

高等学校教材

# 半导体器件计算机模拟

张义门 任建民 编著

电子工业出版社

3

## 内 容 简 介

该书以半导体器件数值模型为主线，系统地讲述了器件模拟的物理基础、数学模型、离散化方法以及计算方法。共分六章：一、器件模拟的物理基础和数学模型。二、半导体基本方程组的分析。三、离散化方程。四、PDES求解法。五、半导体器件模拟器。六、Monte Carlo方法简介。

本教材是作者在总结科研、教学中的经验并参考了国内外大量文献的基础上编写的。它的基本理论系统完整，物理概念清楚，重点突出，文字通俗易懂，是在半导体器件数值模型方面国内出版的内容较新的书。

本教材除了可作为研究生课，本科生选修课的教材外，还可作为从事半导体器件物理方面的研究人员，从事VLSI计算机辅助设计的工程技术人员以及大专院校师生的参考书。

### 半导体器件计算机模拟

张义门 任建民 编著

责任编辑：郭延龄

电子工业出版社出版（北京海淀区万寿路）

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

山东电子工业印刷厂印刷

（淄博市周村）

\*

开本：787×1092毫米 1/16 印张：13 字数：341千字

1991年2月第一版 1991年2月第一次印刷

印数：1—800册 定价：3.55元

ISBN7-5053-0710-X/TP·116

## 出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作分工的规定，我部承担了全国高等学校、中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力，有关出版社的紧密配合，从1978年至1985年，已编审、出版了两轮教材，正在陆续供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻“努力提高教材质量，逐步实现教材多样化，增加不同品种、不同层次、不同学术观点、不同风格、不同改革试验的教材”的精神，我部所属的七个高等学校教材编审委员会和两个中等专业学校教材编审委员会，在总结前两轮教材工作的基础上，结合教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1986~1990年的“七五”（第三轮）教材编审出版规划。列入规划的教材、实验教材、教学参考书等近400种选题。这批教材的评选推荐和编写工作由各编委会直接组织进行。

这批教材的书稿，是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐，由编审委员会（小组）评选择优产生出来的。广大编审者、各编审委员会和有关出版社为保证教材的出版和提高教材的质量，作出了不懈的努力。

限于水平和经验，这批教材的编审、出版工作还会有缺点和不足之处，希望使用教材的单位，广大教师和同学积极提出批评建议，共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

电子工业部教材办公室

## 前 言

本教材系按原电子工业部的工科类专业教材1986~1990年编审规划,由原电子工业部教材编审委员会〈半导体物理与器件〉编审小组征稿,推荐出版,责任编委曹培栋。

本教材由西安电子科技大学张义门担任主编,清华大学余志平担任主审。

教材中系统地讨论了用数值模型模拟半导体器件特性的基本理论,其中包括:用于半经典和经典模拟的方程组,各种基本参量的物理模型及其适用表达式,方程组的基本变量选择,边界条件,方程的离散化,网格划分,线性方程组的求解方法等。此外书中还介绍了几种半导体器件模拟器以供教学和工程界应用。最后还对 Monte Carlo 方法在器件模拟中的应用作了介绍。

本书是作者以研究生课讲稿为基础修改而成,因此学习本教材的读者需要具备一定的半导体器件物理、数值分析及计算机算法语言的基础。把它作为本科生选修课教材时,可以根据学习对象的情况删减部分章节。

本教材由张义门编写第一、二、三、四、六章以及第五章 § 5.3.2 节,由任建民编写第五章。张义门同志统编全稿。参加审阅工作的还有李肇基同志,他为本书提出了许多宝贵意见,这里表示诚挚的感谢。由于编者水平有限,书中难免还存在一些缺点和错误,殷切希望广大读者批评指正。

编 者

1990. 3.

# 目 录

引 言	( 1 )
参考文献	( 3 )
第一章 器件模拟的物理基础和数学模型	( 4 )
§ 1.1 基本方程组	( 4 )
§ 1.1.1 Poisson方程	( 5 )
§ 1.1.2 电流连续性方程	( 6 )
§ 1.1.3 载流子的输运方程	( 6 )
§ 1.1.4 热流方程	( 14 )
§ 1.1.5 常用的基本方程组	( 16 )
§ 1.2 载流子浓度	( 17 )
§ 1.2.1 高掺杂时的分析	( 17 )
§ 1.2.2 有效本征载流子浓度	( 19 )
§ 1.3 迁移率	( 21 )
§ 1.3.1 晶格散射	( 22 )
§ 1.3.2 电离杂质散射	( 23 )
§ 1.3.3 载流子-载流子散射	( 24 )
§ 1.3.4 中性杂质散射	( 25 )
§ 1.3.5 速度饱和效应	( 26 )
§ 1.3.6 表面散射	( 27 )
§ 1.4 载流子的产生和复合	( 29 )
参考文献	( 33 )
第二章 半导体基本方程组的分析	( 35 )
§ 2.1 变量选择及其相应的方程组	( 35 )
§ 2.2 边界条件	( 39 )
§ 2.3 方程的归一化	( 42 )
§ 2.4 方程组的解	( 43 )
参考文献	( 43 )
第三章 离散化方程	( 45 )
§ 3.1 网格划分	( 45 )
§ 3.2 有限差分法	( 49 )
§ 3.2.1 直接差分法	( 49 )
§ 3.2.2 积分差值法	( 56 )
§ 3.3 有限箱法	( 59 )
§ 3.4 边界条件的离散化	( 63 )
§ 3.5 瞬态离散化方程	( 71 )
§ 3.6 有限单元法	( 76 )
§ 3.6.1 加权剩余法的变分原理	( 77 )
§ 3.6.2 基函数的确定	( 78 )

