部分：能带结构
- 第三部分：热力学统计
- **第四部分：载流子输运**
 - 研究半导体中载流子在外场下的运动；电阻率
- 第五部分：非平衡载流子

材料导电性的定量解释

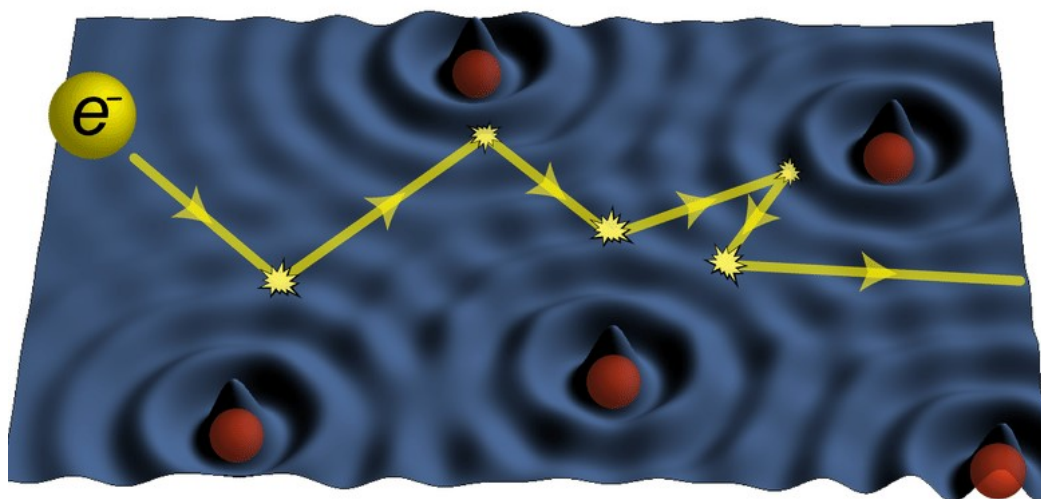
- 导电性需要考虑的因素
- 1. 材料中有没有载流子？有多少载流子？（第三章）
 - 显然，没有载流子不能导电，载流子越多理应越导电
 - 载流子浓度的计算
- 2. 材料中的载流子容不容易动？（第四章）
 - 载流子的有效质量越大，加速度越小，材料就很难导电；反之亦然。现在还知道和散射有关
 - 迁移率的计算

小结：微观输运机制

- 载流子在弱电场下的运动：

- 受到电场力 $\mathbf{F} = q\mathbf{E} = m^* \frac{d\mathbf{v}_d}{dt}$
 - \mathbf{v}_d 为漂移速度。此时可等效地认为 m^* 为一个数（各向异性时为电导有效质量 m_c^* ）
- 受到散射，散射概率（密度） P
 - 平均每过时间 $\tau = 1/P$ 被散射一次，称之为平均自由时间

- 散射



H.-Y. Xie et al.,
Phys. Rev. B 91,
024203 (2014).

小结：主要散射机制

杂质散射

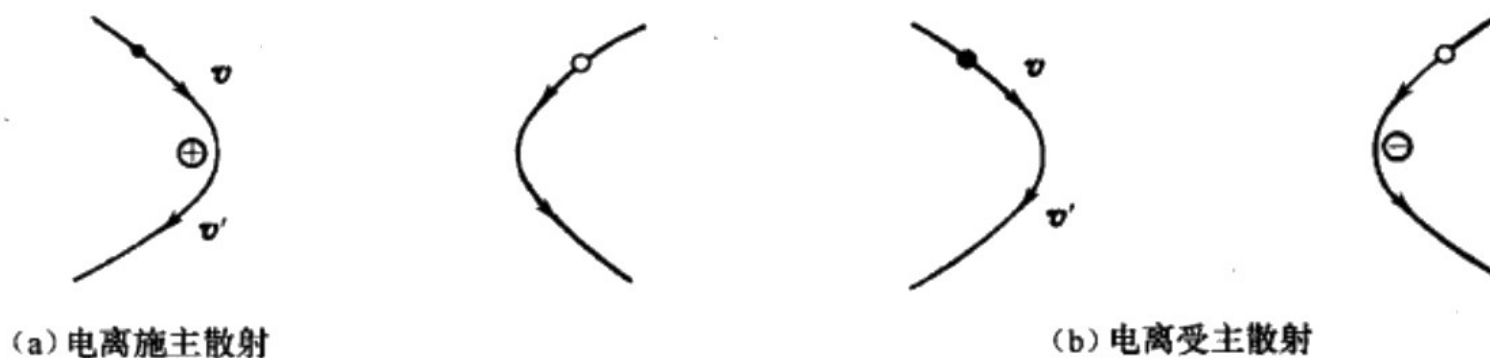
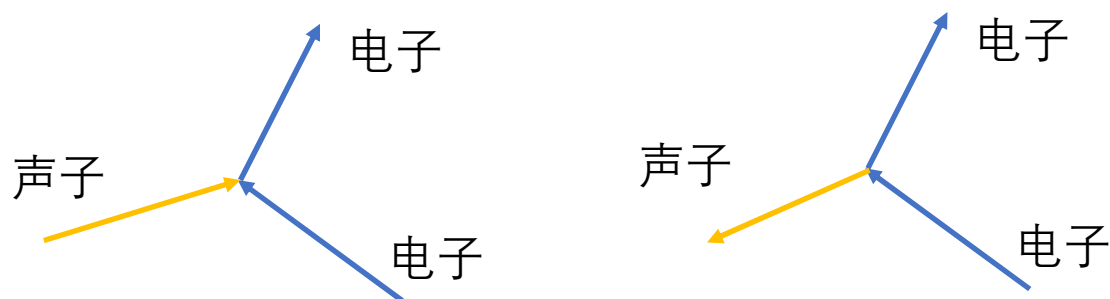


图 4-5 电离杂质散射示意图

●—电子；○—空穴；⊕电离施主；⊖电离受主； v —散射前速度； v' —散射后速度

晶格振动散射



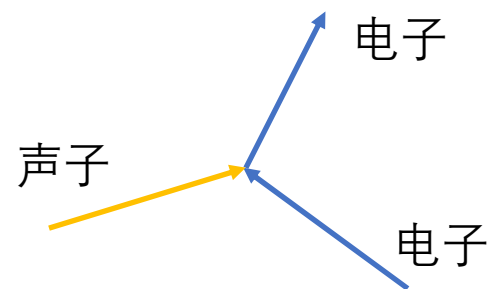
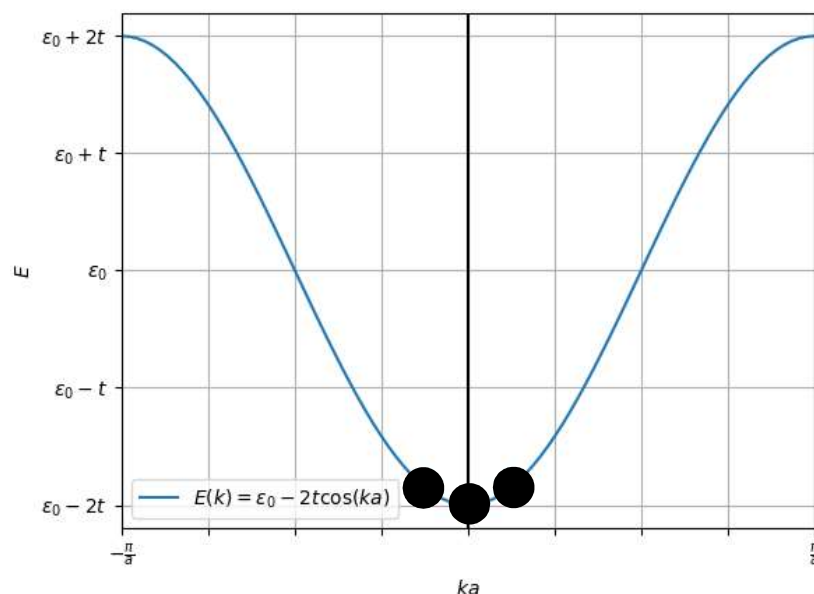
声子：局域化的晶格振动，可带电（极性光学支）或不带电（其它）

小结：主要散射机制

	杂质	声子	
	<u>(低温主导)</u>		
带电： 长程库仑力， 效应较强	电离杂质散射	光学支声子散射	
	$P_i \propto N_i T^{-3/2}$	$P_o \propto \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_o}{k_B T}} - 1}$	声子少，在极性半导体时效应强
	<u>(高温主导)</u>		
中性： 短程势场， 效应较弱	中性杂质散射	声学支声子散射	
	杂质少，效应弱，不重要	$P_a \propto T^{3/2}$	声子多，效应弱，依然重要

哪种声子容易散射电子？

能带中的电子



准动量守恒 $\hbar \mathbf{q} = \hbar \mathbf{k}' - \hbar \mathbf{k}$

能量守恒 $\hbar \omega = E' - E$

- 对于能带边缘， k' 和 k 差距较小，因此 q 也需要较小
- q 小，波长长，低能长波声子容易散射电子
 - 弹性散射

声学支声子散射

- 声子为玻色子，堆积在能量较低处

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E}{k_B T}} - 1} \quad E = \hbar\omega$$

- $q=0$ 附近声子能量最低（长波声子）
- 即使没有电荷的疏密变化，也能造成可观的散射

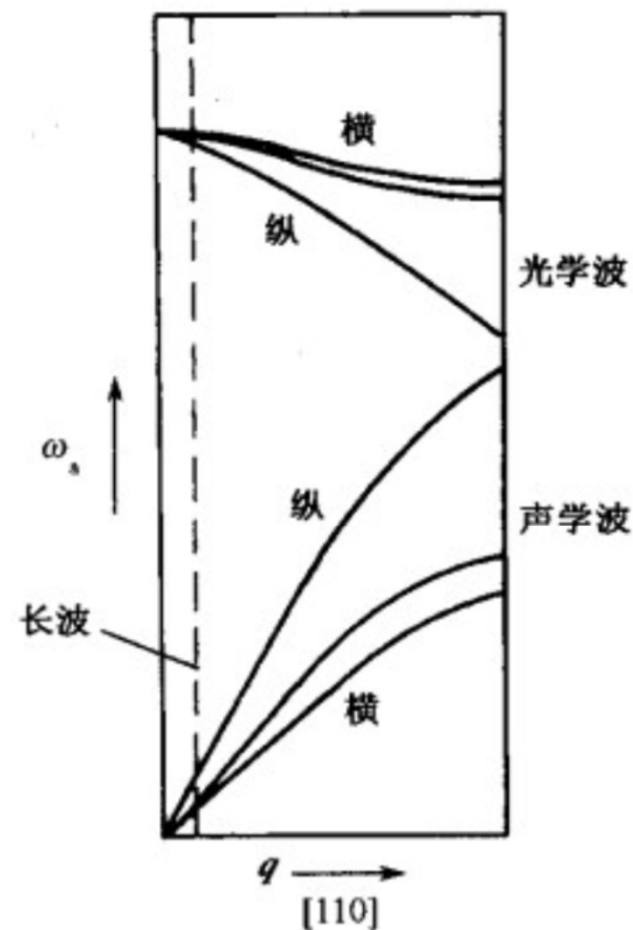


图 4-6 金刚石晶格振动沿 [110]

能谷间散射

- 长波声子散射能谷内电子
 - k' 和 k 差距较小, 因此 q 也需要较小 $\hbar q = \hbar k' - \hbar k$
- 能谷间散射: 对于不同能谷 (如硅导带的六个能谷), k' 和 k 差距较大, 需要短波声子发生作用
- 短波声子能量高, 数目少, 散射不占重要地位
 - 非弹性, 和光学支声子散射类似
- 某些特殊情况下需要考虑 (如强场)

