

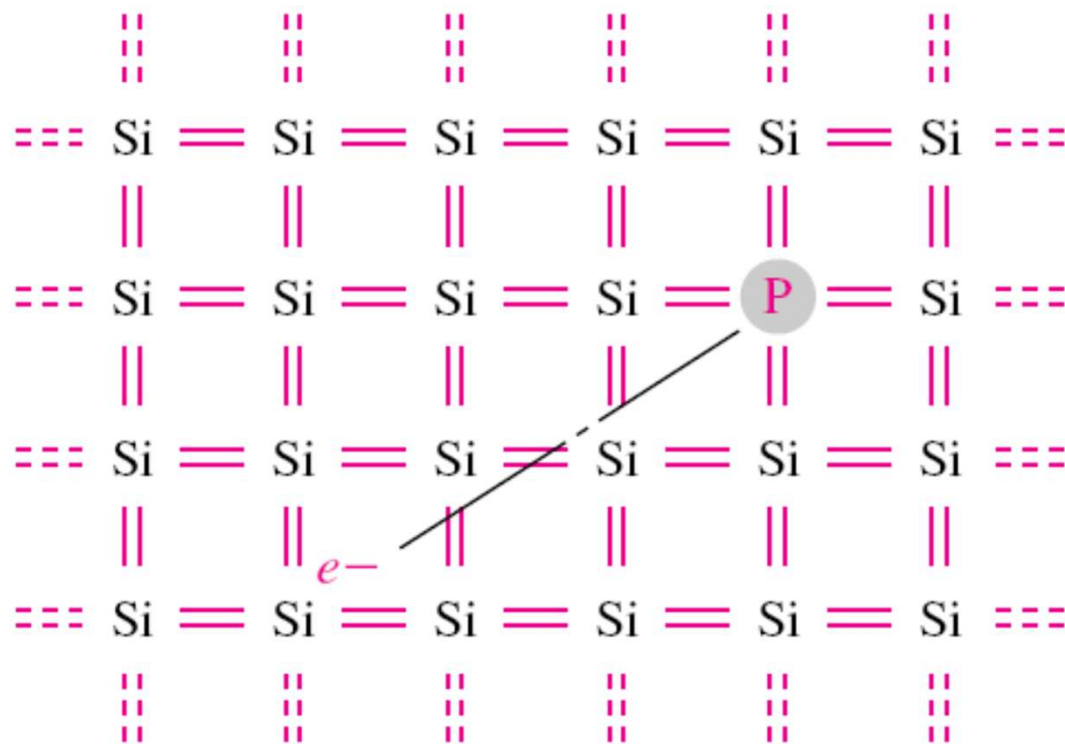
第一章 半导体器件物理基础

- 晶体管、集成电路的发明历史
- 半导体器件发展的最新进展
- Si的晶体结构与能带结构
- 半导体中的能带结构
- 半导体的导电类型
- 热平衡统计
- 半导体中的自由载流子输运

半导体的导电类型

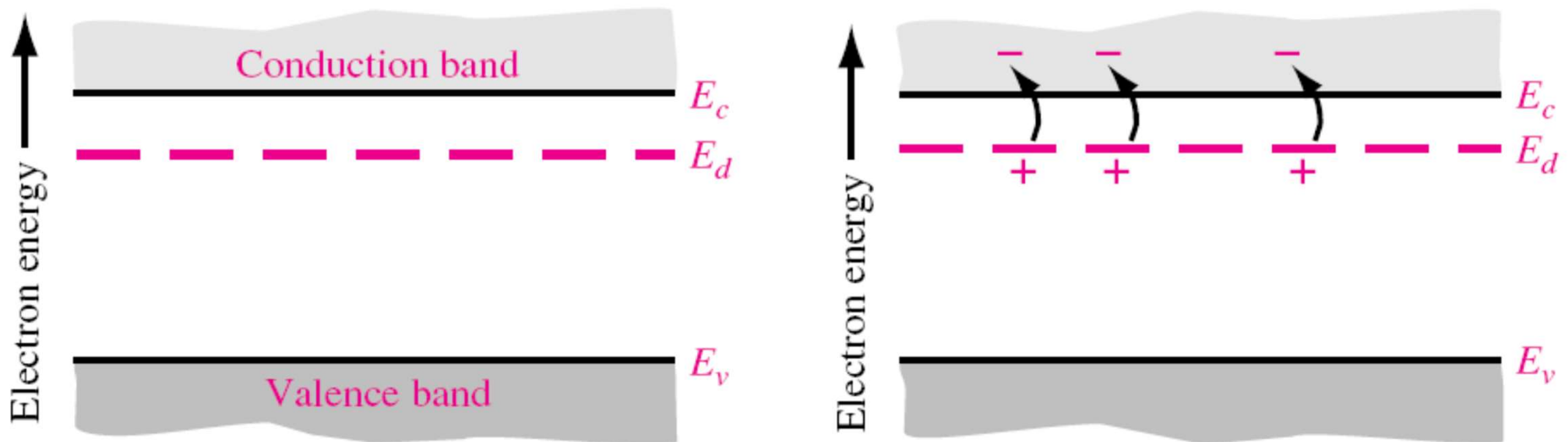
n型半导体：向本征硅晶体材料中掺入少量代位型的**V族元素杂质**（例如**磷**原子），磷原子共有五个价电子，代替一个硅原子之后，其四个价电子与硅原子形成共价键结构，多余的第五个价电子则比较松散地束缚在磷原子的周围。这第五个价电子称作**施主电子** (donor electron)。

不包含施主电子的磷原子带一个单位的正电荷，由于静电引力，在比较低的温度下，施主电子一般都是束缚在磷原子周围。



半导体的导电类型

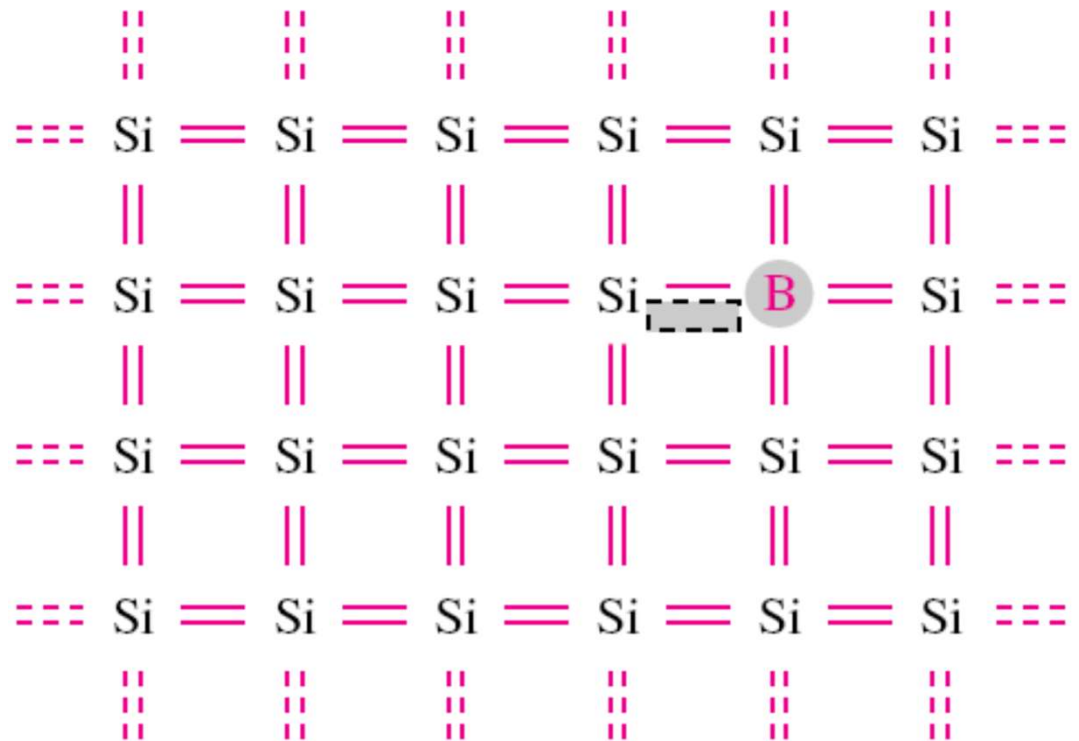
但是在正常温度下，将这个施主电子激发到导带上所需的能量显然要远远低于将共价键中的某个电子激发到导带所需的能量。如下图所示， E_d 就是施主电子在半导体中引入的能级，它位于禁带中靠近导带底的位置，通常将其表示为虚线，这是因为杂质浓度一般比较低（相比于硅晶格原子而言），施主电子的波函数之间尚无相互作用，因此杂质能级还没有发生分裂，也没有形成杂质能带。



半导体的导电类型

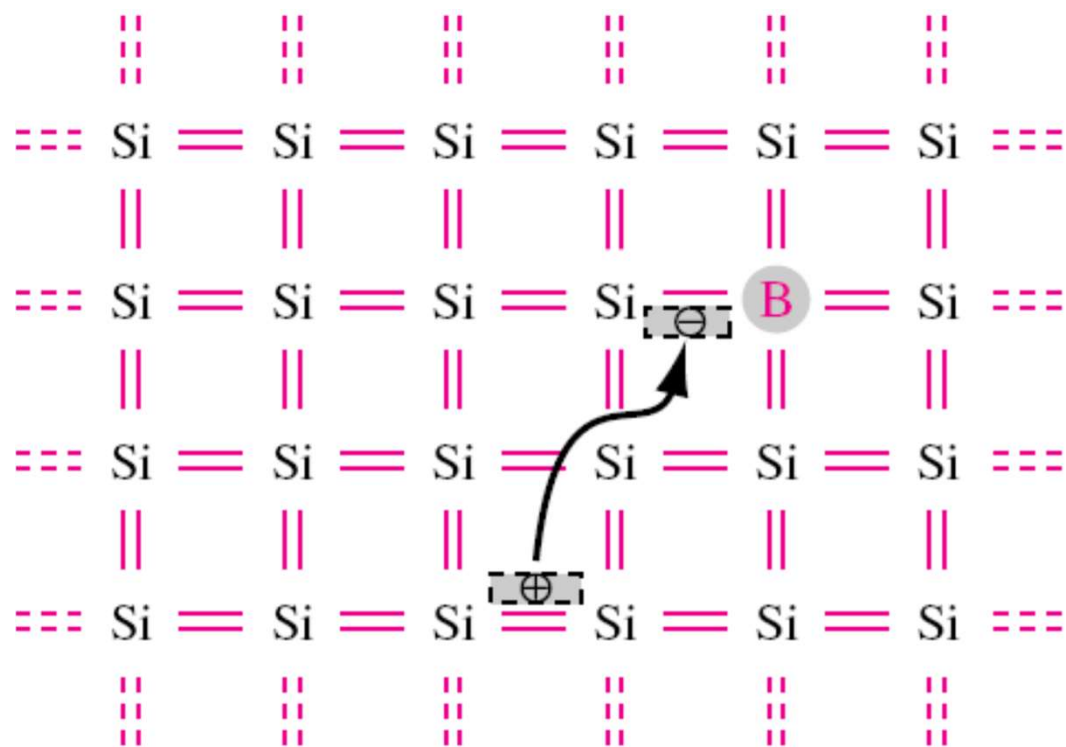
p型半导体：向本征硅晶体材料中掺入少量代位型的**III族元素**杂质（例如**硼**原子）。一个硼原子取代了硅原子的位置，同时在共价键中形成了一个空位。相邻硅原子的价电子要想占据这个空位，必须要获得一些额外的能量。当上述空位填充了电子之后，整个硼原子就会带一个单位的负电荷，成为一个固定的硼离子。

但是在正常温度下，将硅原子中的价电子激发到上述空位所需的额外能量显然要远远低于将其激发到导带中所需的能量。



半导体的导电类型

在正常温度下，硅原子共价键中的一个电子获得一定的热运动能量，就可以转移到硼原子的空位上，从而在价带中形成一个空穴，同时产生一个带负电的硼离子。价带中的空穴可以参与导电，而带负电的硼离子则在晶体中形成固定的负电荷中心。

