

半导体物理实验讲义

半导体物理教研室编

中山大学

一九八三年九月·广州

目 录

- 实验一：用方形阵列四点探针法测半导体薄膜的电阻率及塞耳迁移率
- 实验二：非晶态硅电导率激活能的测量
- 实验三：硅光电二极管光谱灵敏度的测量
- 实验四：椭圆偏光法测半导体薄膜折射率和厚度
- 实验五：用光干涉法测半导体薄膜的厚度
- 实验六：硅的高温氧化层错的观测
- 实验七：用光电导衰退法测半导体少子载流子寿命
- 实验八：用MOS结构的电容—电压法测半导体外延层的杂质分布和
测半导体金属—半导体接触势垒高度
- 预备知识*：实验九、十、十一 MOS 电容器 C—V 特性原理
- 实验九：用 C—V 法测 MOS 结构的 SiO_2 层离子电荷密度
- 实验十：准静态 C—V 法测 $\text{Si}—\text{SiO}_2$ 系统的表面态密度
- 实验十一：利用非平衡 MOS 电容法测硅的产生寿命和表面产
生速度
- 参考实验一：磁阻法 P型硅单晶中的杂质补偿度
- 参考实验二：直流四探针法测半导体材料的电阻率
- 参考实验三：用腐蚀金相法观测硅单晶中的位错
- 参考实验四：用金相法测定硅外延层厚度与层错密度
- 参考实验五：MOS结构的 C—V 温度法测 $\text{SiO}_2—\text{Si}$ 的界面态密度

实验一 用方形阵列四点探针法测半导体薄膜的电阻率及霍尔迁移率

随着电子计算机的飞速发展，对半导体器件及材料提出越来越高的要求。目前，不论在国外或是在国内，超大规模集成电路正向越来越高集成度的方向发展，这样，对半导体材料及工艺就提出了更高的要求。它要求半导体材料参数在一个片子上具有空间的均匀性，在工艺上也有同样的要求。因此，对片子及整个工艺流程的均匀性的探测，分析手段也提出了新的要求：要求能简便、快捷、准确及符合整个工艺流程的需要。目前在国外普遍采用的方形阵列四点探针法测半导体薄膜的电阻率及霍尔迁移率，就是适应超大规模集成电路的发展需要的。它可以测得整个薄膜中的一点的参数，从而可得出整个薄膜的掺杂均匀性。

方形阵列四探针法测具有很大的优越性，首先是它在测量及计算上简单，在同一个实验花样上可以同时测得几个参数——电阻率、霍尔系数，从而可得出掺杂浓度及迁移率。而实验花样则可以与工艺流程中的光刻步骤同时得到。若实验花样取得具有对称性，探针阵列也对称放置时，计算公式可以很简单，与样品的几何形状无关，且得出的结果是很精确的，因为它反映了该点的实际情况。因此，此方法的测量比通常使用的线排列四探针法（它只能测出一个近似的电阻率，且对边界条件很灵敏）简单、精确。其次此方法可以随工艺流程测出每次掺杂的电阻率或掺杂浓度，而不用估量，通常由于温度及气流的不均匀性，估量的电阻率与真正片常常是差距的。因此，这样的测量对掌握器件本身的掺杂比较可靠，从而使我们更好地掌握工艺流程。目前在国外大多采用此方法进行薄膜参数测量。此法国外称为 VDP 四探针测量法，所采用的实验花样称为 VDP 测量电极器。

(一) 测量原理

如图一所示的一块半导体薄膜，直径为 d ，厚度为 t ，是导厚、均匀及各向同性的。我们在这个薄片上固定了四个如图所示的探针，如果其中一对通过电流，则在另一对上就测到电势差。

假如有一个外加磁场 B ，其方向如图一所示，则一般来说，由于霍尔效应，会产生一个横向电场 E_H 。这时，总的电场遵循霍尔—欧姆定律：

$$\vec{E} = \rho(B) \vec{j} - R_H(B) \vec{j} \times \vec{B} \quad (1)$$

其中 \vec{E} 是电场； $R_H(B)$ 是霍尔系数； \vec{B} 是磁场强度矢量。对空穴导电材料来说， $R_H(B)$ 是正的；对电子导电材料来说， $R_H(B)$ 是负的。

如上所述，在垂直磁场作用下，由于霍尔效应，增加了一个横向电场，因此，电场与电流的方向不再完全相同，它们之间产生了一个称为霍尔角的夹角 β 。此角与霍尔系数 $R_H(B)$ 、电阻率 ρ 及磁场 B 有如下关系：

$$\operatorname{tg} \beta = \frac{R_H(B) B}{\rho(B)} \quad (2)$$

当测得两电压探针间的电势差 ΔV 时，我们可以将测得的电势差分解为两项：一项是 ΔV_P ，它是磁场的偶函数（即与磁场方向无关）；另一项是 ΔV_H ，它是磁场的奇函数（即与磁场方向有关）。即测得的电势差为：