小结： 散射和迁移率

考虑了散射之后， v_d 和 E 成正比

比例系数为迁移率，通常取正值 $|v_d| = \mu|E|$

如有方向问题，可加正负号

迁移率可通过运动方程和散射理论推出 $\mu = q\tau m^{*-1} = \frac{q}{P} m^{*-1}$

$$\mu_n = e\tau_n m_n^{*-1} \quad \mu_p = e\tau_p m_p^{*-1}$$

在常见半导体中，即使能带有各项异性（Si等）， m^* 仍为一个数而不是矩阵，原因是简并的能谷平均了能带的各项异性

例如，硅导带 $m_n^* = m_c^* = \frac{3}{\frac{2}{m_t} + \frac{1}{m_l}}$ 称为电导有效质量

$$\text{因此, } \mu = \frac{q\tau}{m^*} = \frac{q}{Pm^*}$$

小结： 弱场输运

- 载流子的漂移
 - 漂移速度 v_d 和外场成正比
- 迁移率
 - $|v_d| = \mu|E| = \frac{q\tau}{m^*}|E|$
- 电流密度 $\mathbf{j} = nq\mathbf{v}_d$
- 半导体的欧姆定律和电导率
 - $\mathbf{j} = ne\mu_n\mathbf{E} + pe\mu_p\mathbf{E}$
 - $\sigma = ne\mu_n + pe\mu_p$

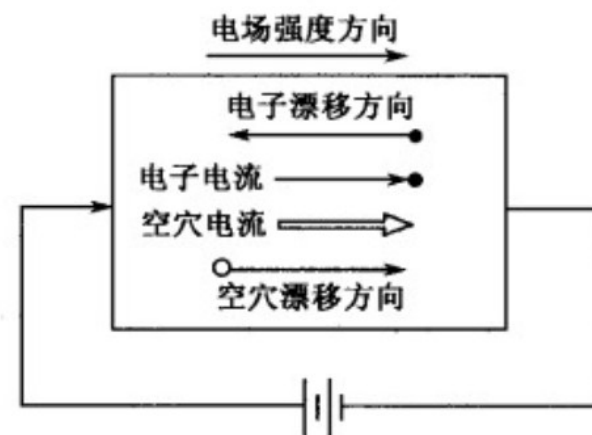


图 4-2 电子漂移电流和
空穴漂移电流

散射的主要机制

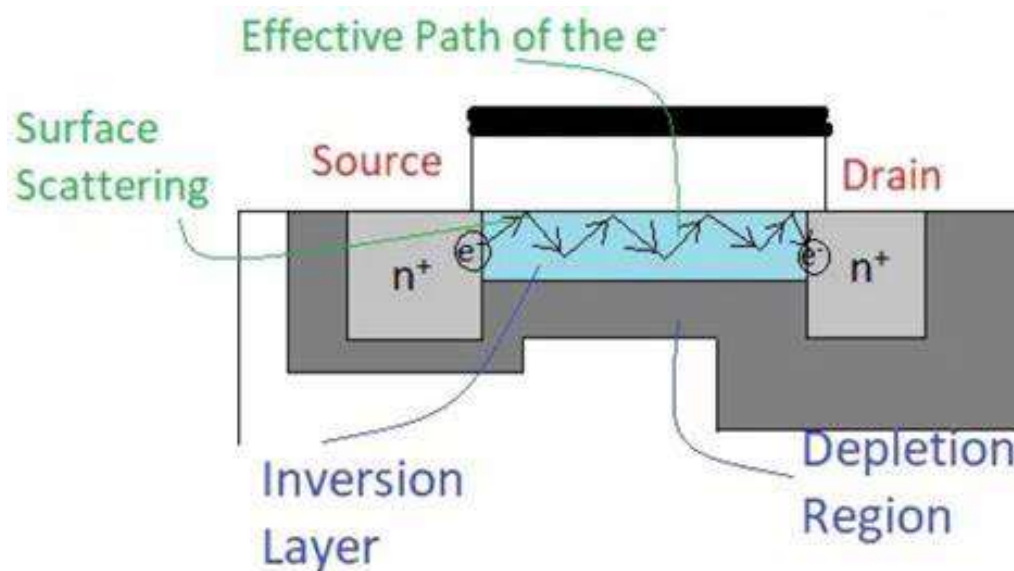
- 电离杂质散射
 - 容易电离的杂质，即施主、受主
- 晶格振动散射（或声子散射）
 - 即使没有杂质、缺陷，晶格也并不是完美的周期结构，原子会在平衡位置附近来回振动
- 其他因素
 - 中性杂质散射
 - 缺陷散射，如位错等
 - 表面散射（晶面截断处）
 - 载流子互相散射

其他散射机制

- 晶格缺陷散射
 - 空位、间隙原子、替位原子散射（点缺陷）：和杂质散射类似，可分为电离和中性两类
 - 商用半导体基本都没有此类问题
 - 位错散射（线缺陷）
 - 单晶半导体位错少，通常较弱
 - 外延半导体里有一定作用
 - 多晶畴壁散射（面缺陷）
 - 为什么大家通常不用多晶半导体来做器件？

其他散射机制

- 表面散射：载流子在表面层（如反型层）运动时受到表面因素如粗糙度作用引起的散射
 - 也可叫做界面散射
 - 引起器件迁移率降低



为什么需要将硅片抛光到原子级别平整度？

其他散射机制

- 电子和（或）空穴散射：在很重掺杂（强简并半导体）时重要
 - 高浓度时载流子容易相遇
 - 可能发生非弹性散射

第四章： 大纲

- 输运、迁移率、散射的概念
 - 载流子的运动（复习第二章）
- 散射机制
 - 杂质散射
 - 晶格振动散射（声子散射）
- **电阻率、迁移率、散射的关系**
- 能带图
- 测量迁移率和电阻率的实验方法

影响迁移率的因素

$$\mu = \frac{q\tau}{m^*}$$

- 有效质量（能带）
 - 原子序数高的半导体，轨道交叠大，能带宽，有效质量小，有可能提高迁移率
 - 例如Ge迁移率大于Si
- 平均自由时间（散射）
 - 电离杂质散射：杂质浓度、温度
 - 声学声子散射：温度
 - 光学声子散射：半导体极性、温度
 - 主要讨论迁移率随温度、杂质浓度的变化关系

迁移率和散射的关系

电子有很多种散射机制，每种机制在单位时间的散射概率为

$$P_i \propto N_i T^{-3/2} \quad P_a \propto T^{3/2} \quad P_o \propto \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_o}{k_B T}} - 1} \quad \text{等}$$

单位时间的总散射概率为 $P = P_i + P_a + P_o + \dots$

总平均自由时间为 $\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{1}{\tau_a} + \frac{1}{\tau_o} + \dots$

由于 $\mu = \frac{q\tau}{m^*}$

总迁移率 $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_i} + \frac{1}{\mu_a} + \frac{1}{\mu_o} + \dots$

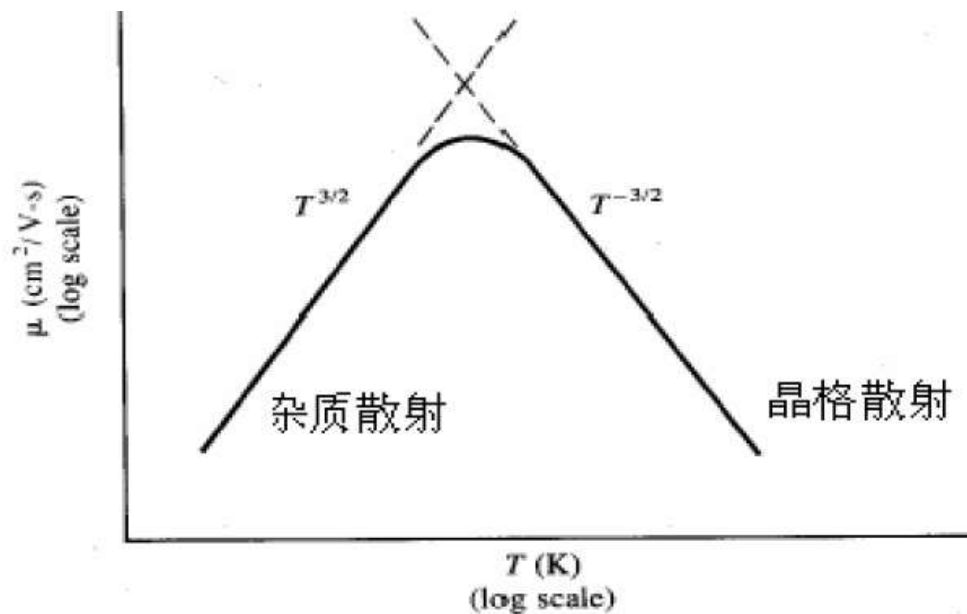
以下只考虑最具代表性的非极性半导体

迁移率和温度的关系

非极性半导体有

$$P = P_i + P_a = AN_i T^{-3/2} + BT^{3/2}$$

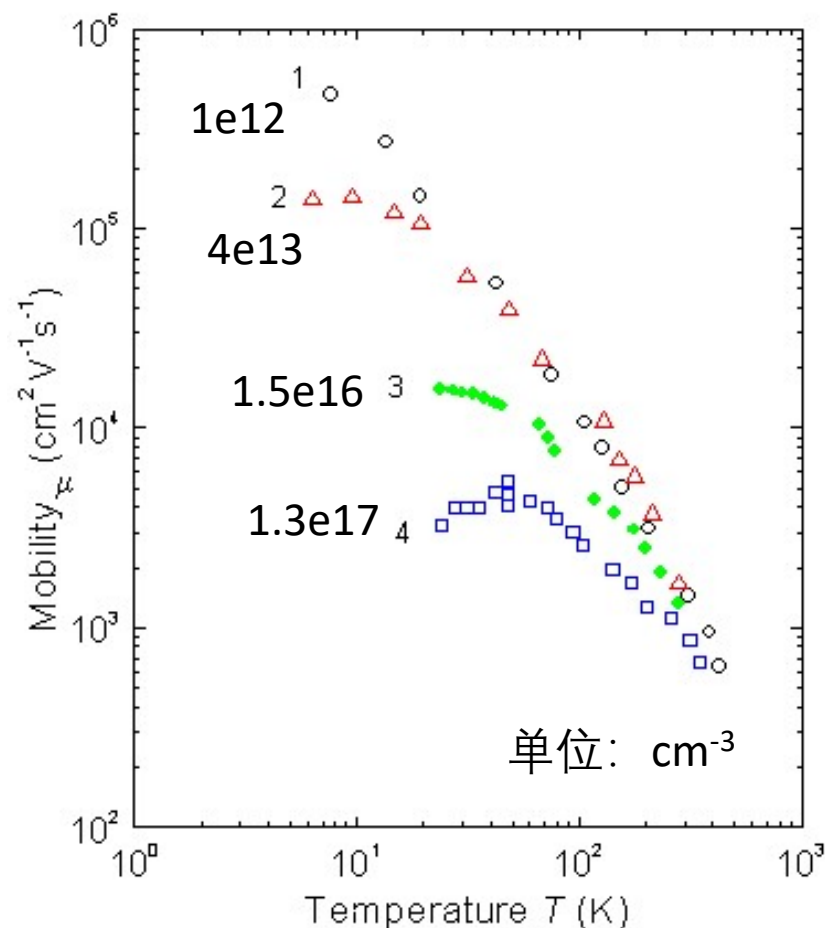
$$\mu = \frac{q}{m^*(AN_i T^{-3/2} + BT^{3/2})}$$