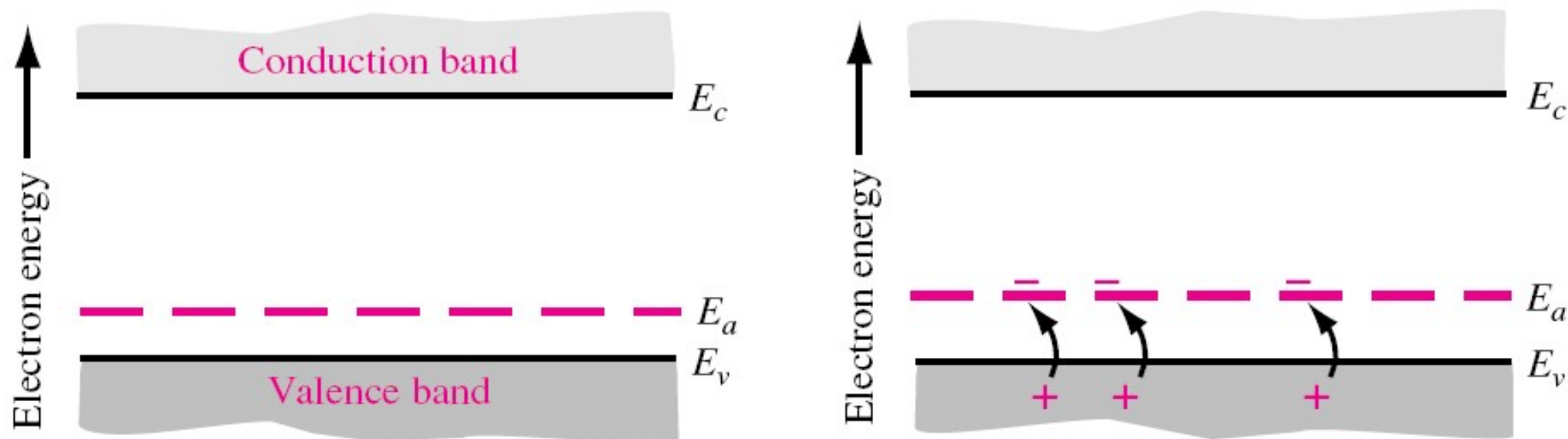


通常我们把上述这种能够向半导体价带中提供导电空穴的III族杂质原子称作**受主 (acceptor) 杂质原子**。

半导体的导电类型

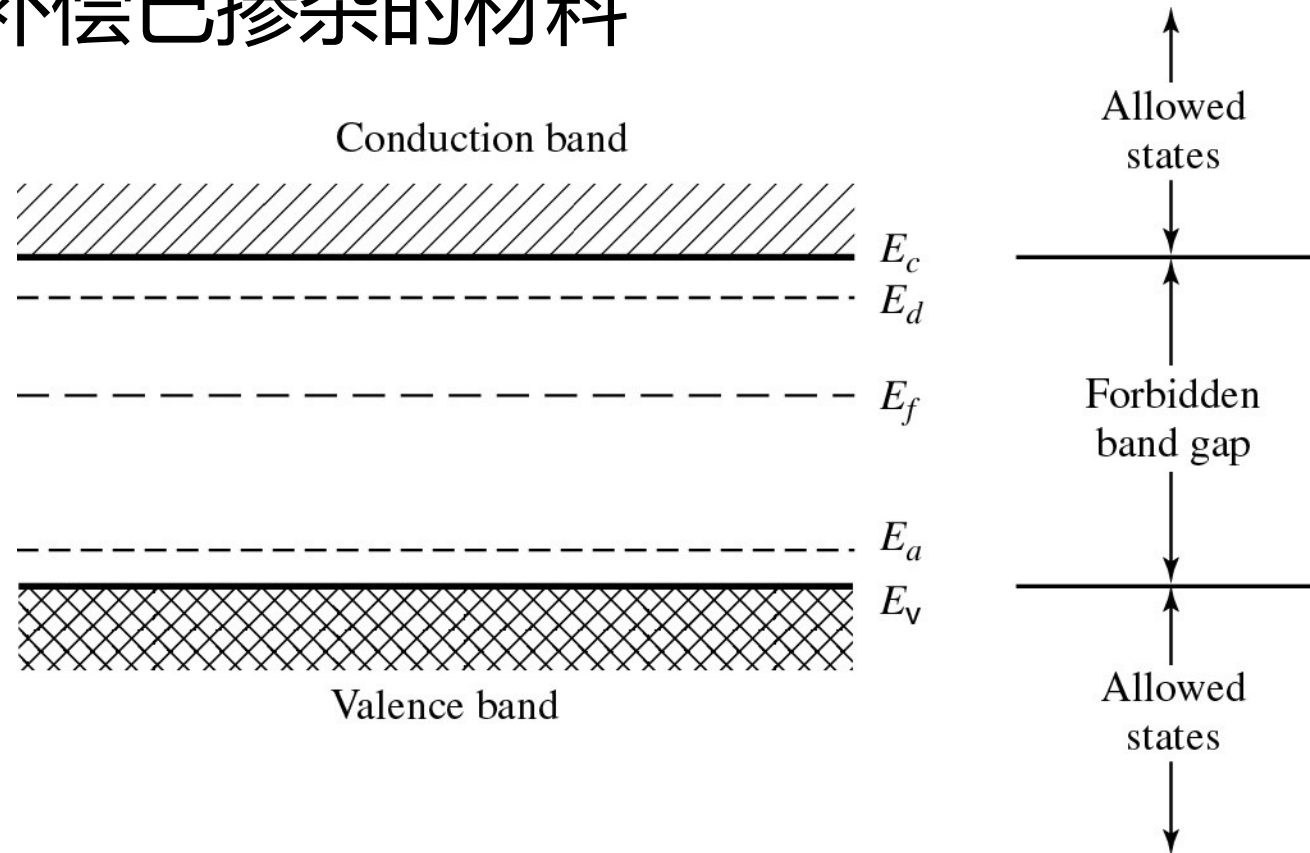
从上面的分析中可看出，受主杂质在给半导体晶体材料中增加价带空穴的同时，却没有增加其导带中电子的数量，由此形成的这种半导体材料我们称为**p型半导体材料**（即以带正电荷的空穴导电为主的半导体材料）。

下图： E_a 是绝对零度时受主杂质在半导体中引入的能级，它通常位于禁带中靠近价带顶部的位置。高于绝对零度时，价带中的电子就会激发到这些受主杂质能级上



半导体的导电类型

补偿： 在已经掺杂的半导体材料中加入相反类型的掺杂剂来补偿已掺杂的材料



有效掺杂浓度： $|N_d - N_a|$;

如果 N_d 大于 N_a 则半导体为n型，反之为p型

热平衡统计

热平衡状态：

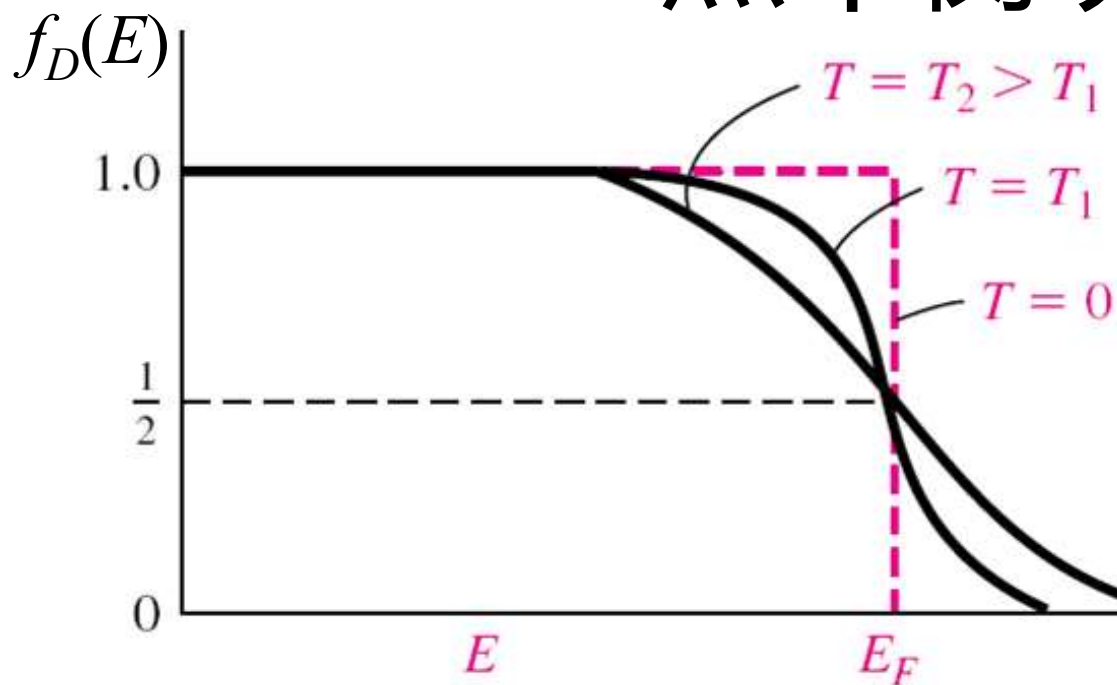
不受外加作用力影响的状态，即半导体材料不受外加电压、电场、磁场以及温度梯度的影响。此时半导体材料的各种特性均不随时间变化，即与时间无关。它是我们分析各种稳态和瞬态问题的起点。

热平衡是一种动态平衡，其中的每一过程都与其相反的过程平衡。例如，热平衡时，如果电子从低能态 E_1 被激发到高能态 E_2 ，那么同时必然有相同数量的电子从能态 E_2 转移到能态 E_1 。

Fermi能级

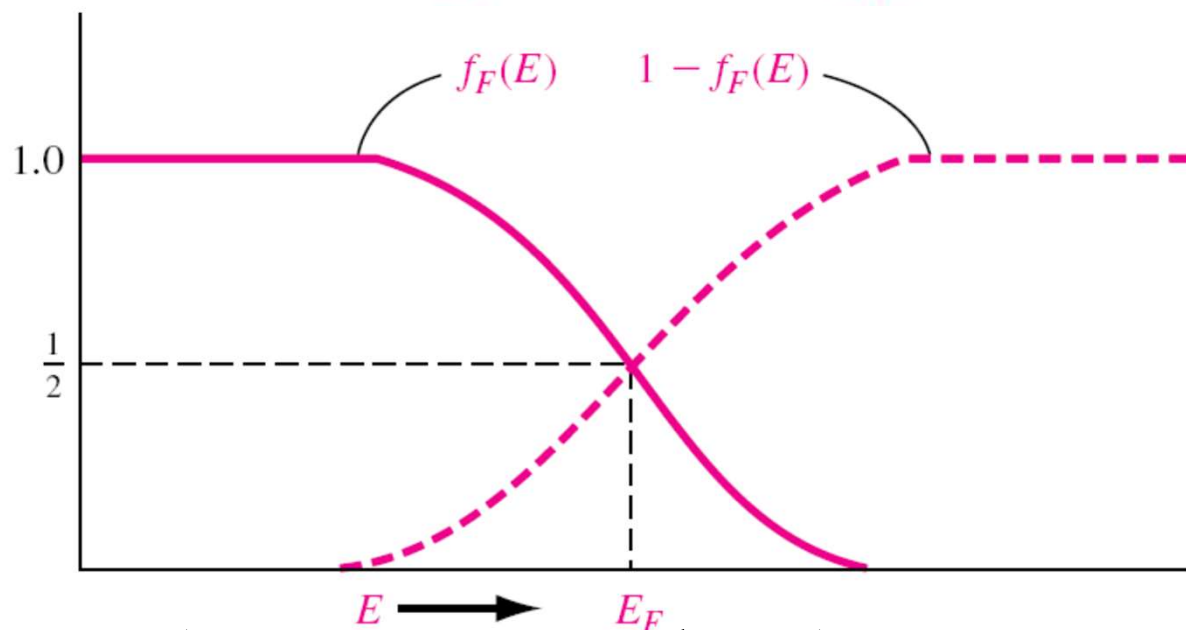
根据Pauli不相容原理，电子在允许态上的分布遵守Fermi-Dirac统计：

热平衡统计



$$f_D(E) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(E - E_f)}{kT}\right]}$$