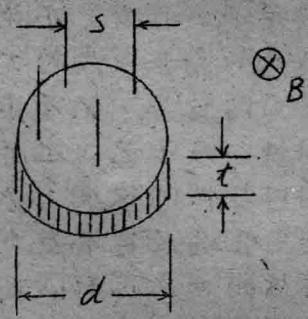
$$\Delta V = \Delta V_P + \Delta V_H \quad (3)$$

在这里：

$$\begin{cases} \Delta V_P(+B) = \Delta V_P(-B) \\ \Delta V_H(+B) = -\Delta V_H(-B) \end{cases} \quad (4)$$

而 V_P 及 ΔV_H 两者都是电流的奇函数（即都与电流方向有关）。

要从测得的电势差 ΔV 分开 ΔV_P 及 ΔV_H ，可利用方程 (3)，只要适当地将磁场反向即可达到（取两个相反方向磁场的方法还可消除总电势差）。

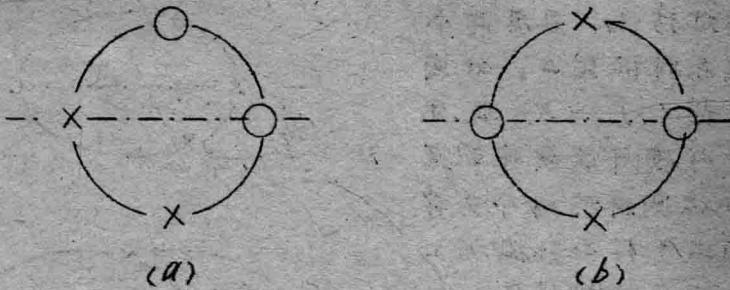


图一

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta V_p = [+\Delta V(++) - \Delta V(-+) - \Delta V(--) + \Delta V(+-)] / 4 \\ \Delta V_H = [+\Delta V(++) - \Delta V(-+) + \Delta V(--) - \Delta V(+-)] / 4 \end{array} \right. \quad (5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta V_p = [+\Delta V(++) - \Delta V(-+) - \Delta V(--) + \Delta V(+-)] / 4 \\ \Delta V_H = [+\Delta V(++) - \Delta V(-+) + \Delta V(--) - \Delta V(+-)] / 4 \end{array} \right. \quad (6)$$

这里括号中第一个符号表示电流方向，第二个符号表示磁场方向。而 ΔV_p 为因电阻率而引起的电势差称谓电阻率电势差； ΔV_H 为因霍尔效应而引起的电势差，称谓霍尔电势差。



图二

当具体测旁花样具有对称性且探针位置作周边对称放置时（如上面图二(a)，图二(b)所示），测旁公式可化为很简单的形式：对于电阻率的测旁配置，(图二(a))，测旁公式为：

$\Delta V_p = \frac{P_L}{\pi t} \ln 2$	(7)
$\Delta V_H = 0$	

对于霍尔效应的测旁配置 (图二(b))，测旁公式为：

$\Delta V_p = 0$	(8)
$\Delta V_H = \frac{R_H I B}{t}$	

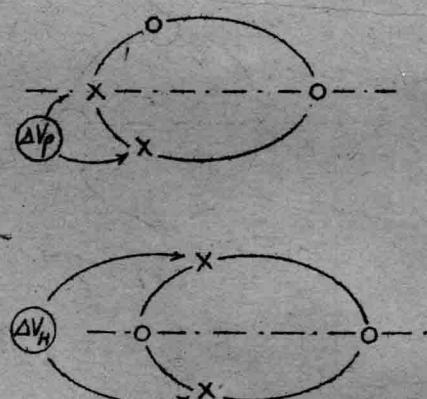
(上面两个测量公式的推导在附录中)。

从公式(7)、(8)，可以看出，电阻率的修正因子为 $C_P = \frac{\pi}{\ln \alpha}$ ，与薄膜的几何形状无关；而霍尔系数的修正因子 $C_H = 1$ 也与薄膜的几何形状无关。

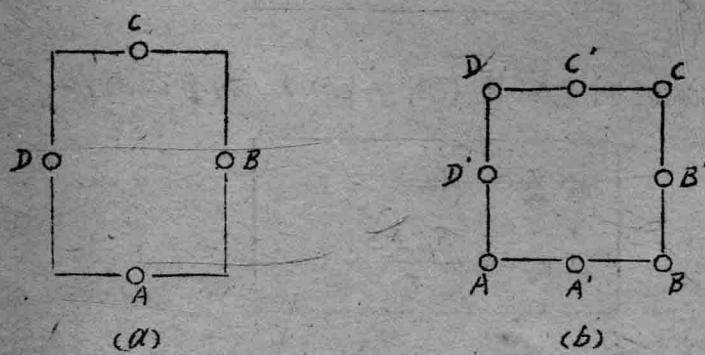
上面的结果表明，当实验花样及探针具有对称性时，且探针的位置是放置在样品的周边时，测得不依赖于测得样品（实验花样）的几何参数，只要知道薄层的厚度就行。事实上，VDP 的实验表明，只要样品（实验花样）具有一个线的对称性，且有两个探针是放在这条对称线上，如图三所示，则公式(7)、(8) 就完全适用，且这时通过改变电流及电压接线的办法测得的两个电势差，为我们指出了样品在微观上或宏观上的均匀性的程度。

上述是对于圆形样品（花样）所得到的结果，如对于方形样品（花样），如图四所示，S.

