半导体材料与物理

4. 输运现象

中国科学技术大学微电子学院 吕頔

输运（transport）

- 输运的定义
  - 载流子的定向运动行为
  - 指载流子产生电流的现象
  - 常见情况是在受到外场（电磁场）作用下产生的运动
- 本章讨论在如下情况下的输运
  - 弱场
  - 热平衡下（定温）、固定掺杂浓度（半导体各处掺杂相同）

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

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

欧姆定律

- 宏观电性质
  - 欧姆定律是在前述条件下弱场输运的基本规律
  - 欧姆定律的积分形式：V=IR
  - 欧姆定律的微分形式：$\boldsymbol{j}=\sigma\boldsymbol{E}$

电流密度　电导率　电场

欧姆定律的微分形式　$\boldsymbol{j}=\sigma\boldsymbol{E}$

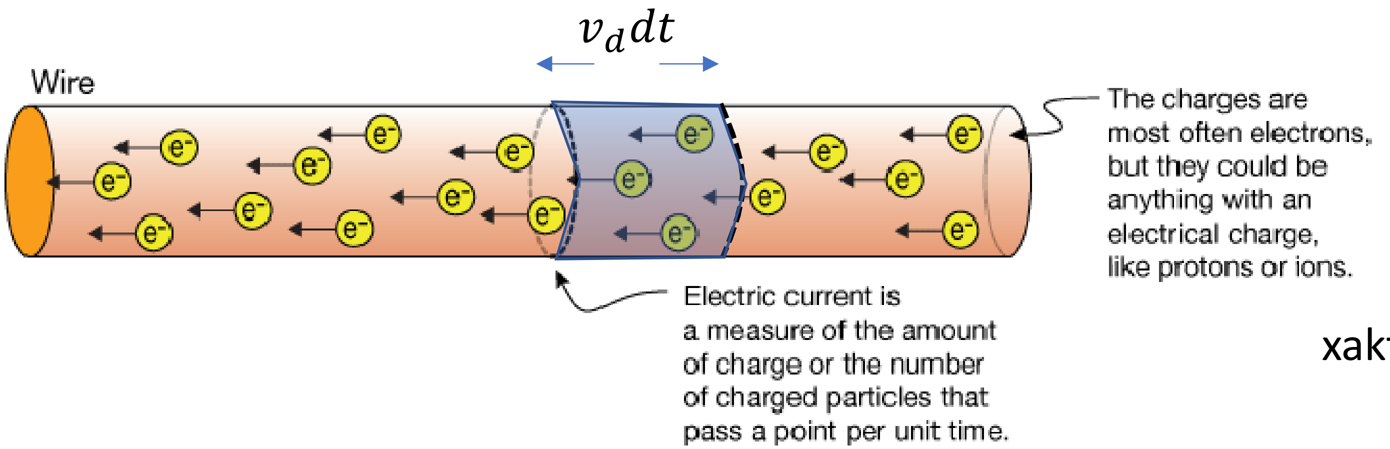
和欧姆定律的积分形式　$IR=V$　的关系为：

$$I=jA \qquad R=\frac{\rho l}{A}=\frac{l}{\sigma A} \qquad V=El$$

A为截面积，ρ为电阻率=1/σ，l为长度

电流密度和漂移速度

截面积为A，载流子浓度为n的半导体



xaktly.com

dt时间内，有n乘以体积（A乘以$v_d$dt）的电子流过截面，总电荷再乘以电子电量

因此 $$Idt = nqAv_d dt$$

<u>电流密度</u>（单位截面上的电流） $\boldsymbol{j} = nq\boldsymbol{v_d}$

<u>其中$\boldsymbol{v}_d$为电子的平均速度，又称为漂移（drift）速度</u>

迁移率（mobility）

- 要满足欧姆定律$\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$，需要载流子漂移速度和电场成正比
  - $\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$和$\boldsymbol{j} = nq\boldsymbol{v_d}$可推得
- 比例系数称为迁移率μ，即$\boldsymbol{v_d} = \mu \boldsymbol{E}$
  - 注：对于各向异性的半导体，此式为$\boldsymbol{v_d} = \mu \cdot \boldsymbol{E}$，其中迁移率是一个矩阵；相应地，欧姆定律也为$\boldsymbol{j} = \sigma \cdot \boldsymbol{E}$，其中电导率也是一个矩阵
- 这就是载流子在外场下的运动（$\boldsymbol{v_d} = \mu \boldsymbol{E}$）和电阻率（电导率）的关系
  - $\sigma = nq\mu$

