

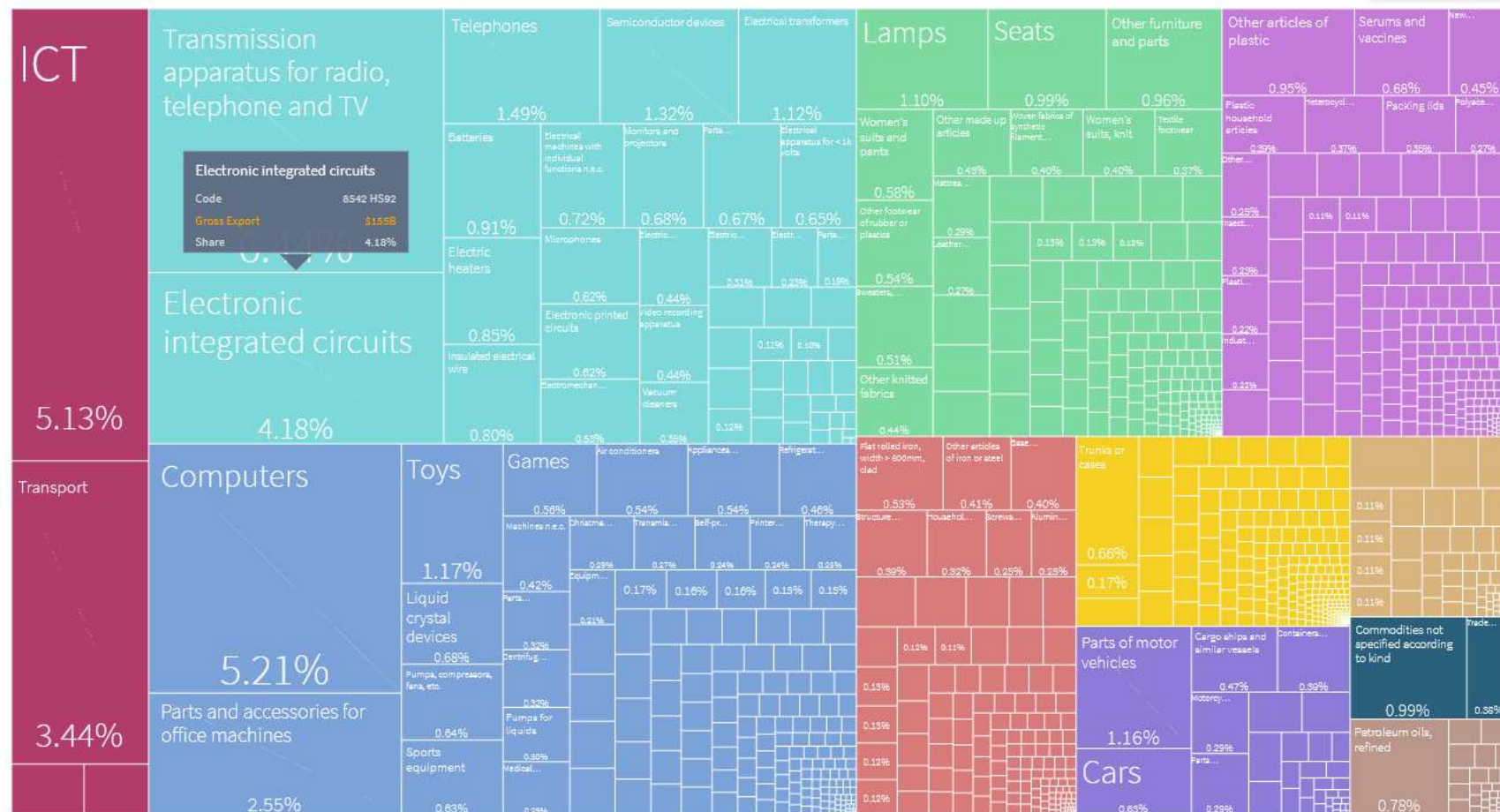
半导体材料与物理

6.复习梳理

中国科学技术大学微电子学院 吕頔

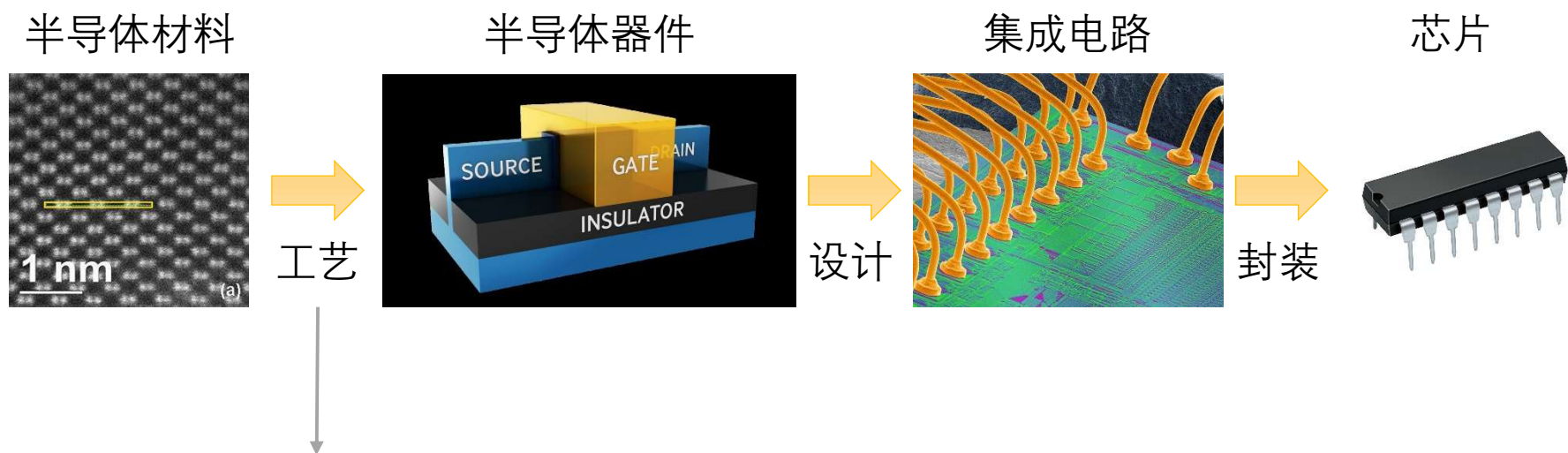
微电子产业在我国经济中的地位

集成电路在我国经济中居于支柱地位，却遇到了“卡脖子”等问题



Harvard, Atlas of economic complexity

本课程在微电子专业中的地位



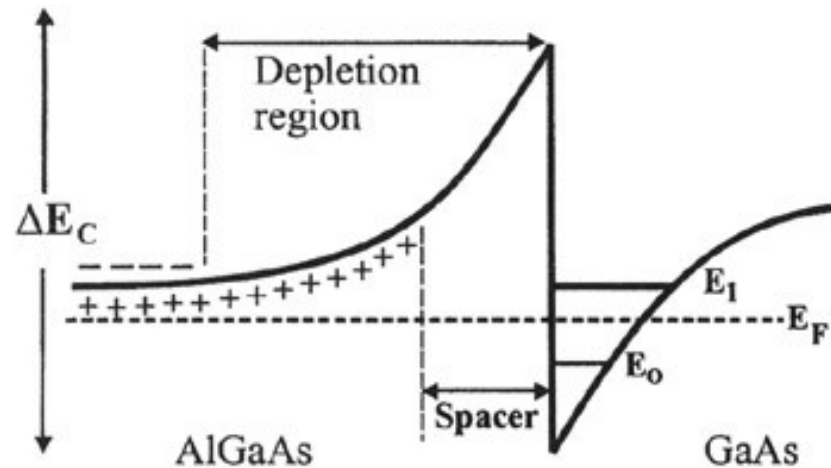
物理基础：量子物理
材料特性：半导体材料与物理（本课程）
器件性能：半导体器件物理
具体工艺：集成电路工艺原理

学习了本课程，可以做到：

1. 认识并分析半导体器件中的各种材料
2. 利用所学知识绘制器件的能带图
3. 了解为计算器件的输运性质所需的基础知识

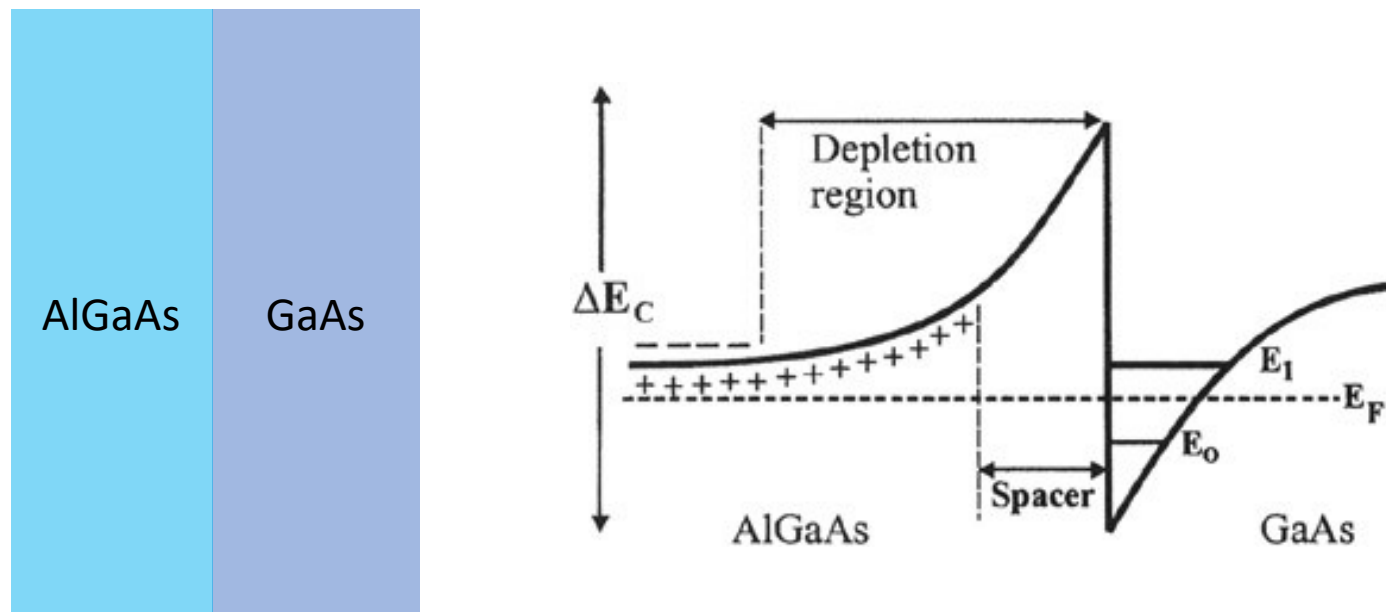
怎么分析一个半导体器件？

- 假设我们需要分析一个器件，叫做AlGaAs/GaAs界面二维电子气



怎么分析一个半导体器件？

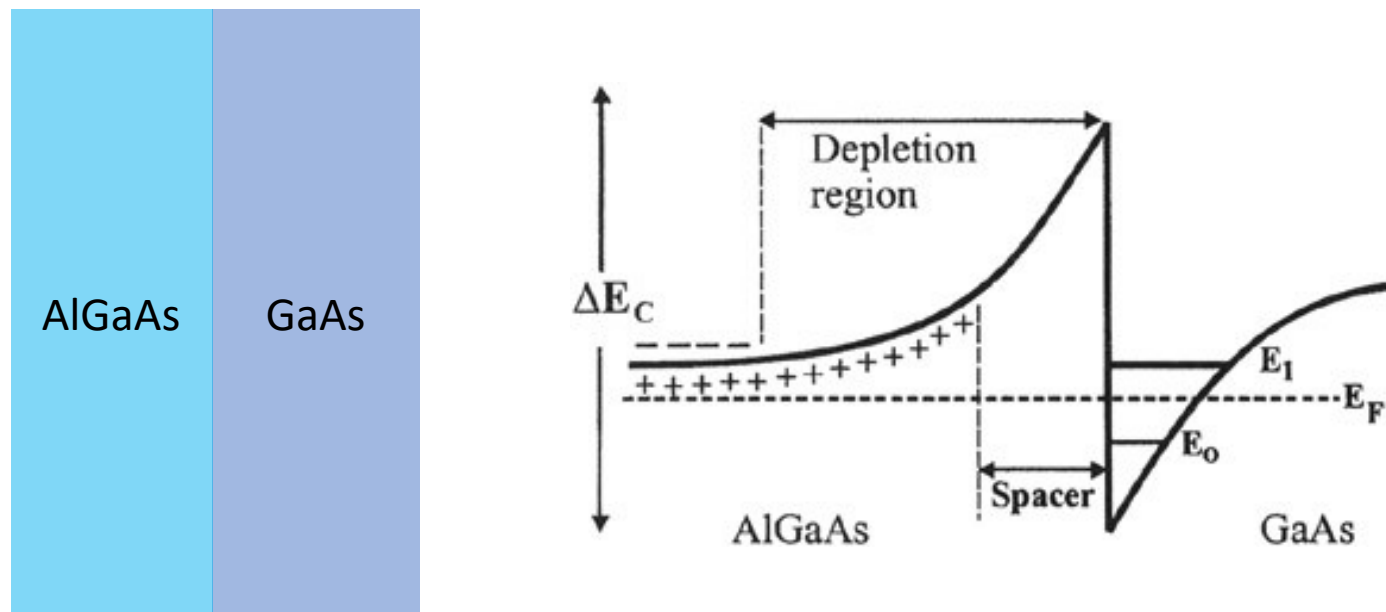
- 首先要知道它的材料
 - GaAs: 什么元素? 什么结构?
 - AlGaAs: 什么元素? 什么结构?
 - AlGaAs是什么材料? (砷有-6价吗?)



晶体结构相同 \rightarrow 外延, 界面质量很可能很好, 缺乏界面态

怎么分析一个半导体器件？

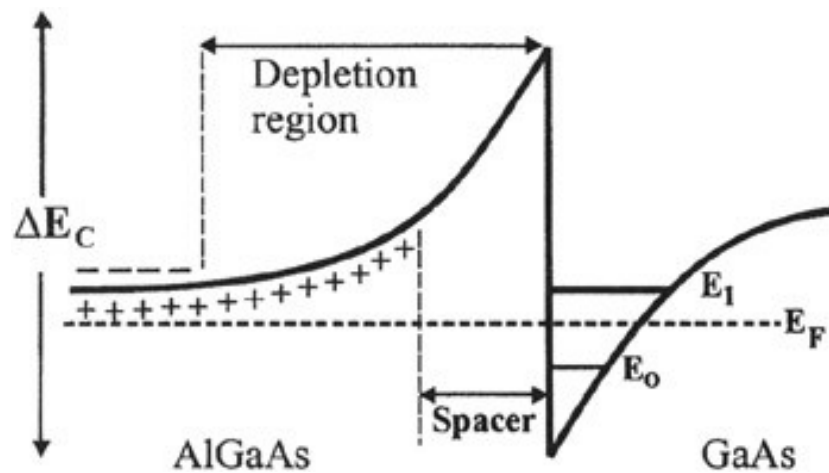
- 其次要知道它的能带结构
 - 查阅或推断相关半导体、绝缘体、金属的能带结构
 - GaAs: 带隙? 直接/间接? 有效质量? 功函数?
 - AlGaAs: 带隙? 直接/间接? 有效质量? 功函数?