§ 3.6.3 有限单元方程 .....	( 81 )
参考文献 .....	( 87 )
<b>第四章 PDES 求解法 .....</b>	<b>( 89 )</b>
§ 4.1 牛顿法 .....	( 92 )
§ 4.2 系数矩阵的稀疏性 .....	( 94 )
§ 4.3 几种迭代法 .....	( 98 )
§ 4.4 迭代过程的加速法 .....	( 114 )
§ 4.5 例 .....	( 119 )
附录 .....	( 125 )
参考文献 .....	( 127 )
<b>第五章 半导体器件模拟器 .....</b>	<b>( 129 )</b>
§ 5.1 几个二维 MOSFET 模拟器简介 .....	( 129 )
§ 5.1.1 二维 MOSFET 模拟现状 .....	( 129 )
§ 5.1.2 二维亚阈及线性区模拟器: GEMINI .....	( 129 )
§ 5.1.3 CADDET: 二维单载流子模拟器 .....	( 134 )
§ 5.1.4 SIFCOD: 通用型二维双载流子器件模拟器 .....	( 139 )
§ 5.2 二维 MINIMOS 模拟器 .....	( 145 )
§ 5.2.1 MINIMOS 概述 .....	( 145 )
§ 5.2.2 MINIMOS 模型介绍 .....	( 146 )
§ 5.2.3 MINIMOS 应用简介 .....	( 153 )
§ 5.2.4 MINIMOS 输入语言介绍 .....	( 163 )
§ 5.3 三维半导体器件模拟器简介 .....	( 170 )
§ 5.3.1 CADDETH——三维半导体器件模拟器 .....	( 170 )
§ 5.3.2 XDMOS-3——三维 MOSFET 模拟器 .....	( 172 )
附录 A 掺杂文件的格式 .....	( 175 )
附录 B 二进制文件的格式 .....	( 176 )
参考文献 .....	( 177 )
<b>第六章 Monte Carlo 方法简介 .....</b>	<b>( 179 )</b>
§ 6.1 Monte Carlo 法的基本概念 .....	( 180 )
§ 6.2 随机变量的抽样 .....	( 182 )
§ 6.3 用 Monte Carlo 法解波尔兹曼方程 .....	( 184 )
§ 6.3.1 Monte Carlo 法解波尔兹曼方程的基本思想 .....	( 185 )
§ 6.3.2 GaAs 材料中的几种散射几率 .....	( 186 )
§ 6.3.3 Monte Carlo 法解波尔兹曼方程的步骤 .....	( 190 )
§ 6.4 速度过冲效应和弹道传输效应 .....	( 194 )
参考文献 .....	( 197 )
<b>练习 .....</b>	<b>( 198 )</b>
<b>常用物理常数表 .....</b>	<b>( 201 )</b>
<b>几种半导体材料性能参数表(300K) .....</b>	<b>( 202 )</b>

## 引 言

从第一只晶体管问世到现在有40年的历史了。回顾这段历史，半导体的发展速度是惊人的。1947年由美国Bell实验室的J. Bardeen和W. H. Brattain制出了第一只点接触晶体管，尽管它是很初级的一种半导体器件，但是为半导体的发展开创了新的前程。1949年Bell实验室的W. Shockley提出了pn结和结型晶体管理论，从而为半导体的发展奠定了理论基础。在五十年代，随着半导体制造工艺技术的发展，器件的性能不断地得到改善和提高。由制造锗器件的合金、合金扩散以及扩散工艺发展到硅器件的平面工艺，为集成电路的制备打下了基础。1958年，第一只用平面工艺制造的集成电路诞生了，虽然它只有几只晶体管，但是这开创了电路的“集成”史。1960年由Bell实验室的Kahng和Atalla制出了第一个金属—氧化物—半导体场效应晶体管(MOSFET)。该类晶体管的诞生为高密度的集成带来了希望，以后它成为大规模和超大规模集成电路中的核心器件。

集成电路的发展是迅速的。基本上按照莫尔定律，集成度以每两年翻一翻的速度向前发展。接连不断地突破1K位，4K位，16K位，64K位的单片集成存储器，从而进入VLSI领域。八十年代初突破256K位，1984年制出1M位的存储器。据报导，更大规模的器件16M位的单片存储器已经出现。

一个256K位的随机存储器，大约占芯片面积 $40\text{mm}^2$ ，其单个器件的最小尺寸在 $1.5\mu\text{m}$ 左右。像这样一个只有几十平方毫米的面积上制造了几十万个晶体管的VLSI片子，其分析和设计工作是相当复杂的，没有计算机辅助设计技术是不可能完成的。

“半导体器件计算机模拟”是用于研究半导体器件数值模型的一门科学。自Shockley奠定半导体器件的理论基础以来，人们习惯于用解析模型的方式来分析半导体器件。这种解析的方式对于一维的分析是方便的，同时已被大量实验证明是有效的。随着LSI和VLSI的发展，这种一维的分析不能满足需要。二维、三维、甚至更多维的分析提到日程上来。数值模型正是在这种情况下发展起来的。和解析模型相比，数值模型是一种离散化模型。由于这种模型是和数字计算机紧密联系在一起，因此它可以描述更为深入和更为广泛的问题。这就是七十年代，尤其是八十年代数值模型迅速发展的重要原因。

“半导体器件计算机模拟”的重要应用领域之一就是VLSI的计算机辅助设计。随着集成密度的提高，一个直接结果是半导体子器件的尺寸减小。这种子器件尺寸的减小使得器件的二维甚至三维效应变得显著。要描述多维效应器件的特性，除了采用数值模型外，没有任何完整的解析模型可以利用，然而半导体器件的计算机模拟使这种描述成为可能。在传统的半导体器件研制过程中，一般都是采用：提出设计方案—试制器件—测试—修改设计方案—再试制，这样重复很多次，直到得出满意的器件。在VLSI电路的研制中，当然不会违背这种模式，但是如何加快其研制进程，缩短其周期是十分重要的问题。在一个VLSI电路的工艺生产中，从设计、制造到测试，都是十分复杂的，要花费