半导体的迁移率和欧姆定律

表 4-1 300K 时较纯样品的迁移率

材 料	电子迁移率 [cm^2/(V·s)]	空穴迁移率 [cm^2/(V·s)]
锗	3800	1800
硅	1450	500
砷化镓	8000	400

欧姆定律 $\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$ 也可写作 $\boldsymbol{j} = nq\mu \boldsymbol{E}$

由于半导体有电子和空穴载流，考虑所有贡献，半导体的欧姆定律为

$$\boldsymbol{j} = -ne\mu_n \boldsymbol{E} + pe\mu_p \boldsymbol{E}$$

电导率 $\sigma = -ne\mu_n + pe\mu_p$

其中，电子空穴浓度差别太大（通常迁移率差不太多）时，少子那项可以忽略，因此主要是多子载流

例题：计算电阻率

- 300 K时，p型硅（掺杂浓度10^{16} cm^{-3}）的迁移率为500 cm^{2}/Vs。求电阻率。

$$\sigma = nq\mu$$

答案：1.25 Ohm.cm

问题的引入

- 宏观电性质
  - 欧姆定律的微分形式：$\boldsymbol{j} = \sigma \cdot \boldsymbol{E}$
  - 电导率$\sigma = nq\mu$
  - 迁移率$\boldsymbol{v_d} = \mu \cdot \boldsymbol{E}$

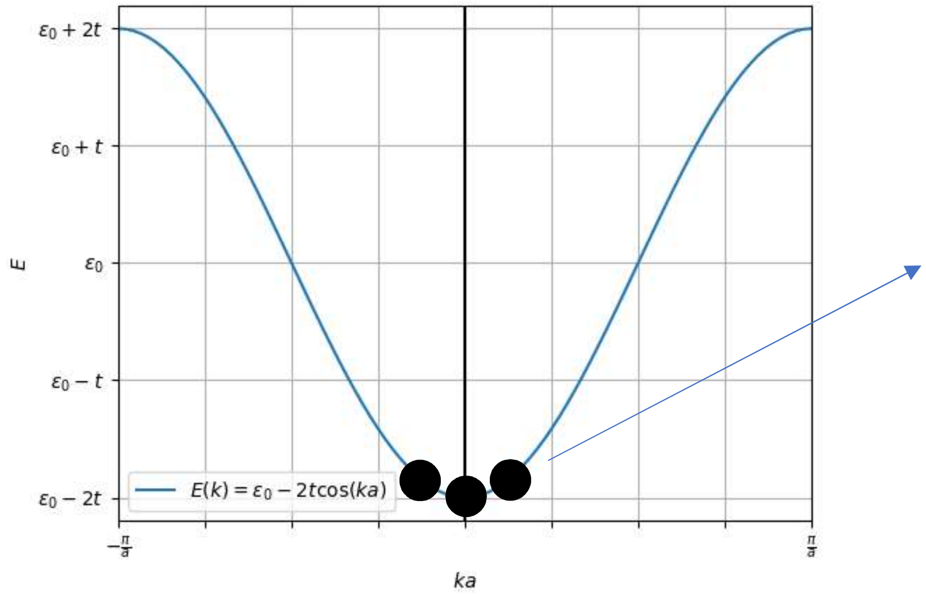
- 微观电性质
  - 载流子的运动方程：$\boldsymbol{F} = q\boldsymbol{E} = m^* \cdot \boldsymbol{a}$

    列向量　矩阵　列向量

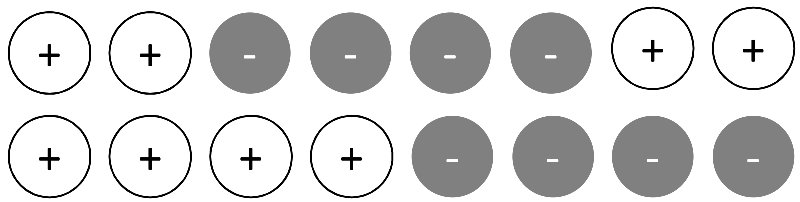
- 两者是统一的吗？
  - 需要推导

载流子在半导体中的存在形式

导带底的电子



紧束缚模型中波函数



能传播的电子布洛赫波，有波矢k

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$$

导带

$$E = E_C + (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_C) \cdot \frac{\hbar^2}{2} {m^*}^{-1} \cdot (\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_C)$$