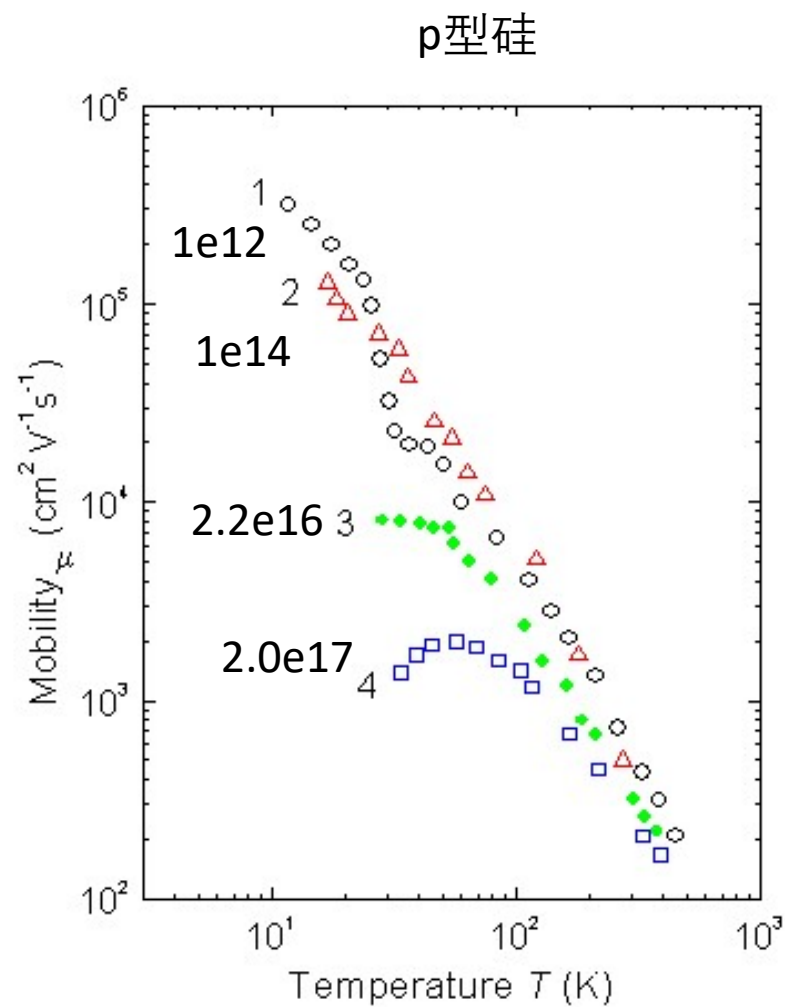
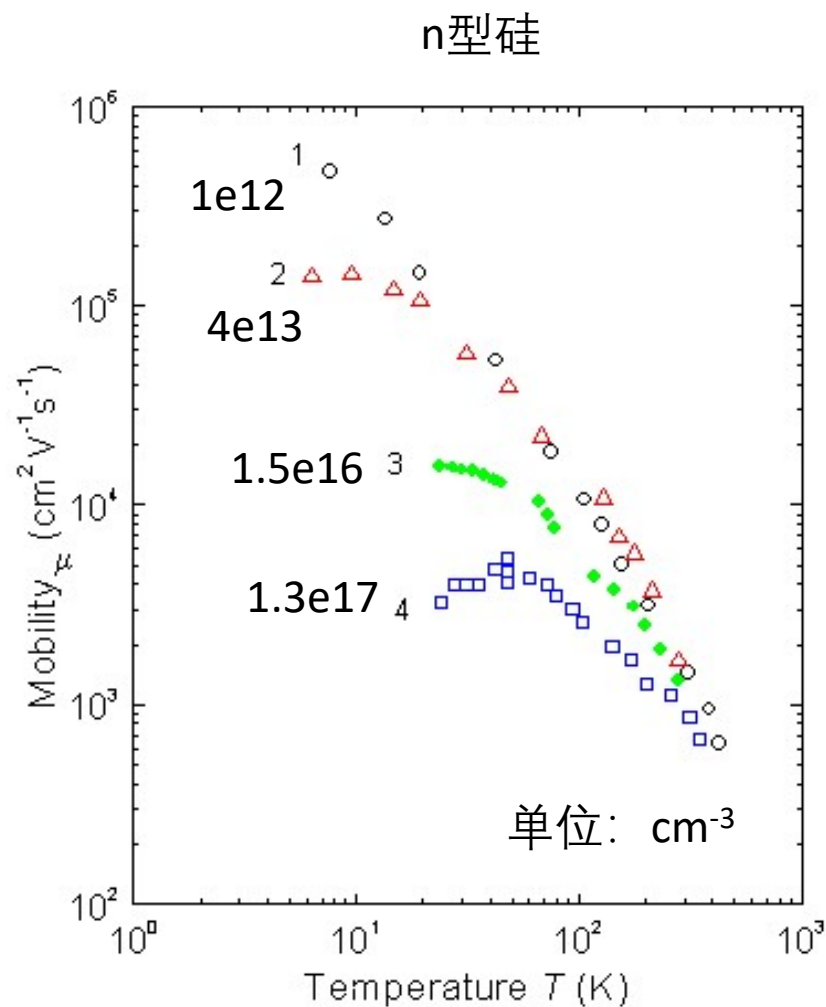
因此，在低温下，电离杂质散射占主要地位；高温下，声学支声子散射占主要地位

迁移率和温度的关系

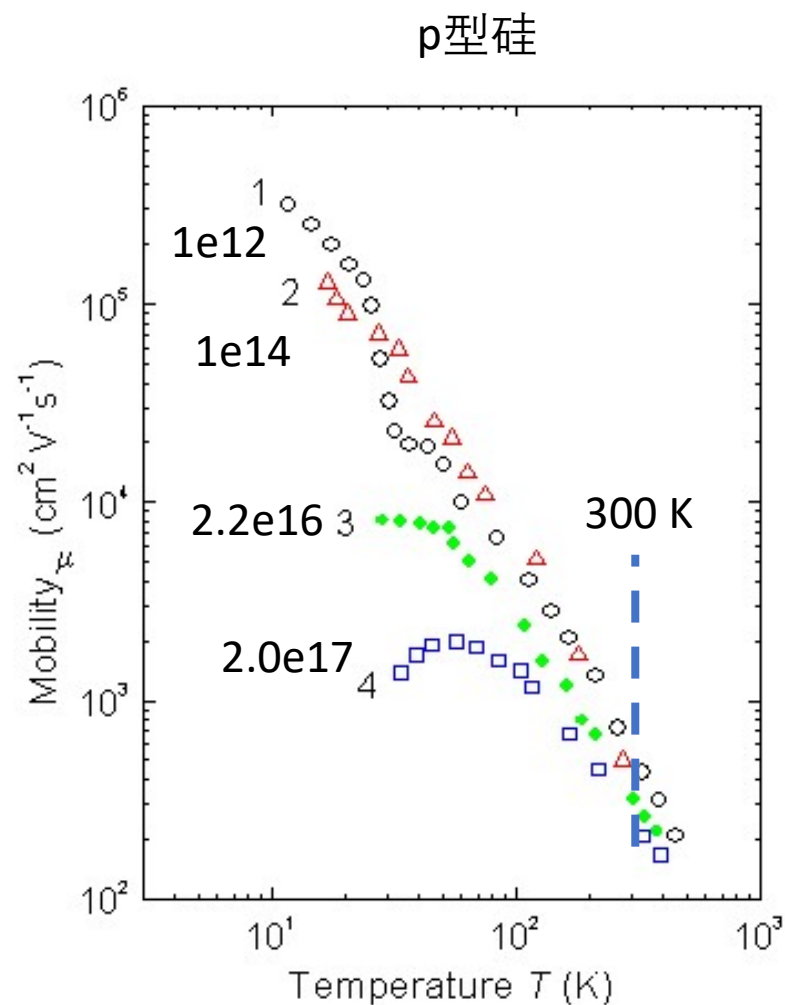
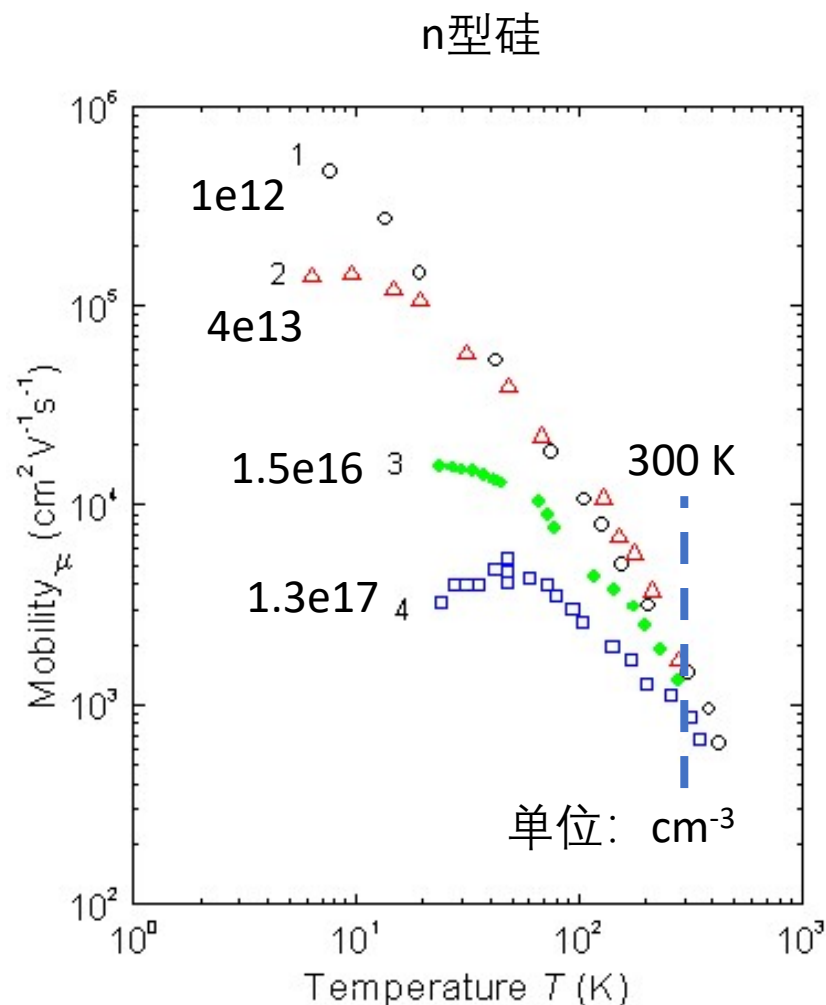
- 不同掺杂浓度n型硅的迁移率-温度关系
- 掺杂越少，越接近完美的声子散射
- 高掺杂的情况，在几十K时曲线下弯，显示出明显的电离杂质散射



迁移率和温度的关系



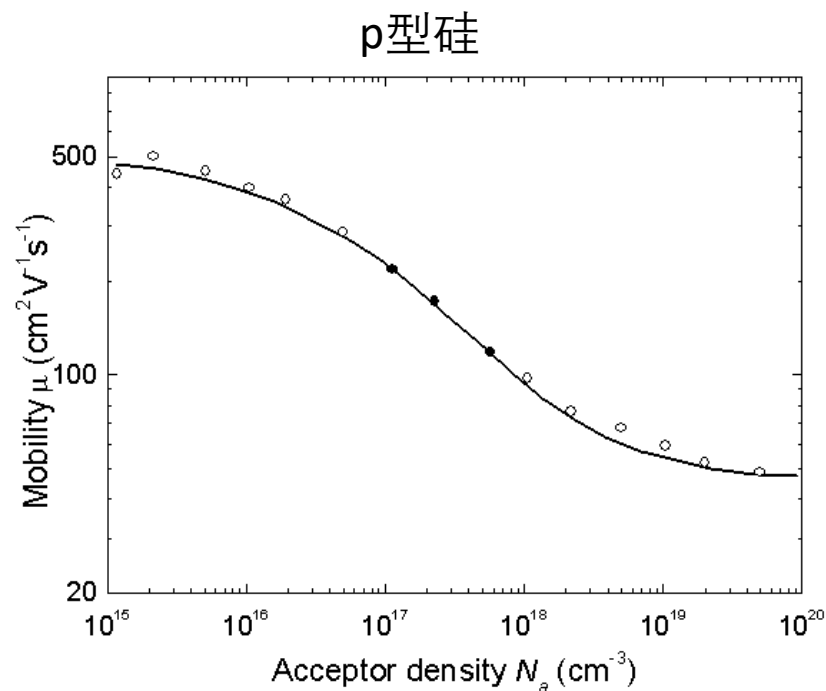
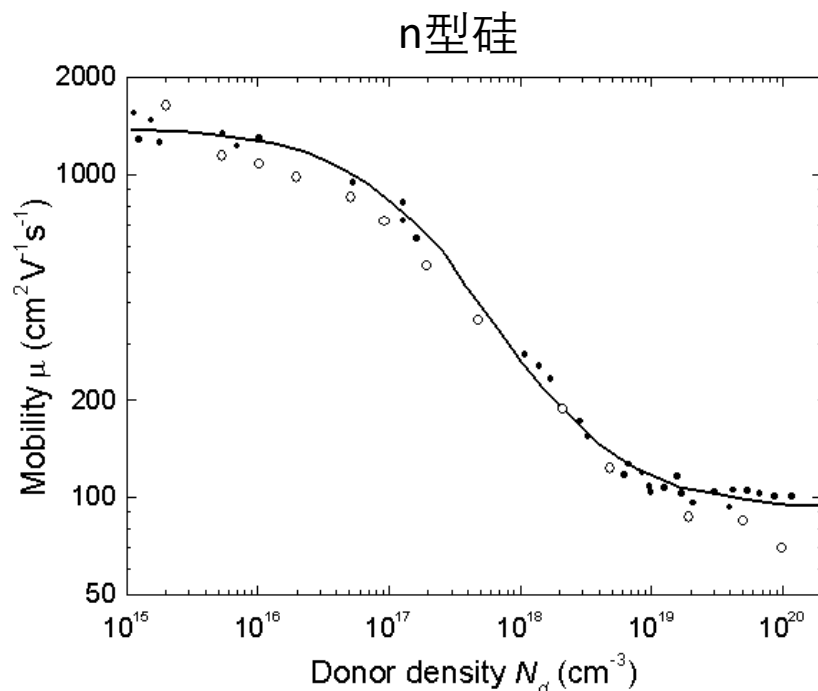
迁移率和杂质浓度的关系