功函数可通过平均电负性推断；电负性↑功函数↑

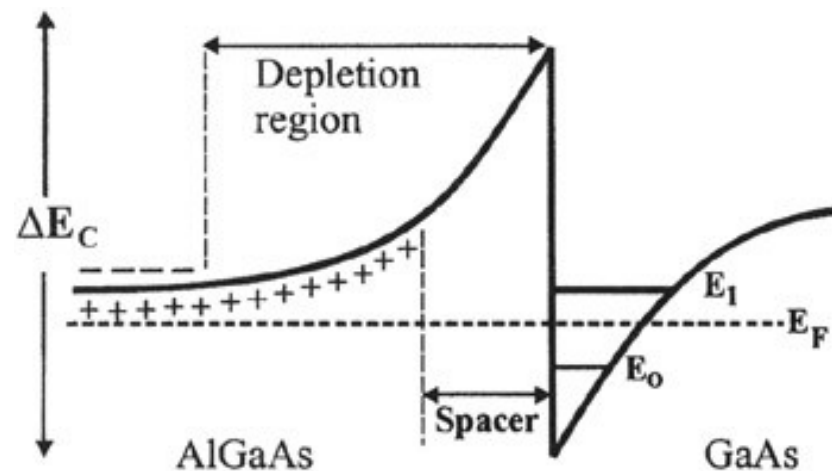
怎么分析一个半导体器件？

- 再次要知道它的载流子性质
 - 掺杂？载流子浓度？迁移率？



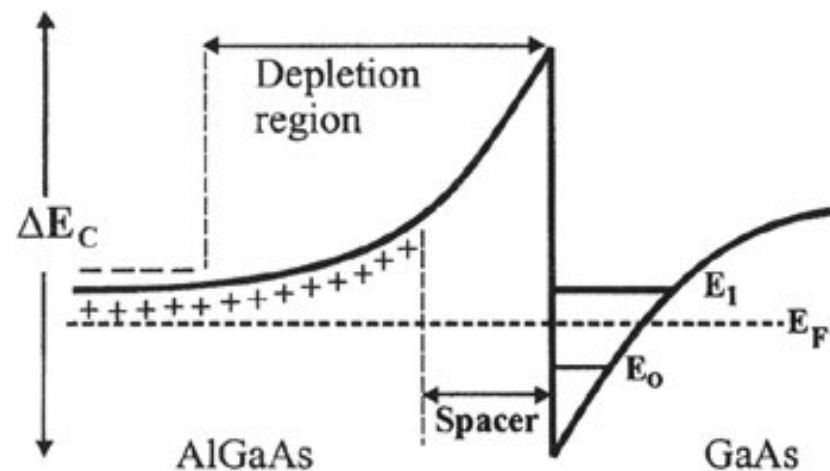
怎么分析一个半导体器件？

- 然后要画出它的能带图
 - 费米能级？电子转移？能带弯曲？
 - 为什么叫做AlGaAs/GaAs界面二维电子气？

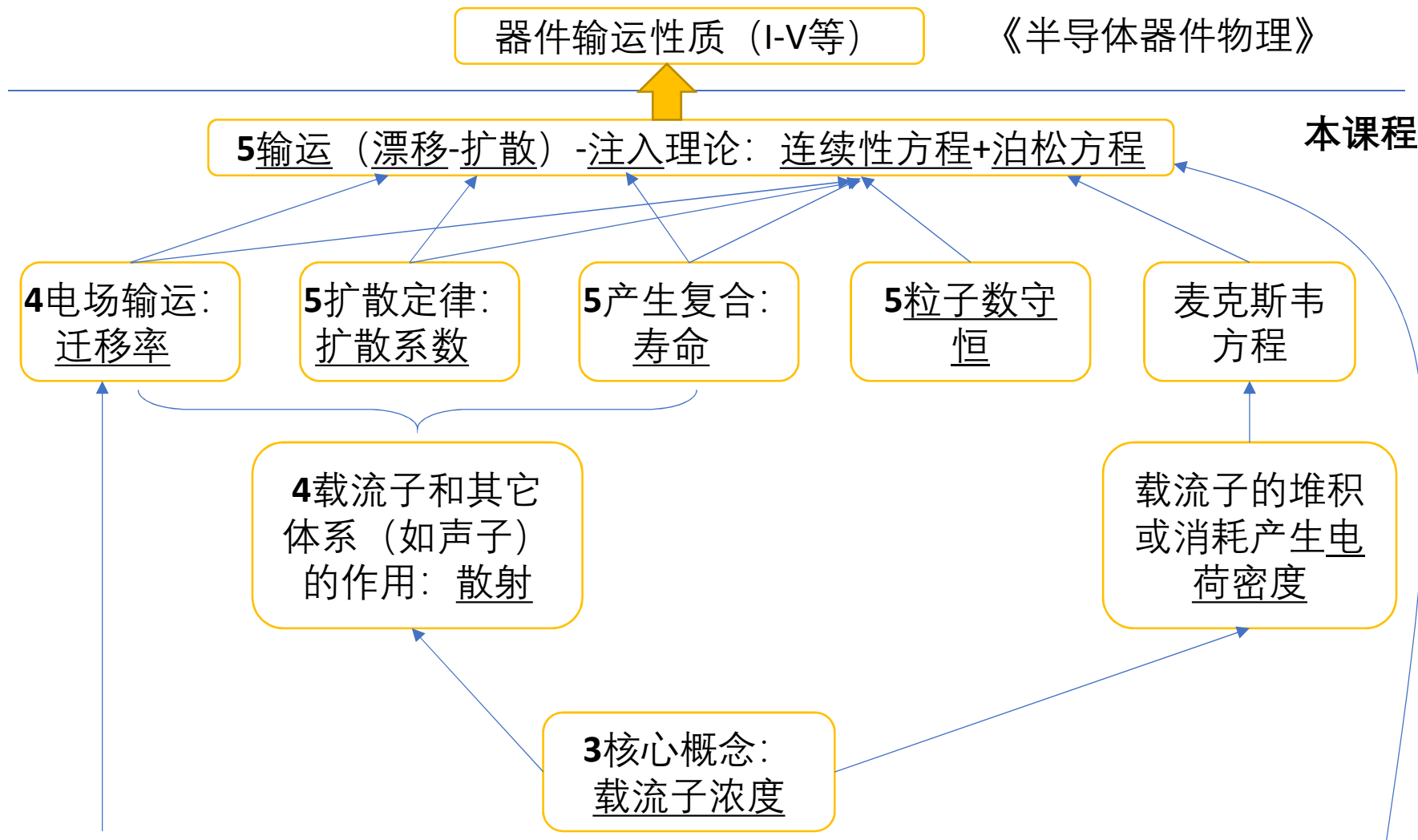


怎么分析一个半导体器件？

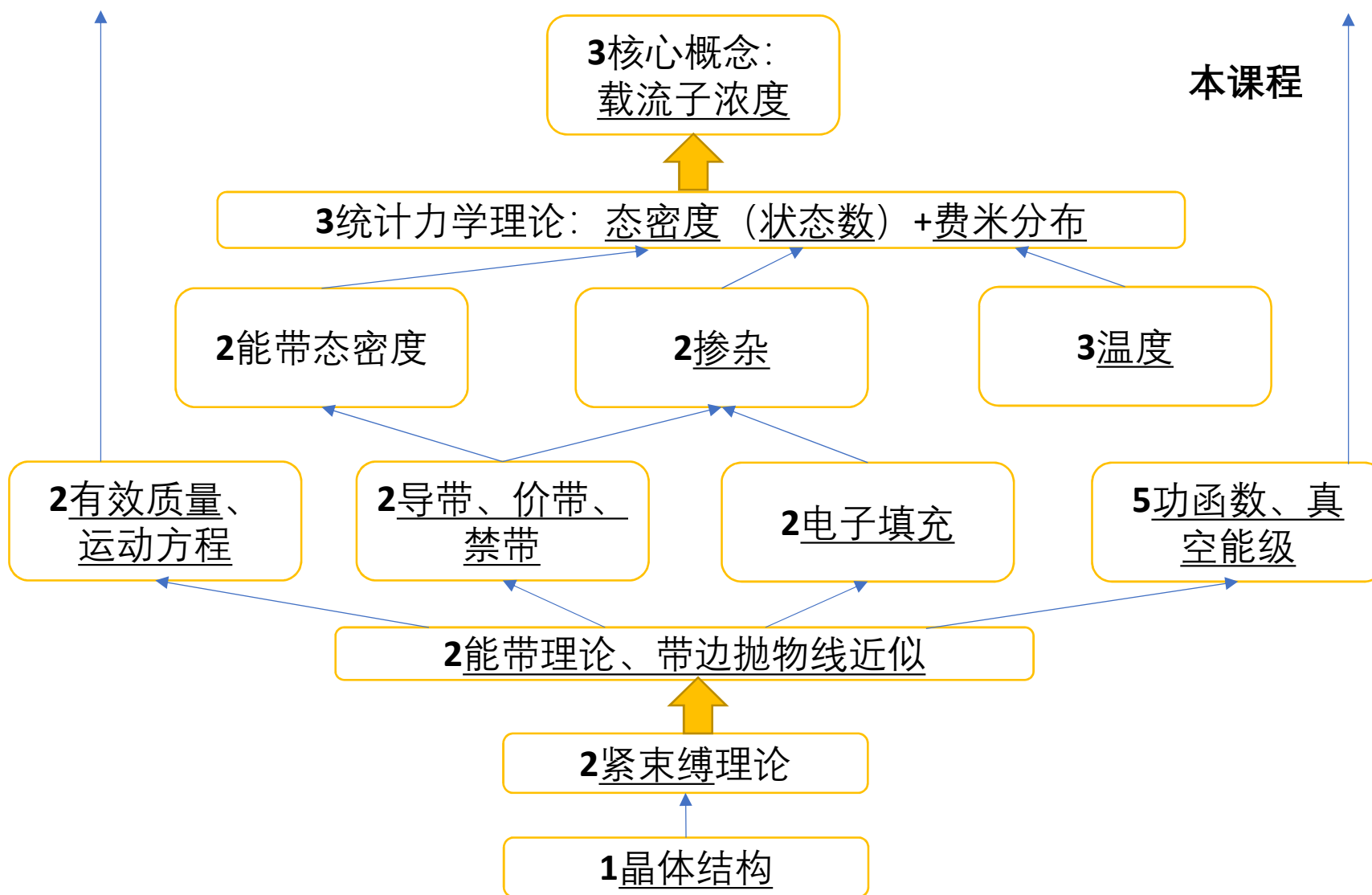
- 最后，利用连续性方程+泊松方程求解它的平衡态和非平衡态
 - 求解 n 和 V 的关系
 - 平衡态电流为零，非平衡态电流不为零



本课程的逻辑结构



本课程的逻辑结构



复习大纲

- 晶体结构推出能带
 - 晶体结构、原子能级、紧束缚模型、能带
- 能带边缘的结构
 - 有效质量、群速度、运动方程、等能面、态密度
- 半导体能带结构的规律
 - 导带三类能谷-价带三条能带、直接-间接带隙
 - 原子序数越大，化学键共价性越强，带隙越小，相同波矢处有效质量越低
- 费米分布
 - “ $g_f(E)$ ”、非简并条件、本征-掺杂半导体的 n 和 E_F

复习大纲

- 半导体里的粒子作用
 - 半导体里的粒子：载流子、声子、光子、杂质
 - 载流子漂移、散射机制、迁移率、电阻率-欧姆定律
 - 载流子扩散、扩散系数-扩散定律、爱因斯坦关系
 - 载流子产生复合、产生-复合率、寿命、直接-间接复合
- 能带图
 - 能带图中的费米能级、泊松方程、输运-连续性方程
- 实验
 - 晶体结构TEM/XRD、能带结构各种谱学/回旋共振、载流子浓度迁移率霍耳效应、扩散漂移Haynes-Shockley

复习大纲

- 晶体结构推出能带
 - 晶体结构、原子能级、紧束缚模型、能带
- 能带边缘的结构
 - 有效质量、群速度、运动方程、等能面、态密度
- 半导体能带结构的规律
 - 导带三类能谷-价带三条能带、直接-间接带隙
 - 原子序数越大，化学键共价性越强，带隙越小，相同波矢处有效质量越低
- 费米分布
 - “ $g_f(E)$ ”、非简并条件、本征-掺杂半导体的 n 和 E_F

常见半导体的晶体结构

IV族单质：C（金刚石）、
Si、Ge

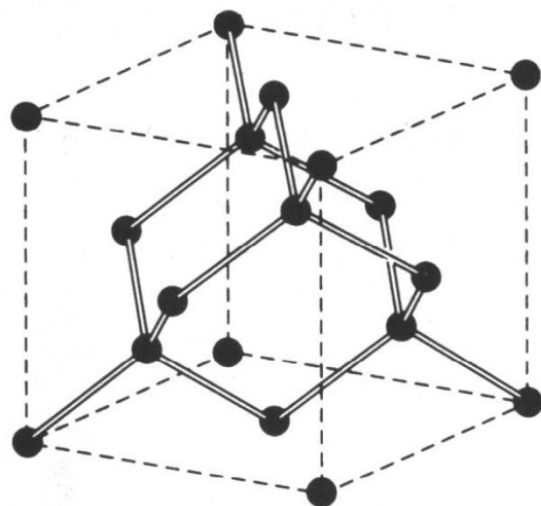


图 23 金刚石型晶体结构。图中显示了四面体键合的排列方式。

金刚石结构
非极性共价键

IV、III-V、II-VI族化合物：
SiC、GaAs、InSb、ZnS等

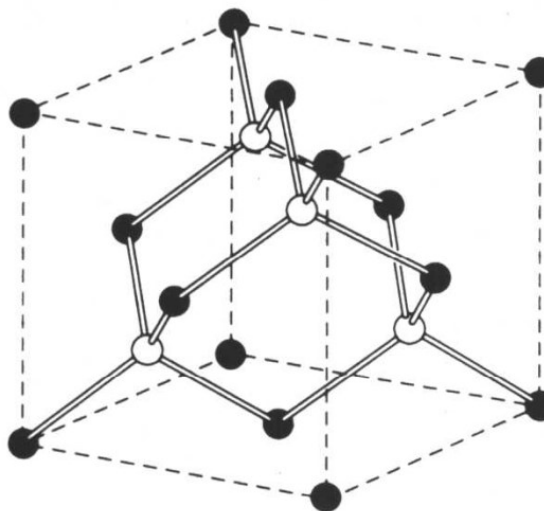


图 24 立方硫化锌的晶体结构。

立方闪锌矿结构
弱极性共价键

IV、III-V、II-VI族化合物：
SiC、GaN、ZnO、ZnS等

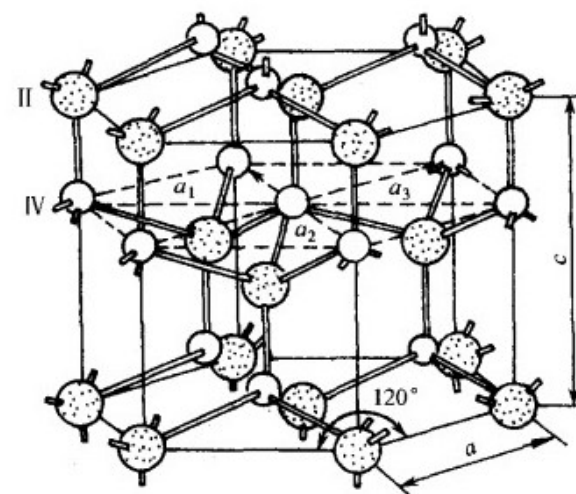


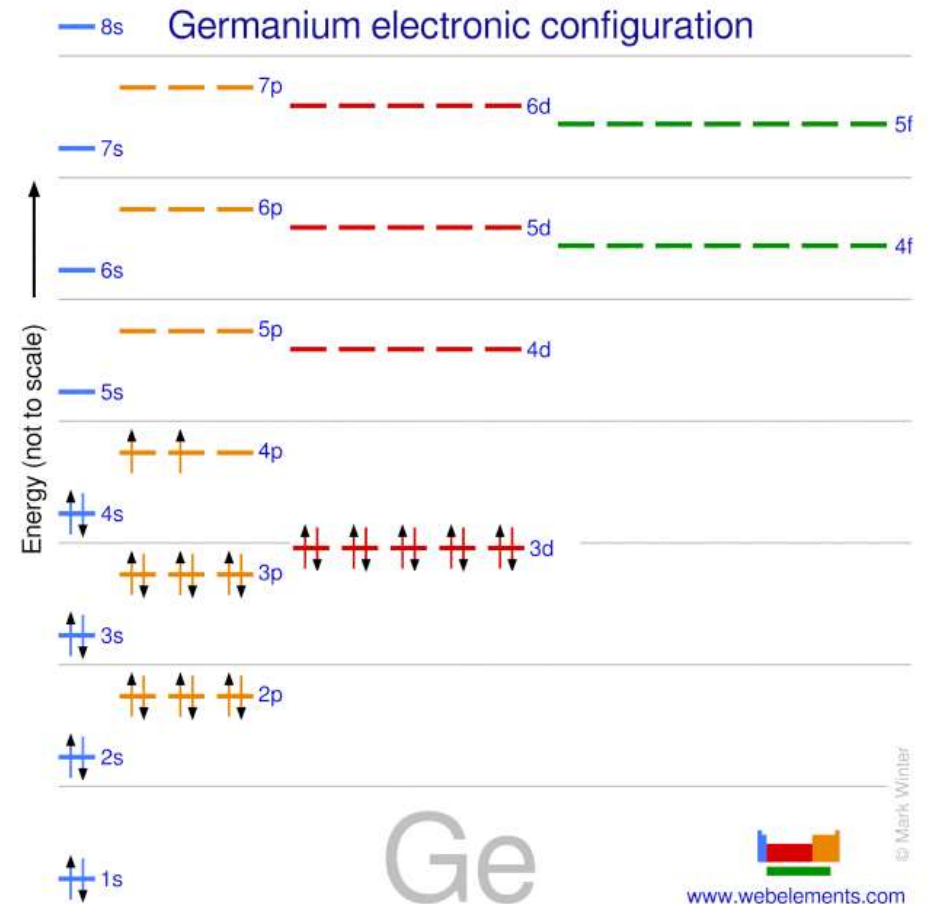
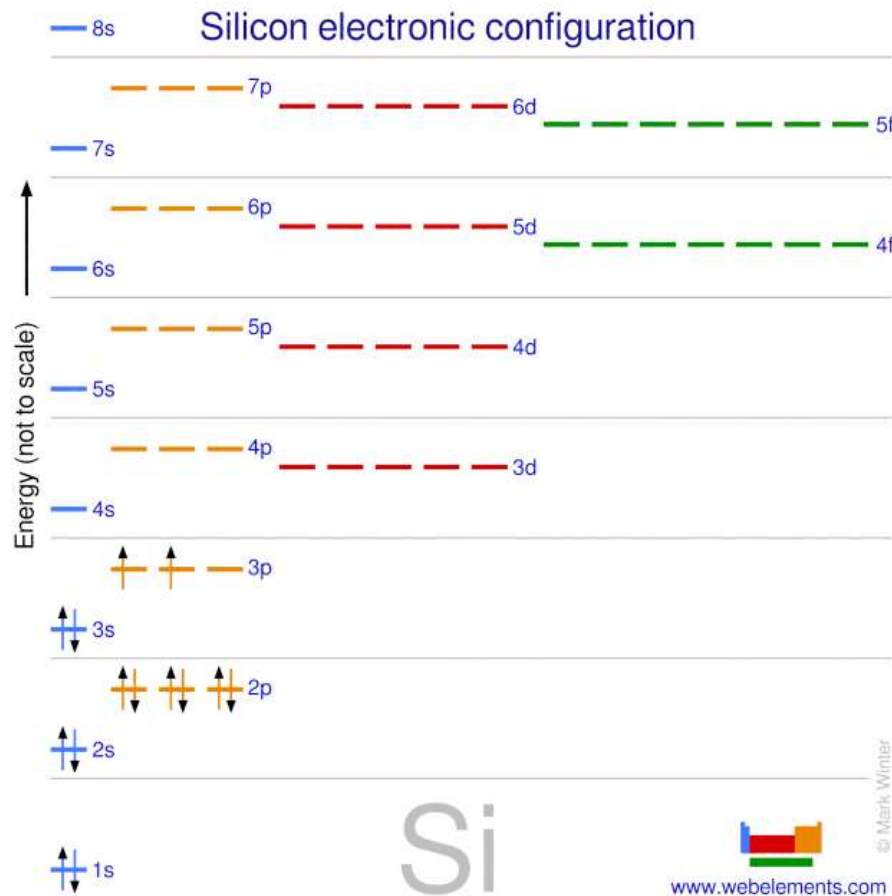
图 1-3 纤锌矿型结构

六方纤锌矿结构
强极性共价键

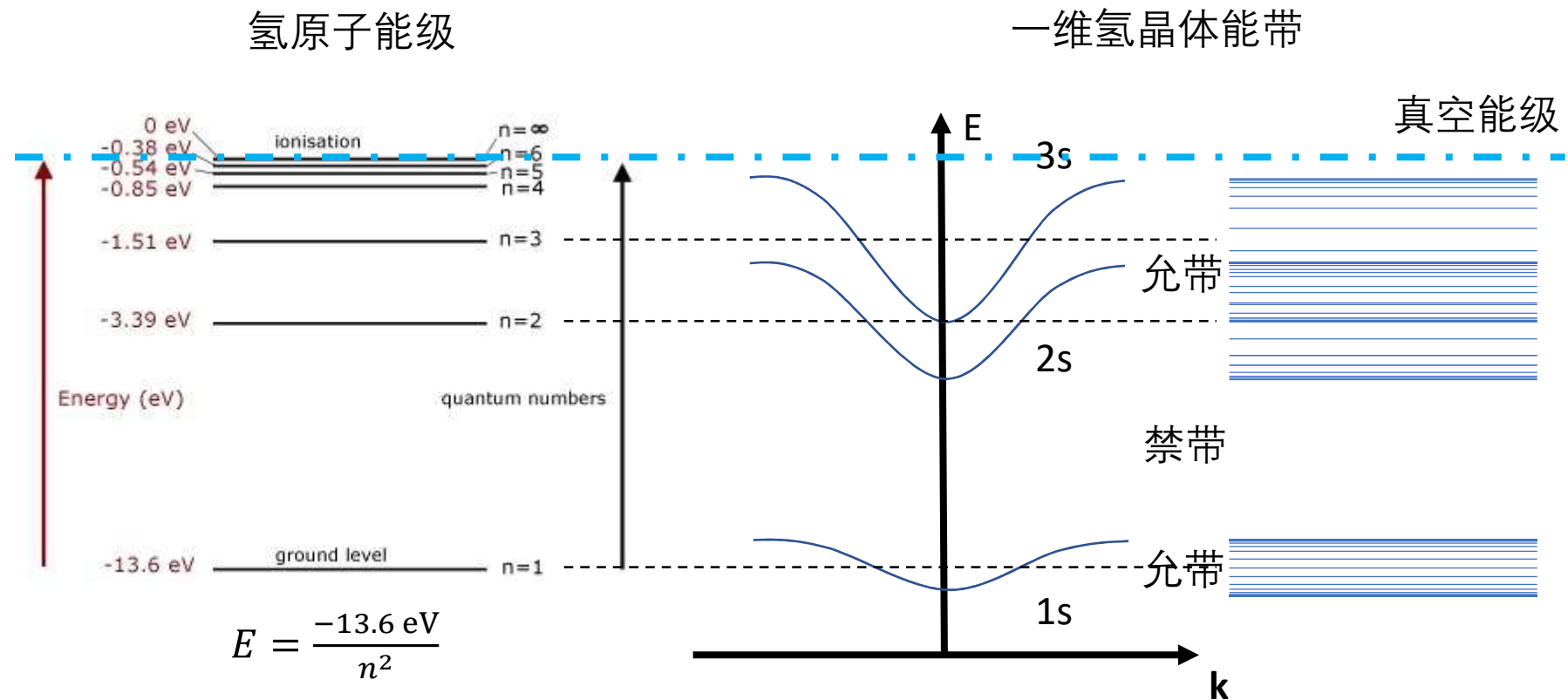
半导体材料中的常见元素

Si: 14个电子; $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

Ge: 32个电子; $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$



原子能级的展宽构成能带

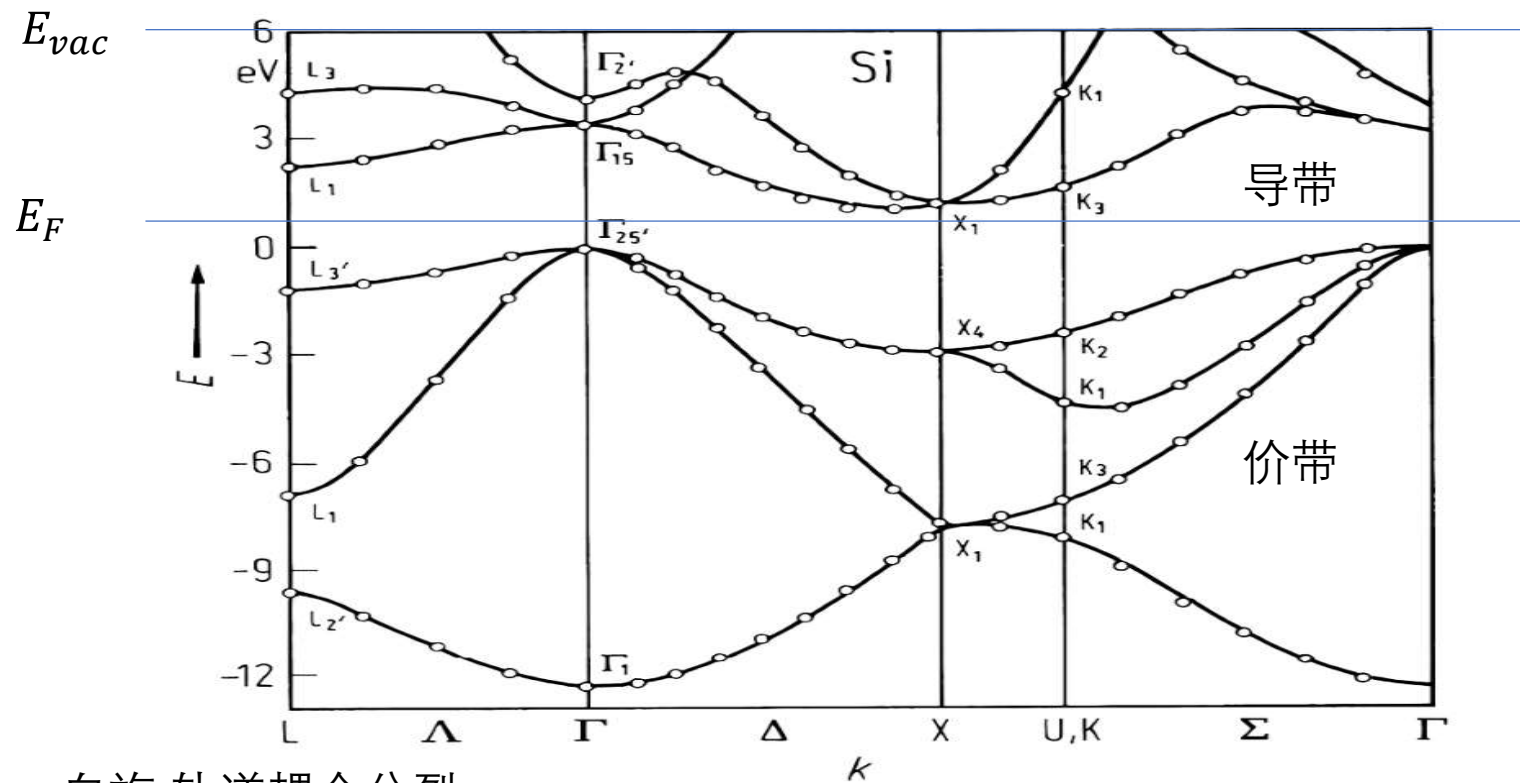


原子波函数线性组合→晶体波函数（布洛赫波）

原子能级→晶体能带（在原子能级上下展宽）

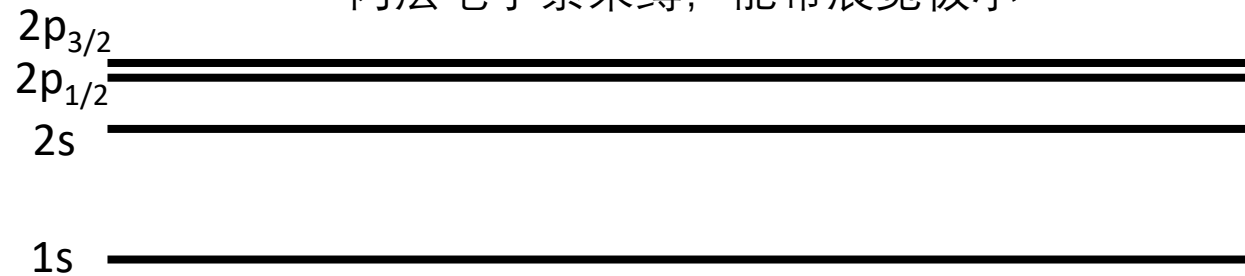
原子的真空能级→晶体的真空能级

硅的能带填充



自旋-轨道耦合分裂

内层电子紧束缚，能带展宽极小



复习大纲

- 晶体结构推出能带
 - 晶体结构、原子能级、紧束缚模型、能带
- 能带边缘的结构
 - 有效质量、群速度、运动方程、等能面、态密度
- 半导体能带结构的规律
 - 导带三类能谷-价带三条能带、直接-间接带隙
 - 原子序数越大，化学键共价性越强，带隙越小，相同波矢处有效质量越低
- 费米分布
 - “ $g_f(E)$ ”、非简并条件、本征-掺杂半导体的 n 和 E_F

能带相关概念

- 有效质量

$$E(\mathbf{k}) \sim E(\mathbf{k}_0) + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \left. \frac{d^2 E}{2 d\mathbf{k}^2} \right|_{\mathbf{k}_0} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = E(\mathbf{k}_0) + (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \frac{\hbar^2}{2} m^{*-1} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$$

- 群速度、运动方程

$$\mathbf{v} = \frac{d\omega}{d\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{d\mathbf{k}} = m^{*-1} \cdot \hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \quad \mathbf{F} = \frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = \frac{m^* \cdot d\mathbf{v}}{dt} = m^* \cdot \mathbf{a}$$

- 等能面

$$\frac{(k_x - k_{x0})^2}{m_{nx}^*} + \frac{(k_y - k_{y0})^2}{m_{ny}^*} + \frac{(k_z - k_{z0})^2}{m_{nz}^*} = \frac{2(E - E(\mathbf{k}_0))}{\hbar^2}$$

- 态密度

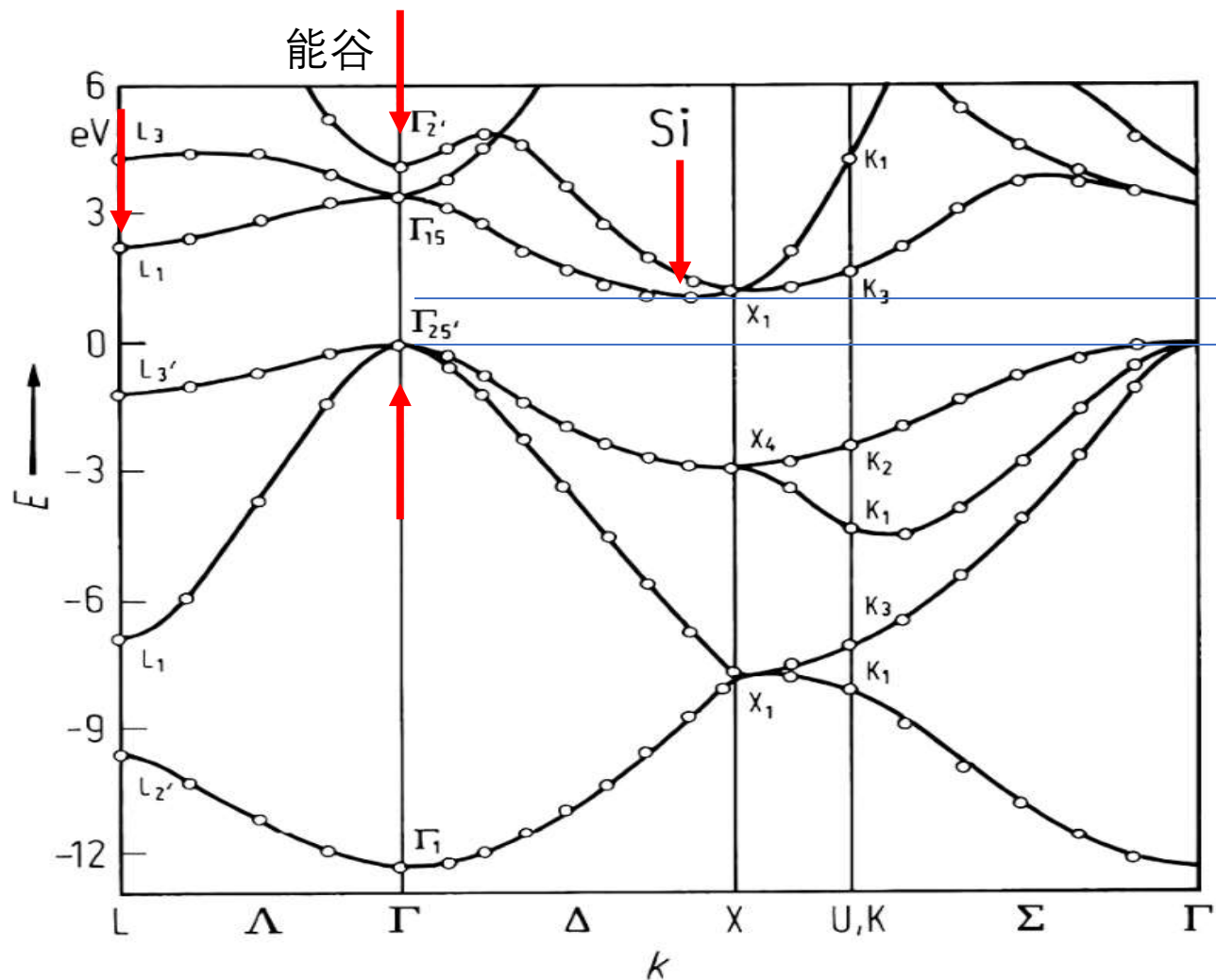
$$\text{DOS} = g(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{L^3 m_{dn}^* \sqrt{2m_{dn}^* (E - E(\mathbf{k}_0))}}{\pi^2 \hbar^3}$$

其中 $m_{dn}^* = (m_{nx}^* m_{ny}^* m_{nz}^*)^{\frac{1}{3}}$ 称为态密度有效质量

复习大纲

- 晶体结构推出能带
 - 晶体结构、原子能级、紧束缚模型、能带
- 能带边缘的结构
 - 有效质量、群速度、运动方程、等能面、态密度
- 半导体能带结构的规律
 - 导带三类能谷-价带三条能带、直接-间接带隙
 - 原子序数越大，化学键共价性越强，带隙越小，相同波矢处有效质量越低
- 费米分布
 - “ $g_f(E)$ ”、非简并条件、本征-掺杂半导体的 n 和 E_F

硅能带的详细结构



半导体中由于掺杂、注入，导带底和价带顶会填一些电子/空穴

导带三种能谷
 Γ 、 X 、 L

导带 (未填电子)

禁带

价带 (填满电子)

价带三条能带

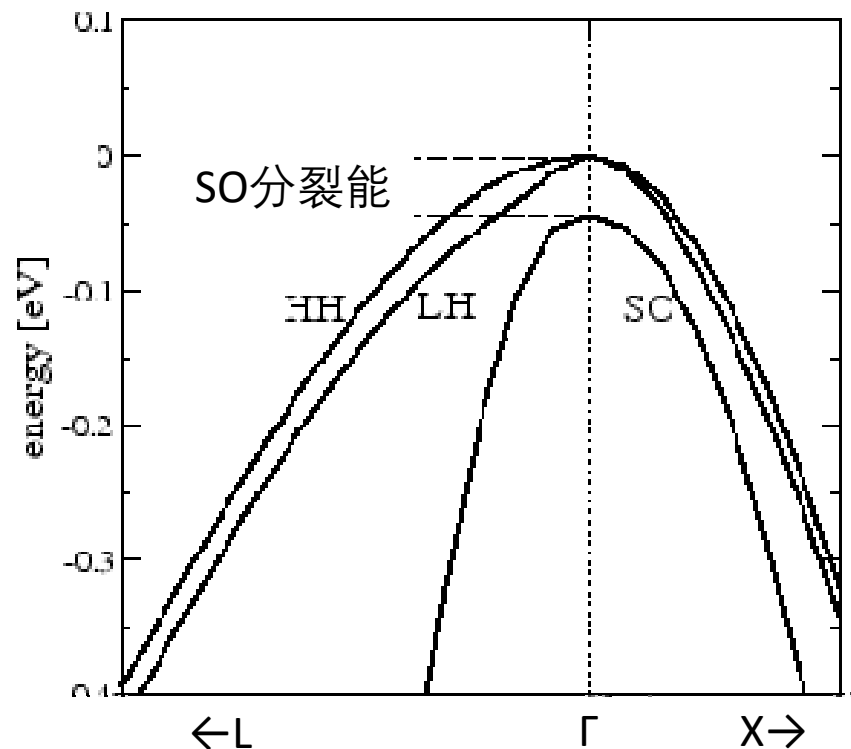
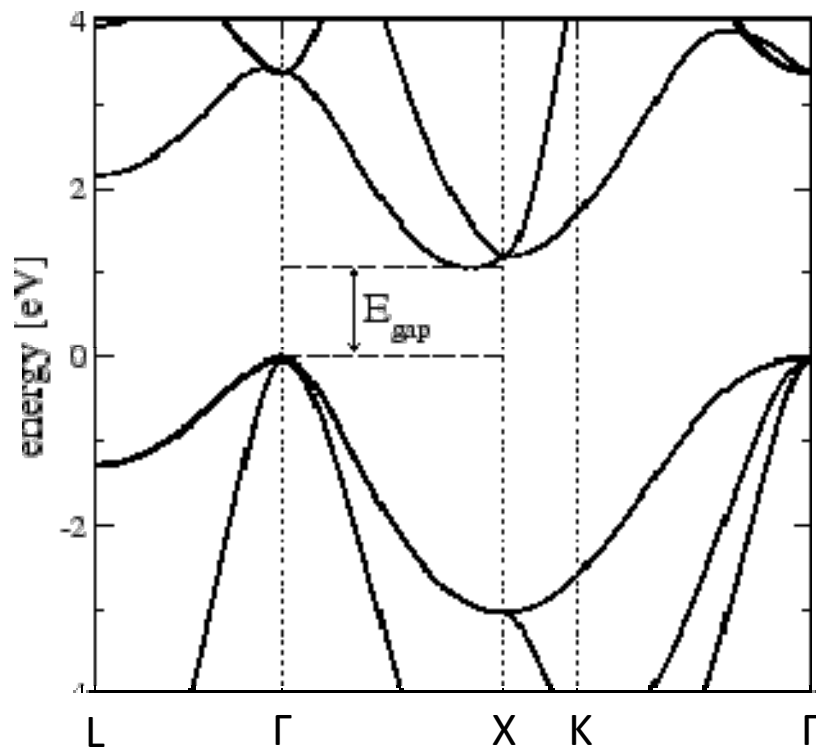
导带的极小值和价带的极大值也叫做“能谷”

k : 三维，较复杂；布里渊区中注意 Γ X K L 这几个点

硅的价带顶

- 重空穴带、轻空穴带、自旋-轨道耦合带

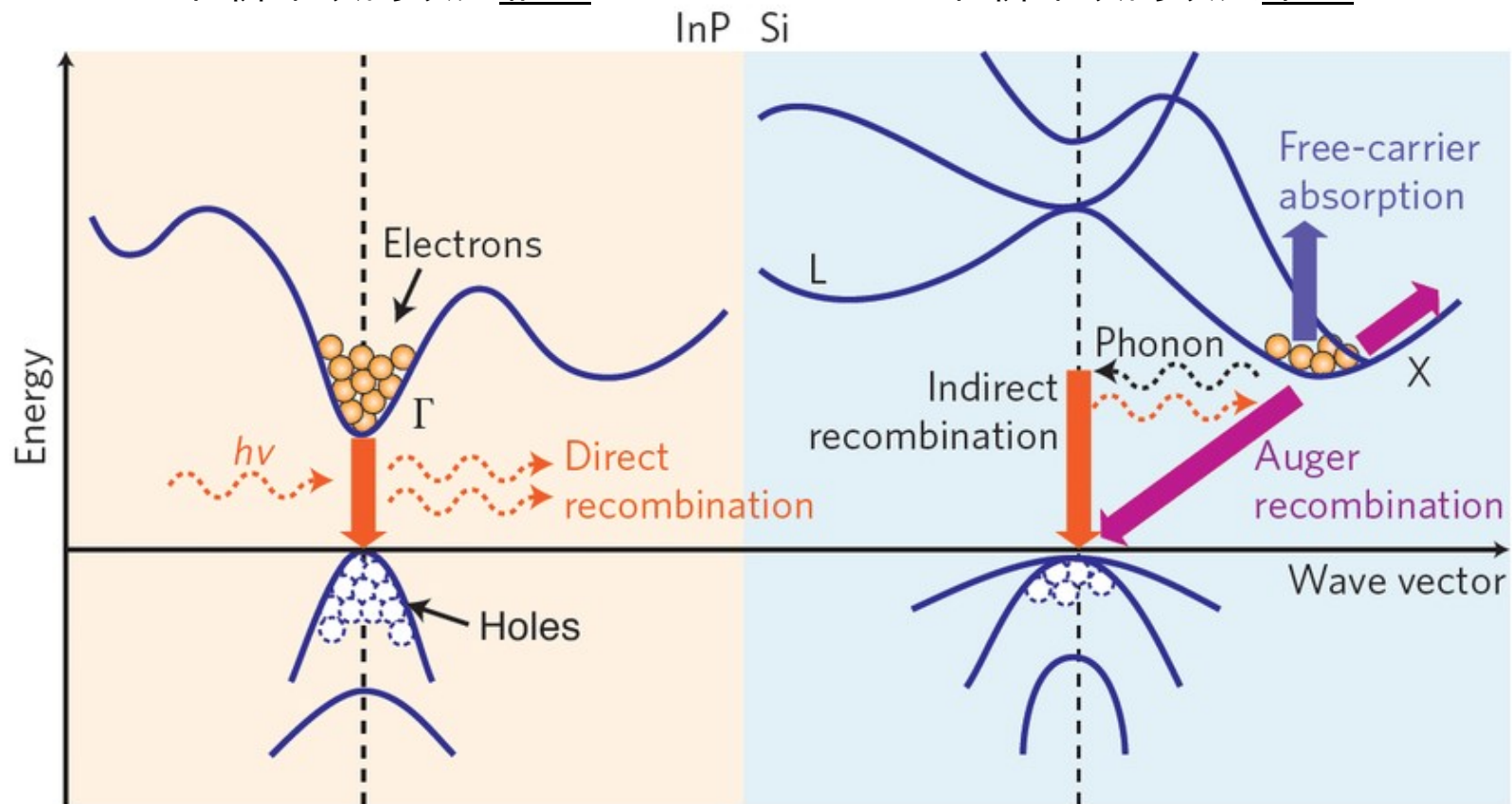
轻重空穴带 $E(\mathbf{k}) = -Ak^2 \mp \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)}$.



直接带隙与间接带隙

直接带隙半导体：导带底
和价带顶的波矢相同

间接带隙半导体：导带底
和价带顶的波矢不同



电子-空穴复合能发射光子

电子-空穴复合不能发射光子

常见半导体能带结构的规律

- 原子序数越大，化学键共价性越强，带隙越小
 - 此时，在相同波矢处有效质量越低
- 常见半导体的价带顶通常都位于 Γ 点附近，导带底则不确定
 - IV族半导体通常为间接带隙
 - III-V族半导体除AlX和GaP为间接带隙以外，其它通常为直接带隙
 - II-VI族半导体通常为直接带隙
- 常见半导体的价带顶通常包含重空穴带、轻空穴带、自旋轨道耦合带，导带底通常只有一个带

半导体能带结构比较

纵向比较：从上到下原子序数增大，近邻原子波函数交叠更多，能带展宽更大

此时，带隙变小，相同k值附近有效质量降低

远离：价带顶

	导带底	价带顶	带隙	电子纵	电子横	重空穴	轻空穴	3号带
金刚石								
Si	Γ X某处	Γ	1.12	0.92	0.19	0.53	0.16	0.245
Ge	L	Γ	0.6	1.64	0.082	0.28	0.044	0.077
闪锌矿								
GaP	Γ X某处	Γ	2.27	0.91	0.25	0.67	0.17	远离
InP	Γ	Γ	1.34	0.073		0.45	0.12	远离
GaAs	Γ	Γ	1.42	0.063		0.50	0.076	远离
InSb	Γ	Γ	0.18	0.0118		~ 0.4	0.016	远离
纤锌矿								
AlN	Γ	Γ	6.2	0.4		3.5-10	0.2-3.5	0.2-3.8
GaN	Γ	Γ	3.39	0.20		1.4	0.3	0.6

半导体能带结构比较

横向比较：从上到下键的极性增大

远离：价带顶

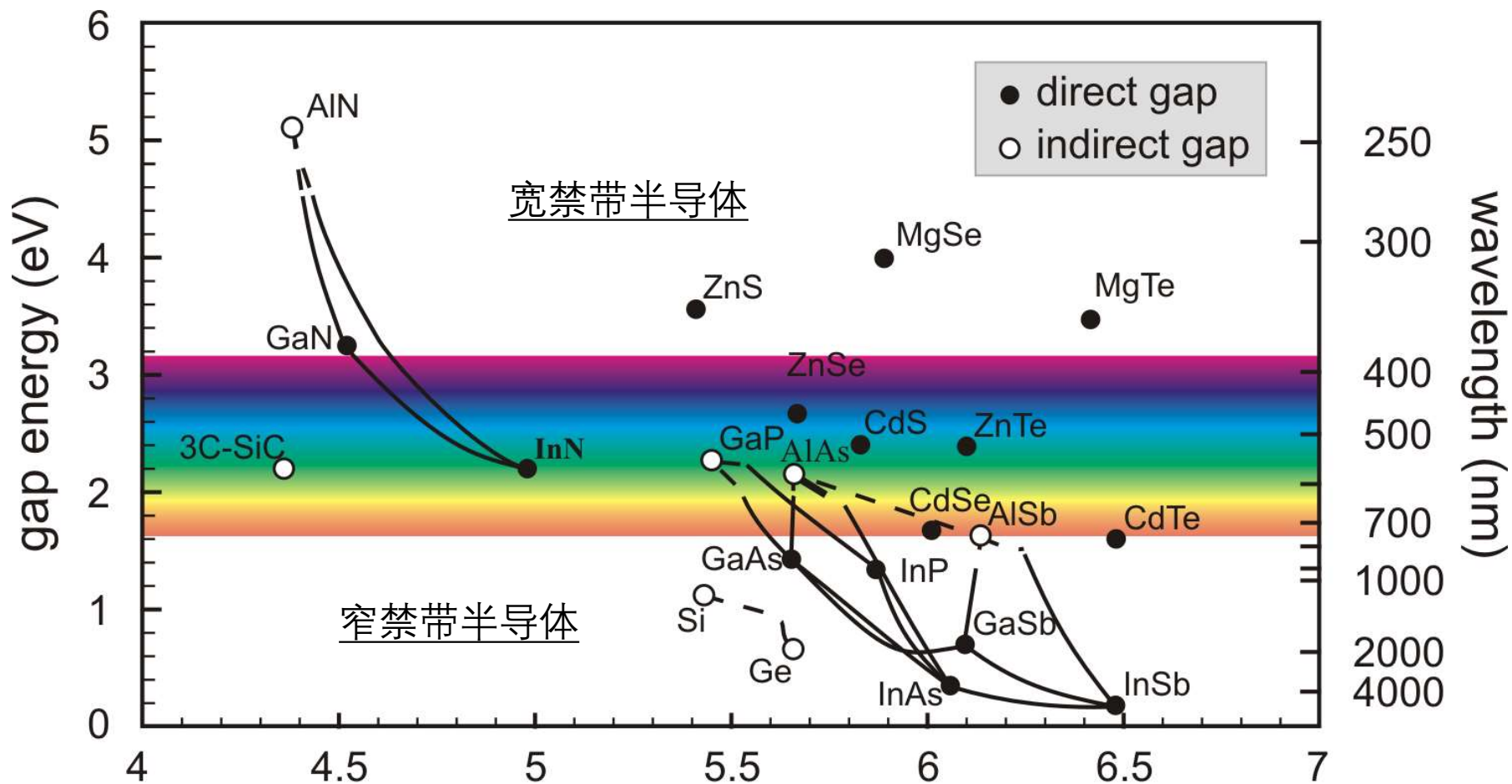
	导带底	价带顶	带隙	电子纵	电子横	重空穴	轻空穴	3号带
三周期								
Si	Γ X某处	Γ	1.12	0.92	0.19	0.53	0.16	0.245
AlP	Γ X某处	Γ	2.52	3.67	0.212	0.71	0.19	0.30
GaN	Γ	Γ	3.39	0.20		1.4	0.3	0.6
四周期								
Ge	L	Γ	0.6	1.64	0.082	0.28	0.044	0.077
GaAs	Γ	Γ	1.42	0.063		0.50	0.076	远离
ZnSe	Γ	Γ	2.60	0.2		>0.6	?	远离

J. Appl. Phys. **89**, 5815 (2001).

键的极性增大，近邻原子波函数交叠造成的能带展宽更小

此时，带隙变大，相同k值附近有效质量提高

半导体能带参数



晶格常数 lattice constant (Å)

Simone Montanari PhD 2005.

基本上可理解为波函数重叠的程度，或原子序数

复习大纲

- 晶体结构推出能带
 - 晶体结构、原子能级、紧束缚模型、能带
- 能带边缘的结构
 - 有效质量、群速度、运动方程、等能面、态密度
- 半导体能带结构的规律
 - 导带三类能谷-价带三条能带、直接-间接带隙
 - 原子序数越大，化学键共价性越强，带隙越小，相同波矢处有效质量越低
- 费米分布
 - “ $g_f(E)$ ”、非简并条件、本征-掺杂半导体的 n 和 E_f

温度和费米分布

- 确定的温度对应某种确定的粒子能量分布
- 对于电子，该分布为费米分布

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1}$$

其中E代表能量， E_F 表示费米能级， k_B 为玻尔兹曼常数，T为温度
f(E)表示粒子占据能量为E的态的概率

- f(E)表示一个态中电子的平均个数
- 当状态数为g时，gf(E)表示能量为E的态中电子的（平均）个数
- 当态密度为g(E)时，g(E)f(E)dE表示能量为E到E+dE的态中电子的个数

半导体的载流子浓度

导带电子浓度 $n = \int \frac{1}{V} g_c(E) f(E) dE$

导带C: 态密度 $g_c(E)$

电子数 $g_c(E) f(E) dE$

施主D: 状态数 $V N_D$
 N_D : 施主浓度

电子数 $V N_D f(E)$

受主A: 状态数 $V N_A$
 N_A : 受主浓度

电子数 $V N_A f(E)$
 空穴数 $V N_A (1 - f(E))$

价带V: 态密度 $g_v(E)$

电子数 $g_v(E) f(E) dE$
 空穴数 $g_v(E) (1 - f(E)) dE$

V : 半导体体积

价带空穴浓度 $p = \int \frac{1}{V} g_v(E) (1 - f(E)) dE$

非简并半导体的载流子浓度

玻尔兹曼

导带电子浓度 $n = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}}$

导带C: 状态数 VN_C
 N_C : 导带等效状态浓度

电子数 $VN_C f(E_C)$

施主D: 状态数 VN_D
 N_D : 施主浓度

电子数 $VN_D f(E_D)$

受主A: 状态数 VN_A
 N_A : 受主浓度

电子数 $VN_A f(E_A)$
 空穴数 $VN_A (1 - f(E_A))$

价带V: 态密度 VN_V
 N_V : 价带等效状态浓度

电子数 $VN_V f(E_V)$
 空穴数 $VN_V (1 - f(E_V))$

V: 半导体体积

价带空穴浓度 $p = N_V e^{-\frac{E_F - E_V}{k_B T}}$ 玻尔兹曼

要求: 非简并 - E_C 、 E_V 和 E_F 足够远 ($>$ 几个 $k_B T$, “几”至少要有 2.5)

本征半导体

- 未掺杂（掺杂补偿）半导体

电子-空穴浓度乘积

$$np = n_i^2 = N_C N_V e^{-\frac{E_g}{k_B T}} = \frac{(m_{dn}^* m_{dp}^*)^{3/2}}{2\pi^3 \hbar^6} (k_B T)^3 e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$$

- 本征载流子浓度 n_i 与材料和温度有关
- E_F 位于禁带中线附近

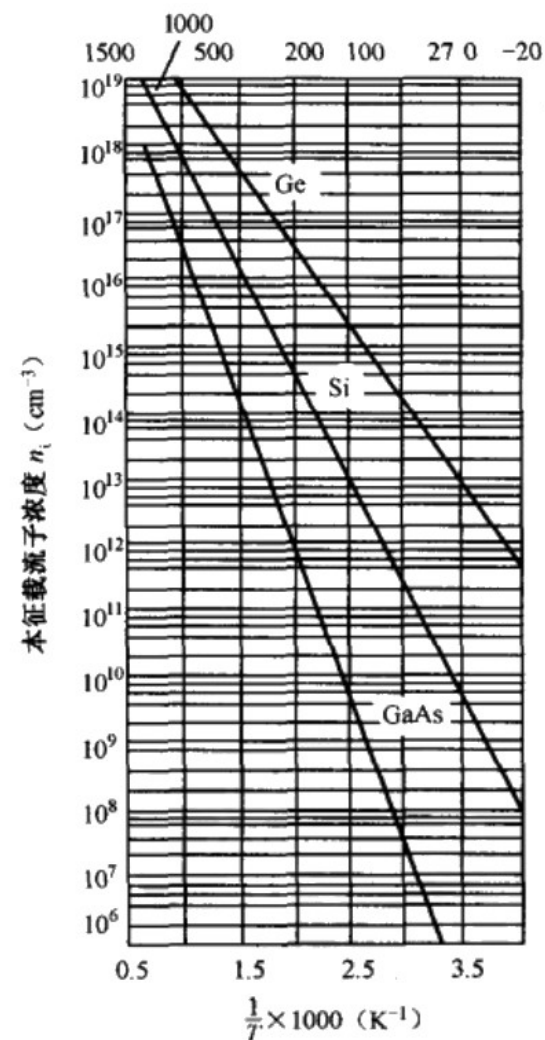


图 3-7 硅、锗、砷化镓
的 $\ln n_i \sim 1/T$ 关系^[5]

n型掺杂半导体的载流子浓度

- 1. 低温弱电离区
- 2. 中间电离区
- 3. 强电离区（饱和）
- 4. 过渡区
- 5. 高温本征激发区
- 注意：空穴浓度在非简并条件下一直都可以用 $np=n_i^2$ 计算

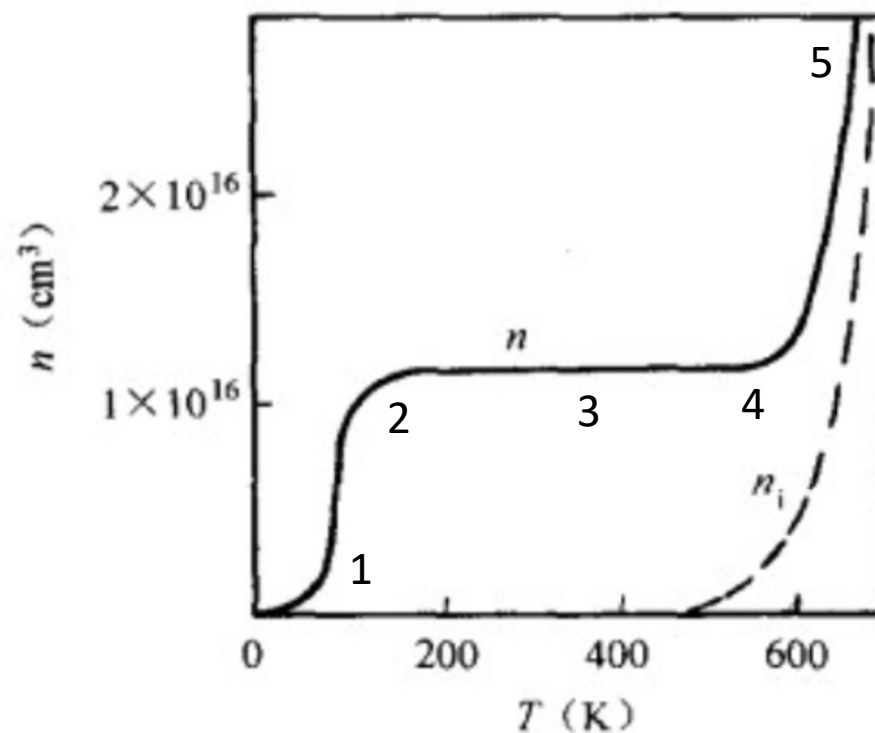
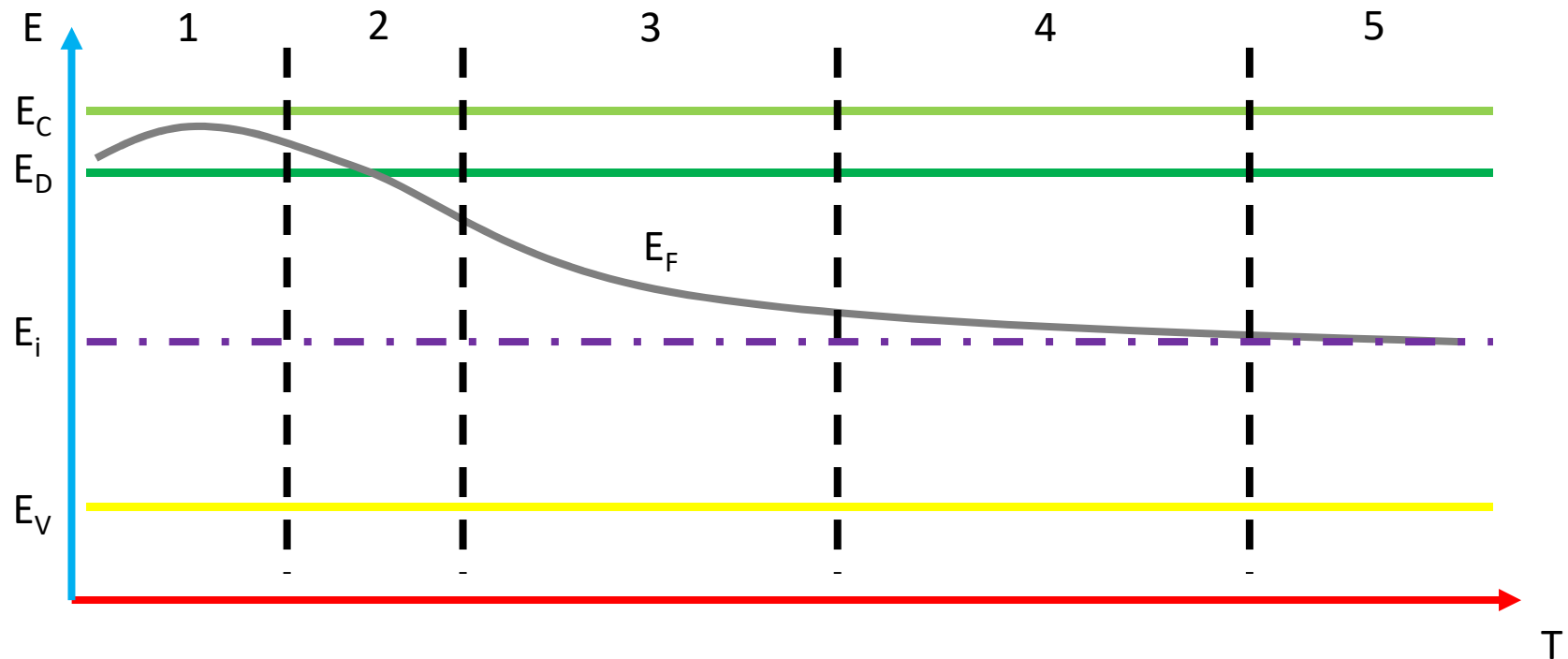


图 3-11 n 型硅的电子浓度与温度的关系^[8,9]曲线

n型半导体的费米能级

- 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



n、p和 E_F 随杂质浓度的变化

室温时的n、p和 N_D 、 N_A 的关系

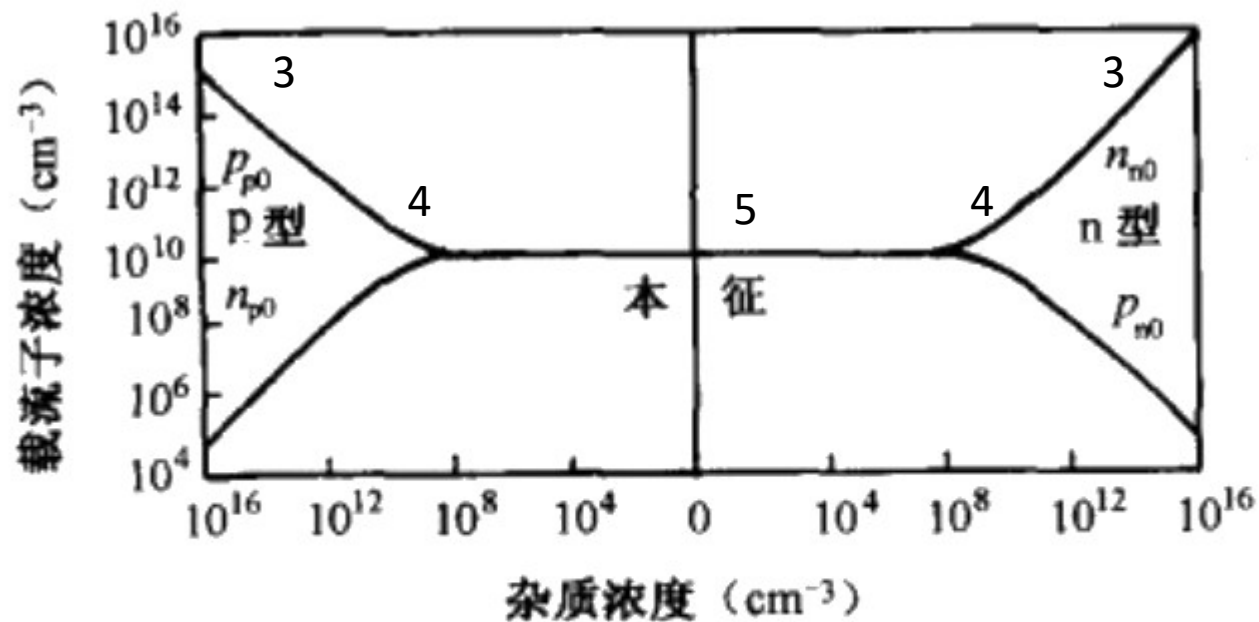


图 3-14 硅中载流子浓度与杂质浓度的关系

掺杂在一开始不影响载流子浓度。超过本征浓度之后，掺得越多载流子浓度越高

n 、 p 和 E_F 随杂质浓度的变化

掺杂浓度越高，载流子浓度越高

掺杂浓度越高， E_F 越靠近带边

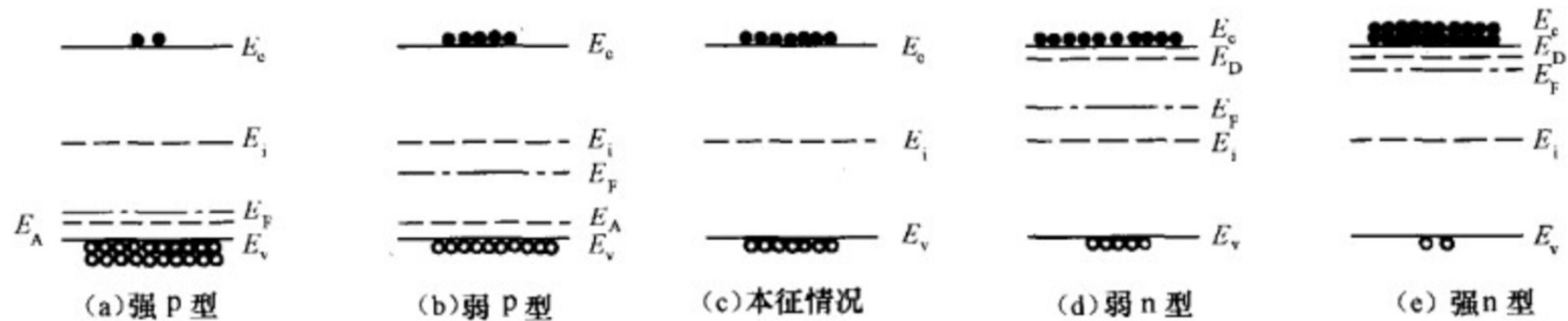


图 3-13 不同掺杂情况下的半导体的费米能级

复习大纲

- 半导体里的粒子作用

- 半导体里的粒子：载流子、声子、光子、杂质
- 载流子漂移、散射机制、迁移率、电阻率-欧姆定律
- 载流子扩散、扩散系数-扩散定律、爱因斯坦关系
- 载流子产生复合、产生-复合率、寿命、直接-间接复合

- 能带图

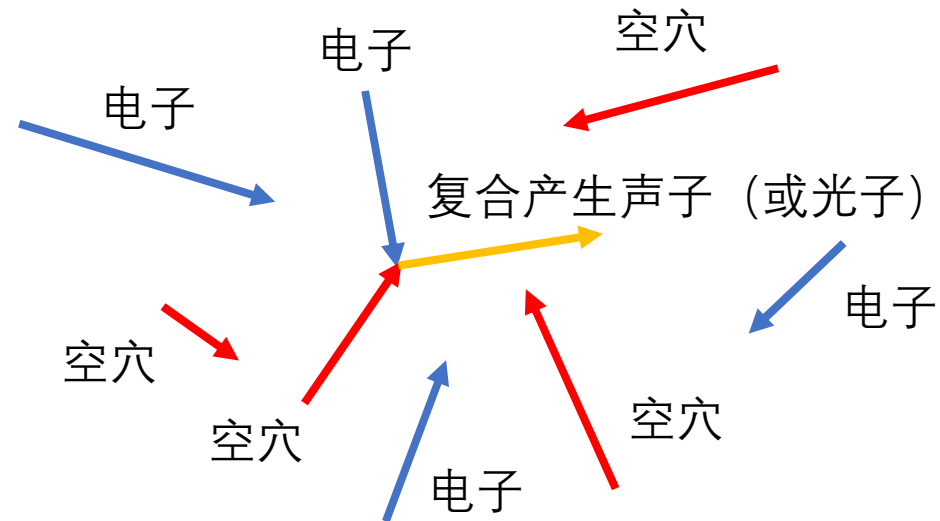
- 能带图中的费米能级、泊松方程、输运-连续性方程

- 实验

- 晶体结构TEM/XRD、能带结构各种谱学/回旋共振、载流子浓度迁移率霍尔效应、扩散漂移Haynes-Shockley

半导体里粒子作用的图像

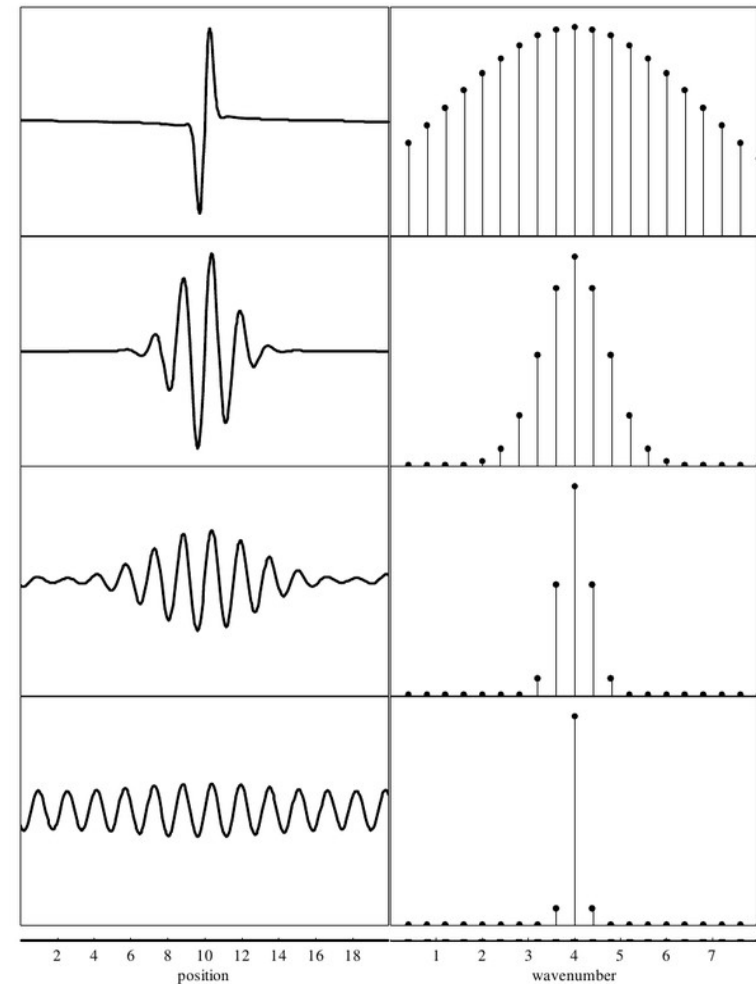
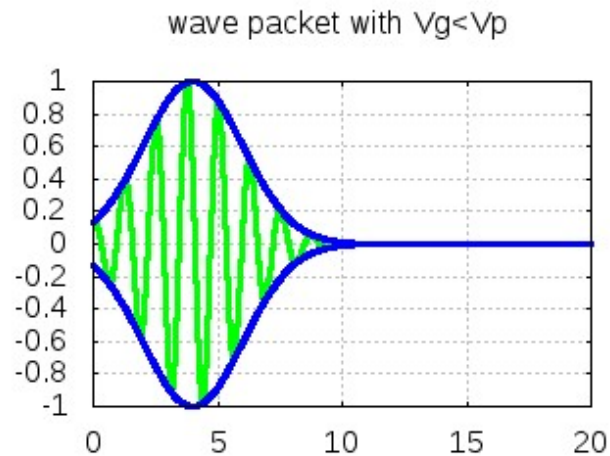
- 半导体中存在载流子、大量声子、光子、杂质等



- 随时随地发生的散射过程导致了1.漂移速度和电场成正比；2.扩散和浓度梯度成正比；3.能级跃迁（产生复合）

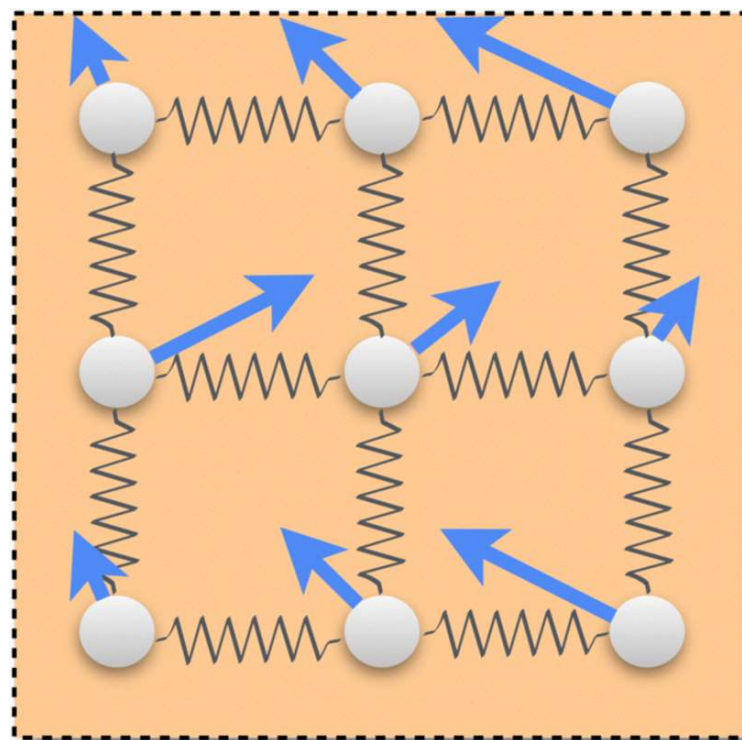
载流子在半导体中的局域化

- 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



晶格振动

晶格振动的经典图景

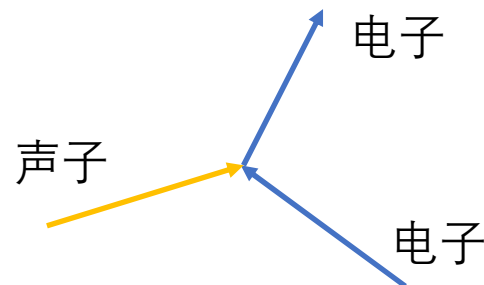


Q. Tong, J. Chem. Phys. 143, 064101 (2015).

第 s 个原子有位移 u_s ；原子间由化学键相连，具有一定“弹性”

声子的准经典近似

- 声子的局域化：
 - 由于半导体中的缺陷和掺杂，声子波函数（也就是晶格振动）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
- 此时，声子也可以有经典的位置、速度、加速度，可以和电子“碰撞”导致散射



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

半导体晶体的声子谱

- 金刚石、闪锌矿晶格每个原胞均含两个原子
- 声子谱进一步分为六支，三支高能的称为“光学支”，三支低能的称为“声学支”，分别各有一支纵波和两支横波

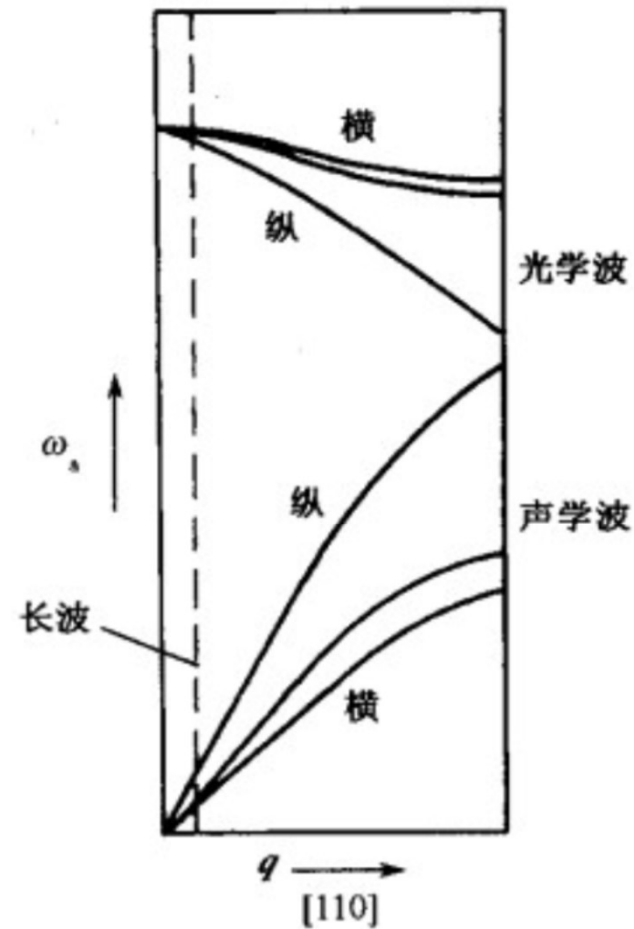


图 4-6 金刚石晶格振动沿 [110]

复习大纲

- **半导体里的粒子作用**

- 半导体里的粒子：载流子、声子、光子、杂质
- **载流子漂移、散射机制、迁移率、电阻率-欧姆定律**
- 载流子扩散、扩散系数-扩散定律、爱因斯坦关系
- 载流子产生复合、产生-复合率、寿命、直接-间接复合

- **能带图**

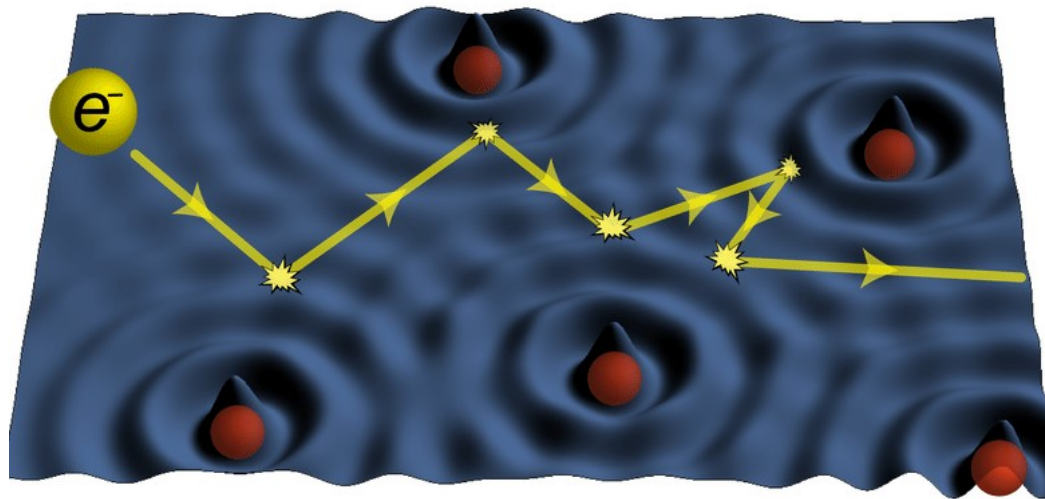
- 能带图中的费米能级、泊松方程、输运-连续性方程

- **实验**

- 晶体结构TEM/XRD、能带结构各种谱学/回旋共振、载流子浓度迁移率霍耳效应、扩散漂移Haynes-Shockley

散射

- 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 \mathbf{j} 和 \mathbf{E} 成正比

杂质散射

- 载流子受（电离）杂质的额外势场影响发生随机偏转，使得速度随机化的过程

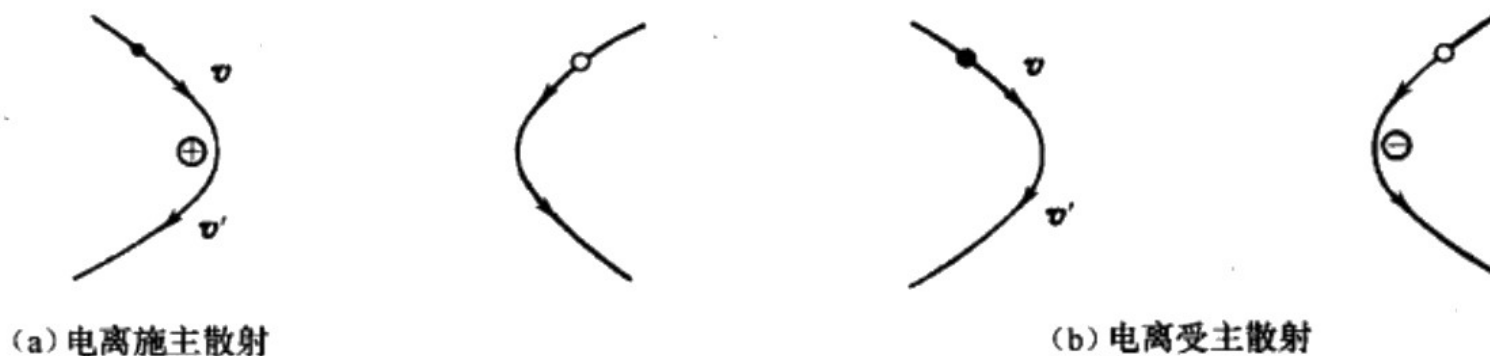


图 4-5 电离杂质散射示意图

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

声子如何散射载流子？

极性半导体中，纵光学波会带来电荷的疏密变化，类似于电离杂质

纵声学波会带来势场的扰动，类似于中性杂质

横波对散射贡献较小

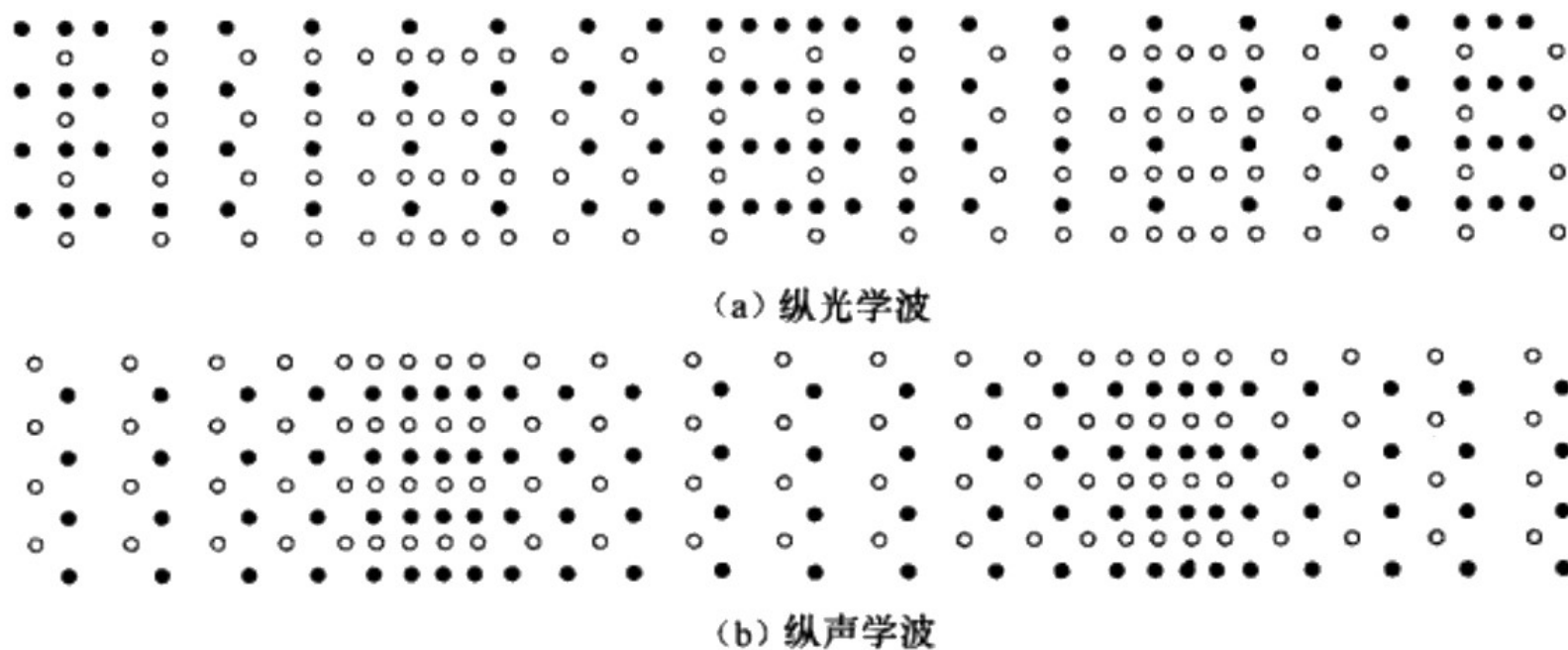
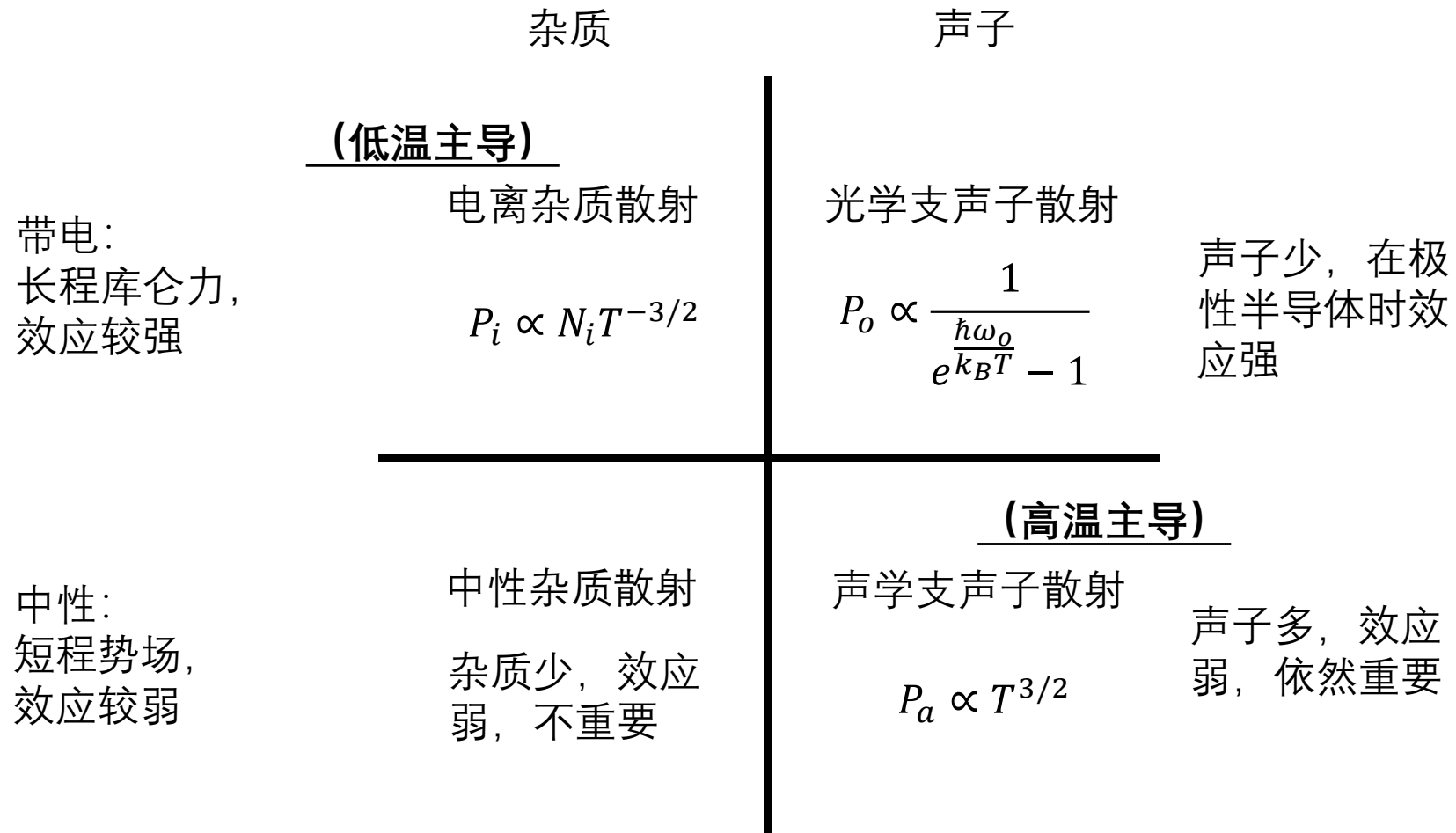


图 4-10 纵声学波和纵光学波示意图(●和○代表原胞中两类原子或离子)

主要散射机制



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

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

迁移率和电导率

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

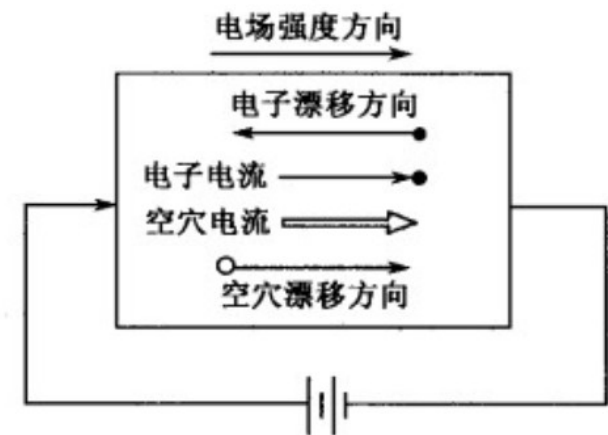


图 4-2 电子漂移电流和
空穴漂移电流

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

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

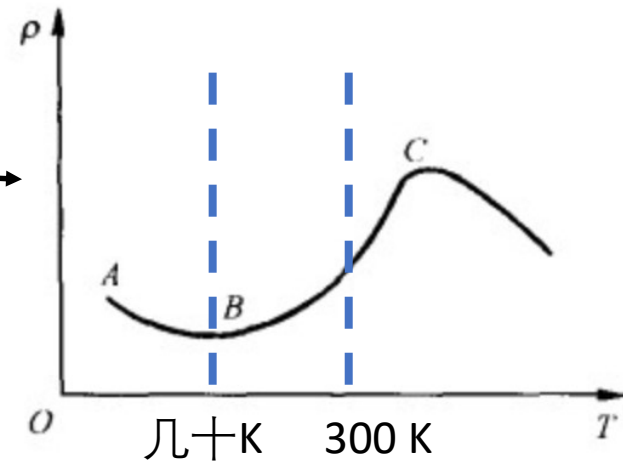


图 4-16 硅电阻率与
温度关系示意图

复习大纲

- **半导体里的粒子作用**

- 半导体里的粒子：载流子、声子、光子、杂质
- 载流子漂移、散射机制、迁移率、电阻率-欧姆定律
- **载流子扩散、扩散系数-扩散定律、爱因斯坦关系**
- 载流子产生复合、产生-复合率、寿命、直接-间接复合

- **能带图**

- 能带图中的费米能级、泊松方程、输运-连续性方程

- **实验**

- 晶体结构TEM/XRD、能带结构各种谱学/回旋共振、载流子浓度迁移率霍耳效应、扩散漂移Haynes-Shockley

载流子的扩散

- 扩散定律（菲克第一定律）

- $\mathbf{S} = -D\nabla n$

- 粒子数守恒

- $\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{S} + G - R = -\nabla \cdot \mathbf{S} + G_{pc} - \frac{\Delta n}{\tau_{in}}$

- 扩散定律（菲克第二定律）

- $\frac{\partial n}{\partial t} = D\nabla^2 n + G_{pc} - \frac{\Delta n}{\tau_{in}}$

- 稳态条件 $\frac{\partial n}{\partial t} = 0$

- 电子 $D_n \nabla^2 \Delta n = \Delta n / \tau_{in-n}$, 空穴 $D_p \nabla^2 \Delta p = \Delta p / \tau_{in-p}$

- 可解得非平衡载流子的分布

输运-漂移和扩散

半导体中同时存在漂移和扩散电流的例子

$$\mathbf{j}_{total} = pq\mu_p \mathbf{E} + nq\mu_n \mathbf{E} - qD_p \nabla p + qD_n \nabla n$$

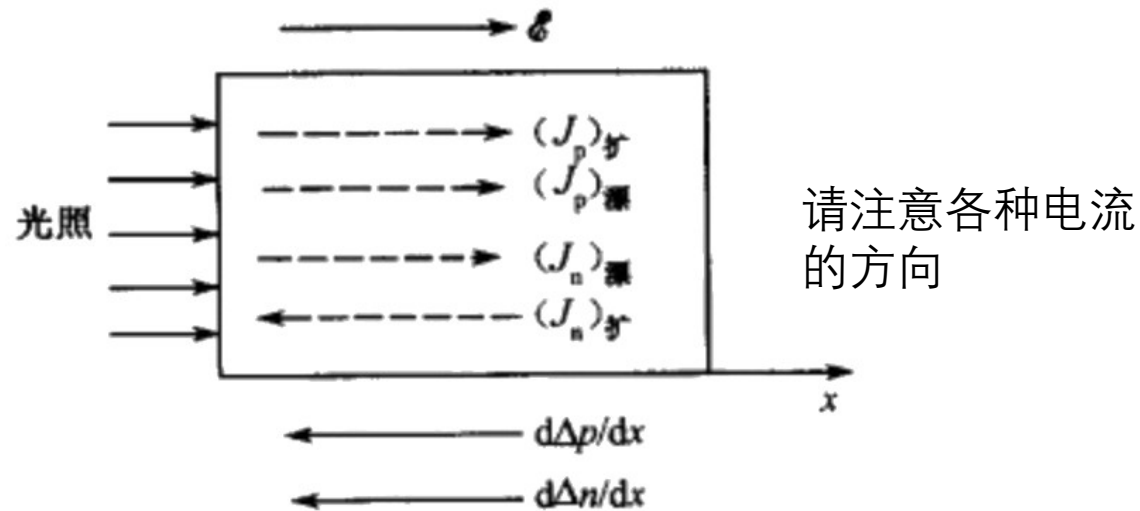


图 5-16 非平衡载流子的一维漂移和扩散

爱因斯坦关系

- 爱因斯坦关系

- 对电子 $\mu_n = \frac{qD_n}{k_B T}$

- 对空穴 $\mu_p = \frac{qD_p}{k_B T}$

- 漂移、扩散电流现在有统一的表达式

- $$\begin{aligned} \mathbf{j}_{total} &= p q \mu_p \mathbf{E} + n q \mu_n \mathbf{E} - q D_p \nabla p + q D_n \nabla n \\ &= -p q \mu_p \nabla V - n q \mu_n \nabla V - \mu_p k_B T \nabla p + \mu_n k_B T \nabla n \end{aligned}$$

总输运电流

- 漂移、扩散电流之和可表达为
- $$\begin{aligned} \mathbf{j}_{total} &= p q \mu_p \mathbf{E} + n q \mu_n \mathbf{E} - q D_p \nabla p + q D_n \nabla n \\ &= -p q \mu_p \nabla V - n q \mu_n \nabla V - \mu_p k_B T \nabla p + \mu_n k_B T \nabla n \\ &= p \mu_p \nabla E_{Fp} + n \mu_n \nabla E_{Fn} \end{aligned}$$
- 第一项 $p \mu_p \nabla E_{Fp}$ 为总空穴电流
 - 空穴由（准）费米能级低的地方向高的地方输运
- 第二项 $n \mu_n \nabla E_{Fn}$ 为总电子电流
 - 电子由（准）费米能级高的地方向低的地方输运
- 费米能级“高”和“低”指的相对于真空能级

复习大纲

- **半导体里的粒子作用**

- 半导体里的粒子：载流子、声子、光子、杂质
- 载流子漂移、散射机制、迁移率、电阻率-欧姆定律
- 载流子扩散、扩散系数-扩散定律、爱因斯坦关系
- **载流子产生复合、产生-复合率、寿命、直接-间接复合**

- **能带图**

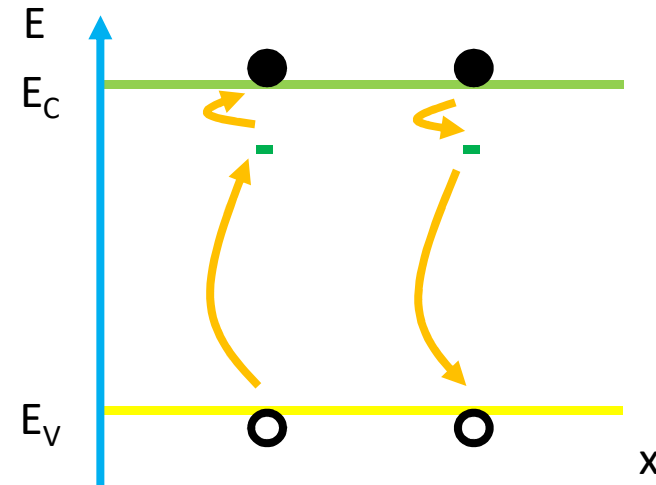
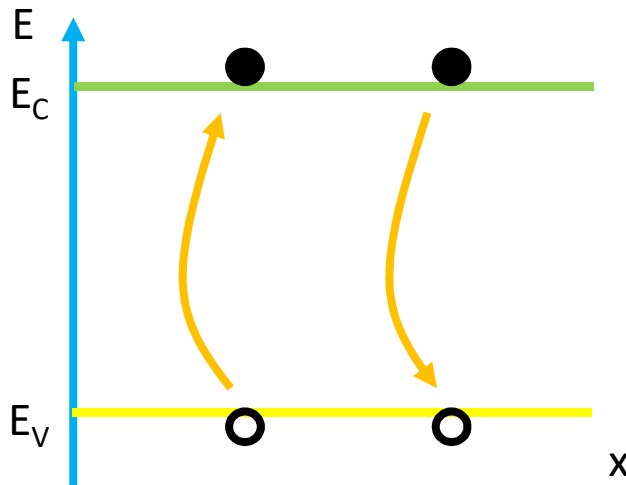
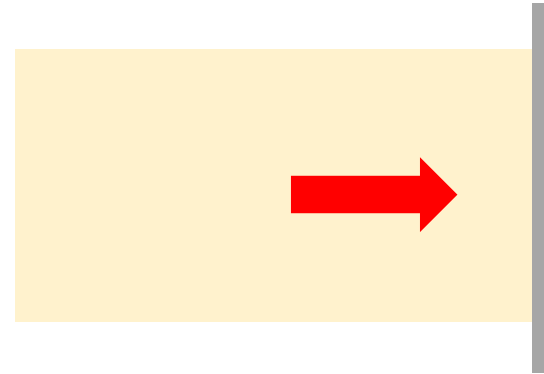
- 能带图中的费米能级、泊松方程、输运-连续性方程

- **实验**

- 晶体结构TEM/XRD、能带结构各种谱学/回旋共振、载流子浓度迁移率霍耳效应、扩散漂移Haynes-Shockley

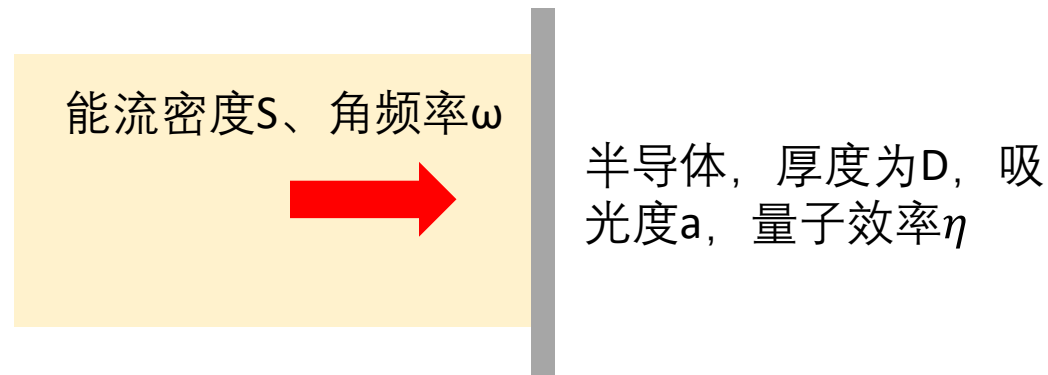
产生率和复合率

- 光生载流子的产生率
- 直接产生/复合率
- 间接产生/复合率



非平衡载流子的注入

- 光注入：光生载流子， $n = n_0 + \Delta n$ ， $p = p_0 + \Delta p$
 - 注入：浓度提高，温度不变，迁移率不变
- 光注入提高的是载流子的产生率



$$G_{pc} = \frac{d\Delta n}{dt} = \frac{d\Delta p}{dt} = \frac{a\eta S}{D\hbar\omega}$$

直接产生/复合

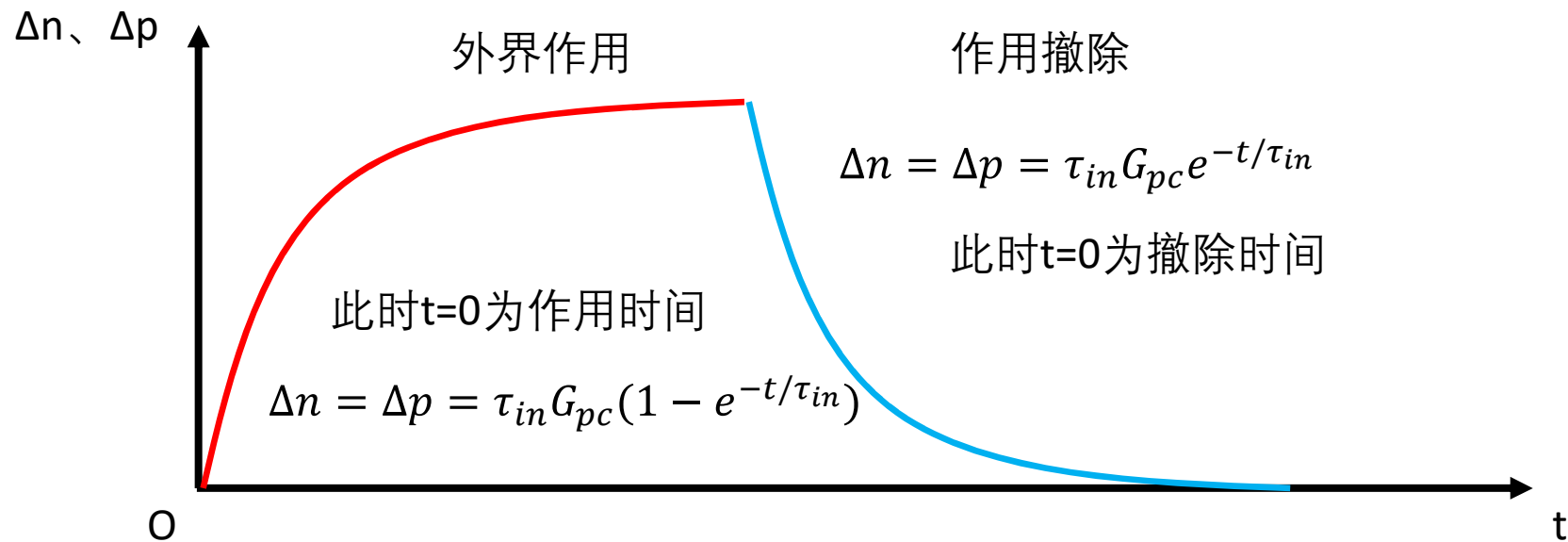
- 载流子的直接复合率为 $R = rnp$
 - 和电子、空穴浓度成正比，比例系数为复合系数 r
 - 平衡态和非平衡态均满足
- 平衡载流子直接产生率为 $G_{eq} = rn_i^2$
 - 要求非简并
 - 使用平衡态的产生率=复合率计算
 - 和体系温度有关
 - 和载流子浓度无关，在非平衡态时也有同样公式
- 载流子的净直接产生率为 $G_{eq} - R = r(n_i^2 - np)$

间接产生/复合

- 载流子的净间接产生率为 $G_{eq} - R = \frac{N_t r_n r_p (n_i^2 - np)}{r_n (n + n_1) + r_p (p + p_1)} \equiv r_{id} (n_i^2 - np)$
 - 和直接产生/复合类似，复合系数 r 不同
- 小注入时，满足 $G_{eq} - R = \frac{N_t r_n r_p (n_i^2 - np)}{r_n (n_0 + n_1) + r_p (p_0 + p_1)}$
 - 复合系数 r_{id} 现为常数
 - 复合系数和过渡态浓度 N_t 成正比

非平衡载流子的光注入

- 光注入时，载流子浓度变化率
 - $\frac{d\Delta n}{dt} = \frac{d\Delta p}{dt} = G_{pc} + G_{eq} - R = (r + r_{id})(n_i^2 - np) + G_{pc}$
 - 可使用小注入条件解微分方程



非平衡载流子的光注入

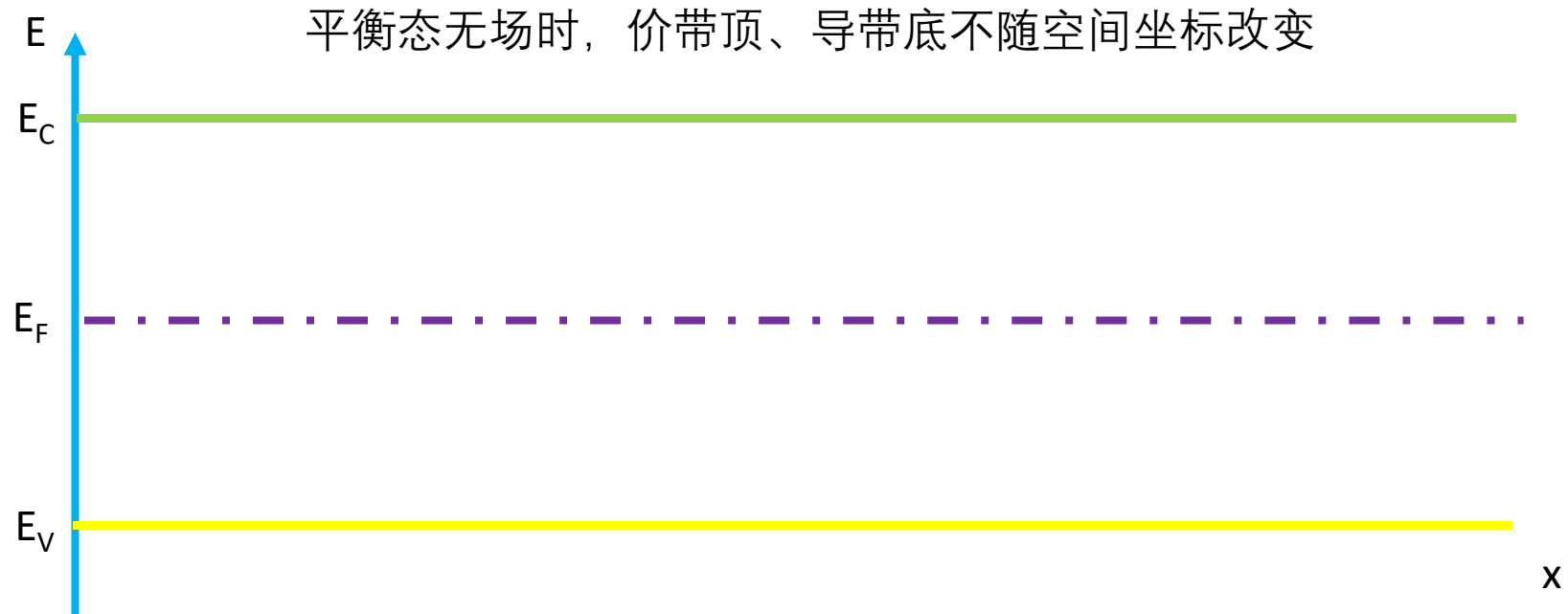
- 光生载流子的寿命和机制有关:
- 直接产生/复合
 - $\tau_{in} = 1/r(n_0 + p_0)$
- 间接产生/复合
 - $\tau_{in} = 1/r_{id}(n_0 + p_0) = \frac{r_n(n_0+n_1)+r_p(p_0+p_1)}{N_t r_n r_p (n_0+p_0)}$
 - 强n型区 (分子中 n_0 占优势, E_F 最接近导带)
 - 强p型区 (分子中 p_0 占优势, E_F 最接近价带)
 - 高阻区 (分子中 n_1 、 p_1 占优势, E_t 最接近导带或价带)
- 总寿命= $1/(1/\text{直接寿命}+1/\text{间接寿命})$
 - 短的那个比较重要
 - $r(n_i^2 - np) = -\Delta p/\tau_{in}$

复习大纲

- 半导体里的粒子作用
 - 半导体里的粒子：载流子、声子、光子、杂质
 - 载流子漂移、散射机制、迁移率、电阻率-欧姆定律
 - 载流子扩散、扩散系数-扩散定律、爱因斯坦关系
 - 载流子产生复合、产生-复合率、寿命、直接-间接复合
- 能带图
 - 能带图中的费米能级、泊松方程、输运-连续性方程
- 实验
 - 晶体结构TEM/XRD、能带结构各种谱学/回旋共振、载流子浓度迁移率霍耳效应、扩散漂移Haynes-Shockley

能带图

- 显示能带随实空间的变化，在输运中很有用
- 能带随倒空间 (k) 的变化是能带结构，两者完全不同



平衡态时的总输运

- 平衡态时，净电子和空穴输运均为零
- $\mathbf{j}_{total} = p\mu_p\nabla E_{Fp} + n\mu_n\nabla E_{Fn} = \mathbf{0} + \mathbf{0} = \mathbf{0}$
- 因此，平衡态时（注意不是稳态）的（准）费米能级为常数
 - 即能带图中 E_F 为水平线
 - 很重要的结论，分析器件的能带图极其常用
- 有输运的时候 E_F 就不会为常数

非均匀体系的求解

- 载流子浓度 n 非均匀，是空间的函数
 - 如何求解？
- 首先画能带图，定性了解情况
- 然后列方程
 - $\mathbf{j}_{total} = -pq\mu_p\nabla V - nq\mu_n\nabla V - \mu_p k_B T \nabla p + \mu_n k_B T \nabla n$
 - $\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{S} + G - R$ 以及 $\mathbf{j} = \pm q\mathbf{S}$
 - $\nabla^2 V = -\nabla \cdot \mathbf{E} = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r}$
 - 三个未知函数 n 、 V 、 \mathbf{j} ，三个方程，可以求解
- 前两个可消掉 \mathbf{j} 合并为连续性方程

非均匀半导体理论中的物理量

- 载流子浓度 n
 - 随空间的分布通常是我们要求的函数
 - 总体情况（如总载流子数）通常可以由材料性质控制，可作为边界条件，如电荷守恒
- 电势 V
 - 随空间的分布也是我们要求的函数
 - V 和 n 有函数关系
 - 总体情况（如总载流子数）通常可以由材料性质控制，可作为边界条件
- 输运电流 j ：可以计算的最终结果
- 费米能级 E_F ：用于定性分析

平衡态时的非均匀体系解法

- 画出能带图，分析可能会发生怎样的输运现象，定性预测平衡态时的情况
- 联立输运方程和泊松方程

$$\mathbf{j}_{total} = \mathbf{0} = -pq\mu_p\nabla V - nq\mu_n\nabla V - \mu_p k_B T \nabla p + \mu_n k_B T \nabla n$$

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r} = -\frac{\rho}{\epsilon}$$

- 得到关于载流子浓度的微分方程

- 近似后通常为

$$\frac{q^2 n_0}{\epsilon k_B T} \Delta n = \nabla^2 \Delta n$$

- 聚焦界面和表面的解，通常会出现一个关于德拜长度的指数衰减项

平衡态时的非均匀体系解法

- 算出电势的空间分布
- 利用边界条件（包括电荷守恒、电势的具体取值等），定出解中的未定系数

非平衡态时的非均匀体系解法

- 画出能带图，分析可能会发生怎样的输运现象，定性预测非平衡态时的情况
- 联立连续性方程和泊松方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \mu k_B T \nabla^2 n / q - n \mu \nabla^2 V - \mu \nabla n \cdot \nabla V + G - R$$

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\epsilon_0 \epsilon_r} = -\frac{\rho}{\epsilon}$$

- 得到关于载流子浓度的微分方程
 - 通常比较复杂
- 算出载流子浓度、电势的空间分布
- 算出总输运电流
 - 以电子为例，输运电流 $\mathbf{j} = -q\mathbf{S} = \mu k_B T \nabla n + n q \mu \nabla V$

复习大纲

- 半导体里的粒子作用
 - 半导体里的粒子：载流子、声子、光子、杂质
 - 载流子漂移、散射机制、迁移率、电阻率-欧姆定律
 - 载流子扩散、扩散系数-扩散定律、爱因斯坦关系
 - 载流子产生复合、产生-复合率、寿命、直接-间接复合
- 能带图
 - 能带图中的费米能级、泊松方程、输运-连续性方程
- 实验
 - 晶体结构TEM/XRD、能带结构各种谱学/回旋共振、载流子浓度迁移率霍耳效应、扩散漂移Haynes-Shockley

观测晶体结构的实验方法

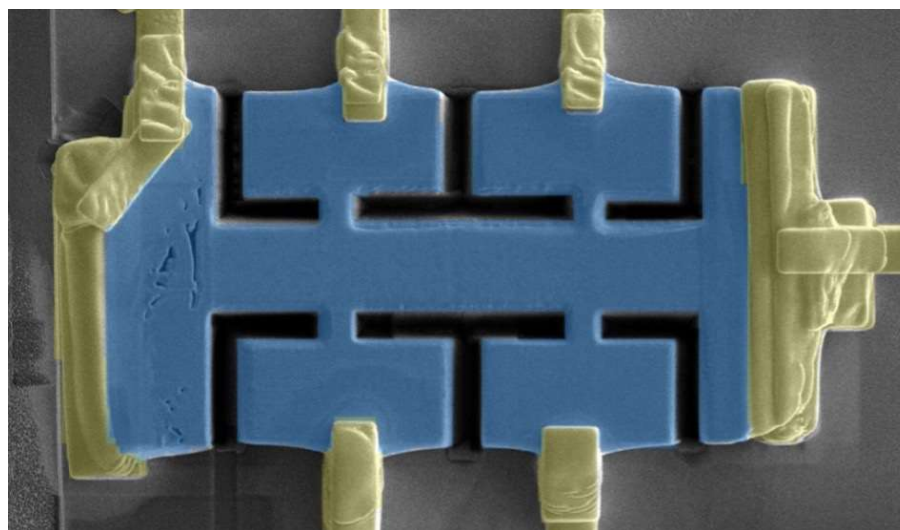
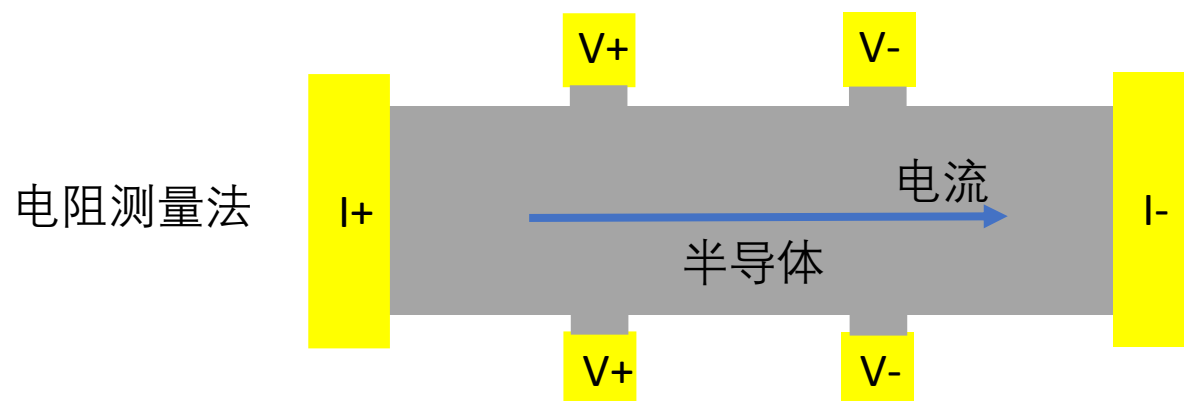
- 直接观察手段
 - 透射电子显微镜 (TEM, transmission electron microscopy)
 - 扫描透射电子显微镜 (STEM, scanning transmission electron microscopy) , 分辨率更高
- 间接精确测量手段
 - X射线衍射 (XRD, X-ray diffraction)

测量能带结构的实验方法

- 高能谱学手段 (UPS/XPS/XAS等)
 - 能带整体特征
 - 测量价带和导带
- 回旋共振
 - 载流子各向异性有效质量
 - 半导体中最常用的测量方法之一
- 吸收光谱
 - 测量不同波长光的吸收
 - 精确确定带隙宽度和类型

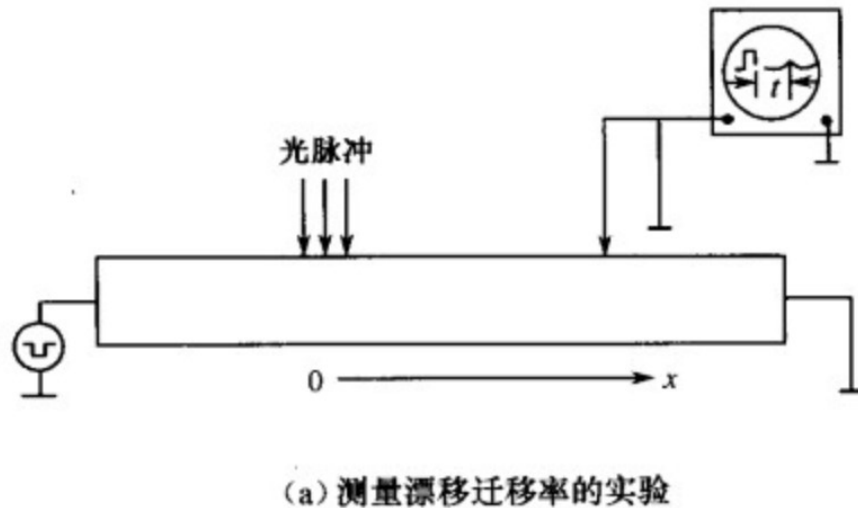
霍尔效应实验

霍尔棒(Hall bar)测量法：同时测量电阻率和载流子浓度

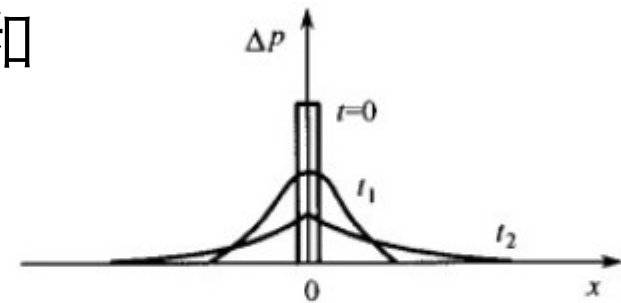


Haynes-Shockley实验

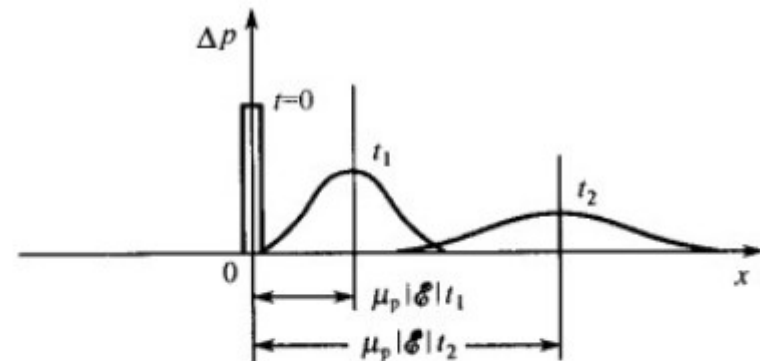
- 表征非平衡态载流子的扩散和漂移



既能测量扩散系数，还能测量迁移率（“漂移系数”）



(b) 无外加电场



(c) 有外加电场

图 5-19 非平衡载流子的脉冲光注入

谢谢！

希望大家在学完本课程之后了解半导体相关的材料和物理基础