群速度

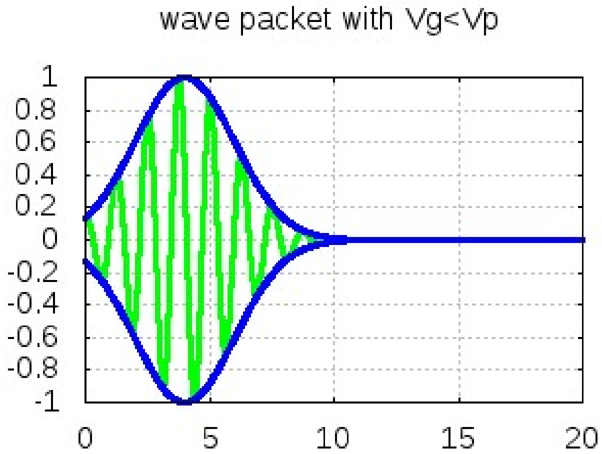
$$\boldsymbol{v} = \frac{d\omega}{d\boldsymbol{k}} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{d\boldsymbol{k}} = {m^*}^{-1} \cdot \hbar(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}_C)$$

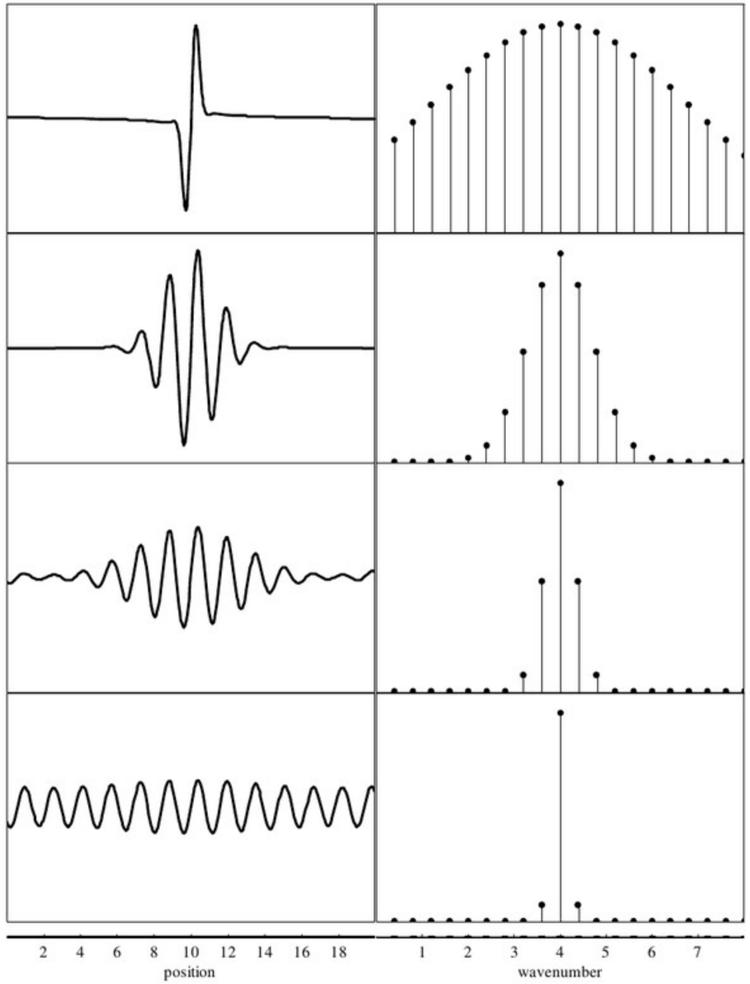
加电场时，电子波矢量随时间改变，进而影响其（群）速度

$$\boldsymbol{F} = \hbar\frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = m^* \cdot \frac{d\boldsymbol{v}}{dt}$$

载流子在半导体中的局域化

- 由于归一化条件，电子波函数会混合相邻波矢的成分，使得存在于晶体所有位置的理想平面波变成局域化的波包（“质包”）
- 此时，电子可以有类似经典的（平均）位置、速度、加速度