注意：费米能级 E_F 则仅仅反映电子在不同能态上的填充水平，并不一定对应于某个具体的能级。



$f_F(E)$ 反映的是能量为 E 的一个量子态被一个电子占据的几率，而 $1 - f_F(E)$ 反映的则是能量为 E 的一个量子态未被电子占据

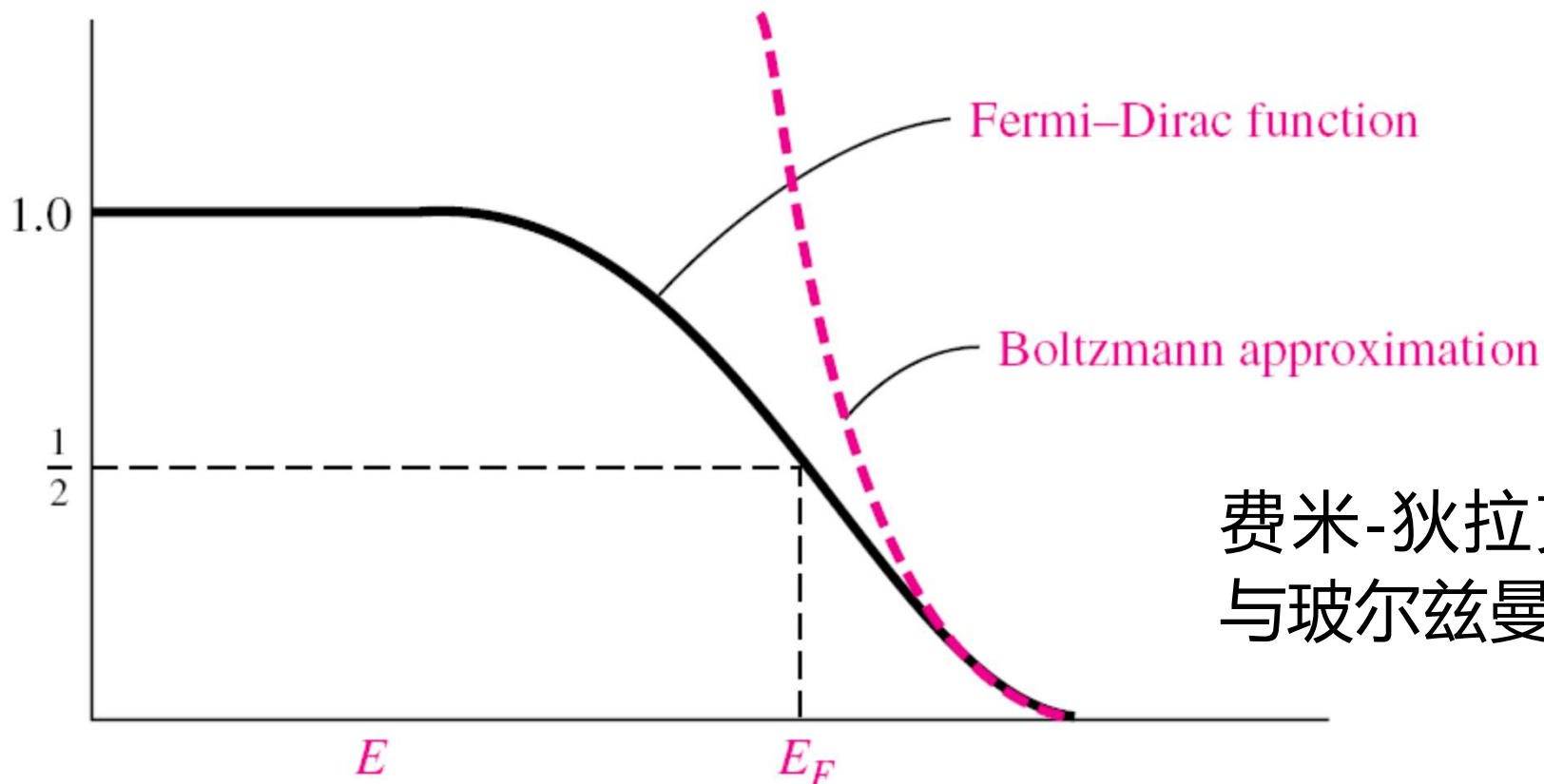
被占据态的概率 $f_F(E)$ 与空状态的概率 $1 - f_F(E)$ （即为空态）的几率。

热平衡统计

麦克斯韦-玻尔兹曼近似：当 $E - E_f \gg kT$ 时

$$f_F(E) \approx \exp \left[\frac{-(E - E_F)}{kT} \right]$$

麦克斯韦-玻尔兹曼统计分布



费米-狄拉克分布函数
与玻尔兹曼近似

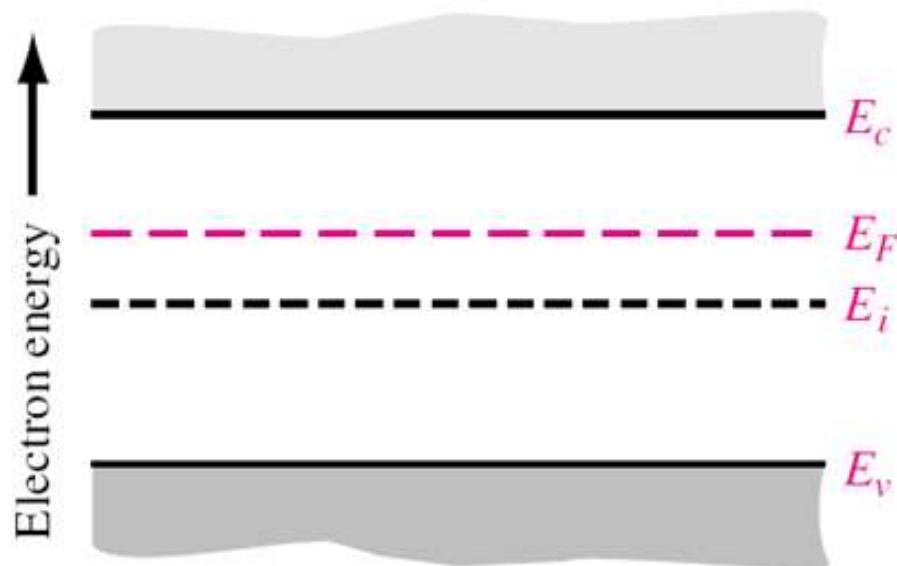
热平衡统计

中等掺杂的半导体材料，用Fermi能级表示的导带电子浓度和价带空穴浓度，
 N_c :导带有效态密度， N_v :带价有效态密度

$$n = N_c \exp \left[-\frac{(E_c - E_f)}{kT} \right]$$

$$p = N_v \exp \left[-\frac{(E_f - E_v)}{kT} \right]$$

本征半导体， $n=p$ ，Fermi能级几乎位于禁带中央，通常用 E_i 表示本征Fermi能级



n型半导体材料



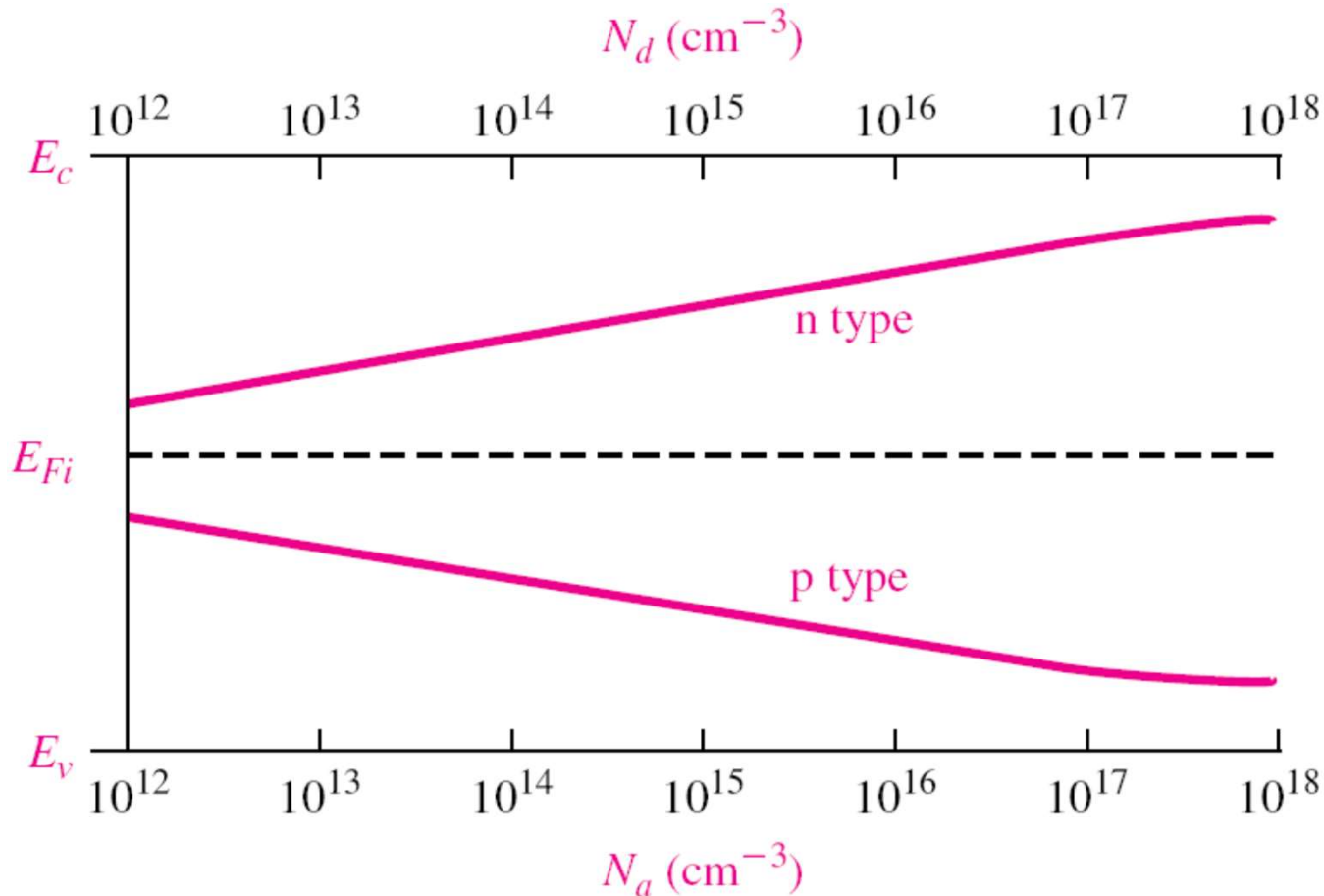
p型半导体材料

热平衡统计

用本征载流子浓度和本征Fermi能级描述载流子浓度：

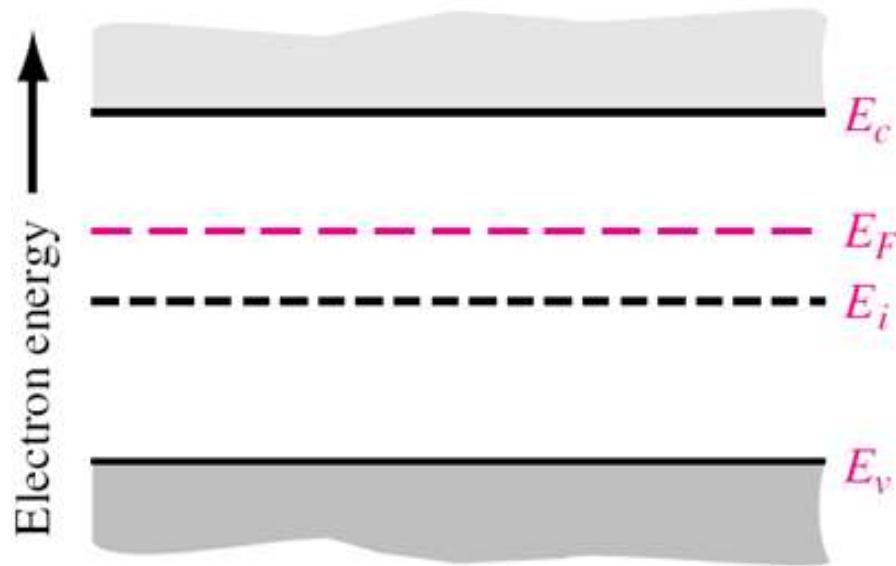
$$n = n_i \exp \left[\frac{(E_f - E_i)}{kT} \right]$$