迁移率和杂质浓度的关系

$$\mu = \frac{q}{m^*(AN_iT^{-3/2} + BT^{3/2})}$$

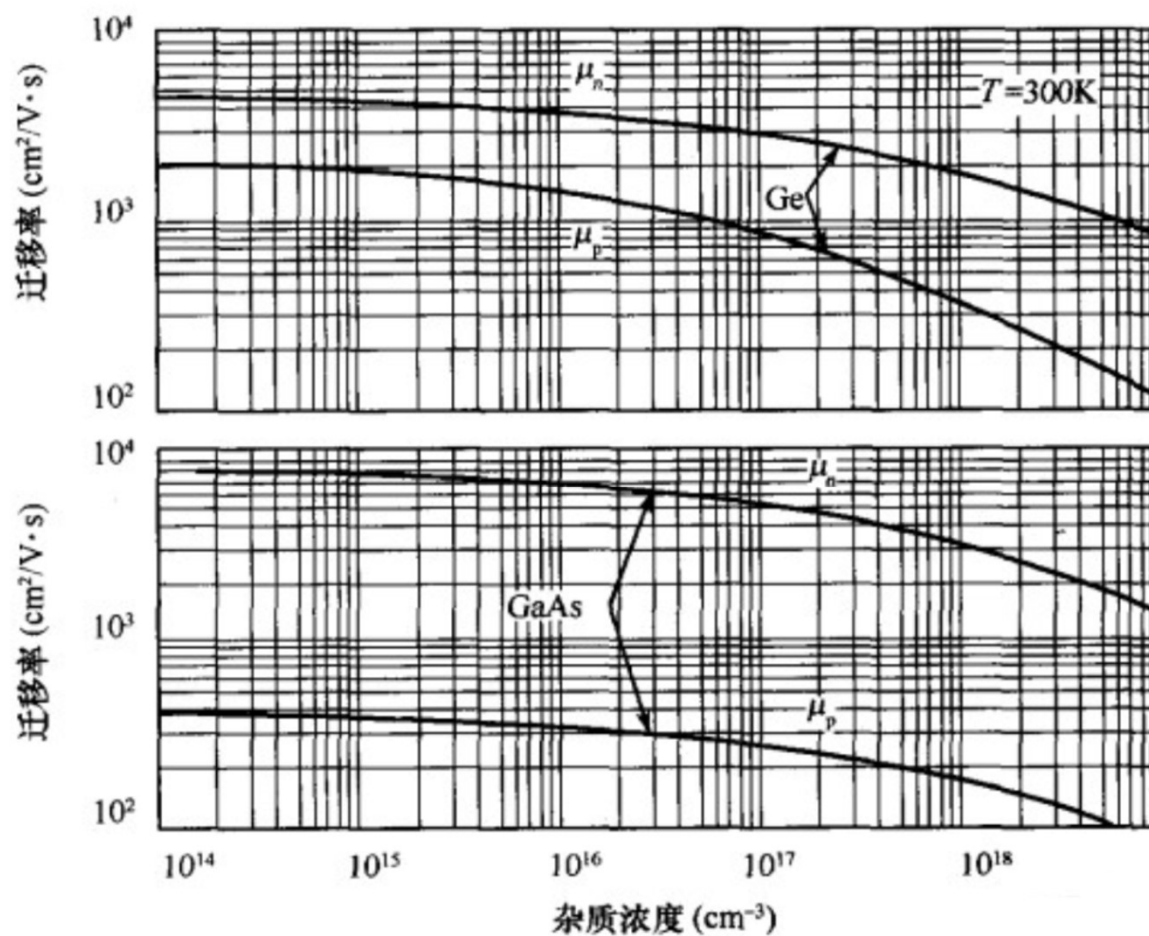
室温下，掺杂浓度不太高($<10^{17} \text{ cm}^{-3}$)，声子散射为主，迁移率基本不变



重掺杂时杂质散射在室温也不能忽略。而且由于进入简并区，杂质能级扩展成能带，相当一部分载流子在杂质能带上运动，有效质量不同

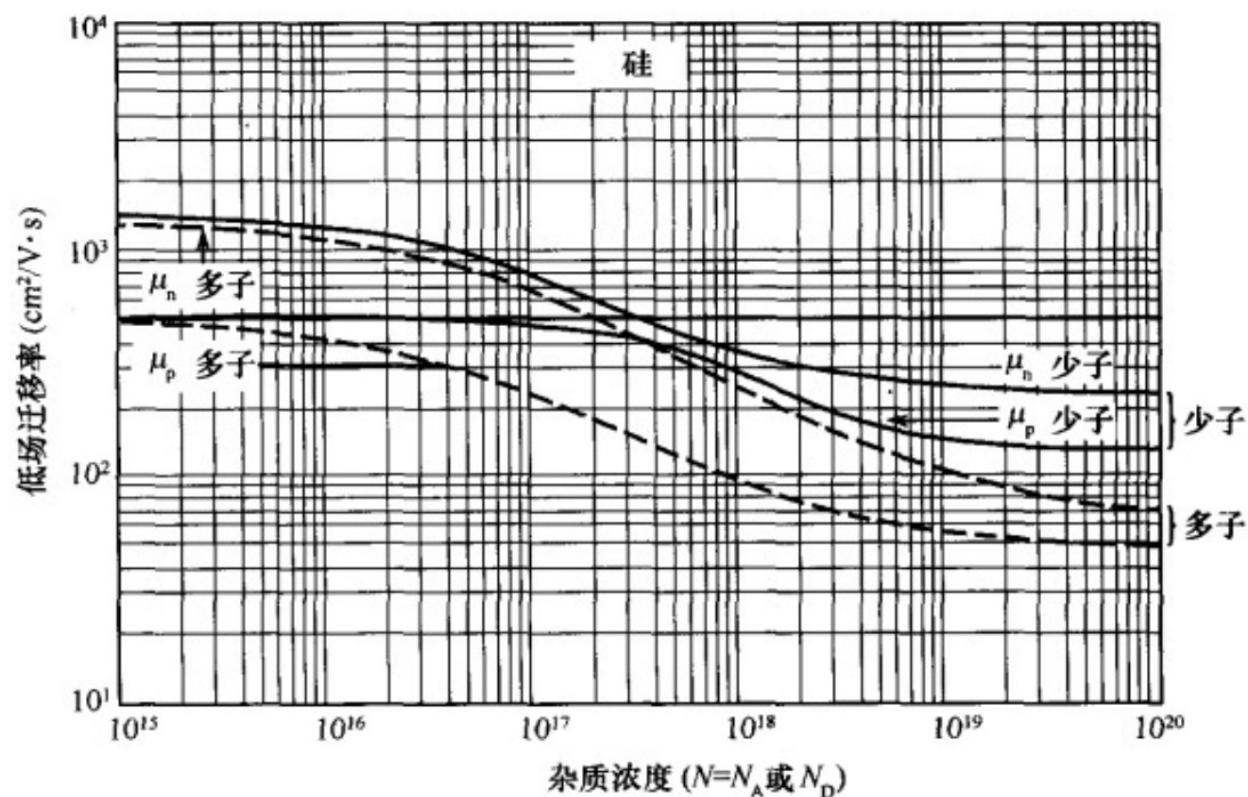
迁移率和杂质浓度的关系

$$\mu = \frac{q}{m^* (AN_i T^{-3/2} + BT^{3/2})}$$



迁移率和杂质浓度的关系

多子和少子的迁移率



多子在杂质能带上运动，
少子不在杂质能带上运
动，迁移率不同

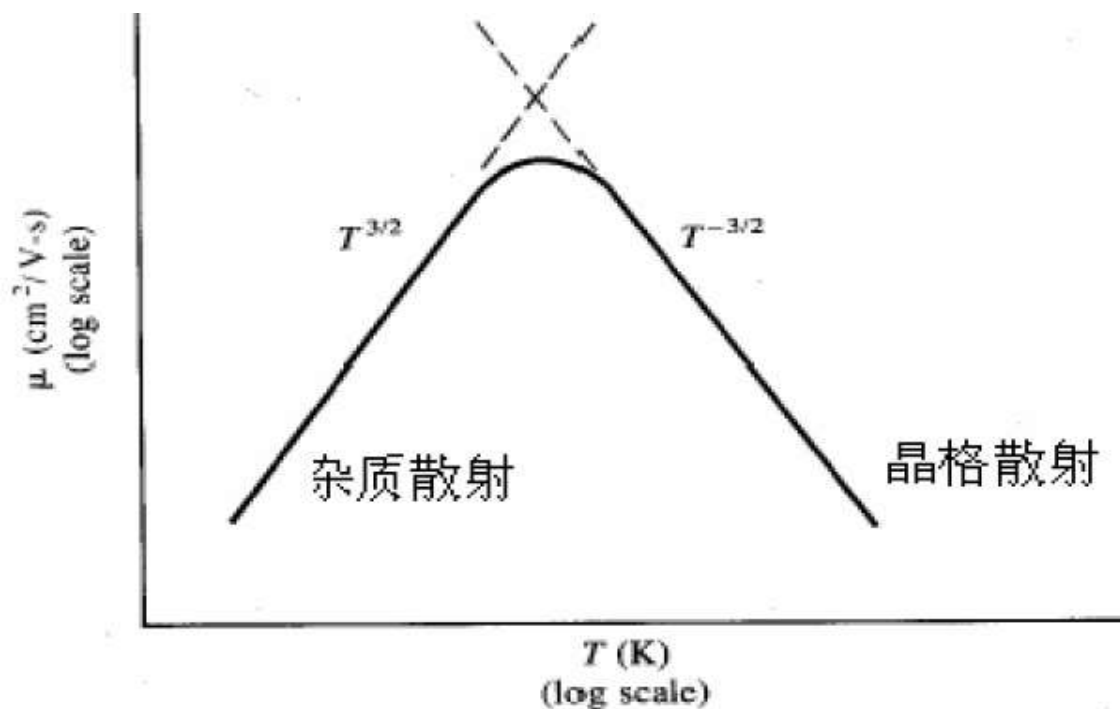
图 4-14 (a) 室温时 n 型和 p 型硅中多数载流子和少数载流子迁移率与杂质浓度的关系

实线：少子迁移率；虚线：多子迁移率^[9]