载流子在半导体中的运动规律

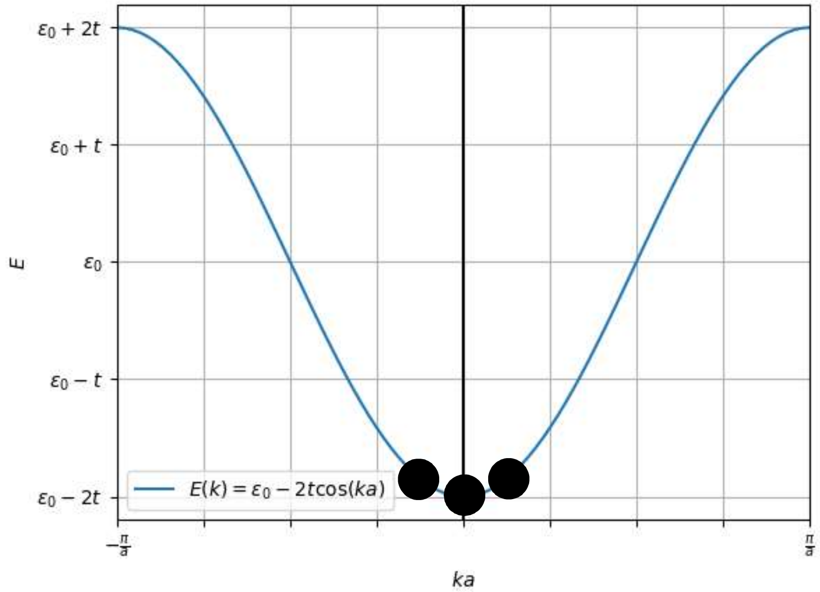
- 电子的局域化：半导体物理中，电子大多数情况下仍然可以作为质“包”考虑（准经典近似）
- 但是，F=ma 不成立；而应该是

$$\boldsymbol{F} = \hbar \frac{d\boldsymbol{k}}{dt} = m^* \cdot \frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = m^* \cdot \boldsymbol{a}$$

- 有效质量m*和能带结构有关，可大可小，可正可负
  - 在能带顶附近，施加力会使电子向反方向加速，表现为对应的空穴向正方向加速

电子的集体运动行为

能带中的电子



电子（群）速度

$$\boldsymbol{v}=\frac{d\omega}{d\boldsymbol{k}}=\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{d\boldsymbol{k}}=m^{*-1}\cdot\hbar(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}_C)$$

由于能带对于-k和k对称，因此所有电子的平均速度为零

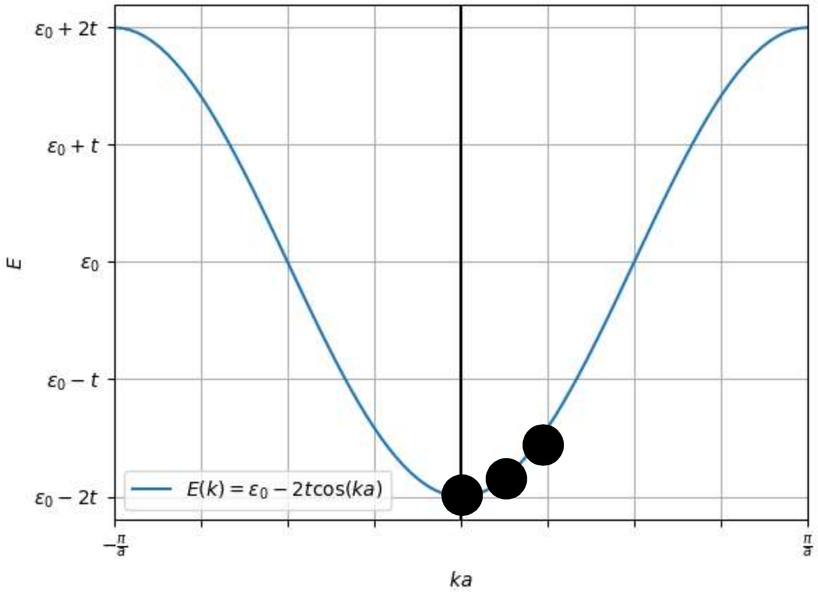
平均速度也就是漂移速度，$\boldsymbol{v}_d=\boldsymbol{0}$

漂移速度（drift velocity）

- 载流子的漂移
  - <u>漂移速度$\mathbf{v_d}$定义为电子在外场作用下的平均速度</u>
- 漂移速度不是群速度
  - 漂移速度是大量电子群速度的平均值
- 漂移速度反映了电流的大小
  - 不加外场时的平衡态，漂移速度为零