相当可观的人力和物力，这是中小规模电路无法比拟的。采用 CAD 技术可以大大缩短研制周期，减小人力和物力的消耗。

“半导体器件计算机模拟”是器件物理研究方面的工具。它既可以分析各种不同工作条件，不同结构，不同环境下的器件的特性，还可以作为难以达到或花费太大的试验的替代物。有人又称模拟为仿真。可以对模拟下一个这样的定义：用一系统或过程的功能模仿代替另一个系统或过程的功能。既然它是一种模仿和代替，所以一个好的模拟器的模拟结果可以代替试验结果。

应用模拟来研究器件物理，不仅具有效率高，节省资金的优点，而且可以给出十分直观的立体图，给出每一个想知道的细节。这对于发现新的物理现象。对于器件的设计和使用都是极为有用的。

然而，用数值模型来模拟半导体器件的思想是在计算机和应用数学发展到一定的条件下产生的，因此它是计算机、应用数学以及半导体器件物理发展的产物。1964年由 H.K.Gummel<sup>[11]</sup>首先提出数值分析模型的概念。当时他采用自洽迭代法研究了一维双极晶体管。他提出的原则和思想至今还在器件模拟工作中广泛地采用着。1969年 D.P.Kennedy 和 R.R.O'Brien<sup>[12]</sup>第一个用二维的数值分析研究了结型场效应晶体管。与此同时，J.W.Slotboom<sup>[13]</sup>用二维数值分析研究了双极型晶体管。从此以后，大量的文章报导了二维数值分析在各种不同情况，不同器件中的应用。例如，1973年 M.S.Mock<sup>[14]</sup>采用“流函数”法对 MOSFET 进行了二维数值分析。1973年，M.Reiser<sup>[15]</sup>，1976年 J.J.Barnes et al.<sup>[16]</sup>，对 MESFET 进行了二维数值分析等，这里不一一枚举。经过大量的研究工作和在实际应用中的验证，二维的数值分析日趋成熟。具有代表性的程序是日本日立公司中心实验室(HITACHI Central Research Laboratory)建立的二维 MOS 器件计算机程序 CADDET<sup>[17]</sup> (Computer-Aided Device Design In Two-Dimensions)和 S.Selberherr, A.Schütz, H.pötzl 建立的二维 MOSFET 分析器 MINIMOS<sup>[18]</sup>。相比之下，MINIMOS 更受到用户的欢迎。因此它成为一个广为流行的 MOSFET 的二维计算机模拟软件程序。

除了二维模拟之外，三维半导体器件的模拟也日益引起人们的兴趣。E.M.Buturla, et al.<sup>[19]</sup>, S.G.Chamberlain, et al.<sup>[20]</sup>, N.Shigyo, et al.<sup>[21]</sup>, A.Yoshii, et al.<sup>[22]</sup>, L.A.Kers<sup>[23]</sup>, T.Toyabe, et al.<sup>[24]</sup> 等在三维器件模拟方面做了不少工作。在国内已有清华大学<sup>[25]</sup>，西安电子科技大学<sup>[26]</sup>在这方面做了研究工作。

总之，从 1964 年算起至今天，虽然已有二十多年的历史，但是器件模拟发展较快的时期还要算七十年代至今。到了八十年代人们更多的集中到多维的模拟上来。除了分析硅材料器件外，有相当多的研究工作已经放在化合物半导体器件的模拟上，例如对 MESFET，异质结特性，热电子效应，速度过冲效应以及弹道传输效应等的研究。

从总体上讲，半导体器件模拟可以分为：1. 经典模拟，2. 半经典模拟，3. 量子模拟。所谓经典模拟是指器件的几何尺寸足够大以致于电子的加速效应可以忽略，电子的运动可以用漂移和扩散的输运方程来描述。半经典模拟主要用于亚微米尺寸的器件，这时电子的运动规律要用波尔兹曼方程来描述。量子模拟主要用于超微型器件，电子的运动规律必须用薛定谔方程来描述。

本书的主要内容仍然放在经典模拟上。其原因是：1. 经典模拟比其另两种模拟来



说要更为成熟；2. 经典模拟在实际应用中更有现实意义；3. 三种模拟在许多方面有共性，尤其在数值分析的技术方面。由上述可见，在器件模拟的基本理论中，经典模拟应该是最为基本和重要的了。