小结：影响迁移率的因素

- 非极性半导体中，温度 T 、电离杂质浓度 N_i

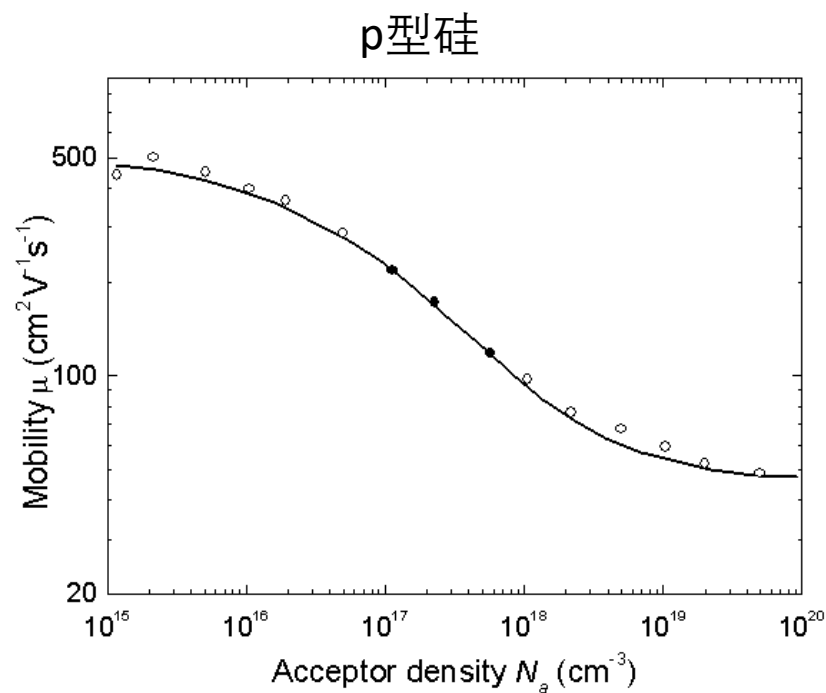
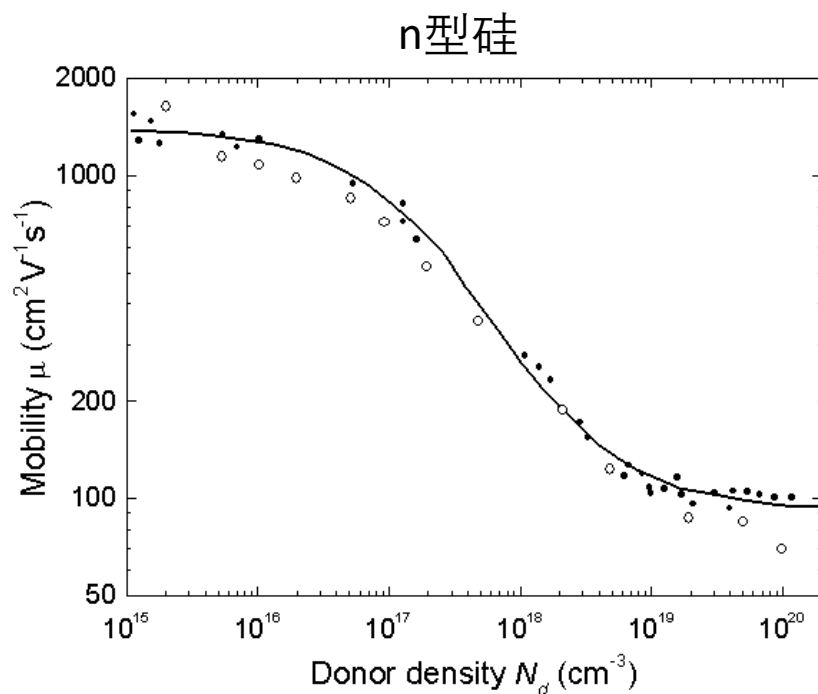
$$\mu = \frac{q}{m^*(AN_iT^{-3/2} + BT^{3/2})}$$



小结：影响迁移率的因素

- 非极性半导体中，温度 T 、电离杂质浓度 N_i

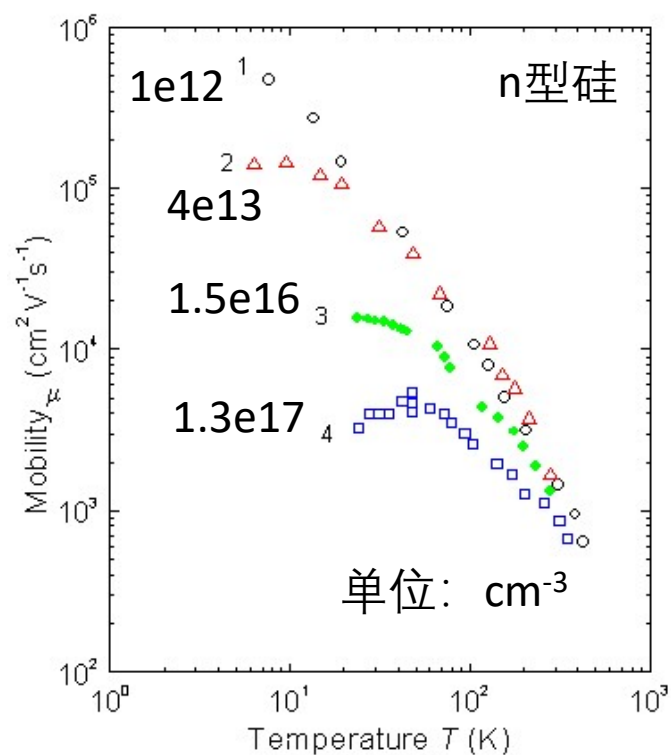
室温下，掺杂浓度不太高($<10^{17} \text{ cm}^{-3}$)，声子散射为主，迁移率基本不变



重掺杂时杂质散射在室温也不能忽略。而且由于进入简并区，杂质能级扩展成能带，相当一部分载流子在杂质能带上运动，有效质量不同

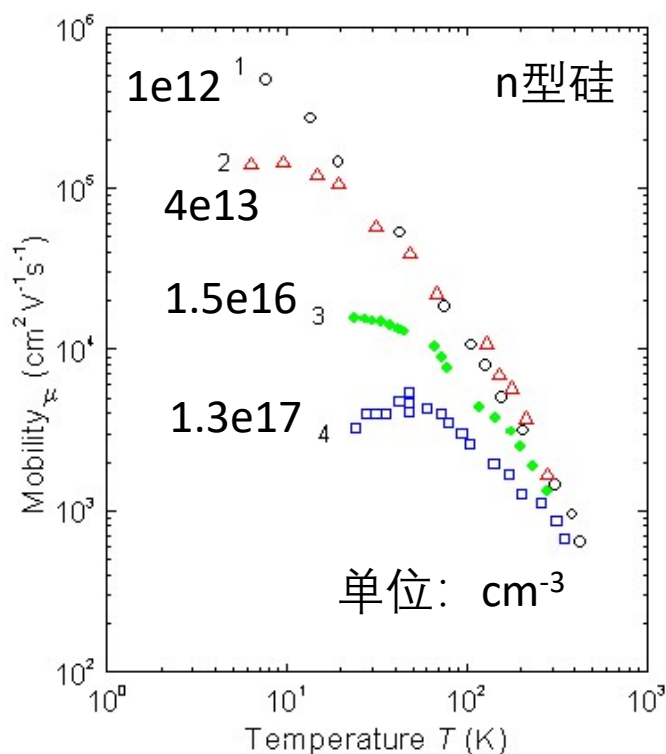
例题：迁移率估算

- 硅中掺杂了 $1\text{e}16\text{ cm}^{-3}$ 的锑，300 K时迁移率约为 $1500\text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。试估算其在350 K时的迁移率。



例题：迁移率估算

- 硅中掺杂了 $1\text{e}16\text{ cm}^{-3}$ 的锑，300 K时迁移率约为 $1500\text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。试估算其在350 K时的迁移率。



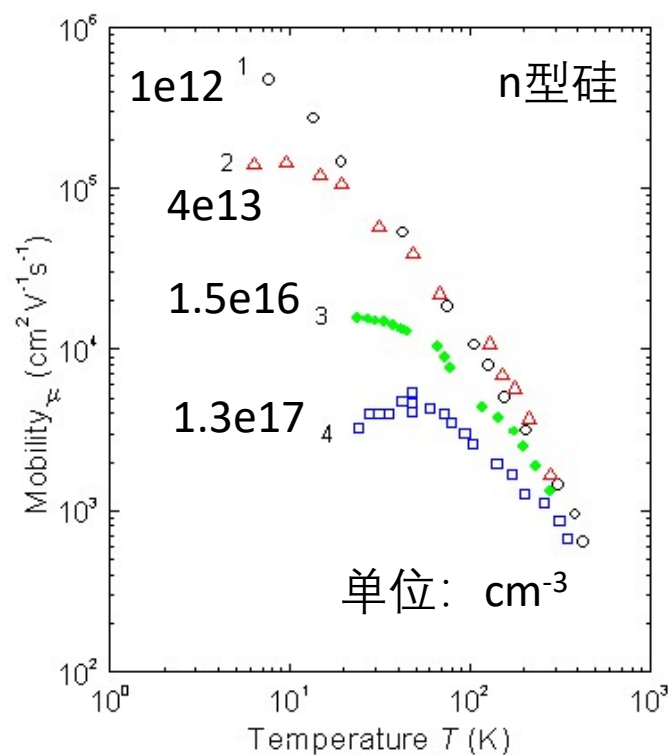
$$\mu = \frac{q}{m^*(AN_i T^{-3/2} + BT^{3/2})}$$

高温以晶格振动散射（声学声子散射）主导， $\mu \propto T^{-3/2}$ 。

答案：约为 $1190\text{ cm}^2/\text{Vs}$

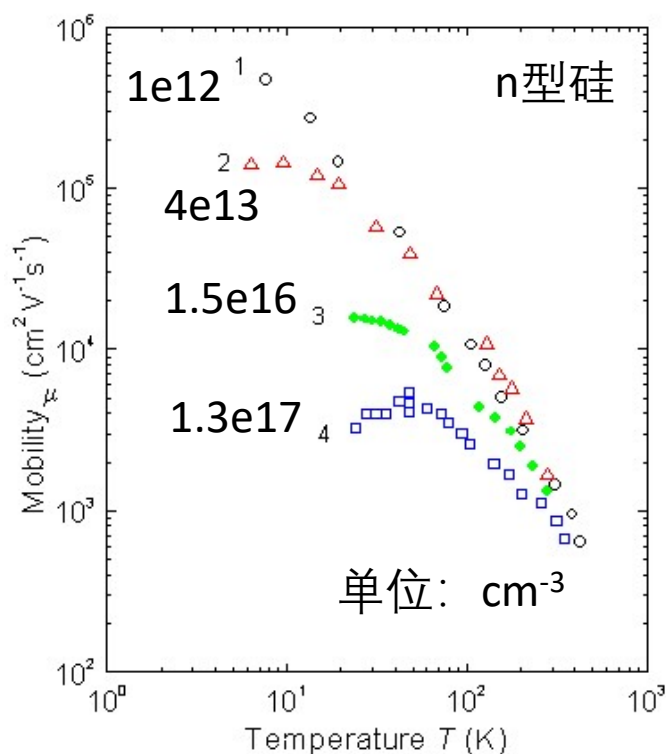
例题：迁移率估算

- 硅中掺杂了 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ 的锑，20 K时迁移率约为 $3000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。掺 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 的锑，20 K时迁移率为？



例题：迁移率估算

- 硅中掺杂了 $1e17 \text{ cm}^{-3}$ 的锑，20 K时迁移率约为 $3000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ 。掺 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 的锑，20 K时迁移率为？



$$\mu = \frac{q}{m^* (AN_i T^{-3/2} + BT^{3/2})}$$

低温以电离杂质散射主导, $\mu \propto T^{3/2}/N_i$ 。

答案：约为 $30000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$

(本题并不严谨，还需计算电离度)

电阻率的计算

一种载流子的电阻率 $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{nq\mu}$

同时考虑多子和少子的电阻率 $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{ne\mu_n + pe\mu_p}$

- 电阻率和载流子浓度、迁移率有关
- 载流子浓度和温度、掺杂浓度有关
- 迁移率也和温度、掺杂浓度有关
- 因此，电阻率和温度、掺杂浓度有关

载流子浓度 (第三章)

本征半导体

$$n_i = \frac{(m_n^* m_p^*)^{3/4}}{\sqrt{2} \pi^{3/2} \hbar^3} (k_B T)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