能带边缘电子的集体运动行为

能带中的电子



在能带边缘，电子的有效质量m*相同，因此，施加外力F后，经过时间Δt，每个电子得到额外的速度

$$\Delta \boldsymbol{v} = m^{*-1} \cdot \boldsymbol{F}\Delta t \qquad \boldsymbol{F} = m^{*} \cdot \frac{d\boldsymbol{v}}{dt}$$

即漂移速度 $\boldsymbol{v}_d = m^{*-1} \cdot \boldsymbol{F}\Delta t$

微观输运机制和宏观现象矛盾

在能带边缘，电子的有效质量m*相同，因此，施加外力F后，经过时间Δt，
电子得到漂移速度

$$\boldsymbol{v}_d = m^{*-1} \cdot \boldsymbol{F} \Delta t$$

又有 $\boldsymbol{j} = nq\boldsymbol{v_d}$

如果外力仅为电场力，$\boldsymbol{j} = nqm^{*-1} \cdot q\boldsymbol{E}\Delta t$ 电流随时间增大。

然而，实验显示，当**E**较小时，**j**和**E**成正比，和时间无关（服从欧姆定律）：

$$\boldsymbol{j} = \sigma \cdot \boldsymbol{E}$$

因此，电子必然还受到其它的作用（力）

例题：阻尼运动

- 半导体中的载流子受电场力$q\boldsymbol{E}$和阻尼力$-f\boldsymbol{v}$，满足$q\boldsymbol{E}-f\boldsymbol{v}=m^{*}\boldsymbol{a}$。求证此时欧姆定律成立。注意，此处**v**为漂移速度$\mathbf{v}_\mathrm{d}$，**a**为漂移加速度。

$$\boldsymbol{j}=nq\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{d}}$$

例题：阻尼运动

- 半导体中的载流子受电场力$q\boldsymbol{E}$和阻尼力$-f\boldsymbol{v}$，满足$q\boldsymbol{E}\ -f\boldsymbol{v}=m^{*}\boldsymbol{a}$。求证此时欧姆定律成立。注意，此处**v**为漂移速度$\mathbf{v}_{\mathrm{d}}$，**a**为漂移加速度。

半导体中载流子在电场力作用下，先加速，后饱和（匀速）

$$q\boldsymbol{E}\ -f\boldsymbol{v}=m^{*}\frac{d\boldsymbol{v}}{dt}=-\frac{m^{*}}{f}\frac{d(q\boldsymbol{E}\ -f\boldsymbol{v})}{dt}\quad \text{积分解得}\quad \boldsymbol{v}=\frac{q\boldsymbol{E}}{f}(1-e^{-\frac{ft}{m^{*}}})$$

饱和时满足 $$\boldsymbol{v_d}=\frac{q}{f}\boldsymbol{E}$$

$$\boldsymbol{j}=nq\boldsymbol{v_d}=nq\frac{q}{f}\boldsymbol{E}=\sigma\boldsymbol{E}\quad \text{满足欧姆定律}$$

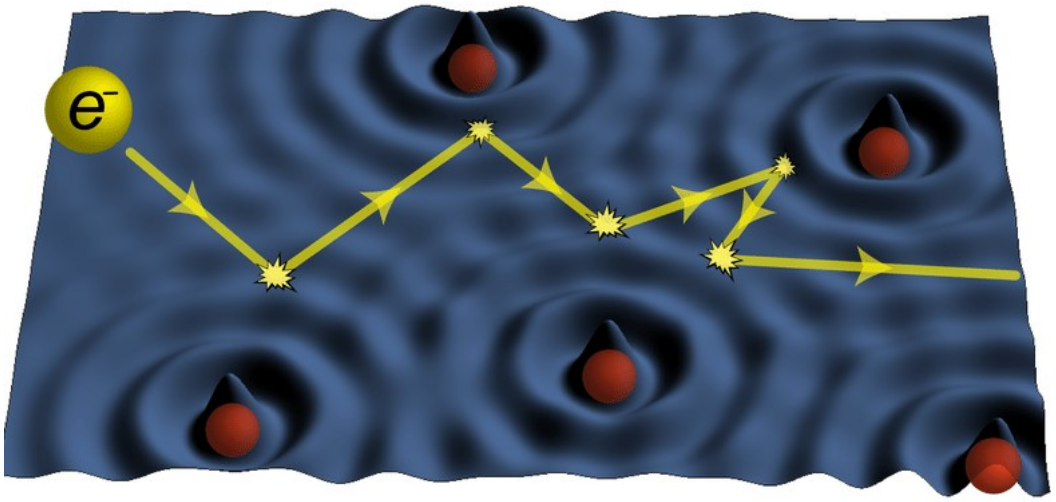
说明：载流子很有可能还受一个阻力

阻碍电子运动的力在哪里?