#### 参 考 文 献

- (1) H. K. Gummel: "A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculations" IEEE Trans. on ED, Vol. ED-11, pp. 455-465, 1964
- (2) D. P. Kennedy, R. R. O'Brien: "Two-Dimensional Mathematical Analysis of a Planar Type Junction Field-Effect Transistor" IBM J. Res. Dev., Vol. 13, pp. 662-674, 1969
- (3) J. W. Slotboom: "Iterative Scheme for 1 and 2-Dimensional D. C. Transistor Simulation" Electron Lett., 5, pp. 677-678, 1969
- (4) M. S. Mock: "A two-Dimensional Mathematical Model of the Insulated-Gate Field Effect Transistor" Solid State Electronics, Vol 16, PP.601-609, 1973
- (5) M. Reiser: "A Two-Dimensional Numerical FET Model for DC, AC and Large-Signal Analysis" IEEE Trans. on ED, Vol. ED-20, PP. 35-44, 1973
- (6) J. J. Barnes, R. J. Lomax and I. G. Haddad: "Finite-Element Simulation of GaAs MESFET's with Lateral Doping Profiles and Submicron Gates" IEEE Trans on ED, Vol. ED-23, no. 9, PP. 1042-1048, 1976
- (7) T. Toyabe, K. Yamaguchi, S. Asai and M. S. Mock: "A Numerical Model of Avalanche Breakdown in MOSFET's" IEEE Trans. on ED, Vol. ED-25, PP. 825-832, 1978
- (8) S. Selberherr, A. Schütz and H. Pötzl: "MINIMOS- a Two-Dimensional MOS Transistor Analyzer" IEEE Trans. on ED, vol. ED-27, PP. 1540-1550, 1980
- (9) E. M. Buturla, P. E. Cottell, B. M. Grossman, K. A. Salsburg, M. B. Lawlor and C. T. McMullen: "Three-Dimensional Finite Element Simulation of Semiconductor Devices" Proc. Int. Solid State Circuits Conf. PP. 76-77, 1980
- (10) S. G. Chamberlain, A. Husain: "Three-Dimensional Simulation of VLSI MOSFET's" Proc. Int. Electron Devices Meeting, PP. 592-595, 1981
- (11) N. Shigyo, M. Konaka, R. L. M. Dang: "Three Dimensional Simulation of Inverse Narrow-Channel Effect" Elec. Lett., 18, no. 6, PP. 274-275, 1982
- (12) A. Yoshii, H. Kitazawa, M. Tomizawa, S. Horiguchi and T. Sudo: "A Three Dimensional Analysis of Semiconductor Devices" IEEE Trans. on ED, Vol. ED-29, no. 2, PP. 184-189, 1982
- (13) L. A. Akers, T. M. Wang: "Simulation of a Three Dimensional Semiconductor Devices" SIMULATION Vol. 37, no. 2, PP. 43-50, 1983
- (14) T. Toyabe, H. Masuda, Y. Aoki, H. Shukuri and T. Hagiwara: "Three Dimensional Device Simulator CADDETH with Highly Convergent Matrix solution Algorithms" IEEE Trans. on CAD, Vol. CAD-4, PP. 482-488, 1985
- (15) 陈大同, 吴启明, 王泽毅, 李志坚: "MOS器件三维数值模拟" 半导体学报, Vol. 8, no. 4, 371-377, 1987
- (16) Ren Jianmin, Zhang Yimen: "An Effective Three-Dimensional Analysis of MOSFET" Proc. of IEEE Asian Electronics conference, PP. 204-206, 1987

# 第一章 器件模拟的物理基础和数学模型

要精确地描述各种各样的结构的半导体器件的工作特性，虽然目前还不能随心所欲地达到，但是并不是不可实现的事。正如引言中讲到的，半导体器件的计算机模拟正是研究这个课题的学问。

要模拟半导体器件，首先要做到三件事：1. 确立器件工作的物理模型；2. 建立器件工作的数学模型；3. 明确器件数学模型受到的约束条件。根据这三点，便可以利用计算机进行数值解，并用数值结果来描述器件的工作情况。事实证明，这种途径不仅是可行的，而且是十分有效的。

物理模型和数学模型之间并不是截然分割开的。在物理模型的指导下才能选定数学模型，而数学模型又要能充分地反映出物理模型。因此，数学模型就是物理模型的具体体现。通常，总是从最普遍的基本方程出发，根据物理模型作出各种不同的近似处理，从而得出较为简化的方程。研究更具有普遍意义的方程就成为首当其冲的任务。

## § 1.1 基本方程组

为了不失一般性，将从Maxwell方程组出发，导出适用于半导体器件的基本方程。这是由于在半导体器件中的电磁场运动规律，应遵循Maxwell方程组

(1.1.1)至(1.1.4)是一组在介质中的Maxwell微分方程组。

$$\nabla \times \mathcal{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.1.1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho \quad (1.1.2)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (1.1.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1.1.4)$$

其中 $\mathcal{E}$ 为电场强度， $\mathbf{D}$ 为电位移矢量， $\mathbf{H}$ 为磁场强度， $\mathbf{B}$ 为磁感应强度， $\mathbf{J}$ 为传导电流密度， $\rho$ 为电荷密度。

电位移矢量和电场强度之间的关系为

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t \varepsilon(t-t') \mathcal{E}(\mathbf{r}, t') dt' \quad (1.1.5)$$

上述关系式，在研究压电现象，铁磁现象和非线性光学中必须用到。但在低频或静电场条件下，上式可以简化为：

$$\mathbf{D} = \varepsilon \mathcal{E} \quad (1.1.6)$$

式中 $\varepsilon$ 为介电常数，是一个二阶张量。在常用的半导体材料中，介电常数为和时间无关的量。因此，(1.1.6)式对于我们将研究的半导体器件总是成立的。再者，由于通常用于制造器件的材料并非各向异性，所以可以把介电常数作为标量来处理。

### § 1.1.1 Poisson方程

Poisson方程实际上是从(1.1.2)式得出的。将(1.1.6)式代入(1.1.2)式后可得

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathcal{E}) = \rho \quad (1.1.7)$$

要得出静电位的方程，需要找出静电位和电场强度之间的关系。由(1.1.1)式，电场强度的旋度和磁感应强度随时间的变化率有对应关系，这意味着电位分布除了和电场强度有关外还和磁感应强度随时间的变化率有关。由于存在着(1.1.4)式，可以将  $\mathbf{B}$  表述为某一矢量场  $\mathbf{A}$  的旋度，即

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.1.8)$$

并且矢量场  $\mathbf{A}$  应受到下述限制： $\mathbf{A}$  的散度等于零，

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (1.1.9)$$

$\mathbf{A}$  称为  $\mathbf{B}$  的矢量势。将(1.1.8)代入(1.1.1)式

$$\nabla \times \left( \mathcal{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0 \quad (1.1.10)$$

由旋度的性质可知，当某一矢量的旋度等于零时，该矢量就是某一标量场的梯度。考虑到电场的方向和标量场(电势)的梯度方向相反，令

$$-\nabla \psi = \mathcal{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.1.11)$$