Perdorr 通过保角变换的方法得出下面的结论：①电阻率及霍尔系数修正因子对于样品（花样）的长宽比的微小的变化具有高度的灵敏性。然而，②当四个点探针被放置在一个方形样品（花样）的四条边的中点时，如图四 (a) 中的 A B C D，则电阻率修正因子与上述的圆形周边线性放置的花样相同为 $C_P = \frac{\pi}{\ln \alpha}$ ，而



图三



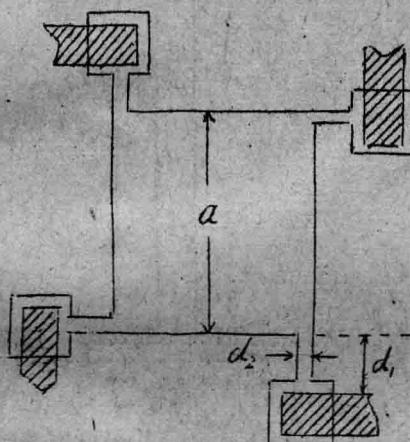
图四

霍尔系数修正因子也为 $C_H = 1$ ，却与花样的长宽比无关。②当样品（花样）为正方形时，不论探针是放置在四条边的中点（图四(b) 中点 $A' B' C' D'$ ）或是放置在四个边角上（图四(b) 中点 $A B C D$ ）都可得到与上面相同的修正因子。

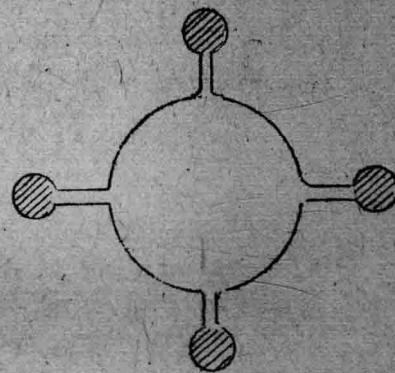
上面的结论是通过点接触推导出来的。但实际上只要测易花样（图五）满足下面的要求： $d_1/a \geq d_2/a$ ，则上述结果的精确度超过 0.1%。