- 能带理论中，并没有阻碍电子运动的力
- 但能带理论做了如下近似:
  - 单电子近似：电子的运动可看作是相互独立的
  - 周期势近似：电子在一个具有晶格周期性的等效势场中运动
- 电子-电子作用会对运动造成阻碍吗?
  - 在半导体中效果不会太强
- 真实的势场是周期势吗?
  - 掺杂？缺陷？晶格振动?

散射（scattering）

- 由于晶格的不完美，破坏了周期势场，而对电子运动产生的阻碍



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

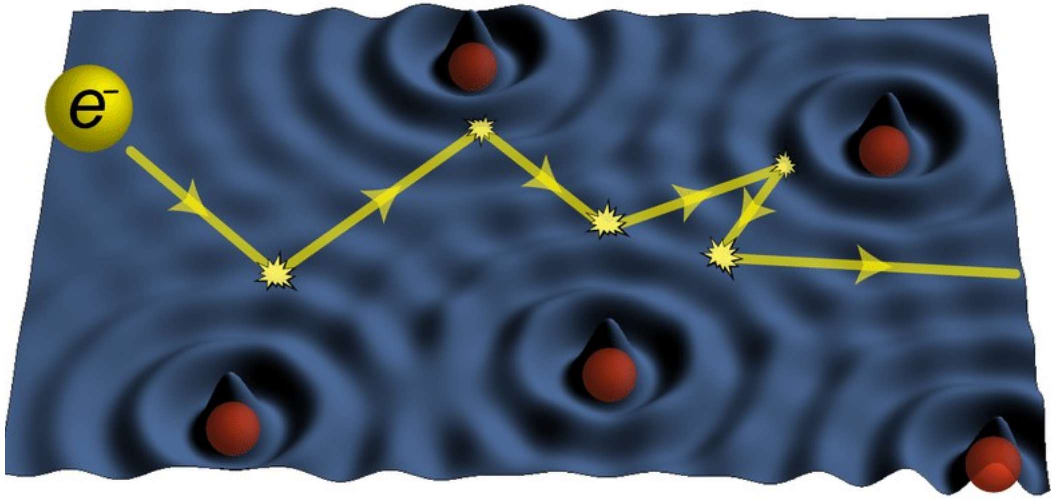
- 效果上，使电子“减速”，最终使得**j**和**E**成正比

载流子的散射

- 散射的起因：周期势场被破坏；附加势场改变载流子运动状态
  - 理想晶格不起散射作用
- 散射的结果:
  - 无外场时，散射使得载流子无规运动，但不改变平均速度（漂移速度），$\boldsymbol{v_d} = 0$
  - 有外场时，漂移速度不会随时间无限增加，而是使得其与电场强度成正比，$\boldsymbol{v_d} = \mu \boldsymbol{E}$
  - 迁移率反映了散射作用的强弱：迁移率越低（载流子越不喜欢动），散射越强；反之亦然

散射的一般性质

- 散射概率（密度）P：单位时间内一个载流子受到散射的平均次数



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

- 平均自由时间τ=1/P：载流子在相邻两次散射之间自由运动的平均时间

被散射电子数

电子数为N，单位时间被散射概率为P

经过dt时间，电子被散射概率为Pdt

还剩下的电子数N+dN=N(1-Pdt)