将(1.1.11)式代入(1.1.6)有

$$\mathbf{D} = -\epsilon \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \epsilon \nabla \psi \quad (1.1.12)$$

将(1.1.12)代入(1.1.2)式

$$\nabla \cdot \left( \epsilon \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) + \nabla \cdot (\epsilon \nabla \psi) = -\rho \quad (1.1.13)$$

(1.1.13)中的第一项应为  $\epsilon \frac{\partial \nabla \cdot \mathbf{A}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \cdot \nabla \epsilon$ ，由于  $\mathbf{A}$  矢量的性质， $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ 。对于各向同性均匀的材料， $\nabla \epsilon = 0$ 。则Poisson方程为：

$$\nabla \cdot (\epsilon \nabla \psi) = -\rho \quad (1.1.14)$$

$\rho$  为正电荷密度。在半导体中  $\rho$  应用净电荷密度来代替。

$$\rho = q(p - n + N_d^+ - N_a^-) \quad (1.1.15)$$

$n$ ,  $p$  分别为电子和空穴浓度， $N_d^+$ ,  $N_a^-$  分别为离化施主和离化受主浓度。(1.1.14)可以用于介电常数不相同的异质结器件，因此它是 Poisson 方程的更为一般的形式。在  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}-\text{GaAs}$  异质结器件中，离化施主表示为：<sup>[1.1.16]</sup>

$$N_d^+ = N_d \frac{(N_c/g) \exp(-\Delta E_d/kT)}{n + (N_c/g) \exp(-\Delta E_d/kT)} \quad (1.1.16)$$

其中  $g$  为简并因子， $N_c$  为导带底有效状态密度， $\Delta E_d$  为施主能级与导带底  $E_c$  之差。令

$$N = N_d^+ - N_a^- \quad (1.1.17)$$

对于同一材料的半导体器件，(1.1.14)可写为：

$$\nabla^2 \psi = -\frac{q}{\epsilon} (p - n + N) \quad (1.1.18)$$

### § 1.1.2 电流连续性方程

由Maxwell方程组中的(1.1.3)式，便可以导出在半导体中的电流连续性方程。即

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (1.1.19)$$

在半导体器件中，传导电流密度由电子电流密度和空穴电流密度组成，即：

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p \quad (1.1.20)$$

由(1.1.19)式可得

$$\nabla \cdot (\mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p) + q \frac{\partial p}{\partial t} - q \frac{\partial n}{\partial t} = 0 \quad (1.1.21)$$

该式说明单位体元中流出的电流等于单位时间内该体元中净电荷密度的减少。改写(1.1.21)得：

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_p + q \frac{\partial p}{\partial t} = - \left( \nabla \cdot \mathbf{J}_n - q \frac{\partial n}{\partial t} \right) \quad (1.1.22)$$

(1.1.22)式是将(1.1.21)式中的电子项和空穴项分开得到的，其物理含义十分明确：单位时间，单位体元内流出以及增加的正电荷数等于单位时间，单位体元内流入以及减少的负电荷数。构成这一事实的原因在于在该体元内存在着增加或减少电荷的“源”或“漏”。这就是存在着产生或复合中心。定义 $R$ 为单位时间，单位体积内复合的电子和空穴对数，那么应有：

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_p + q \frac{\partial p}{\partial t} = -qR \quad (1.1.23)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_n - q \frac{\partial n}{\partial t} = qR \quad (1.1.24)$$

上式中的 $-R$ 表示产生率， $R$ 表示复合率。(1.1.23)表示单位时间，单位体积内流出以及增加的空穴数等于单位时间，该体积内产生的电荷数。(1.1.24)和(1.1.23)在实质上有着相似的解释。(1.1.23)和(1.1.24)就是常用的电流连续性方程。

方程中涉及到 $\mathbf{J}_n$ ， $\mathbf{J}_p$ ， $p$ ， $n$ ， $R$ 一些物理量，这些物理量和哪些因素有关，它们的解析表达式是什么，这些问题对于“模拟”来说都是十分重要的问题，以后将一一讨论到。 $\mathbf{J}_n$ 和 $\mathbf{J}_p$ 均由电子和空穴的输运规律来确定，首先研究电子和空穴的输运方程是很必要的。

### § 1.1.3 载流子的输运方程

载流子的输运问题是一个较为复杂的问题。为了不失一般性，可将载流子的电流密度写为下述形式：

$$\mathbf{J}_n = -qn\mathbf{v}_n \quad (1.1.25)$$

$$\mathbf{J}_p = qp\mathbf{v}_p \quad (1.1.26)$$

它们分别为载流子浓度，载流子的平均漂移速度以及电荷的乘积。由于电子电流密度的方向和电子漂移速度方向相反，所以(1.1.25)中加了一个负号。

本节的中心内容将研究漂移速度，电场以及载流子浓度之间的关系。还将研究在什么条件下波尔兹曼方程退化成经典的载流子输运方程。这对于研究小尺寸器件的特性来说是一个基本的问题。

## 一、波尔兹曼方程

波尔兹曼方程是波尔兹曼在1872年为建立一个气体的非平衡态分布函数而创立的。以后此方程被洛伦兹用在固体中求金属中电子的非平衡分布函数。现代在研究亚微米尺寸的器件中，特别是在研究化合物半导体材料的器件中被广泛采用。它是一个极为有用的方程。

设在相空间中的电子分布函数为 $f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, t)$ ，其中 $\mathbf{X} = (x, y, z)^T$ 为位置坐标， $\mathbf{K} = (k_x, k_y, k_z)^T$ 为动量坐标， $t$ 为时间。分布函数 $f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, t)$ 是一个在七维空间中的函数。分布函数确定着单位相空间体积的电子浓度。 $f_v$ 在整个动量空间上积分为电子浓度 $n(\mathbf{X}, t)$

$$\frac{1}{4\pi^3} \int_{\mathbf{K}} f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, t) d\mathbf{K} = n(\mathbf{X}, t) \quad (1.1.27)$$