$$p = n_i \exp \left[\frac{(E_i - E_f)}{kT} \right]$$



费米能级的
位置于掺杂
浓度的关系
曲线

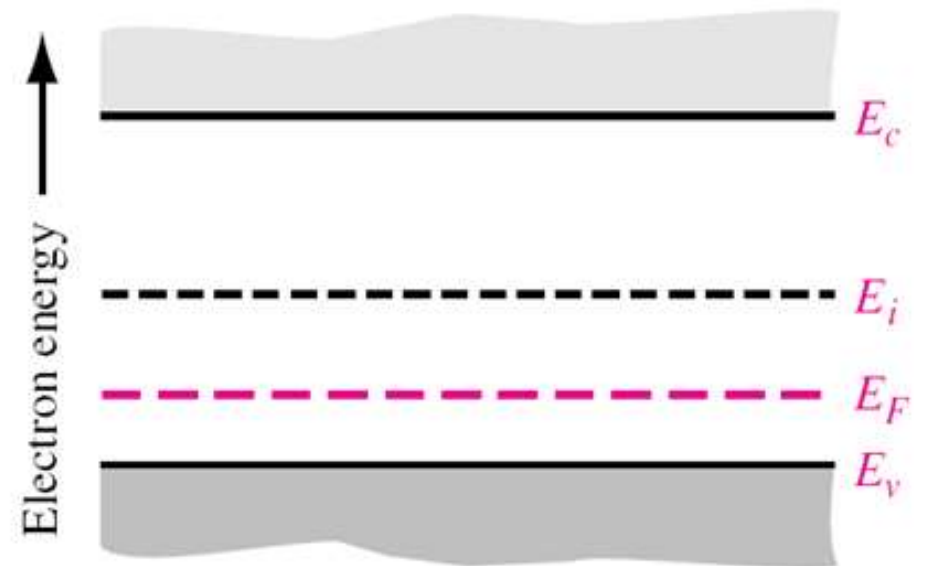
热平衡统计



n型半导体材料

$$n = N_c \exp \left[-\frac{(E_c - E_f)}{kT} \right]$$

$$n = n_i \exp \left[\frac{(E_f - E_i)}{kT} \right]$$



p型半导体材料

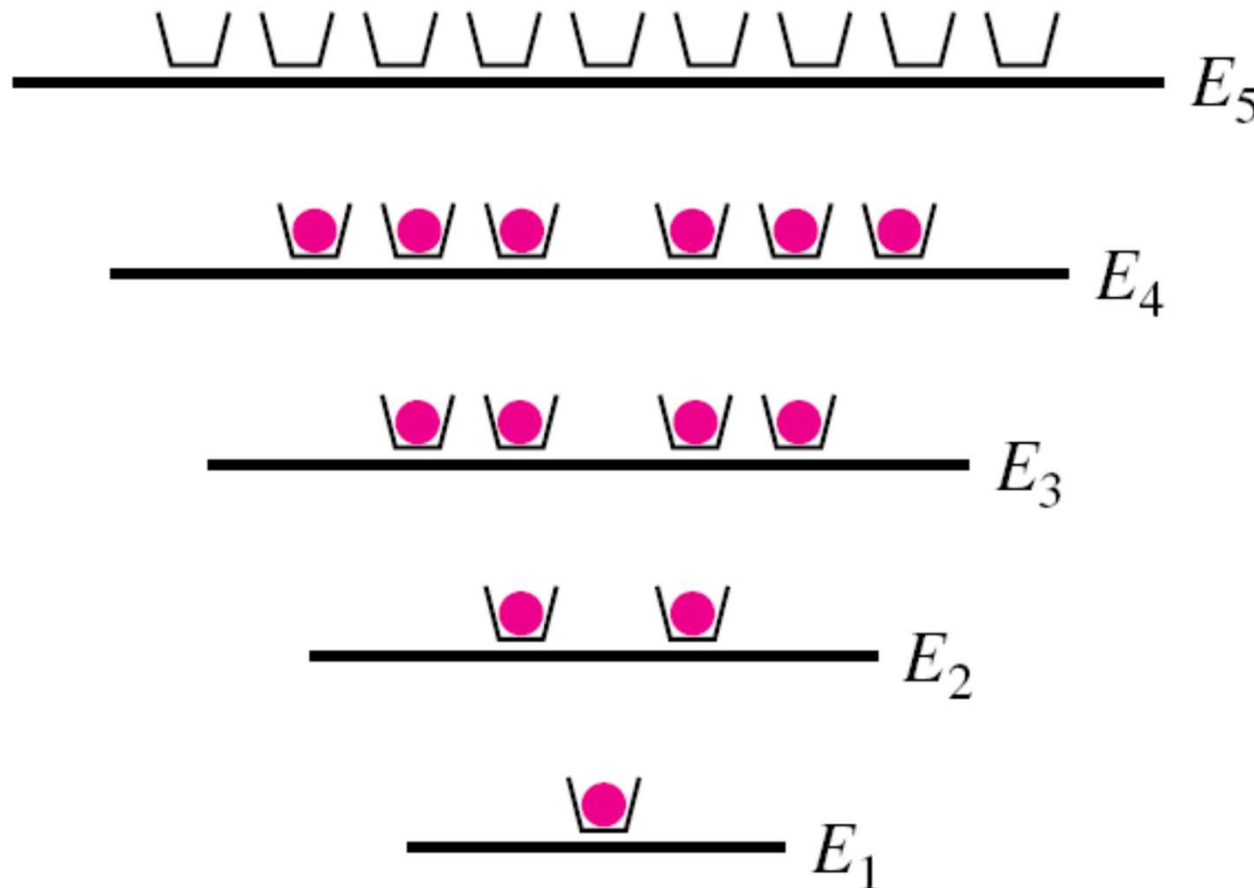
$$p = N_v \exp \left[-\frac{(E_f - E_v)}{kT} \right]$$

$$p = n_i \exp \left[\frac{(E_i - E_f)}{kT} \right]$$

热平衡统计

Fermi能级由什么因素决定？

考虑 $T=0\text{K}$ 时一个特定系统的分立能级和量子态



如果系统中有13个电子，则 E_f 应该位于 E_4 能级和 E_5 能级之间；

如果系统中只有1个电子， E_f 位于何处？2个电子呢？

E_f 的值取决于系统中电子或空穴的数目。

热平衡统计

质量作用定律

产生—电子从价带激发到导带

复合—电子通过带隙回到价带

电子-空穴对的产生率 G 取决于温度 T

$$G = f_1(T)$$

$f_1(T)$ 是由晶体的物理性质和温度决定的函数

复合率 R 可以表示为载流子的浓度与包含其它因素的函数 $f_2(T)$ 的乘积：

$$R = npf_2(T)$$

平衡时， $G = R$ ，得到：

$$np = \frac{f_1(T)}{f_2(T)} = f_3(T)$$

热平衡统计

本征半导体材料, $n = p = n_i$ $n_i p_i = n_i^2 = f_3(T)$

$$n_i^2 = N_c N_v \exp\left(\frac{-E_g}{kT}\right)$$

N_c 和 N_v 分别是导带边和价带边的等效态密度。 N_c 和 N_v 随温度的变化并不明显, 但 n_i 随温度明显变化

对于给定的半导体, 在一定温度下, 本征载流子浓度 n_i 是常数

质量作用定律:

$$np = n_i^2$$

质量作用定律对本征和非本征半导体都适用;
质量作用定律是产生与复合相平衡, 即热平衡的直接结果

热平衡统计

在一定温度下，对于给定的半导体材料来说， N_c 和 N_v 都是常数。下表给出了室温下（ $T=300\text{K}$ ）Si、GaAs和Ge材料中的 N_c 和 N_v 以及电子和空穴的有效质量。

	$N_c (\text{cm}^{-3})$	$N_v (\text{cm}^{-3})$	m_n^*/m_0	m_p^*/m_0
Silicon	2.8×10^{19}	1.04×10^{19}	1.08	0.56
Gallium arsenide	4.7×10^{17}	7.0×10^{18}	0.067	0.48
Germanium	1.04×10^{19}	6.0×10^{18}	0.55	0.37

对于给定的半导体材料来说，本征载流子浓度 n_i 只与温度有关。室温下实测得到的几种常见半导体材料的本征载流子浓度如下表所示（本教材Si在室温下的本征载流子浓度为 $1.45 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$ ）。

Silicon	$n_i = 1.5 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$
Gallium arsenide	$n_i = 1.8 \times 10^6 \text{cm}^{-3}$
Germanium	$n_i = 2.4 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$

热平衡统计

考虑掺杂半导体材料，假定电中性区所有的掺杂原子都
离化

$$N_d + p = N_a + n$$

利用质量作用定律：

$$n - \frac{n_i^2}{n} = N_d - N_a$$

$$n = \frac{N_d - N_a}{2} + \left[\left(\frac{N_d - N_a}{2} \right)^2 + n_i^2 \right]^{1/2}$$

硅在室温下的 $n_i = 1.45 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$ ，n型硅中典型的净施主浓度为 10^{15}cm^{-3} 或更大，上式简化为：