(二) 实验步骤

(1). 制版：制作几个实验花样（圆的或方形的）的光刻图版。如图五、图六。图中画有斜影线部分是接触电极，大方形或大圆则是被测部分。



图五



图六

(2) 样品制作：

① 光刻：在要测的样品上光刻上实验花样，刻至下面的绝缘层为止。

② 作电极接触——Al（或 Au）并反刻（将电极以外的 Al 层去掉）。

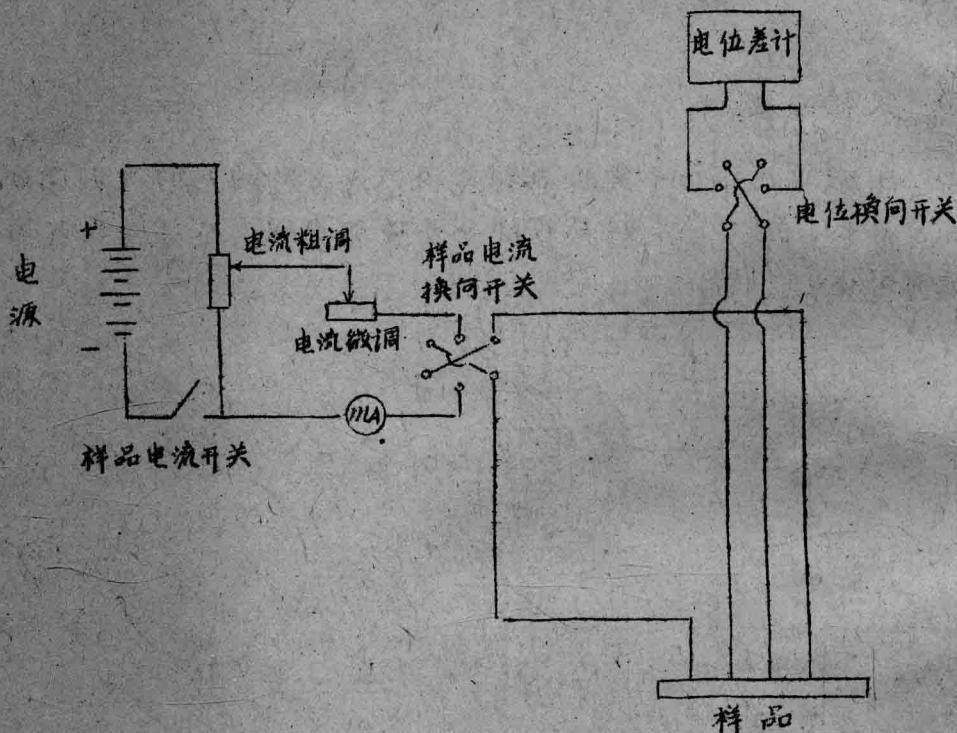
上面两个步骤已事先做好。

(3) 测量：

① 测量线路(见图七)

② 电阻率的测量

a) 将样品架上的四个点探针接触到底部实验花样的四个电极上(本实验已事先连接好), 并将其中两个相邻的探针(不是对角线的一对)接到电极上, 设这时电流为 $+I$; 而另外一对探针接到电位差计上以便读出电势差 ΔV_p .



图七

b) 改变电流方向, 设为 $-I$, 又读一次电势差 ΔV_p .

c) 将所得的两个 ΔV_p 进行平均.

d) 将两对探针对调, 重复上述步骤再测一次, 并取平均值.

e) 比较两次的测量结果.

③ 霍尔系数的测量:

a) 将四个探针接触到实验花样的四个电极上, 并将其中任一对对角线探针接到电源上, 另一对对角线探针接到电位差计上, 设这时的电流方向为 $+I$, 将整个装置放进磁场中, 设这时的磁场方向为 $+B$, 测量另一对对角线探针的电势差 $\Delta V_H(++)$.

- b) 改变电流方向，设为 $-I$ ，再读一次 $\Delta V_H (-+)$ 。
 c) 保持电流方向为 $-I$ ，改变磁场方向为 $-B$ ，再测一次电势差为 $\Delta V_H (- -)$ 。
 d) 改变电流方向为 $+I$ ，保持磁场方向为 $-B$ ，再读一次 $\Delta V_H (+ -)$ 。
 e) 将测得的四个值求平均值。
 f) 将两对探针对调，按上述步骤再测一次，并取平均值。
 g) 比较两次的测量结果。

(4) 计算样品的载流子浓度及霍尔迁移率。

由半导体物理知道，载流子浓度 n_0 (对于N型样品) 由下式决定：

$$n_0 = \frac{1}{R_H e} \quad (9)$$

式中 e 为电子的电荷； α 是接近于 1 的因子 (假设为 1) 它的具体数值依赖于载流子的散射过程。利用上面所测得的电阻率和 n_0 值，可推导出霍尔迁移率 M_H ：

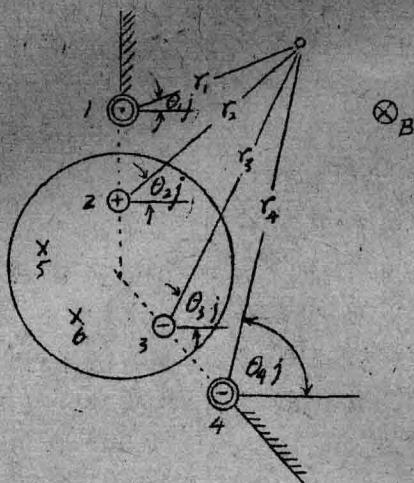
$$M_H = \frac{R_H}{P} \quad (10)$$

其中 P 为样品电阻率。上述测得中磁场单位用高斯，电流单位用安倍，电位差单位用伏特，样品厚度单位用厘米，霍尔系数单位为厘米³/库伦。因此在有磁场强度单位的公式中必须乘上 10^8 。

附录

公式 (7)、(8) 的推导：

考虑探针的一般排列，如图八所示：图中点④为电流探针电流流进点；⑤为电流探针电流流出点。点②及③称为底电流源。而图中点⑤及⑥ (符号 X) 为电势接触点。我们可以通过 Corbin's 法求出圆形薄片中的电势分布。当没有磁场时，从电学基本理论可知，点源②及③的映像分别是一及 4，当一个外加磁场被引进时，这些点源产生的电流分布必须进行修正，修正



图八

以后的点源我们用一个 Corbino 波代替，而它的映像我们同样用一个 Corbino 波来代替。那么，利用 Corbino 映像方法，我们求在任意一点 j ，由每一个电流源 i 所产生的电流密度 J_i ，如以极坐标表示之，则 J_i 为：

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{J}_1 = \frac{1}{2\pi r_1 t} (\vec{r}_1 - tg\beta \vec{\theta}_1) \\ \vec{J}_2 = \frac{1}{2\pi r_2 t} (\vec{r}_2 + tg\beta \vec{\theta}_2) \\ \vec{J}_3 = \frac{-1}{2\pi r_3 t} (\vec{r}_3 + tg\beta \vec{\theta}_3) \\ \vec{J}_4 = \frac{-1}{2\pi r_4 t} (\vec{r}_4 - tg\beta \vec{\theta}_4) \end{array} \right. \quad (11)$$

这里 \vec{r}_i 及 $\vec{\theta}_i$ 是相应于第 i 个点电流源的极坐标单位矢量。

总的电流密度 J 是上述各点电流密度的线性迭加。将这些方程代入 Hall-Ohm 定律 (1) 并利用公式 (2)，那么在点 j 处的电场（看作各个个别电场的迭加）是：

$$\begin{aligned}
 \vec{E} &= \sum_i \vec{E}_i = \sum_i (E_{r_i} \vec{r}_i + E_{\theta_i} \vec{\theta}_i) \\
 &= \frac{\rho I}{2\pi t} \left(\frac{\vec{r}_1}{r_1} + \frac{\vec{r}_2}{r_2} - \frac{\vec{r}_3}{r_3} - \frac{\vec{r}_4}{r_4} \right) + \frac{\rho I}{2\pi t} \operatorname{tg}\beta \left(-\frac{\vec{\theta}_1}{r_1} + \frac{\vec{\theta}_2}{r_2} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\vec{\theta}_3}{r_3} + \frac{\vec{\theta}_4}{r_4} \right) + \frac{IBR}{2\pi t} \left(-\frac{\vec{\theta}_1}{r_1} - \frac{\vec{\theta}_2}{r_2} + \frac{\vec{\theta}_3}{r_3} + \frac{\vec{\theta}_4}{r_4} \right) \\
 &\quad + \frac{IBR}{2\pi t} \operatorname{tg}\beta \left(-\frac{\vec{r}_1}{r_1} + \frac{\vec{r}_2}{r_2} - \frac{\vec{r}_3}{r_3} + \frac{\vec{r}_4}{r_4} \right) \\
 &= \frac{\rho I}{2\pi t} \left[\left(\frac{\vec{r}_1}{r_1} + \frac{\vec{r}_2}{r_2} - \frac{\vec{r}_3}{r_3} - \frac{\vec{r}_4}{r_4} \right) + \operatorname{tg}^2\beta \left(-\frac{r_1}{r_1} + \frac{r_2}{r_2} - \frac{r_3}{r_3} + \frac{r_4}{r_4} \right) \right] \\
 &\quad + \frac{IRB}{2\pi t} \left(-\frac{\vec{\theta}_1}{r_1} - \frac{\vec{\theta}_2}{r_2} + \frac{\vec{\theta}_3}{r_3} + \frac{\vec{\theta}_4}{r_4} \right) + \frac{IRB}{2\pi t} \left(-\frac{\vec{\theta}_1}{r_1} + \frac{\vec{\theta}_2}{r_2} - \frac{\vec{\theta}_3}{r_3} + \frac{\vec{\theta}_4}{r_4} \right) \\
 &= \frac{\rho I}{2\pi t} \left[\left(\frac{\vec{r}_1}{r_1} + \frac{\vec{r}_2}{r_2} - \frac{\vec{r}_3}{r_3} - \frac{\vec{r}_4}{r_4} \right) + \operatorname{tg}^2\beta \left(-\frac{\vec{r}_1}{r_1} + \frac{\vec{r}_2}{r_2} - \frac{\vec{r}_3}{r_3} + \frac{\vec{r}_4}{r_4} \right) \right] \\
 &\quad + \frac{IRB}{\pi t} \left(\frac{\vec{\theta}_4}{r_4} - \frac{\vec{\theta}_1}{r_1} \right) \tag{12}
 \end{aligned}$$

那么，在电极探针 5、6 之间的电势差为：

$$\Delta V = V_5 - V_6 = - \sum_i \int_{V_{i6}}^{V_{i5}} E_{r_i} dr_i - \sum_i \int_{\theta_{i6}}^{\theta_{i5}} E_{\theta_i} r_i d\theta_i \tag{13}$$

将 (12) 式代入 (13) 式：

$$\begin{aligned}
 \Delta V &= \frac{\rho(B)I}{2\pi t} \left[\left(- \int_{r_{16}}^{r_{15}} \frac{1}{r_1} dr_1 - \int_{r_{26}}^{r_{25}} \frac{1}{r_2} dr_2 + \int_{r_{36}}^{r_{35}} \frac{1}{r_3} dr_3 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \int_{r_{46}}^{r_{45}} \frac{1}{r_4} dr_4 + \operatorname{tg}^2\beta \left(\int_{r_{16}}^{r_{15}} \frac{1}{r_1} dr_1 - \int_{r_{26}}^{r_{25}} \frac{1}{r_2} dr_2 \right. \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \left. + \int_{r_{36}}^{r_{35}} \frac{1}{r_3} dr_3 - \int_{r_{46}}^{r_{45}} \frac{1}{r_4} dr_4 \right) \right] \\
 &\quad + \frac{IR(B)B}{\pi t} \left(- \int_{\theta_{46}}^{\theta_{45}} \frac{1}{r_4} r_4 d\theta_4 + \int_{\theta_{16}}^{\theta_{15}} \frac{1}{r_1} r_1 d\theta_1 \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{P(B)I}{2\pi t} \left[\left(\ln \frac{r_{16}}{r_{15}} + \ln \frac{r_{26}}{r_{25}} + \ln \frac{r_{35}}{r_{36}} + \ln \frac{r_{45}}{r_{46}} \right) \right. \\
 &\quad \left. + tg^2 \beta \left(\ln \frac{r_{15}}{r_{16}} + \ln \frac{r_{26}}{r_{25}} + \ln \frac{r_{35}}{r_{36}} + \ln \frac{r_{46}}{r_{45}} \right) \right] \\
 &\quad + \frac{IR(B)B}{\pi t} \left[(\theta_{46} - \theta_{45}) + (\theta_{15} - \theta_{16}) \right] \\
 &= \frac{P(B)I}{2\pi t} \left(\ln \frac{r_{16} r_{26} r_{35} r_{45}}{r_{15} r_{25} r_{36} r_{46}} + tg^2 \beta \ln \frac{r_{15} r_{26} r_{35} r_{46}}{r_{16} r_{25} r_{36} r_{45}} \right) \\
 &\quad + \frac{IR(B)B}{\pi t} (\Delta\theta_1 + \Delta\theta_4) \tag{14}
 \end{aligned}$$

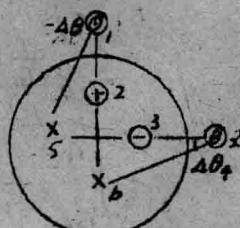
这里 r_{ij} 是点 i 和点 j 之间的距离，而 θ_{ij} 是在 i 点相对于 j 点被测得的角度，见图八。且 $\Delta\theta_1 = \theta_{15} - \theta_{16}$ ； $\Delta\theta_4 = \theta_{46} - \theta_{45}$ 。

如前面所说的，测得的电势差可分为两部分：一部分是电阻率电势差 ΔV_p ，它是磁场的偶函数；另一部分是霍尔电势差 ΔV_H ，它是磁场的奇函数。因此，按照奇偶函数将 ΔV 分开得：

$$\left\{
 \begin{aligned}
 \Delta V_p &= \frac{PI}{2\pi t} \left[\ln \left(\frac{r_{16} r_{26} r_{35} r_{45}}{r_{15} r_{25} r_{36} r_{46}} \right) \right. \\
 &\quad \left. + tg^2 \beta \ln \left(\frac{r_{15} r_{26} r_{35} r_{46}}{r_{16} r_{25} r_{36} r_{45}} \right) \right] \\
 \Delta V_H &= \frac{IRB}{\pi t} (\Delta\theta_1 + \Delta\theta_4)
 \end{aligned} \tag{15}
 \right.$$

下面具体讨论几种探针排列：

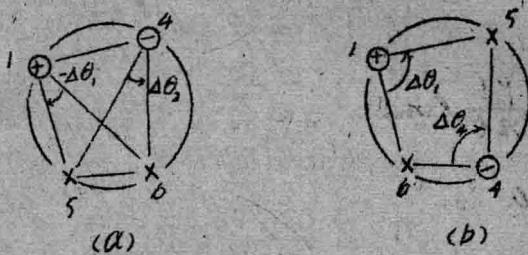
(1) 如图九所示，四点探针在一个圆形薄片上以正方形阵列排列时，(15)式可简化为：



图九

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta V_p = \frac{\rho I}{\pi t} \left(\ln \frac{r_{35} r_{45}}{r_{25} r_{15}} + T q^2 \beta \ln \frac{r_{35} r_{15}}{r_{25} r_{45}} \right) \\ \Delta V_H = \frac{IRB}{\pi t} (\Delta \theta_1 + \Delta \theta_4) \end{array} \right. \quad (16)$$

(2) 当四点探针的位置放在样品的周边时 (如图十), 则方程 (15) 又可简化为:



图十

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta V_p = \frac{\rho I}{\pi t} \ln \frac{r_{45} r_{16}}{r_{15} r_{46}} \\ \Delta V_H = \frac{IRB}{\pi t} (\Delta \theta_1 + \Delta \theta_4) \end{array} \right. \quad (17)$$

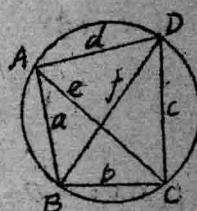
在这种情况下, 由初等几何关系可知
(看图十一):

$$\textcircled{1} \quad \angle DAB + \angle DCB = 180^\circ$$

$$\textcircled{2} \quad \angle BAC = \angle BDC.$$

所以对于图十(a) 的情形,

$-\Delta \theta_1 = \Delta \theta_4$. 故方程 (17) 可简化为:



图十一

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta V_p = \frac{\rho I}{\pi t} \ln \frac{ef}{ac} \\ \Delta V_H = 0 \end{array} \right. \quad (18)$$

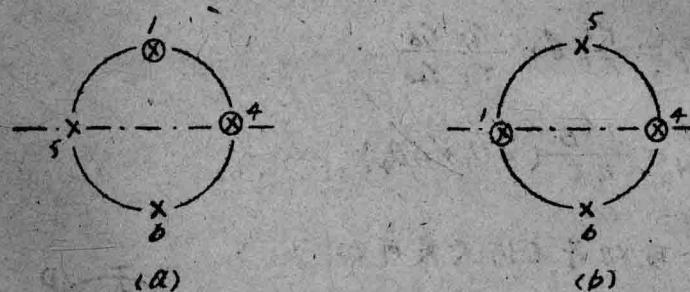
而对于图十(b)的情形， $\angle\theta_1 + \angle\theta_4 = \pi$ ，方程(17)也可简化为：

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta V_P = \frac{\rho I}{\pi t} \ln \frac{ac}{bd} \\ \Delta V_H = \frac{R_H I B}{t} \end{array} \right. \quad (19)$$

③ 当我们进一步将探针位置作周次对称放置时(如图十二)，则方程(18)、(19)可简化为最简单的形式：对于图十二(a)，方程(18)简化为：

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta V_P = \frac{\rho I}{\pi t} \ln \alpha^2 \\ \Delta V_H = 0 \end{array} \right. \quad (20)$$

这里可看出电阻率的修正因子为 $C_P = \frac{\pi}{\ln \alpha^2}$ ，与片子的几何形状无关。对于图十二(b)的配置，方程(19)简化为：



图十二

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta V_P = 0 \\ \Delta V_H = \frac{R_H I B}{t} \end{array} \right. \quad (21)$$

这里也可看出，霍尔系数的修正因子 $C_H = 1$ ，也与薄膜的几何形状无关。

实验二. 非晶态硅电导率 激活能的测量

晶态材料的特点是原子的空间排列具有严格的周期性和对称性，称为长程序。非晶态固体则不具有这种周期性和对称性，也就是说没有长程序，但原子的排列却也不像气体中那样完全混乱。实验表明，非晶态固体虽然不具有长程序，但在几个原子间距范围内，原子的排列却有一定的次序，原子的束缚力使得键长和键角以及配位数都与相应的晶体中的十分类似，这种次序称为短程序。因此，总的来说，非晶态材料的特点是短程有序而长程无序。

关于非晶态半导体的结构模型主要有两种：

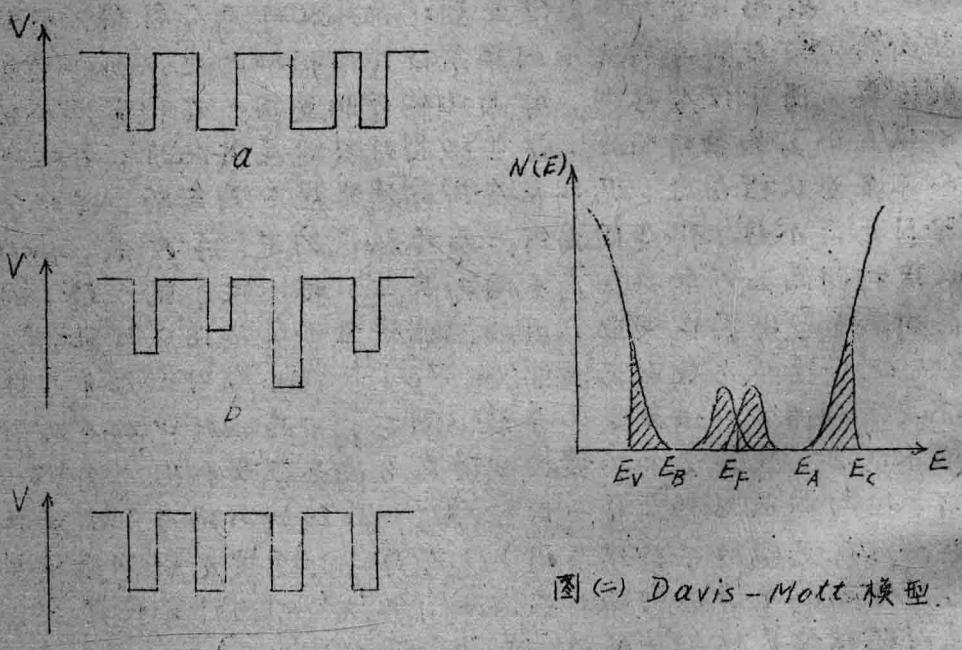
(1) 微晶模型：由于早期对液态和非晶态材料X射线分析得到的衍射花样与同成分的单晶材料有相似之处，例如衍射角及配位数。因此使人想到，非晶结构可能是由一些非常细小的(约十埃大小)晶粒折合成。这些微晶的取向是混乱的，无规则，所以不显示长程有序。现在认为微晶模型是不满意的，因为它与实验符合得不好，但是随着对非晶态认识的进一步发展，人们开始认识到非晶态可能存在着不同的类型，而不是千篇一律，因而不能排除某些非晶态类型。因此微晶模型也有适用的可能性。

(2) 连续无规网络模型(CRN)：认为非晶态半导体与晶态具有相同的配位数及化学键，例如，非晶态硅中都是四配位的原子键合，只是它们的键长与键角与晶态硅键合相比有微小的偏差，因而构成短程有序与长程无序。在这种网络中不出现断键，所以对研究键的结构很有用。迄今为止，连续无规网络模型给出了对非晶态半导体的最好的描述，现在人们用计算机建立各种无规网络模型来模拟具体的非晶半导体。

关于非晶材料的半导体性质，1960年苏联的约飞院士提出：一种材料如果在晶态时是半导体，那么当它转变为液相时只要仍保持与晶态相同的配位数就能保持它的半导体性质。这说明了半导体的基本属性是由材料的短程有序决定的，而不是长程有序性。一些计算也表明：在非晶态材料中，只要晶相中的短程序例如键

长、键角及配位数等基本不变，则晶体的状态密度的总体特征就将保存下来（但细节会不同）。因此，可以认为在非晶态半导体中，像在晶体中一样，电子状态基本上存在于由能隙分开的能带之中，而能隙中的状态则是由于缺陷而产生的，特别是悬挂键。按照这个观点，英国物理学家 MOTT 对非晶半导体进行了一系列的理论研究，他的研究已成为当今非晶态半导体的理论基础。

MOTT 理论认为，非晶态半导体虽然不具有晶格的周期性，但由于仍具有短程有序性，因此仍具有与晶态半导体相类似的能带模型，只是由于无规势场的干扰（在这里 MOTT 利用了 Anderson 关于无序势阱的模型：即有两类无规势场情况，一种是横向无序，即有序的势阱深度、无序的势阱宽度，如图(一) a，另一种是纵向无序，即有序的势阱宽度无序的势阱深度，如图(一) b。图(一) c 是晶体周期格子的势阱）。因此能带模型如图(二)



图(一) a, b, Anderson 势阱

c. 晶体的周期格子的势阱

所示，人们把这个模型称为 Davis-Mott 模型，该能带模型的

基本总是：

I) 由于每个原子的价键要求被满足(短程有序)而形成基本的能带。

II) 由于无规则场的干扰(即组分无序和位置无序)而形成定域态带尾(即从 E_V 到 E_B 和从 E_A 到 E_C 的阴影部分)。

III) 由于缺陷(主要是悬挂键)而造成禁带中间有连续的状态 E_X 、 E_Y ， E_X 为双占据态即受主态， E_Y 为单占据即施主态，二者分开的距离为相关能；对于某些无序情况，二者也可重合成为一个能态。

IV) 存在 E_C (对于导带)和 E_V (对于价带) 把扩展态与定域态分开，这也是 MOTT 提出的关于迁移率边的概念。当：

$E \geq E_C$ ； $E \leq E_V$ 时状态是扩展态(类似于晶态硅中正常的导带或价带)。

$E < E_C$ ； $E > E_V$ 时为定域化的带尾态(图 (二) 中的 $E_V - E_B$ 及 $E_A - E_C$ 的阴影部分)。

在扩展态中电子是正常传导，而在带尾定域态中能级分布是定域化的，电子只有通过与晶格的互相作用交换能量才能发生由一个能级到另一个能级的跳跃式传导，在绝对零度时，带尾定域态中电子迁移率应等于零，而在 $E \geq E_C$ 的扩展态中电子迁移率则为一有限值。于是 E_C (或 E_V) 就成了两个不同导电范畴的分界线称 σ_{min} 与迁移边相对应的电导趋于一个极小值叫最小金属电导。

这是 MOTT 提出的。

非晶态半导体的直流电导率 — 实验原理：

由于上述非晶态半导体(以下以硅为例，因为它是我们在实验所采用的样品)的能带结构的基本特征，使得在非晶态材料中存在三个电传导的渠道：

1. 扩展态电传导

所有半导体的电导率都可写为如下形式：

$$\sigma = -e \int N(E) \mu(E) kT \frac{\partial f(E)}{\partial E} dE \quad (1)$$

其中 $f(E)$ 是费米-狄拉克分布函数：

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