该式又是一种对分布函数 $f_v$ 进行归一化的形式。

如果在某载流子系统中，下述假设成立：1) 单一粒子近似成立，即载流子之间的相互作用较弱。2) 散射几率和外力无关，把总作用力分解成互相独立的外力和内力分量。3) 在与电子运动的波包物理尺寸可以相比拟的长度上外力几乎为常数。4) 散射（或碰撞）是瞬时的，它需要的时间比粒子运动的平均时间小得多。这时载流子的输运规律可以用波尔兹曼方程(BTE)来描述。

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} + \mathbf{u}_v \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_v + \frac{\mathbf{F}_{v,e}}{h} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_v = \left( \frac{\partial f_v}{\partial t} \right)_c \quad (1.1.28)$$

其中 $\mathbf{u}_v$ 为群速

$$\mathbf{u}_v = \frac{d\mathbf{X}}{dt} \quad (1.1.29)$$

$\mathbf{F}_{v,e}$ 为外力，在只考虑电场力的作用时

$$\mathbf{F}_{v,e} = \mp q\mathbf{e} \quad (1.1.30)$$

“-”和“+”号分别用于电子和空穴。 $\left( \frac{\partial f_v}{\partial t} \right)_c$ 表示由于散射而引起的分布函数的变化。

$$\left( \frac{\partial f_v}{\partial t} \right)_c = \int_{\mathbf{K}'} \{ f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, t) [1 - f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}', t)] \cdot S_v(\mathbf{K}, \mathbf{K}') - f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}', t) [1 - f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, t)] \cdot S_v(\mathbf{K}', \mathbf{K}) \} d\mathbf{K}' \quad (1.1.31)$$

$S_v(\mathbf{K}, \mathbf{K}')$ 为单位时间内电子从 $\mathbf{K}$ 态被散射到 $\mathbf{K}'$ 态的几率， $S_v(\mathbf{K}', \mathbf{K})$ 为单位时间内电子从 $\mathbf{K}'$ 态被散射到 $\mathbf{K}$ 态的几率。(1.1.28)指出：由散射引起的分布函数随时间的变化率由三部分构成：分布函数随时间的瞬态变化（即 $\frac{\partial f_v}{\partial t}$ 项）；由外场引起的分布函数的变化（即 $\frac{\mathbf{F}_{v,e}}{h} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f_v$ 项）；由温度场引起的分布函数的变化（即 $\mathbf{u}_v \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_v$ 项）。

(1.1.28)方程是一个在七维空间中的积分微分方程，解这一方程是极其困难的。在具体求解时，往往引入许多近似假设。一般地说，它没有解析解。在三十年代苏联有人在这方面做了许多工作。从那以后，越来越多的人在理论和实验方面做了研究工作。他们利用波尔兹曼方程来研究高场输运条件下电子和声子，载流子之间以及载流子和杂

质之间的相互作用；研究电子器件中的热电子效应，速度过冲效应等<sup>[1.5]</sup>。为了求解波尔兹曼方程，必须认识到比较现实和强有力的方法是数值解法，H. Rees采用迭代逼近技术得到成功<sup>[1.6, 1.7]</sup>。1970年，W. Fawcett等人把 Monte Carlo 方法应用于解波尔兹曼方程从而得出GaAs中电子的传输特性<sup>[1.8]</sup>。Monte Carlo方法在解波尔兹曼方程方面的应用越来越受到人们的注意。

再引进两个假设(1.1.28)可以进一步简化。1) 散射是弹性的，因此  $K = K'$ ，分布函数和  $K$  的方向无关， $f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}) = f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}')$ 。2) 外场为弱场，分布函数偏离平衡态的分布不大。这时有

$$\left(\frac{\partial f_v}{\partial t}\right)_c = -\frac{f_v - f_{v0}}{\tau_v} \quad (1.1.32)$$

其中  $f_{v0}$  为平衡态的分布函数， $\tau_v$  为弛豫时间。

$$\frac{1}{\tau_v} = \int_{K'} S_v(\mathbf{K}, \mathbf{K}') (1 - \cos\theta_{KK'}) d\mathbf{K}' \quad (1.1.33)$$

$\theta_{KK'}$  为  $\mathbf{K}$  和  $\mathbf{K}'$  之间的夹角。

由于  $\tau_v$  是和散射有关的一个常数，所以和内部散射有关的  $\left(\frac{\partial f_v}{\partial t}\right)_c$  由一个积分式变成了一个简单的函数式子。这一变化使波尔兹曼方程(1.1.28)从积分微分方程变成了一个微分方程。将(1.1.32)代回(1.1.28)得：

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}_{ve}}{h} \cdot \nabla_{\mathbf{K}} f_v + \mathbf{u}_v \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_v = -\frac{f_v - f_{v0}}{\tau_v} \quad (1.1.34)$$

(1.1.34)是一个常用到的方程。在  $t=0$  时刻，假定全部除去各种外力的影响，并且  $f_v$  在空间上是均匀的，则和外力有关的项将等于零。

$$\frac{\mathbf{F}_{ve}}{h} \cdot \nabla_{\mathbf{K}} f_v + \mathbf{u}_v \cdot \nabla_{\mathbf{x}} f_v = 0 \quad (1.1.35)$$

此时分布函数的变化只是由内部散射引起。(1.1.35)代入(1.1.34)得到

$$\frac{\partial f_v}{\partial t} = -\frac{f_v - f_{v0}}{\tau_v} \quad (1.1.36)$$

该方程的解为：

$$f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, t) = f_{v0}(\mathbf{X}, \mathbf{K}) + [f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, 0) - f_{v0}(\mathbf{X}, \mathbf{K})] \cdot e^{-t/\tau_v} \quad (1.1.37)$$