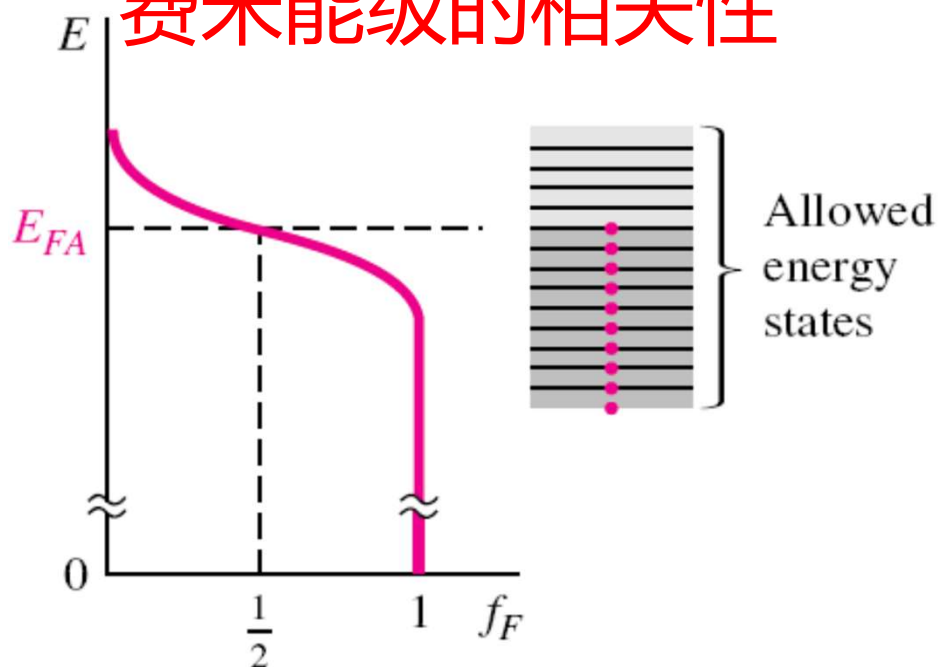
$$n = N_d - N_a$$

$$p = \frac{n_i^2}{n} \approx \frac{n_i^2}{N_d - N_a}$$

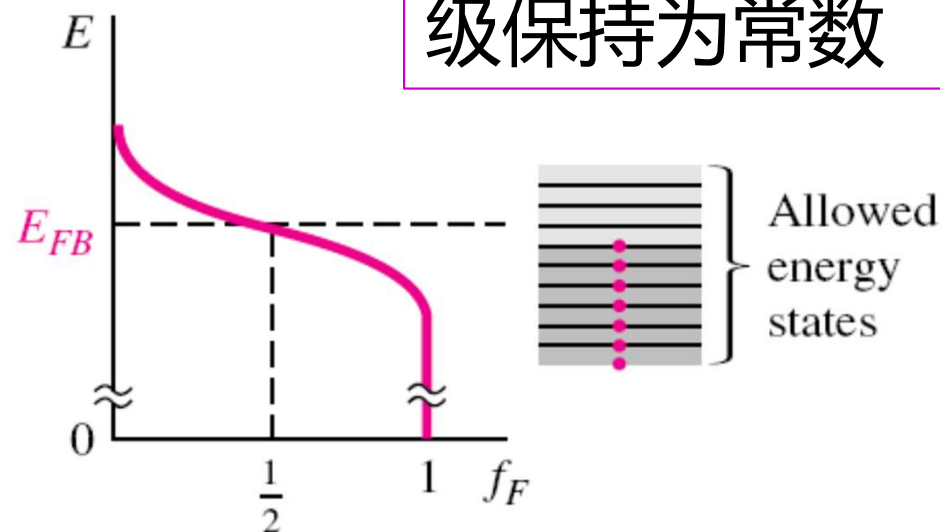
非本征半导体中，通常一种载流子浓度比另一种载流子
浓度会高出很多个数量级。

热平衡统计

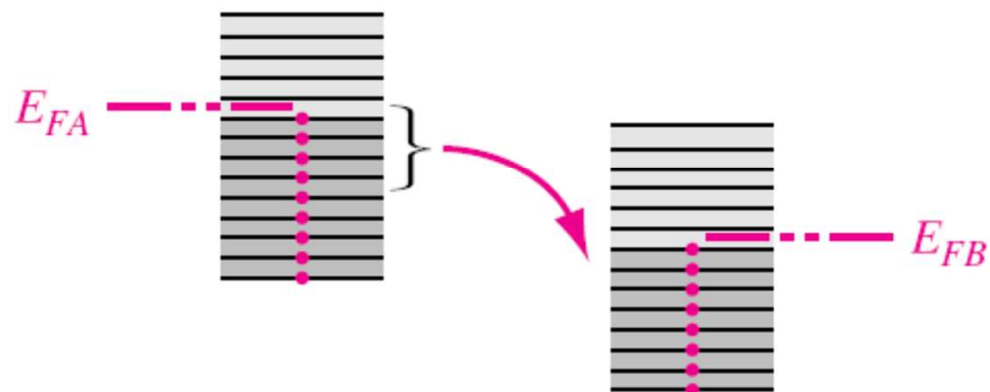
费米能级的相关性



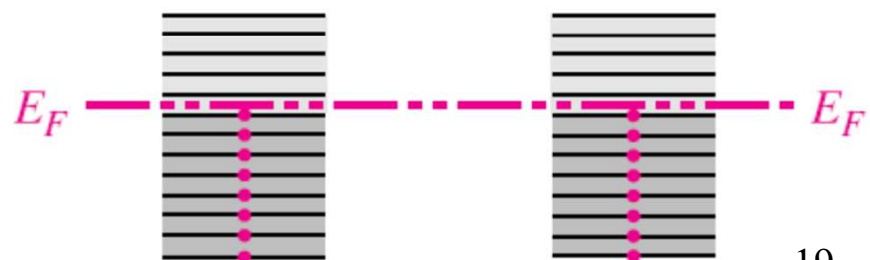
材料A热平衡时费米能级的位置



材料B热平衡时费米能级的位置



两种材料接触瞬间的情况



达到热平衡的情况

在热平衡条件，一个系统中的费米能级保持为常数

半导体中的自由载流子输运

半导体中的自由载流子如果发生净的定向流动，就会形成电流。一般情况下载流子的输运机理有两种，即**漂移**运动和**扩散**运动。

在没有外加电场的情况下，电子在半导体晶体材料中就存在着无规则的热运动，由于电子与晶格原子之间的碰撞作用，这种无规则的热运动将不断地改变电子的运动方向。温度越高，电子在发生两次碰撞之间的自由运动时间也就越短。

电子的均方热运动速度 v_{th} 与温度之间的近似关系：

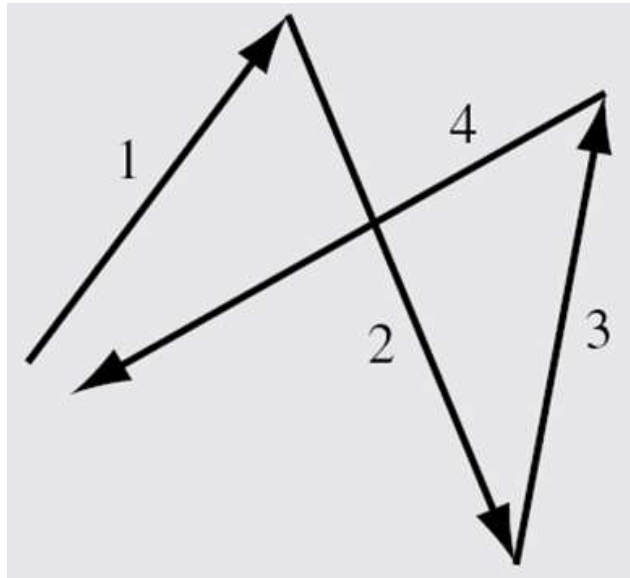
$$\frac{1}{2}m_n^*v_{th}^2 = \frac{3}{2}kT$$

晶体硅， $m_n^*=0.26m_0$ ， $T=300\text{K}$ 时， $v_{th}=2.3\times 10^7\text{cm s}^{-1}$ ²⁰

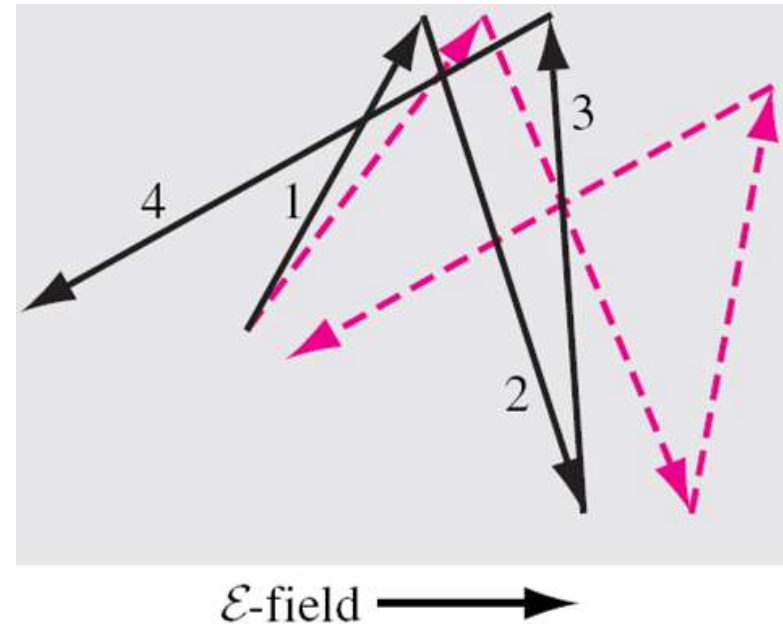
半导体中的自由载流子输运

漂移速度

$$\mathcal{E} = 0$$



$$\mathcal{E} \neq 0$$



在低场情况下，载流子的定向漂移速度与外加电场成正比

$$v_d = \mu \mathcal{E}$$

μ —载流子的迁移率，单位为 $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$

半导体中的自由载流子输运

迁移率和散射

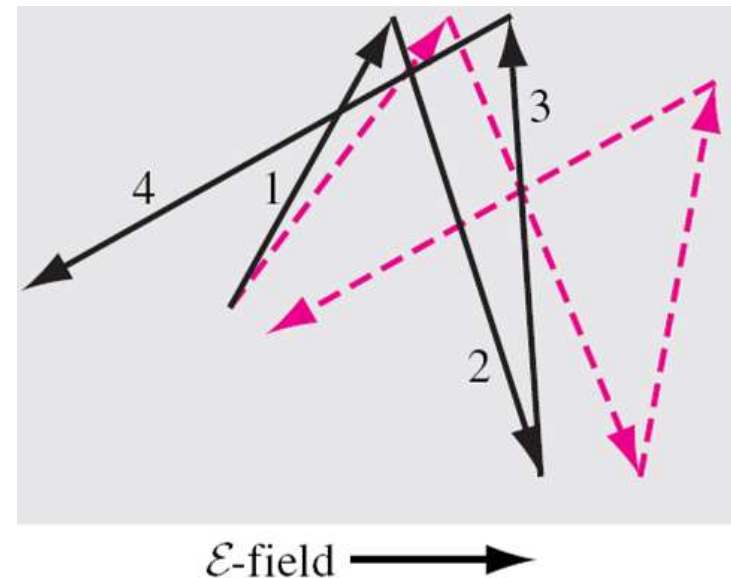
迁移率 μ 描述的是载流子在外加电场作用下运动难易的程度。

$$\mu_n = \frac{q\tau_{cn}}{m_n^*}$$

τ_{cn} —平均散射时间

m_n^* —导带电子的有效质量

漂移速度仅是随机热运动速度的微小扰动



热运动越剧烈，电子在发生两次碰撞之间的自由运动时间也就越短。

半导体中的自由载流子输运

对于载流子在半导体晶体材料中的定向运动来说，存在着**两种主要的**散射机制（碰撞机制）：

- 1) 晶格散射（或声子散射）
- 2) 电离杂质的库仑散射

它们共同决定载流子的自由运动时间。

晶格散射（或声子散射）

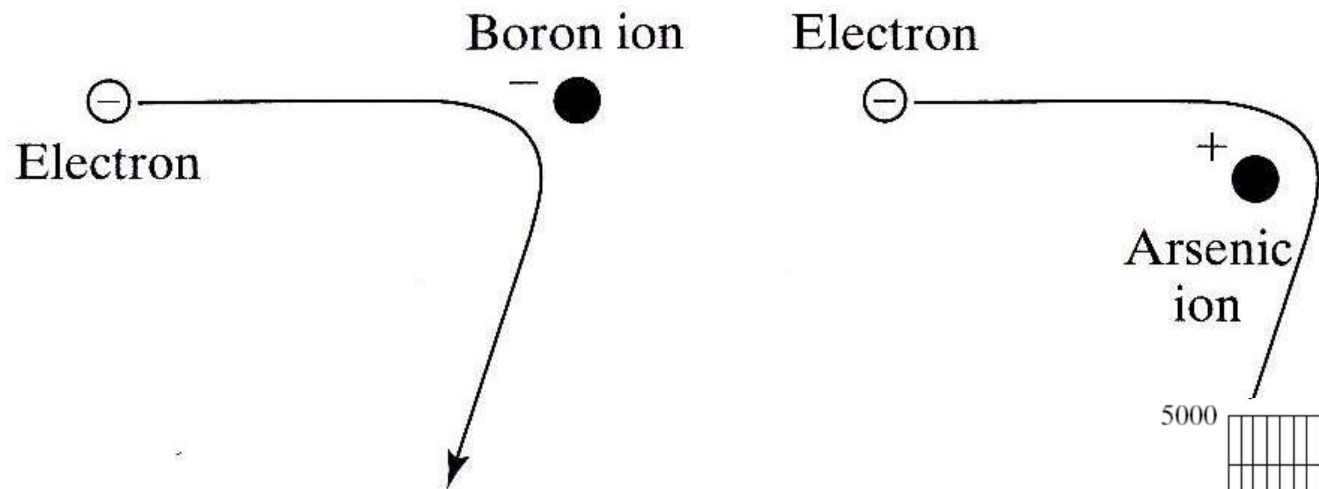
温度升高，晶格振动加剧，导致迁移率下降。

电离杂质的库仑散射

电子和带电离子之间的库仑力使电子的运动方向发生了偏移。

- ✓ 温度升高，电子的热运动速度高，能以更短的时间通过离子附近，迁移率提高。
- ✓ 杂质浓度提高，散射加剧，迁移率下降

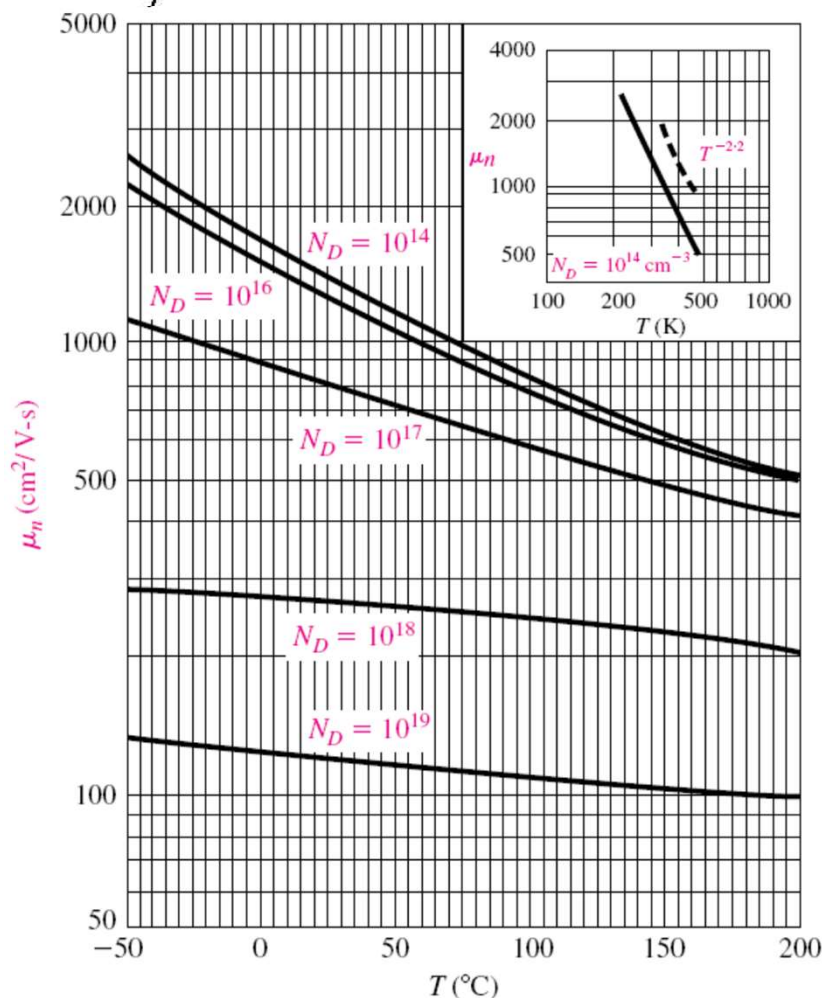
半导体中的自由载流子输运



左图：电子被受主离子或施主离子散射

不同掺杂浓度下，Si单晶材料中电子的迁移率随温度的变化关系示意图。

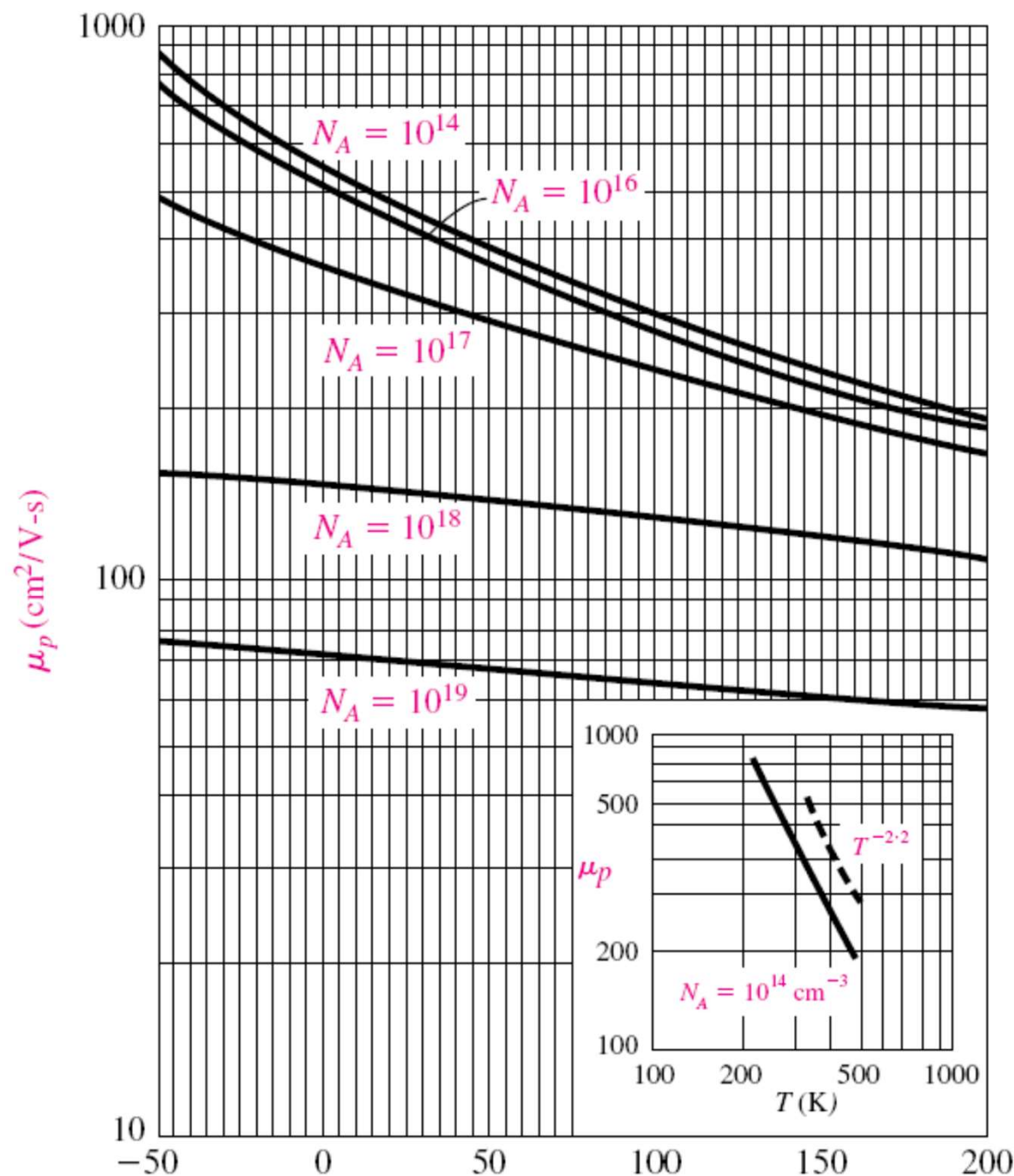
从图中可见，在比较低的掺杂浓度下，电子的迁移率随温度的改变发生了十分明显的变化，这表明在低掺杂浓度的条件下，电子的迁移率主要受晶格振动散射的影响



半导体中的自由载流子输运

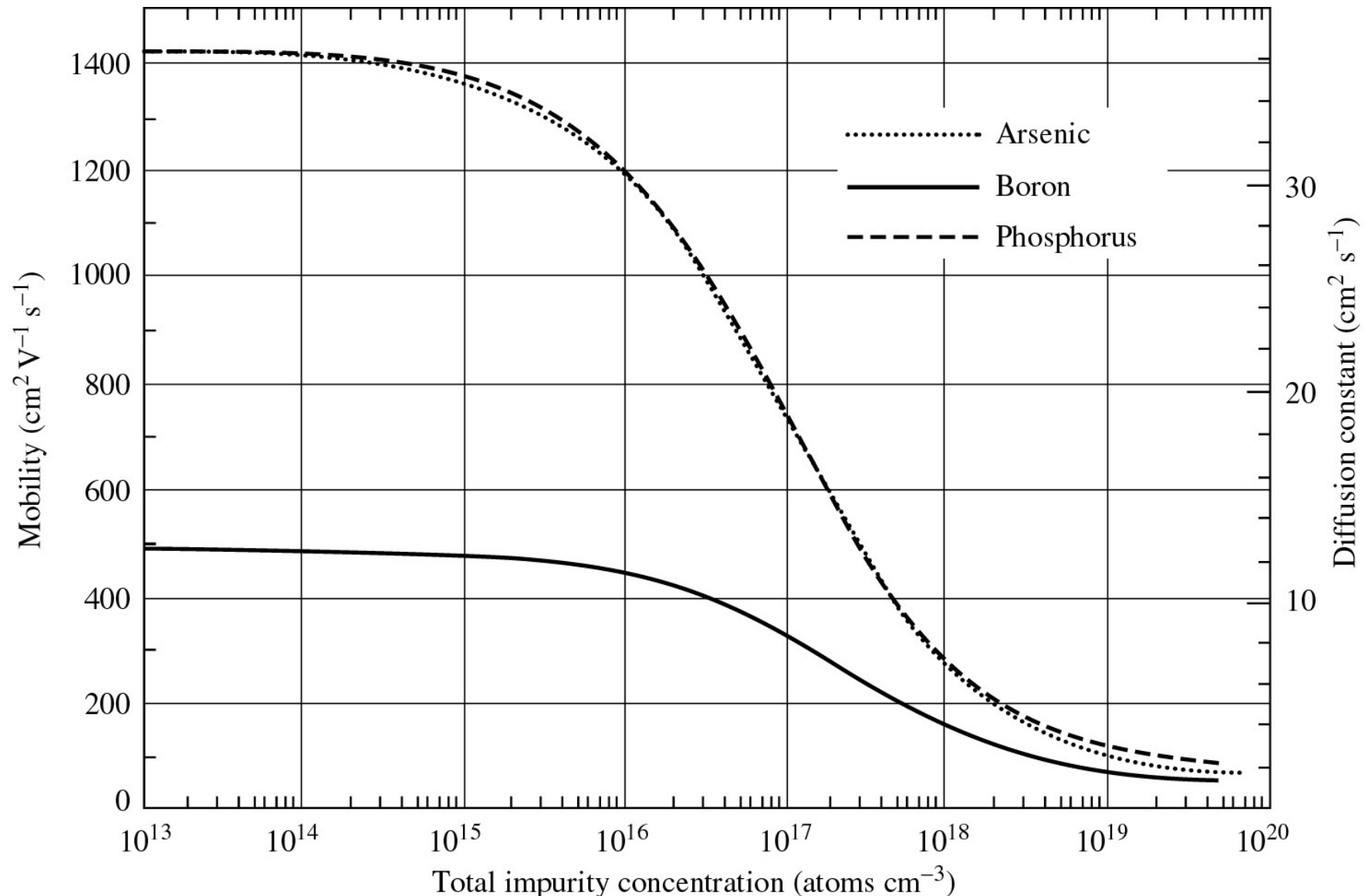
为不同掺杂浓度下，硅单晶材料中空穴的迁移率随温度的变化关系示意图。

从图中可，在比较低的掺杂浓度下，空穴的迁移率同样随温度的改变发生了十分明显的变化，这表明在低掺杂浓度的条件下，空穴的迁移率也是主要受晶格振动散射的影响。



半导体中的自由载流子输运

300K时硅中电子和空穴的迁移率与总杂质浓度的关系。



半导体中的自由载流子输运

速度饱和

$$v_d = \mu \mathcal{E}$$

假设：

载流子的迁移率与外加电场无关，
漂移速度随外加电场线性增加

载流子总的运动速度应为其随机热运动速度与定向漂移运动速度之和。在 $T=300\text{K}$ 的室温条件下，载流子的随机热运动能量可表示为：

$$\frac{1}{2} m_n^* v_{th}^2 = \frac{3}{2} kT$$

晶体硅， $T=300\text{K}$ 时， $v_{th}=2.3 \times 10^7 \text{cm s}^{-1}$

考虑低掺杂硅材料， $\mu_n=1424 \text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ ， $\mathcal{E}=75 \text{V/cm}$