掺杂半导体

- 1. 低温弱电离区
- 2. 中间电离区
- 3. 强电离区
- 4. 过渡区
- 5. 高温本征激发区

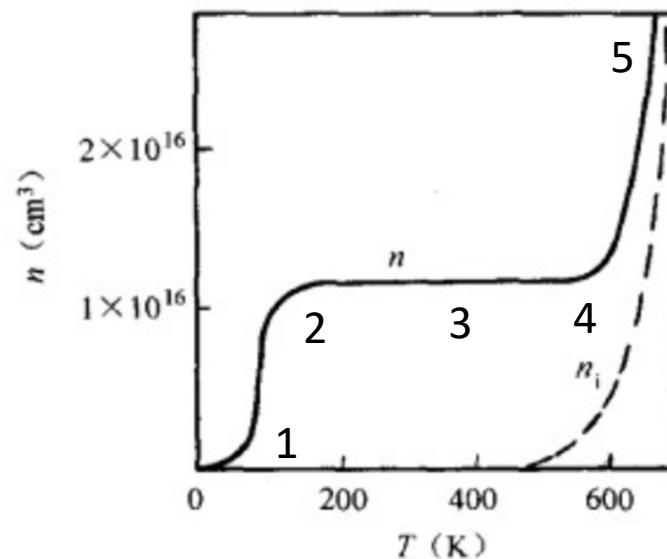
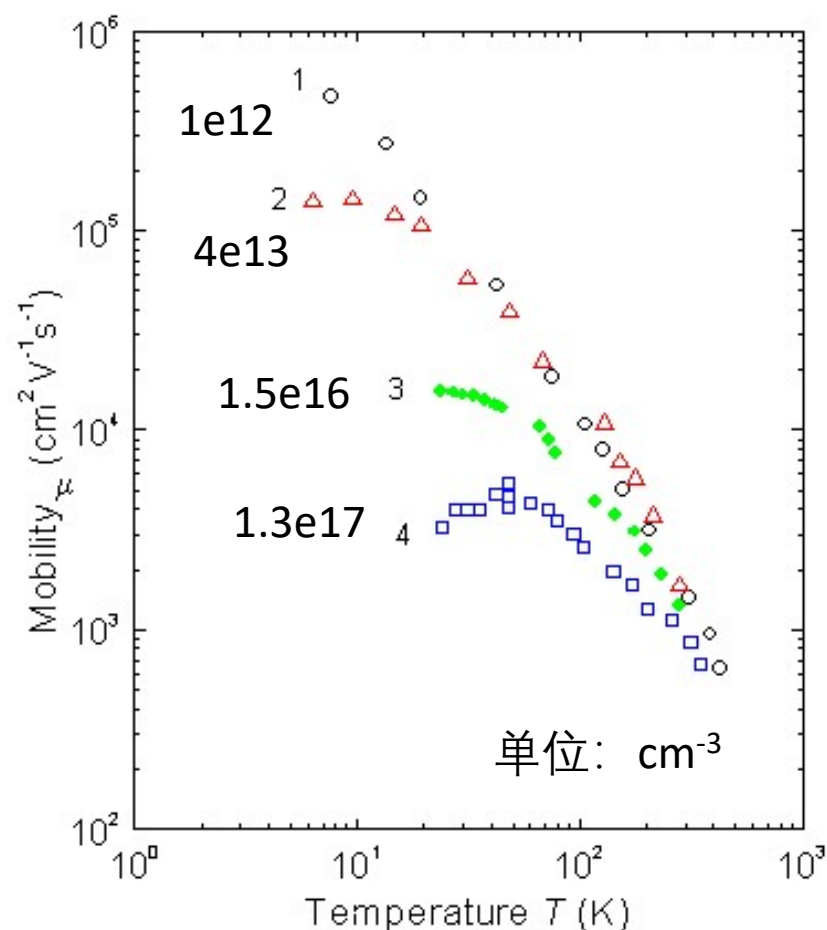
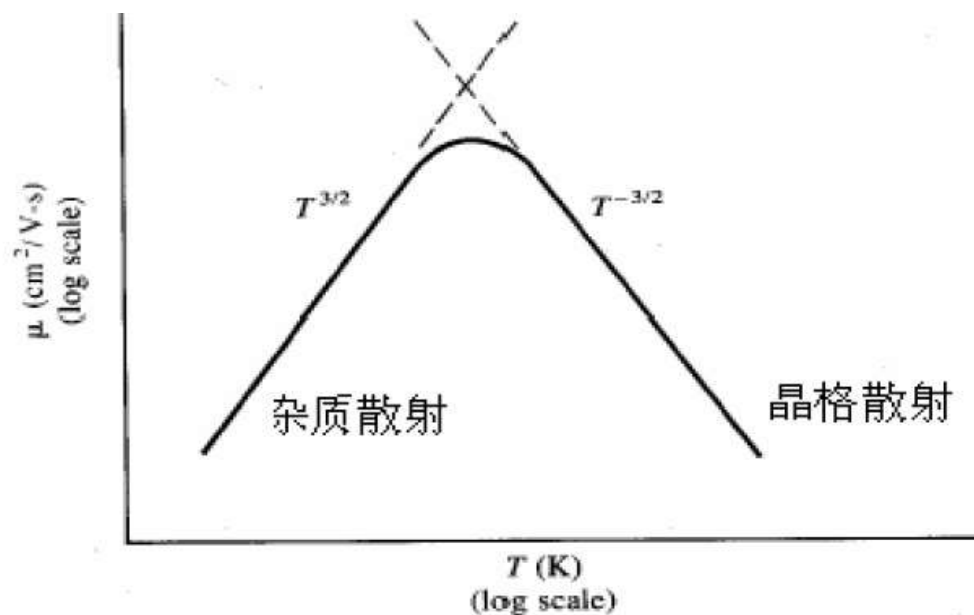


图 3-11 n 型硅的电子浓度与温度的关系^[8,9]曲线

迁移率 (本章)

非极性半导体
$$\mu = \frac{q}{m^*(AN_i T^{-3/2} + BT^{3/2})}$$

电离杂质散射 声学声子散射



本征半导体的电阻率和温度

电阻率 $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{ne\mu_n + pe\mu_p}$

载流子浓度 $n = p = n_i = \frac{(m_n^* m_p^*)^{3/4}}{\sqrt{2}\pi^{3/2}\hbar^3} (k_B T)^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}} \propto T^{3/2} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$

本征半导体电离杂质浓度可忽略，电离杂质散射可忽略

迁移率 $\mu = \frac{q}{m^*(AN_i T^{-3/2} + BT^{3/2})} = \frac{q}{m^* BT^{3/2}} \propto T^{-3/2}$

因此 $\rho \propto \frac{1}{n_i \mu} \propto T^{-3/2} e^{\frac{E_g}{2k_B T}} T^{3/2} = e^{\frac{E_g}{2k_B T}}$