可见，在上述这种严格的条件下的波尔兹曼方程的解比较简单。由(1.1.37)式， $t=0$  时  $f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, t) = f_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}, 0)$ 。 $t = \tau_v$  时，即经过弛豫时间  $\tau_v$  后，分布函数基本上接近于平衡态的数值。

## 二、经典输运方程

实际上，经典输运方程只是波尔兹曼方程的一个特例。这里将从波尔兹曼方程导出经典输运方程并给出几种常见的输运方程的表达式。这样将有助于了解经典输运方程的应用条件和使用范围。

在仅仅由于外部因素，例如外场和温度等引起粒子系统分布函数发生变化时，下述关系成立：

$$\left| \frac{\partial f_v}{\partial t} \right| \ll \left| \frac{F_{ve}}{h} \cdot \nabla_K f_v + \mathbf{u}_v \cdot \nabla_X f_v \right| \quad (1.1.38)$$

这时波尔兹曼方程被简化为:

$$\frac{F_{ve}}{h} \cdot \nabla_K f_v + \mathbf{u}_v \cdot \nabla_X f_v = -\frac{f_v - f_{v0}}{\tau_v} \quad (1.1.39)$$

对于分布函数偏离平衡态分布函数不大的弱场情形,  $\nabla_K f_v \approx \nabla_K f_{v0}$ ,  $\nabla_X f_v \approx \nabla_X f_{v0}$ , 则(1.1.39)为

$$-\frac{f_{v1}}{\tau_v} \approx \frac{F_{ve}}{h} \cdot \nabla_K f_{v0} + \mathbf{u}_v \cdot \nabla_X f_{v0} \quad (1.1.40)$$

其中

$$f_{v1} = f_v - f_{v0} \quad (1.1.41)$$

在半导体中, 用费米分布作为描述平衡态的载流子分布函数, 即

$$f_{n0}(\mathbf{X}, \mathbf{K}) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E_c(\mathbf{X}, \mathbf{K}) - E_{Fn}(\mathbf{X})}{kT(\mathbf{X})}\right]} \quad (1.1.42)$$

$$f_{p0}(\mathbf{X}, \mathbf{K}) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E_{Fp}(\mathbf{X}) - E_v(\mathbf{X}, \mathbf{K})}{kT(\mathbf{X})}\right]} \quad (1.1.43)$$

其中  $E_{Fn}(\mathbf{X})$  和  $E_{Fp}(\mathbf{X})$  分别为电子和空穴的费米能级,  $E_c(\mathbf{X}, \mathbf{K})$  和  $E_v(\mathbf{X}, \mathbf{K})$  分别为导带和价带中的能量,  $k$  为波尔兹曼常数,  $T(\mathbf{X})$  为绝对温度。

在单能谷、抛物线型能带且各向同性的假设条件下,  $E_c(\mathbf{X}, \mathbf{K})$  和  $E_v(\mathbf{X}, \mathbf{K})$  分别可以写为:

$$E_c(\mathbf{X}, \mathbf{K}) = E_{c0} - q\psi(\mathbf{X}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{K} \cdot \mathbf{K}}{2m_n^*} \quad (1.1.44)$$

$$E_v(\mathbf{X}, \mathbf{K}) = E_{v0} - q\psi(\mathbf{X}) - \frac{\hbar^2 \mathbf{K} \cdot \mathbf{K}}{2m_p^*} \quad (1.1.45)$$

$E_{c0}$  和  $E_{v0}$  分别为导带和价带顶能量,  $m_n^*$  和  $m_p^*$  分别为电子和空穴的有效质量,  $g\psi(\mathbf{X})$  为电位分布引起能量改变的数值。利用(1.1.42)至(1.1.45)式, 分别可以求得:

$$\nabla_X f_{n0} = f_{n0}(1 - f_{n0}) \nabla_X \left( \frac{q\psi + E_{Fn}}{kT} \right) \quad (1.1.46)$$

$$\nabla_X f_{p0} = -f_{p0}(1 - f_{p0}) \nabla_X \left( \frac{q\psi + E_{Fp}}{kT} \right) \quad (1.1.47)$$

$$\nabla_K f_{v0} = -f_{v0}(1 - f_{v0}) \cdot \frac{\hbar^2 \mathbf{K}}{m_v^* kT} \quad (1.1.48)$$

由于

$$F_{ve} = q\nabla_X \psi(\mathbf{X}) \quad (1.1.49)$$

$$\mathbf{u}_v = \hbar \mathbf{K} / m_v^* \quad (1.1.50)$$

将(1.1.46)至(1.1.50)代入(1.1.40), 并假定  $\nabla_X T = 0$ , 可得:

$$f_n = f_{n0} - \tau_N f_{n0}(1 - f_{n0}) \frac{\mathbf{u}_n}{kT} \cdot \nabla_X E_{Fn} \quad (1.1.51)$$



$$f_p = f_{p0} + \tau_p f_{p0} (1 - f_{p0}) \frac{\mathbf{u}_p}{kT} \cdot \nabla_X E_{Fp} \quad (1.1.52)$$

电流密度应等于群速和分布函数之积在动量空间上积分

$$\mathbf{J}_n = -\frac{q}{4\pi^3} \int_{V_K} \mathbf{u}_n \cdot f_n \cdot d\mathbf{K} \quad (1.1.53)$$

$$\mathbf{J}_p = \frac{q}{4\pi^3} \int_{V_K} \mathbf{u}_p \cdot f_p \cdot d\mathbf{K} \quad (1.1.54)$$

将(1.1.51)代入(1.1.53)后

$$\mathbf{J}_n = -\frac{q}{4\pi^3} \int_{V_K} \mathbf{u}_n \cdot \left[ f_{n0} - \tau_n f_{n0} (1 - f_{n0}) \frac{\mathbf{u}_n}{kT} \cdot \nabla_X E_{Fn} \right] \cdot d\mathbf{K}$$