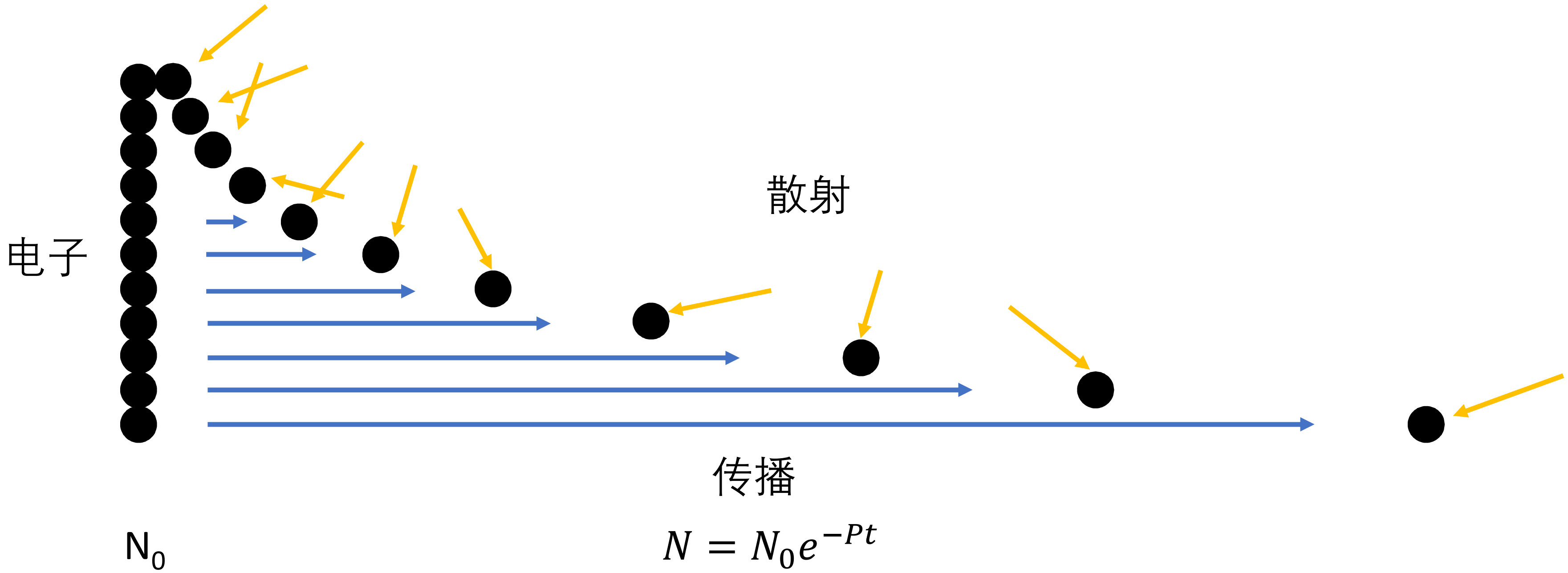
$$\frac{dN}{N} = -Pdt$$

$$N = N_0 e^{-P}$$

其中N_0为t=0时的电子数

在t到t+dt时间，电子剩余的比例为e^{-Pt}，被散射概率为$Pe^{-Pt}dt$

被散射电子的行为



- 在t~t+dt被散射概率为$Pe^{-Pt}dt$，被散射时间的数学期望为$\int_0^{\infty} tPe^{-Pt}dt = 1/P$
- 平均而言，电子经过平均自由时间τ=1/P被散射

被散射电子速度和迁移率

只考虑电场力作用，电子的平均速度为

$$\boldsymbol{v_d} = m^{*-1} \cdot q\boldsymbol{E}t$$

但经过时间t后被散射，因此，电子总的对时间的平均速度为

$$\boldsymbol{v_d} = \int_0^\infty m^{*-1} \cdot q\boldsymbol{E}tPe^{-Pt}dt = \frac{m^{*-1} \cdot q\boldsymbol{E}}{P} = m^{*-1} \cdot q\boldsymbol{E}\tau$$

又知 $\boldsymbol{v_d} = \mu \cdot \boldsymbol{E}$

因此，迁移率 $\mu = q\tau m^{*-1}$

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

这部分推导可见书中4.3

注意，迁移率通常取正值；如有方向问题，可加正负号

散射的一般性质

- 散射概率（密度）P：单位时间内一个载流子受到散射的平均次数
  - 平均自由时间$\tau=1/P$：载流子在相邻两次散射之间自由运动的平均时间
  - 平均自由程$\lambda=v_T\tau$：载流子在连续二次散射之间自由运动的平均路程
  - 其中v_T为载流子的无规运动<u>速率</u>（平均的群速度<u>速率</u>）
- τ和λ的数量级
  - 载流子在Si中的平均自由程1 nm ~ 1 um,对应平均自由时间1 fs ~ 1 ps

例题：平均自由时间

- 300 K时，p型硅（掺杂浓度10^{16} cm^{-3}）的迁移率为500 cm^2/Vs。空穴有效质量取0.50m。求平均自由时间。

$$\mu_p = \frac{e\tau_p}{m_p^*}$$

答案：约140 fs