- 本征半导体的电阻率随温度升高而迅速下降
 - 很高温（通常达不到）时趋于常数

掺杂半导体的电阻率和温度

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{nq\mu}$$

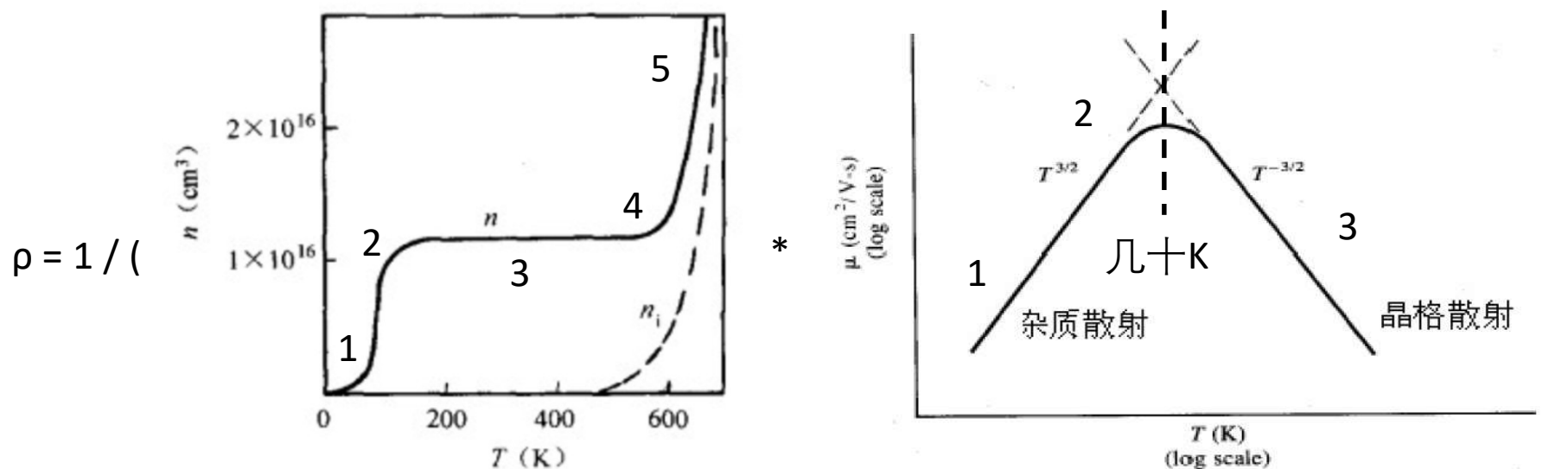


图 3-11 n 型硅的电子浓度与温度的关系^[8,9]曲线

掺杂半导体的电阻率和温度

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{nq\mu}$$

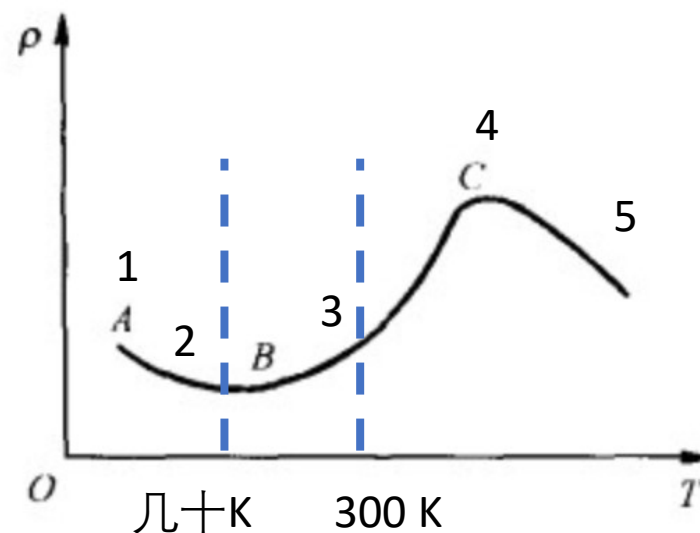
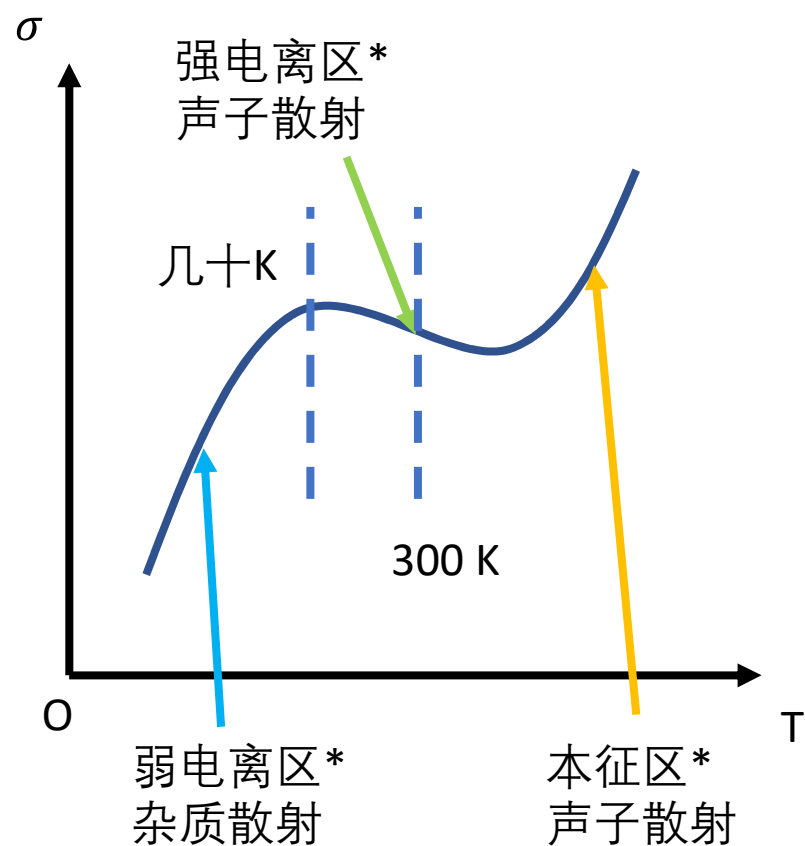
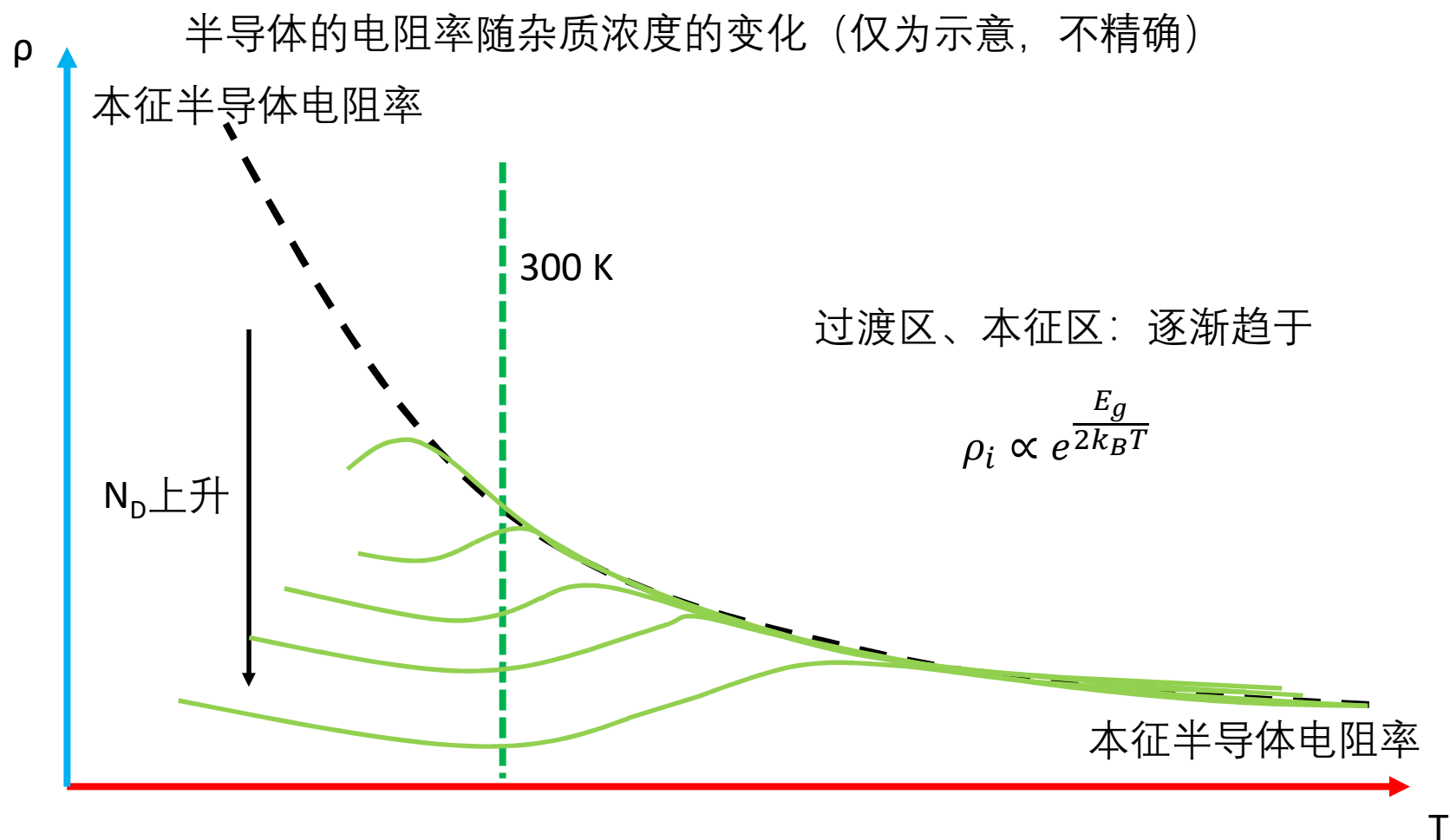


图 4-16 硅电阻率与
温度关系示意图

掺杂半导体的电阻率



电阻率和杂质浓度的关系

一种载流子的电阻率 $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{nq\mu}$

同时考虑多子和少子的电阻率 $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{ne\mu_n + pe\mu_p}$

- 通常考虑室温时的电阻率
- 室温时，非简并的Si、Ge等掺杂半导体处于强电离区， $n=N_D$ ， $p=N_A$
- 掺杂浓度 $<1e17 \text{ cm}^{-3}$ ，迁移率基本不变
- 因此，对于非简并掺杂半导体， $\rho = \frac{1}{nq\mu} \propto \frac{1}{N_D}$ 或 $\frac{1}{N_A}$

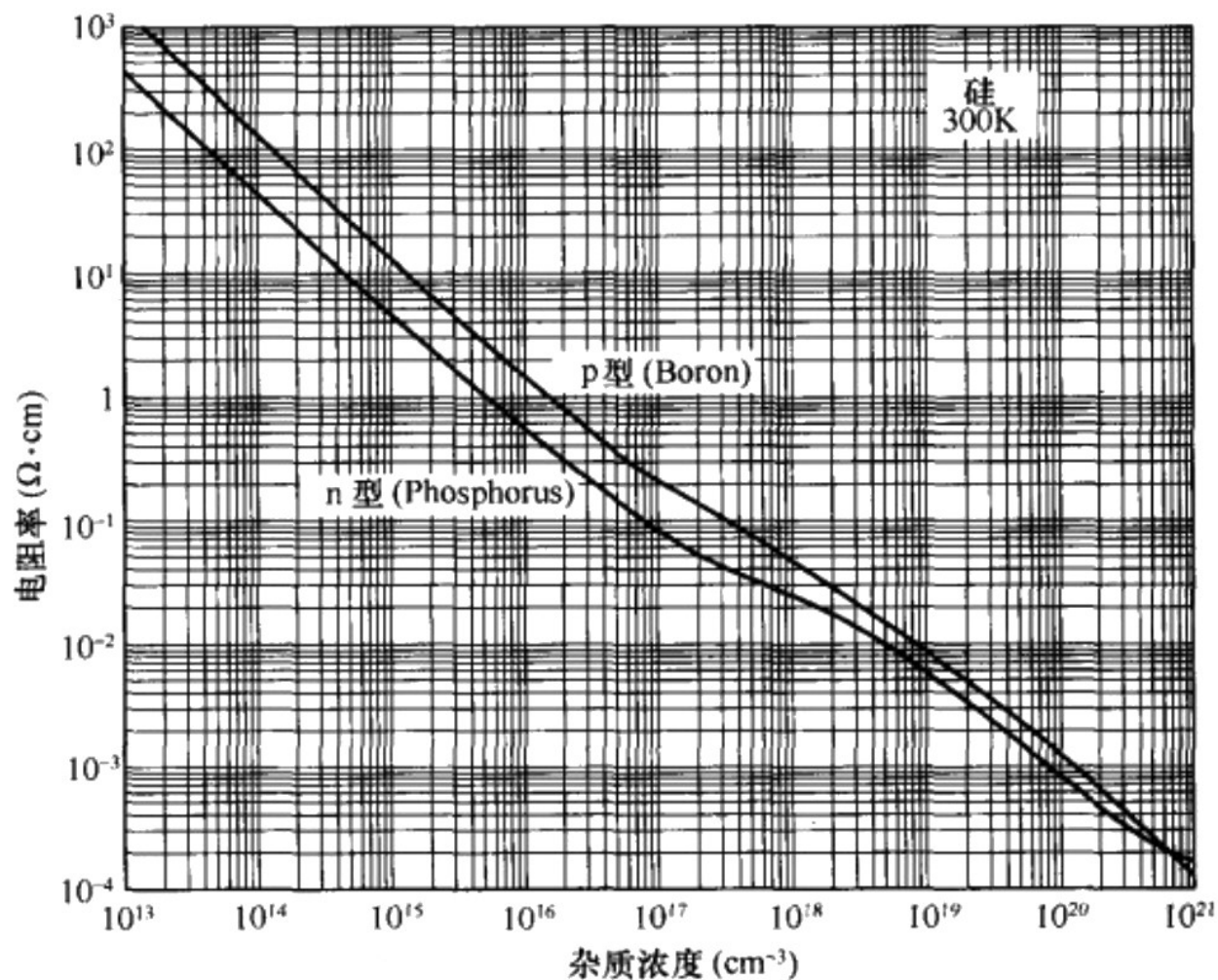
电阻率和杂质浓度的关系

- 非简并掺杂半导体 ($<10^{17} \text{ cm}^{-3}$)
 - $\rho = \frac{1}{nq\mu} \propto \frac{1}{N_D}$ 或 $\frac{1}{N_A}$
 - 双对数坐标下 $\log \rho = -\log N_D + C$ 或 $\log \rho = -\log N_A + C$
 - 斜率为-1
- 重掺杂时由于迁移率降低，此关系会略有偏离
 - μ 减小， ρ 会更大
 - $\log \rho = -\log N_D + C$ 或 $\log \rho = -\log N_A + C$ 会向上偏
- 通常电子迁移率略大，n型半导体电阻率较低

电阻率和杂质浓度的关系

非简并掺杂半导体斜率为-1

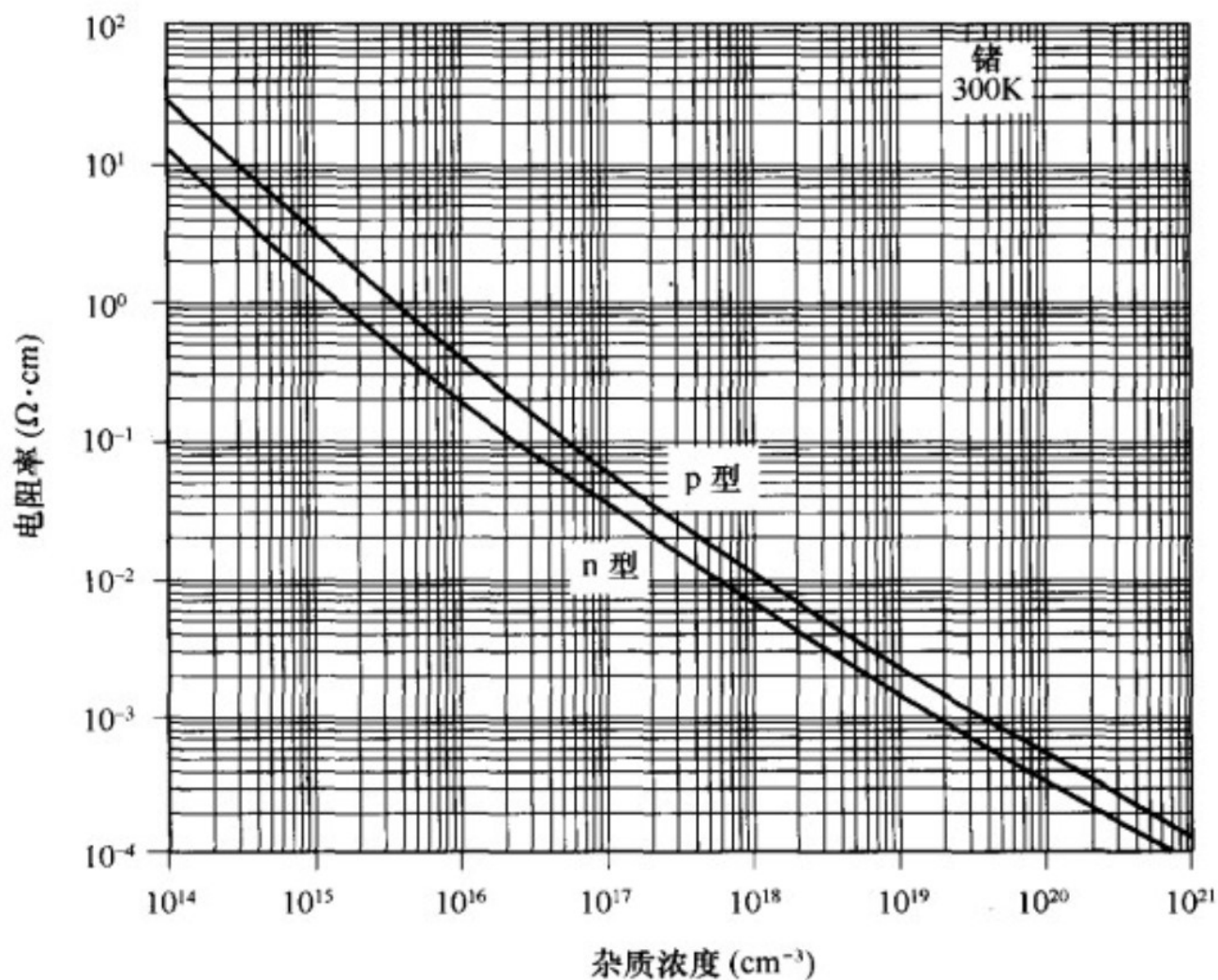
重掺杂时由于迁移率降低，会向上偏



电阻率和杂质浓度的关系

非简并掺杂半导体斜率为-1

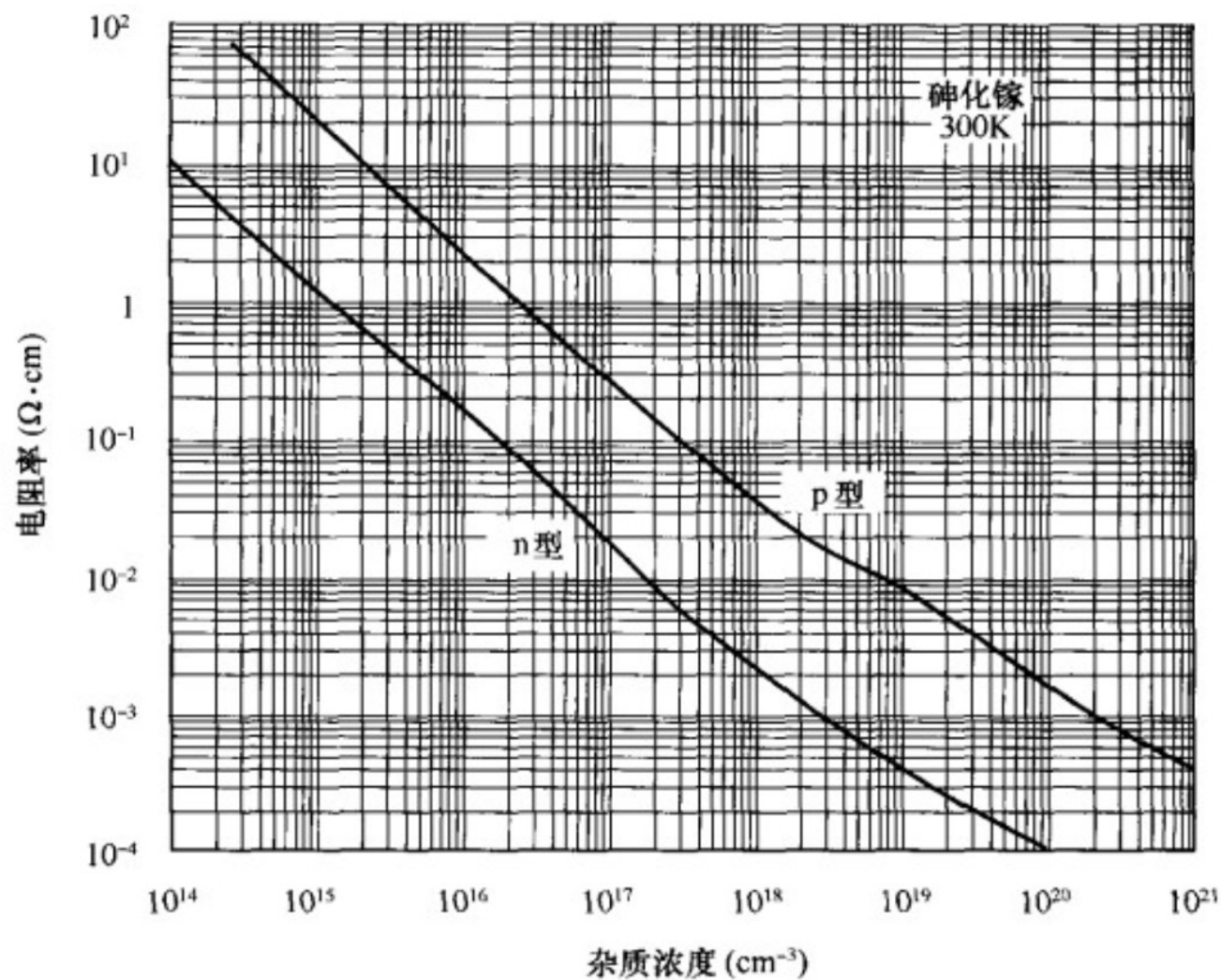
重掺杂时由于迁移率降低，会向上偏



电阻率和杂质浓度的关系

非简并掺杂半导体斜率为-1

重掺杂时由于迁移率降低，会向上偏



小结：影响电阻率的因素

- 电阻率和载流子浓度、迁移率有关 $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{ne\mu_n + pe\mu_p}$
- 载流子浓度和温度、掺杂浓度有关（第三章）
- 迁移率也和温度、掺杂浓度有关 $\mu = \frac{q}{m^*(AN_iT^{-3/2} + BT^{3/2})}$
- 因此，电阻率和温度、掺杂浓度有关

- 本征半导体随温度 $\rho \propto e^{\frac{E_g}{2k_B T}}$

- 掺杂半导体随温度

- 室温，非简并掺杂半导体

随掺杂浓度

$$\rho = \frac{1}{nq\mu} \propto \frac{1}{N_D} \text{ 或 } \frac{1}{N_A}$$

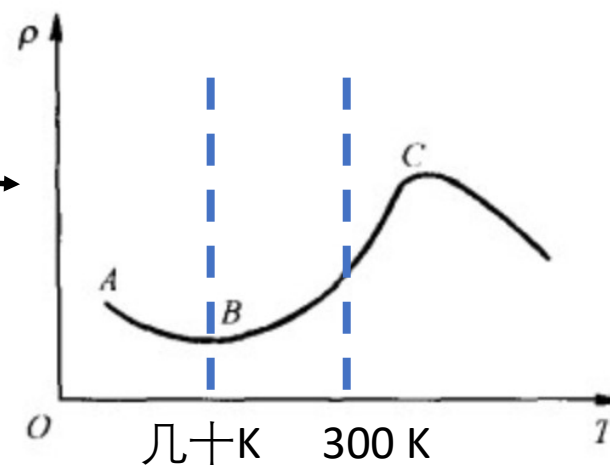


图 4-16 硅电阻率与
温度关系示意图

例题：电阻率估算

- 一片本征硅晶圆室温300 K的电阻率为100000 Ohm.cm。试估算其在350 K时的电阻率。

$$E_g = 1.12 \text{ eV}, \quad k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$$

例题： 电阻率估算

- 一片本征硅晶圆室温300 K的电阻率为100000 Ohm.cm。试估算其在350 K时的电阻率。

$$\rho \propto e^{\frac{E_g}{2k_B T}}$$

代入 $E_g=1.12$ eV, $k_B=1.38e-23$ J/K可得

$$\rho_{350K} / \rho_{300K} = 0.045$$

因此 $\rho_{350K} = 4500$ Ohm.cm

例题：电阻率估算

- 硅中掺杂了 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 的锑，300 K时电阻率为0.5 Ohm.cm。试估算其在350 K时的电阻率。

$$E_C - E_D = 40 \text{ meV} \quad k_B T (300 \text{ K}) = 26 \text{ meV} \quad E_g = 1.12 \text{ eV}, \quad k_B = 1.38e-23 \text{ J/K}$$

表 3-2 300K 下锗、硅、砷化镓的本征载流子浓度

各项参数	$E_g (\text{eV})$	$m_n^* (m_{dn})$	$m_p^* (m_{dp})$	$N_c (\text{cm}^{-3})$	$N_v (\text{cm}^{-3})$	$n_i (\text{cm}^{-3})$ (计算值)	$n_i (\text{cm}^{-3})$ (测量值)
Ge	0.67	$0.56m_0$	$0.29m_0$	1.05×10^{19}	3.9×10^{18}	1.7×10^{13}	2.33×10^{13}
Si	1.12	$1.062m_0$	$0.59m_0$	2.8×10^{19}	1.1×10^{19}	7.8×10^9	1.02×10^{10}
GaAs	1.428	$0.068m_0$	$0.47m_0$	4.5×10^{17}	8.1×10^{18}	2.3×10^6	1.1×10^7

例题：电阻率估算

- 硅中掺杂了 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 的锑，300 K时电阻率为0.5 Ohm.cm。试估算其在350 K时的电阻率。

首先判断在哪个区

$$T = 300 \text{ K}, \quad p < n_i = 1e10 \ll N_D$$

$$T = 350 \text{ K}, \quad p < n_i = 2.8e11 \ll N_D \quad \text{注意, } n_i \text{ 正比于 } T^{3/2} e^{-E_g/2kBT}$$

价带导带激发不明显

$$N_C (300 \text{ K}) = 3e19 \text{ cm}^{-3} \quad E_C - E_D = 40 \text{ meV}$$

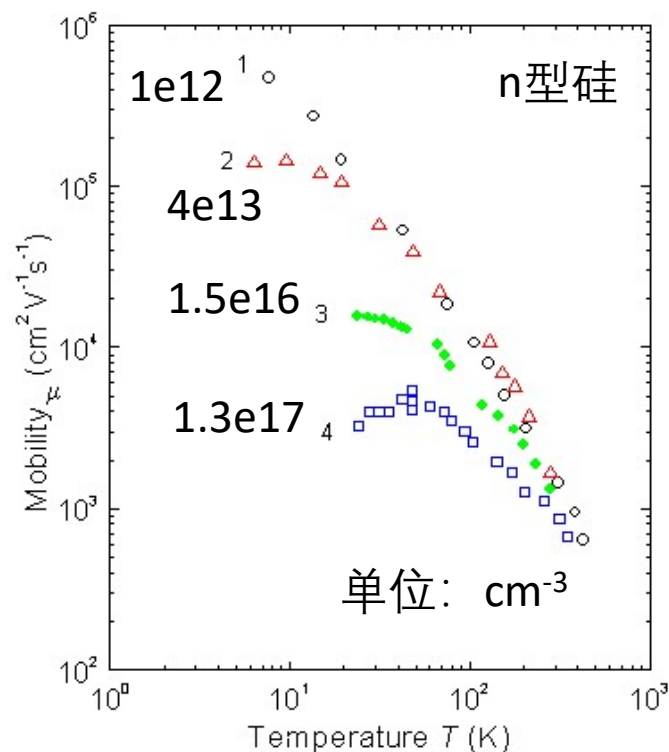
$$T = 300 \text{ K}, \quad \frac{4g_D N_D}{N_C} e^{\frac{E_C - E_D}{k_B T}} = 0.012 \ll 1$$

$$T = 350 \text{ K}, \quad \frac{4g_D N_D}{N_C} e^{\frac{E_C - E_D}{k_B T}} = 0.008 \ll 1 \quad \text{注意, } N_C \text{ 正比于 } T^{3/2}$$

施主基本激发，属于饱和区， $n = N_D$

例题：电阻率估算

- 硅中掺杂了 $1e16 \text{ cm}^{-3}$ 的锑，300 K时电阻率为0.5 Ohm.cm。试估算其在350 K时的电阻率。



$$\mu = \frac{q}{m^*(AN_i T^{-3/2} + BT^{3/2})}$$

高温以晶格振动散射（声学声子散射）主导， $\mu \propto T^{-3/2}$ 。

$$\rho = \frac{1}{nq\mu} = \frac{1}{N_D q\mu} \propto T^{3/2}$$

答案为0.63 Ohm.cm

可见，温度对饱和区掺杂半导体的电阻率影响不算大