$$v_d = \mu_n \mathcal{E} = 1.07 \times 10^5 \text{cm/s}$$

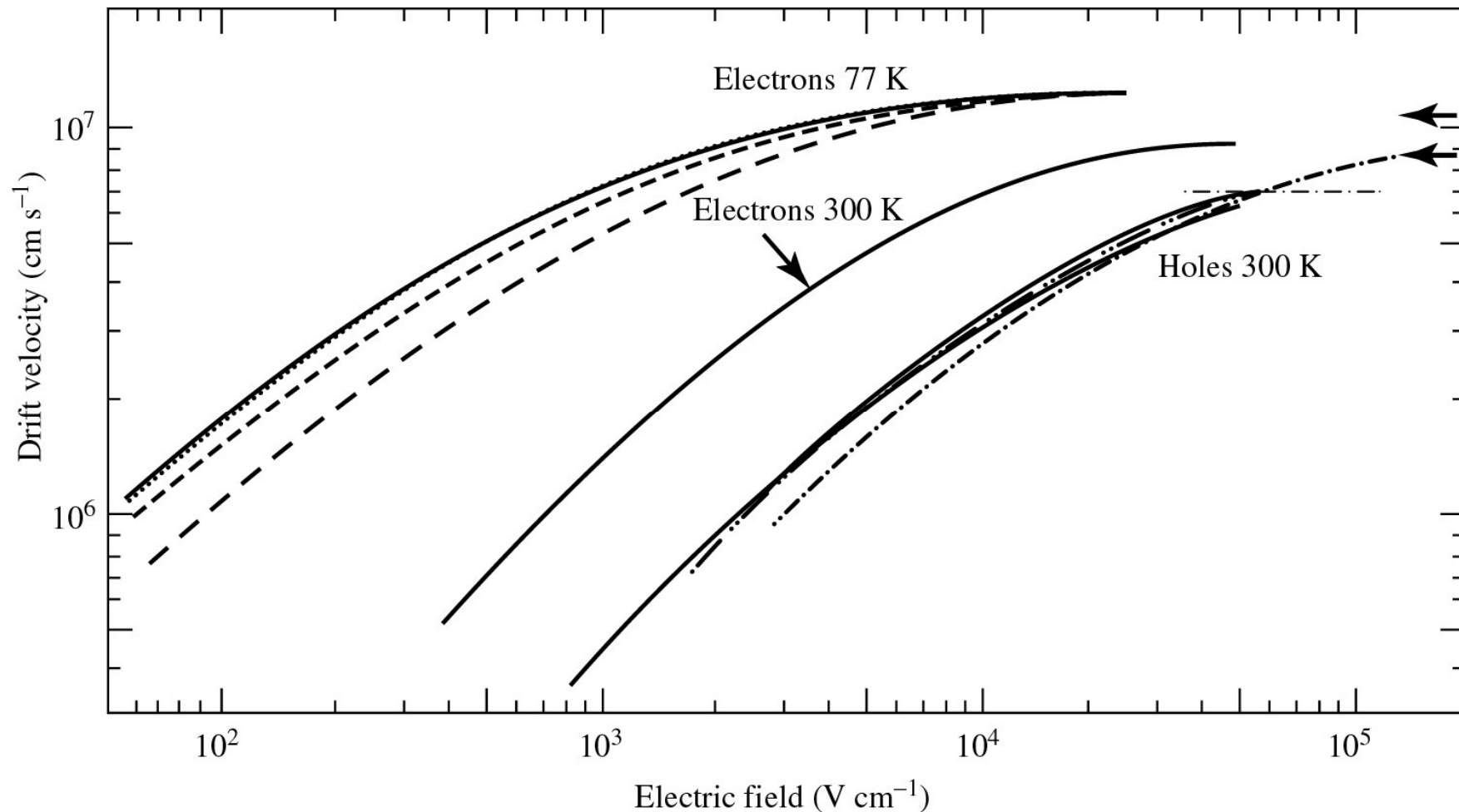
载流子定向漂移运动速度只有平均热运动速度的百分之一。

半导体中的自由载流子输运

- 在上述低电场的情况下，载流子的平均自由运动时间基本上由载流子的热运动速度决定，不随电场的改变而发生变化。因此，低电下载流子的迁移率可以看成是一个常数。
- 当外加电场增强为 7.5kV/cm 之后，对应的载流子定向漂移运动速度将达到 10^7cm/s ，已经与载流子的平均热运动速度持平。此时，载流子的平均自由运动时间将由热运动速度和定向漂移运动速度共同决定，载流子的平均自由运动时间将随着外加电场的增强而不断下降，由此导致载流子的迁移率随着外加电场的不断增大而出现逐渐下降的趋势，最终使得载流子的漂移运动速度出现饱和现象，即载流子的漂移运动速度不再随着外加电场的增加而继续增大。

半导体中的自由载流子输运

硅中电子(77K和300K)和空穴(300K)的漂移速度与外加电场的关系，强电场时速度达到饱和。



饱和漂移速度： v_l 或 v_{sat}

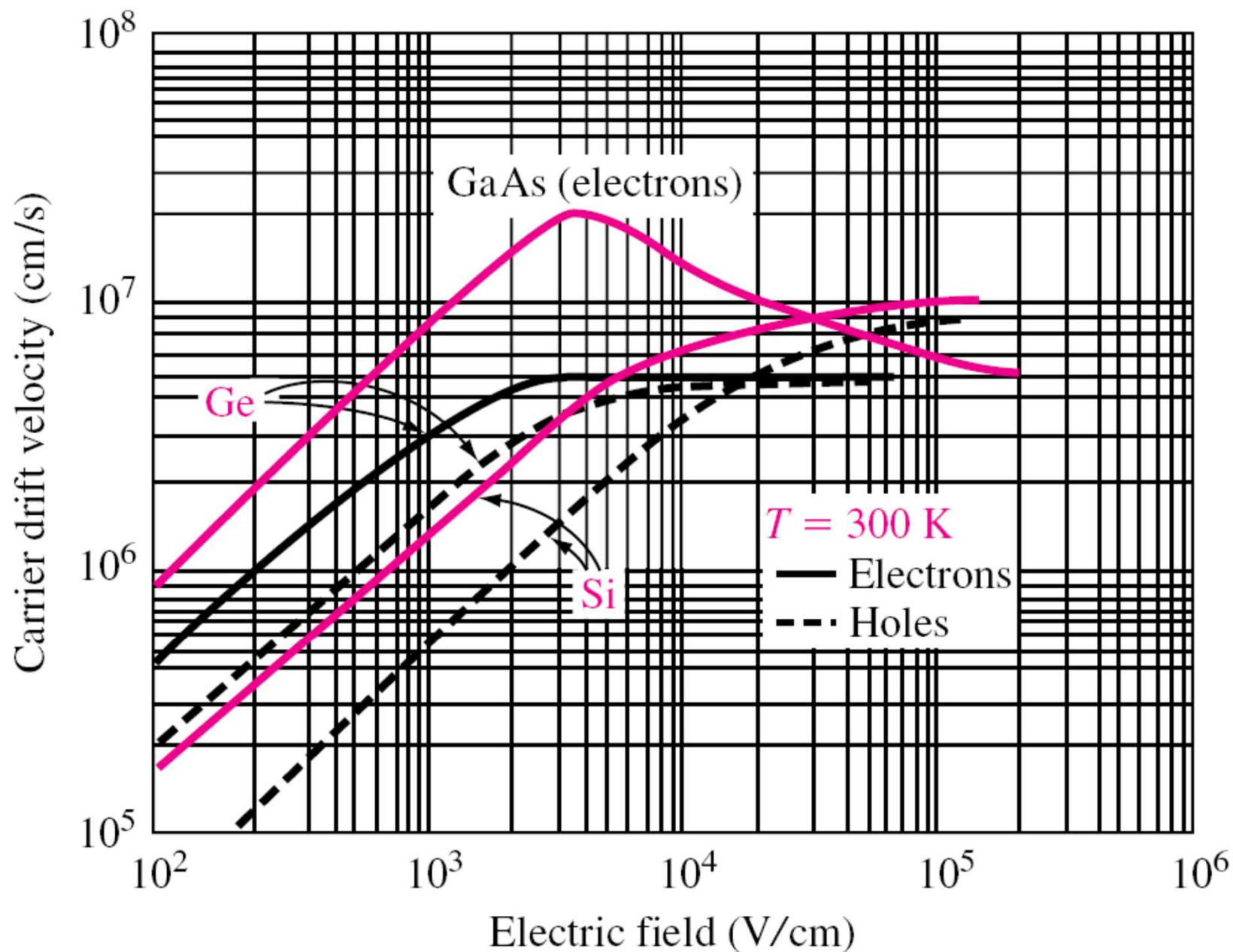
$$v_d = \mu_n \mathcal{E}$$

$$v_d = \mu_p \mathcal{E}$$

$$\mu_n = \frac{e\tau_n^*}{m_n^*}$$

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

锗、硅及砷化镓单晶材料中电子和空穴的漂移运动速度随着外加电场强度的变化关系。



半导体中的自由载流子输运

从上述载流子漂移速度随外加电场的变化关系曲线中可以看出，

- 在低电场条件下，漂移速度与外加电场成线性变化关系，**曲线的斜率就是载流子的迁移率**；
- 在高电场条件下，漂移速度与电场之间的变化关系将逐渐偏离低电场条件下的线性变化关系。
- 若考虑Si单晶材料中的电子为例，当外加电场增加到 30kV/cm 时，其漂移速度将达到饱和值，即达到 10^7cm/s ；
- 当载流子的漂移速度出现饱和时，漂移电流密度也将出现饱和特性，即漂移电流密度不再随着外加电场的进一步升高而增大。

半导体中的自由载流子输运

漂移电流

沿外加电场方向的电流密度

$$J_n = \sum_{i=1}^n -qv_i = -nqv_d = nq\mu_n \mathcal{E}$$

总电流为电子电流和空穴电流之和：

$$J = J_n + J_p = (nq\mu_n + pq\mu_p) \mathcal{E}$$

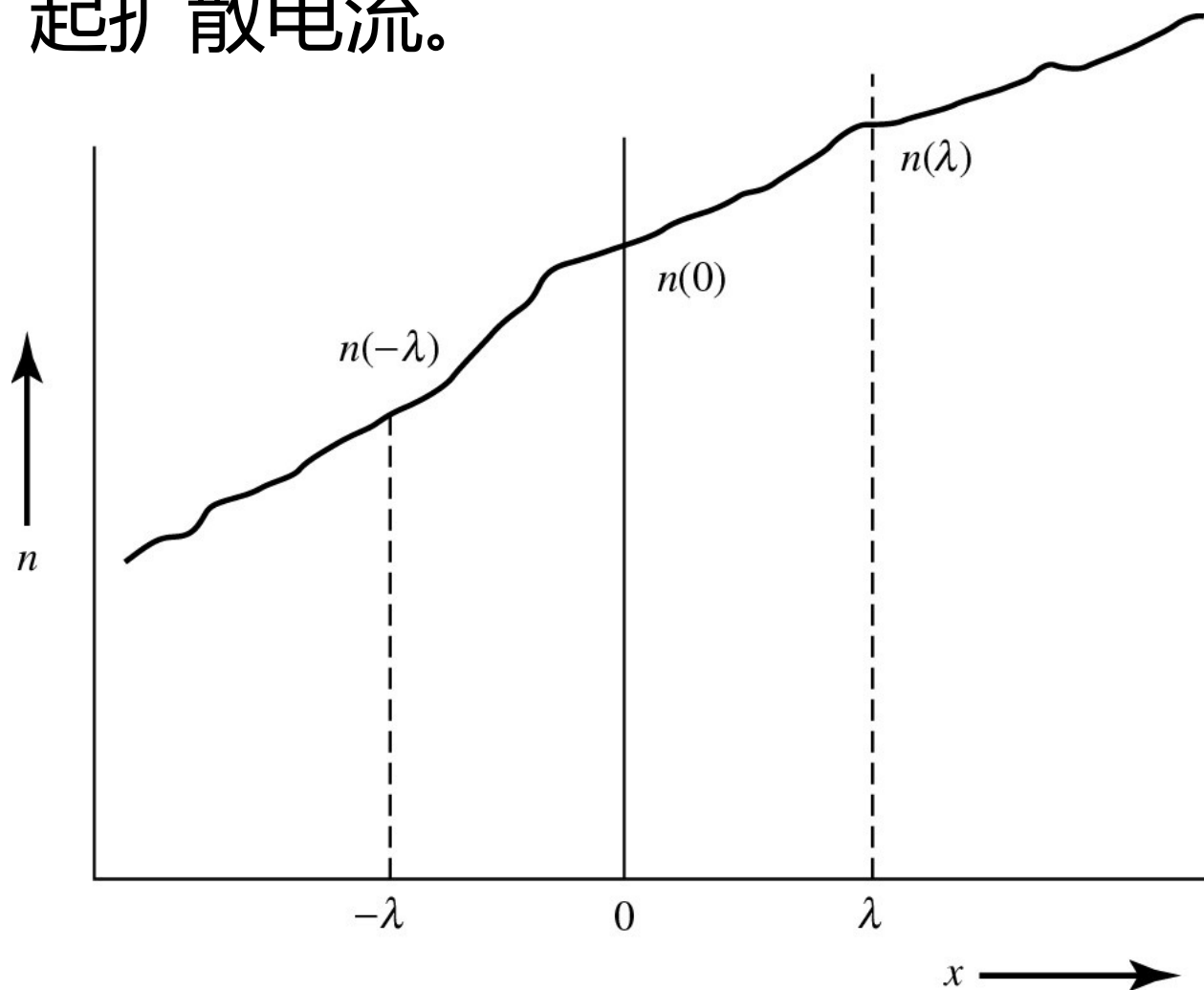
定义为半导体的电导率 σ

$$\sigma = q\mu_n n + q\mu_p p$$

半导体中的自由载流子输运

扩散电流

微观粒子的扩散运动是由于其浓度梯度的存在而引起的，带电粒子由于浓度梯度的存在而发生扩散运动就会引起扩散电流。

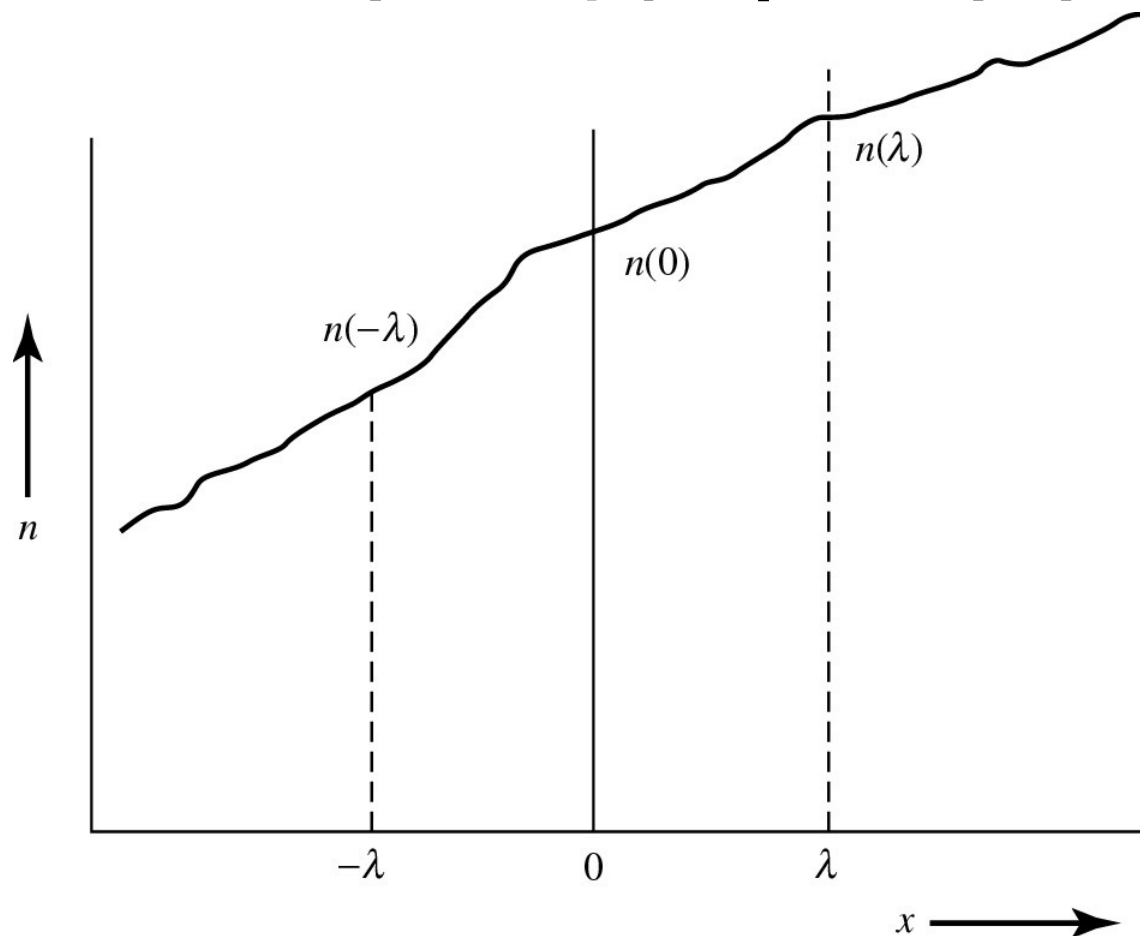


一维固体中电子浓度
 n 随距离 x 的变化关系

λ : 电子的平均自由程

$$\lambda = v_{th} \tau_{cn}$$

半导体中的自由载流子输运



单位时间从左边通过 $x=0$ 平面单位面积的平均电子数取决于 $x=-\lambda$ 处的电子浓度，为：

$$\frac{1}{2}n(-\lambda)v_{th}$$

$x=-\lambda$ 处的电子碰撞后一半向左一半向右

单位时间从右边通过 $x=0$ 平面单位面积的电子数(用符号 F 表示)为：

$$F = \frac{1}{2}n(\lambda)v_{th}$$

从左边单位面积流过的粒子的净流量为：

$$F = \frac{1}{2}v_{th}n(-\lambda)$$

半导体中的自由载流子输运

$$F = \frac{1}{2} v_{th} [n(-\lambda) - n(\lambda)]$$

将 $x=\pm\lambda$ 处的电子浓度用台劳级数展开，取前两项：

$$F = \frac{1}{2} v_{th} \left\{ \left[n(0) - \frac{dn}{dx} \lambda \right] - \left[n(0) + \frac{dn}{dx} \lambda \right] \right\} = -v_{th} \lambda \frac{dn}{dx}$$

粒子流对应的电流为：

$$J_n = -qF = q\lambda v_{th} \frac{dn}{dx}$$

将能量均分原理用于一维情况，并考虑电子的平均自由程公式

$$\frac{1}{2} m_n^* v_{th}^2 = \frac{1}{2} kT \quad \lambda = v_{th} \tau_{cn}$$

$$J_n = q \left(\frac{kT}{q} \mu_n \right) \frac{dn}{dx} = q D_n \frac{dn}{dx}$$

D_n ——电子的扩散系数，单位为 cm^2/s

半导体中的自由载流子输运

定义为扩散系数 D_n

$$D_n = \left(\frac{kT}{q} \right) \mu_n$$

上式被称为**Einstein关系**，它指出了固体中描述自由载流子的漂移运动的迁移率与描述载流子扩散运动的扩散系数之间的关系。

考虑固体中的统计力学定律，可以严格地推导出这个公式。

在半导体材料中一共存在四种电流机制：

电子漂移电流、电子扩散电流、
空穴漂移电流、空穴扩散电流。

因此在一维情况下，总的电流密度可表示为：

$$J_{nx} = q\mu_n n \mathcal{E}_x + q\mu_p p \mathcal{E}_x + qD_n \frac{dn}{dx} - qD_p \frac{dp}{dx}$$

本章小结

1. Si的晶体结构为金刚石结构
2. 能带理论是目前研究固体中电子运动的一个主要理论基础。通过求解晶体中的电子的本征值和本征波函数状态，确定出其能带结构，核心是确定周期性势场。
3. 布洛赫定理。在晶体中电子的行为可用单电子近似的薛定谔方程描述，在周期场中运动的单电子波函数是布洛赫波。有两种等价的表述。

$$\varphi_k(r) = e^{ik \cdot r} u_k(r) \quad u_k(r) = u_k(r + R_n)$$

$$\varphi_k(r + R_n) = e^{ik \cdot R_n} \varphi_k(r)$$

4. 近自由电子模型

假设晶格势场中周期变化的部分很弱，可以作为微扰来处理。以自由电子的哈密顿算符作为零级近似，考虑了波函数的一级修正及能量的二级修正后，得到晶体电子的波函数：

$$\varphi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \left\{ 1 + \sum_n' \frac{V_n}{\frac{\hbar^2}{2m} [k^2 - (k + K_n)^2]} e^{i\vec{K} \cdot \vec{x}} \right\}$$

电子能量为：

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} + \sum_n' \frac{|V_n|^2}{\frac{\hbar^2}{2m} [k^2 - (k + \vec{K}_n)^2]}$$

当电子波矢k满足 $\vec{K}_n \cdot (\vec{k} + \frac{1}{2} \vec{K}_n) = 0$

电子能量E(k)发生分裂，成为：

$$E_{\pm} = E^0(k) \pm |V_n|$$

禁带宽度 $E_g = 2 |V_n|$

5.紧束缚近似模型。该模型假定晶体势场较强，当电子在 R_m 处离子实附近时，主要受该离子实势场的影响，其它离子实对这个电子的影响很小，可以作为微扰处理。以孤立原子的哈密顿算符作为零级近似，应用简并微扰理论进行计算，结果表明，晶体电子的能量本征值不是一系列分立的能级，而是一系列能带，其表达式为：

$$E(\vec{k}) = E_i - J_0 - \sum_s J(\vec{R}_s) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_s}$$

6.准经典近似的三个方程：

电子的运动方程：
$$\vec{F} = \frac{d}{dt}(\hbar \vec{k})$$

晶体中电子的速度 $v(k)$ 。 $v(k)$ 的实质是 k 态电子的平均速度，与能带结构有关，其表达式为：
$$v(k_0) = \frac{1}{\hbar} (\nabla_k E)_{k_0}$$
在能带顶及能带底，电子速度为零，对于任意的 k ，存在 $v(k) = -v(-k)$ 。

讨论电子对外力的响应时引入概括电子与晶格相互作用的有效值 m^* 来描述。晶体电子的有效质量是个二阶张量。当以此张量的主轴为 $k_x k_y k_z$ 轴时，有效质量是个对角张量，各分量的定义为： $m_{ii}^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_i^2}$

有效质量概括了周期场对电子的作用，使电子的加速度与外力直接联系起来。

7. 在 k 空间：在恒定外力 $-eE$ 的作用下，电子的状态发生变化，所服从的规律为： $\frac{dk}{dt} = -\frac{eE}{\hbar}$

即：布洛赫波电子的平均速度不随时间改变，电子不会与周期性排列的离子实碰撞，电导率是无限大的。

8. 空穴。空穴的实质是近满带顶附近空的能量状态，空穴运动的实质是电子的运动。空穴是一种假象的粒子，这种粒子带正电荷，具有正的有效质量 m_h^* ，运动速度与 k 态电子相同。

9. 费米分布函数

费米能级代表在体积不变的条件下，系统增加一个电子所需的自由能。

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/kT} + 1}$$

10. 质量作用定律

质量作用定律是产生与复合相平衡，即热平衡的直接结果

$$np = n_i^2$$

11. 迁移率和散射

存在着两种主要的散射机制（碰撞机制）：

- 1) 晶格散射（或声子散射）
- 2) 电离杂质的库仑散射

$$\mu_n = \frac{q\tau_{cn}}{m_n^*}$$

12. 在一维情况下，总的电流密度可表示为：

$$J_{nx} = q\mu_n n \mathcal{E}_x + q\mu_p p \mathcal{E}_x + qD_n \frac{dn}{dx} - qD_p \frac{dp}{dx}$$

$$D_n = \left(\frac{kT}{q} \right) \mu_n$$

本章调研报告（二选一）：

1. 写一篇关于不同结构的GAA FET的结构演进的调研报告（字数不限）
2. 从晶体管发展趋势分析GAA FET之后，如何延长摩尔定律？
3. 半导体物理与器件，4th版，尼曼著，在matlab中复现Kronig-Penney模型。