

第一章 绪论

微电子硅基芯片的尺度即将到达瓶颈，是否可能存在进一步改进的可能，是否可以找到全新的替代材料？

1.1 半导体物理回顾

晶体结构部分

- 了解并使用密勒指数
- 理解基本的晶体结构
- 理解量子力学的基本知识

经典的理论只能处理单电子的问题，甚至 He_2 已经无法处理，而实际的固体存在 10^{23}cm^{-3} 的电子密度。进一步发现了晶体的周期性，三维重复性对问题进行了简化。对硅片来说，晶圆的方向就是 $[100]$ 晶向。当晶体纯度足够高时，我们就可以在单个的原胞内部处理。

当硅原子相隔较远，电子不发生交叠，均处在 E_1 能级，若是逐渐接近，能量会变化为 $E \pm \Delta E'$ 的能带分布。若是有 N 个电子，不考虑自旋兼并度就有 N 个能带，考虑则是 $2N$ 个。

假设我们有一块 N 原子晶体，那么能量以及相互作用的矩阵可以表示为

$$\begin{bmatrix} E_1 & E_{12} & E_{13} & & \\ E_{21} & E_2 & E_{23} & & \\ E_{31} & E_{32} & E_3 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

但是特征值的求解几乎是不可能的，那么我们使用原胞的思想就可以块对角化，求解特征值对应的能量：

$$\begin{bmatrix} [4 \times 4] & & & & \\ & [4 \times 4] & & & \\ & & [4 \times 4] & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

实际上动量以及角动量对应着平移不变性以及旋转不变性。得到的 $E - K$ 关系就是能量-动量关系。

关键方程

- 物理常数
- 密勒指数
- 晶面角度
- 立方晶面距离

1.1.1 能带结构

- 理解 $E - K$ 关系，从中提取速度、有效质量、等能面等信息，进一步获得电流等关键量
- 理解态密度，费米积分，并进行简单计算
- 一定温度以及掺杂下，计算电子空穴浓度

布洛赫波函数为 $\varphi = \phi(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 。实际中电子以波包的形式传播，其速度为群速度，与 $E - K$ 关系斜率相关（色散关系的倒数）。

综上，我们从真空电子**概率波**与晶格作用（周期势阱）得到了 $E - K$ 关系，导出了有效质量以及群速度等关系，转换为另一个**粒子**的状态，简化问题。

若是需要求解电流密度 $\mathbf{J} = i \cdot n \cdot \mathbf{v}$ ，其中 n 总满足**式 1.1**，为所有量子态的占据几率，其中 $N(E)$ 为态密度。

$$n = \sum_{k=0}^{n=N} f(E(\mathbf{k})) = A \int_{\mathbf{k}} f(E(\mathbf{k})) d\mathbf{k}^3 A' \int_{E=0}^{\infty} f(E) N(E) dE \quad (1.1)$$

最终得到

$$n = N_C e^{\frac{E_F - E_C}{kT}}$$

$$p = N_V e^{\frac{E_V - E_F}{kT}}$$

那么 $n \cdot p = N_C N_V e^{-\frac{E_g}{kT}} = n_i^2$ 其中 $E_g = E_C - E_V$ 。

无掺杂时， $n = p = n_i \approx 10^{10} \text{cm}^{-3}$ 近似绝缘。有掺杂时，电中性条件为

$$p - n + N_D - N_A = 0 \quad (1.2)$$

在导带或者价带能量与费米能级相差 $3k_B T$ 及以上时，费米-狄拉克分布可以弱化为玻尔兹曼分布，并且可以称为简并半导体。

关键方程

- 不同维度的能量、动量态密度，
- 费米狄拉克分布
- 费米积分

1.1.2 非平衡态

- 理解载流子的产生与复合

- 理解载流子的扩散与漂移
- 初步求解简单的少数载流子扩散方程

虽然不满足 $np = n_i^2$ 但是仍均匀分布在空间中。当出现扰动时，偏离稳定，通过耗散能量逐渐回到平衡态。由于电子空穴成对出现，那么在恢复稳态时有

$$(n \pm \Delta n) \times (p \pm \Delta p) = n_i^2, \text{ where } \Delta n = \Delta p$$

复合中心辅助的产生与复合 (SRH)

$$-\frac{\partial n}{\partial t}_{SRH} = -\frac{\partial p}{\partial t}_{SRH} = R_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (1.3)$$

D_P, D_N 分别是空穴、电子的扩散系数，单位是 cm^2/sec

$$J_P|_{\text{diff}} = -qD_P\nabla p$$

$$J_N|_{\text{diff}} = qD_N\nabla n$$

考虑浓度差

$$J_N = qn\mu_N E + qD_N\nabla n$$

$$J_P = qp\mu_P E - (qD_P\nabla p)$$

第一项是漂移电流，第二项是扩散电流。

漂移电流的定义

$$J_n = qnv_{\text{drift}} = qn\mu_n \mathcal{E} = n\mu_n \frac{dF_n}{dx}$$

$$J_p = qp v_{\text{drift}} = qp\mu_p \mathcal{E} = p\mu_p \frac{dF_p}{dx}$$

其中 μ_n 是迁移率。