其中 $f_{n0}$ 是 $\mathbf{K}$ 的偶函数， $\mathbf{u}_n$ 在 $\mathbf{K}$ 空间中为奇函数，因此

$$\int_{V_K} \mathbf{u}_n \cdot f_{n0} \cdot d\mathbf{K} = 0$$

于是

$$\mathbf{J}_n = \frac{q}{4\pi^3} \int_{V_K} \mathbf{u}_n \cdot \tau_n f_{n0} (1 - f_{n0}) \cdot \frac{\mathbf{u}_n}{kT} \cdot \nabla_X E_{Fn} \cdot d\mathbf{K}$$

定义

$$E_{Fn} = -q\varphi_n \quad (1.1.55)$$

式中 $\varphi_n$ 为电子的费米势。

$$n = \frac{1}{4\pi^3} \int_{V_K} f_{n0} \cdot d\mathbf{K} \quad (1.1.56)$$

$$\langle \tau_n \rangle = \frac{m_n^*}{kT} \frac{\int_{V_K} \mathbf{u}_n \cdot \mathbf{u}_n \tau_n f_{n0} (1 - f_{n0}) d\mathbf{K}}{\int_{V_K} f_{n0} d\mathbf{K}} \quad (1.1.57)$$

则

$$\mathbf{J}_n = -\frac{q^2 n \nabla \varphi_n}{m_n^*} \langle \tau_n \rangle \quad (1.1.58)$$

定义迁移率 $\mu_n$ 为：

$$\mu_n = q \langle \tau_n \rangle / m_n^* \quad (1.1.59)$$

(1.1.58)式化简为

$$\mathbf{J}_n = -q\mu_n n \nabla \varphi_n \quad (1.1.60)$$

同理可以求得

$$\mathbf{J}_p = -q\mu_p p \nabla \varphi_p \quad (1.1.61)$$

其中

$$\mu_p = q \langle \tau_p \rangle / m_p^* \quad (1.1.62)$$

$$\langle \tau_p \rangle = \frac{m_p^*}{kT} \frac{\int_{V_K} \mathbf{u}_p \cdot \mathbf{u}_p \tau_p f_{p0} (1 - f_{p0}) d\mathbf{K}}{\int_{V_K} f_{p0} d\mathbf{K}} \quad (1.1.63)$$

$\varphi_p$ 为空穴的费米势。(1.1.60)和(1.1.61)就是要求的经典输运方程。由方程可见,当迁移率和载流子浓度视为常量时,电流密度和费米势的梯度成正比。为了将该方程改写成漂移电流密度和扩散电流密度项之和的形式,有必要利用载流子浓度的表达式。由载流子浓度的波尔兹曼分布

$$n = n_i \exp\left[\frac{q}{kT}(\psi - \varphi_n)\right] \quad (1.1.64)$$

$$p = n_i \exp\left[\frac{q}{kT}(\varphi_p - \psi)\right] \quad (1.1.65)$$

其中 $n_i$ 为本征载流子浓度。在高掺杂条件下,载流子浓度应由费米分布来描述。这时数学处理将变得十分复杂。以后会讲到,采用有效本征载流子浓度概念后,可以用波尔兹曼分布来描述高掺杂时的载流子浓度分布,这给问题的处理带来很大方便。用 $n_{i,e}$ 表示有效本征载流子浓度,(1.1.64)和(1.1.65)变为:

$$n = n_{i,e} \exp\left[\frac{q}{kT}(\psi - \varphi_n)\right] \quad (1.1.66)$$

$$p = n_{i,e} \exp\left[\frac{q}{kT}(\varphi_p - \psi)\right] \quad (1.1.67)$$

从上述两式可得

$$\varphi_n = \psi - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{n}{n_{i,e}}\right) \quad (1.1.68)$$

$$\varphi_p = \psi + \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{p}{n_{i,e}}\right) \quad (1.1.69)$$

将(1.1.68)、(1.1.69)代入(1.1.60)、(1.1.61)后可得:

$$J_n = q\mu_n n \mathcal{E} + qD_n \nabla n - q\mu_n n \left(\frac{kT}{q} \nabla \ln n_{i,e}\right) \quad (1.1.70)$$

$$J_p = q\mu_p p \mathcal{E} - qD_p \nabla p + q\mu_p p \left(\frac{kT}{q} \nabla \ln n_{i,e}\right) \quad (1.1.71)$$

其中  $\mathcal{E} = -\nabla\psi$ ,  $D_v = \frac{kT}{q}\mu_v$  (爱因斯坦关系)。上述两方程中的最后一项代表由于本征载流子度浓度梯度而引起的电流。当  $\nabla \ln n_{i,e} = 0$  时,该项引起的电流也就等于零。(1.1.70)和(1.1.71)方程的优越性在于它们可以处理高掺杂条件下的载流子输运问题<sup>[1.1.1]</sup>。为了运用方便,定义有效电场强度为:

$$\mathcal{E}_n = \mathcal{E} - \frac{kT}{q} \nabla \ln n_{i,e} \quad (1.1.72)$$

$$\mathcal{E}_p = \mathcal{E} + \frac{kT}{q} \nabla \ln n_{i,e} \quad (1.1.73)$$

将有效电场 $\mathcal{E}_n$ 和 $\mathcal{E}_p$ 代入(1.1.70)和(1.1.71)后得:

$$J_n = q\mu_n n \mathcal{E}_n + qD_n \nabla n \quad (1.1.74)$$

$$J_p = q\mu_p p \mathcal{E}_p - qD_p \nabla p \quad (1.1.75)$$

在 $\nabla \ln n_{i,e} = 0$ 时(1.1.74)和(1.1.75)变成最常见的表达式: