

丘成桐中学科学奖（物理）申报材料

姓名：苗辰飞

学生所属学校的省份/州：上海市上海中学

国别：中国

指导老师姓名：李向亭，许建丽

报告标题：不同拓扑结构下半导体电阻率特性研究

不同拓扑结构下半导体电阻率特性研究

苗辰飞
 上海市上海中学

摘要：范德堡方法是测量无孔半导体薄层材料电阻率的经典方法，但针对新型有孔半导体材料，如何测量其电阻率目前尚无成熟方法。我的科创活动从有孔半导体薄层材料的电学建模入手，研究开孔对半导体材料拓扑结构和范德堡函数的影响。发现薄层材料开孔后，拓扑结构从面变成环。面拓扑结构中范德堡函数恒为一，即经典的范德堡方程。环拓扑结构中范德堡函数介于零和一之间，经典的范德堡方程不再成立。将经典范德堡方程右侧的常数一（对应面拓扑结构范德堡函数）泛化为薄层材料的范德堡函数 F ，形成拓展范德堡方程：

$$e^{-\frac{\pi h}{\rho} R_x} + e^{-\frac{\pi h}{\rho} R_y} = F$$
，就可将其应用范围拓展到任何拓扑结构的薄层材料。

研究发现有孔半导体薄层材料的开孔特性决定其范德堡函数：薄层材料范德堡函数随内部开孔面积的增大呈现指数衰减；在开孔面积相同的情况下，开孔位置越靠近材料中心，对半导体材料范德堡函数的影响越明显。进一步将孔大小和开孔位置对范德堡函数的影响规律进行定量归纳整理，形成一种便于理解和快捷计算的指数经验公式。

在有孔薄层半导体材料开孔特性和其范德堡函数对应关系研究的基础上，拓展经典的范德堡方法，建立了一种测量有孔半导体薄层材料电阻率的新方法：

1. 首先根据待测有孔薄层材料开孔特性运用电学模型或者经验公式计算出有孔薄层材料的范德堡函数 F ；
2. 和经典范德堡法一样，采用四针脚测量法获得两个范德堡电阻 R_x 和 R_y ；
3. 最后将 F 、 R_x 和 R_y 以及材料厚度 h 代入拓展范德堡方程，即可解得开孔薄层材料得电阻率 ρ 。

实验验证发现该方法电阻率测量误差在 0.5% 以内，实现了有孔薄层材料电阻率的精确测量。

同时上述薄层材料开孔特性和其电阻率的对应关系也可以反向应用，从理论上提供了一种通过电阻率测量分析薄层材料微观结构的新思路。

关键词：开孔薄层材料，孔特性，电阻率测量，拓展范德堡法

目录

一、引言	1
二、开孔半导体薄层材料等效电学模型的建立	1
1 有孔薄层材料范德堡函数的引入	1
2 有孔薄层材料的混合电阻网格等效电学模型	2
3 混合电阻网络范德堡函数计算及其临界网格密度	4
三、开孔大小对薄层半导体材料范德堡函数的影响规律研究	6
四、开孔位置对半导体薄层材料范德堡函数的影响研究	7
五、孔大小、开孔位置对半导体薄层材料范德堡函数综合影响研究	8
六、拓展范德堡方法测量有孔薄层材料电阻率	10
七、总结与展望	10
参考文献	11
致谢	12
学术诚信声明	13

一、引言

集成电路由大量薄片半导体元件构成,是现代信息处理的基础。半导体薄片材料的电阻率决定了半导体元件的电学性能和以其为基础的集成电路的信息处理能力,准确测量半导体薄片材料的电阻率成为 IT 产业的关键性技术之一。范德堡法只需通过两次四针脚测量,就可以准确计算出任意形状的无孔半导体薄层的电阻率,消除了测量针脚位置以及接触电阻对测量的干扰,简单快捷,因此成为半导体薄层电阻率测量的经典方法。随着信息产业的高速发展,新型有孔薄片半导体薄层材料相继出现并得到广泛应用。但经典的范德堡法只适应于无孔薄层材料电阻率测量,对于有孔半导体材料电阻率的测量,尚无成熟的方法。

针对有孔薄片半导体材料,本文尝试从电学等效模型入手,通过模型模拟结合实验检测,研究薄层半导体材料开孔大小、开孔位置对其范德堡函数的影响规律,建立薄层材料开孔几何特性和其范德堡函数的对应关系,从而拓展范德堡法,开发出一种测量有孔薄片半导体材料导电性能的新方法。

二、开孔半导体薄层材料等效电学模型的建立

1 有孔薄层材料范德堡函数的引入

对于任意形状的无孔半导体薄层材料,在其边缘任取四点,取其中相邻两点注入电流,在剩余两点检测电压差,将电压和电流的比值记为 R_x ;然后交换两组针脚,再检测一次,获得另一个电阻值 R_y 。容易证明,这两个电阻值满足范德堡方程^[1]:

$$e^{-\frac{\pi h}{\rho} R_x} + e^{-\frac{\pi h}{\rho} R_y} = 1 \quad (1)$$

根据方程 1,在已知薄层半导体厚度 h ,测量获得电阻值 R_x, R_y 的情况下可以轻易出电阻率 ρ ,这就是经典范德堡方法测量薄层材料电阻率的原理。

但是对于有孔半导体薄层,拓扑结构从面变成环,不能通过保角变换将环映射为半平面,因此针对有孔半导体薄层材料,范德堡方程不再成立。为扩展范德堡方法使其适用于有孔薄片半导体材料,定义范德堡函数 $F(R_x, R_y)$ 如下:

$$F(R_x, R_y) = e^{-\frac{\pi h}{\rho} R_x} + e^{-\frac{\pi h}{\rho} R_y} \quad (2)$$

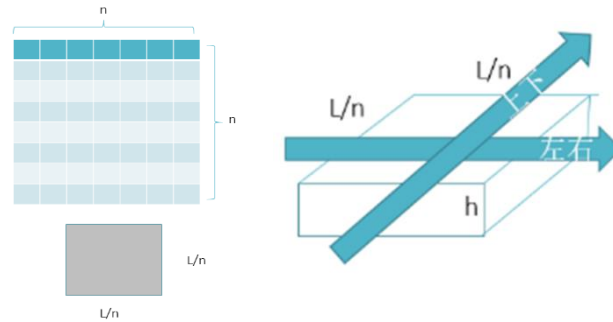
其方程形式为 $e^{-\frac{\pi h}{\rho} R_x} + e^{-\frac{\pi h}{\rho} R_y} = F$, 称为拓展范德堡方程。

对于无孔半导体薄层材料, 范德堡函数 $F(R_x, R_y)$ 等于 1, 拓展范德堡方程回归到经典的范德堡方程; 对于有孔半导体薄层材料, 范德堡函数将不再恒等于 1, 其具体取值取决于材料的开孔几何特性。

下面我们将尝试从薄层材料导电性能的等效数学模型入手, 结合模型分析和实验验证, 建立起薄层材料开孔几何特性和其范德堡函数的对应关系, 从而根据薄层材料中孔拓扑特性直接计算出其范德堡函数, 带入拓展范德堡方程, 采用和经典范德堡法类似的思路, 计算获得开孔薄层材料的电阻率。

2 有孔薄层材料的混合电阻网络等效电学模型

边长为 L 的正方形导电薄层材料可以分成 $n \times n$ 个小的正方形导体单元格, 如图 1A 所示。每个小单元格可以看成是一个边长为 L/n 的方块电阻元。



AB

图 1 薄层导电材料电学分析示意图

根据微分思想, 当 n 足够大时, 对应方块电阻微元足够小, 可以近似认为电流只以垂直于微元边线的方向均匀通过电阻微元(和微元边线呈一定夹角的电流可以投影分解到两个互相垂直的边线方向), 即每个方块电阻微元中的电流只有上下、左右两个方向(如图 1B), 对应方块电阻微元可以用上下和左右两个互相垂直方向的方向电阻来表示。考虑到方块电阻微元的对称性, 上下和左右两个方向的电阻相等。

方块电阻微元在左右方向的电阻定义为在方块电阻微元的左侧面均匀注入电流, 在右侧面均匀引出电流时对应的电阻值。因此方块电阻微元上下和左右两个方向电阻的计算方法如下式所示:

$$R_{上下} = R_{左右} = \frac{\rho \frac{L}{n}}{\frac{L}{n}h} = \frac{\rho}{h} \quad (3)$$

因此, 正方形薄层材料可以看作是由 $n \times n$ 个方向电阻等于 $\frac{\rho}{h}$ 的方块电阻微元所构成组合体。

为模拟方块薄层材料的导电性能, 引入一个 $n \times n$ 的导体网格, 网格中每一根线段代表一个阻值为 R 的单位电阻 (图 2A)。考虑到网格中每一个电阻都同时属于两个相邻的小单元格, 所以每一根电阻可以看作是两个阻值等于 $2R$ 的电阻并联, 这两个 $2R$ 的电阻分别属于共享这个导体棒的两个相邻的导体单元格, 从而将两个相邻导体单元格完全独立出来, 每个导体单元格的电路图如图 2B 所示, 等价于 4 个阻值为 $2R$ 的电阻构成的电阻框。

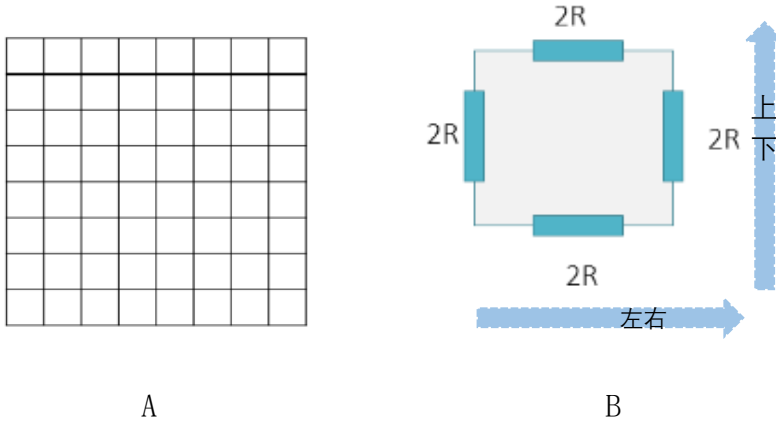


图 2 电阻网络模型示意图

按照方块电阻微元方向电阻的计算方法, 可以获得单元格的方向电阻

$$R_{上下} = R_{左右} = \frac{1}{\frac{1}{2R} + \frac{1}{2R}} = R \quad (4)$$

因此选择阻值等于 $\frac{\rho}{h}$ 的单位电阻构建电阻网络 (图 2A), 当电阻网络足够密时, 其中每一个导体单元格 (图 2B) 和正方形薄层材料 (图 1A) 中位置对应的方块电阻微元 (图 1B) 完全电学等效, 因此密度足够高的导体网格就是正方形薄层材料的电学等效模型, 两者具有完全一致的导电性。

无孔薄层材料的等效电阻网络模型中所有单位电阻都等于 $\frac{\rho}{h}$; 半导体材料中开孔部分由于完全不导电, 可以用由绝缘棒组成的绝缘网格来模拟 (图 3B), 我们把由绝缘棒和单位电阻构成和开孔薄层材料完全等价的电学模型称为混合电

阻网格模型, 二者具有完全一致的导电性能, 因此也必然具有相同的范德堡函数。

3 混合电阻网络范德堡函数计算及其临界网格密度

有孔薄层材料在电学上等价于一个如图 3A 中 $(n-2) \times (n-2)$ 的电阻网格, 其中红色线段代表阻值等于 $\frac{\rho}{h}$ 的单位电阻, 红色区域对应薄层材料中非孔部分; 蓝色虚线代表绝缘棒, 内部蓝色区域代表开孔部分, 周围蓝色绝缘棒则用来隔绝网格的其余外部输入, 模拟四针脚范德堡电阻测量; 黑色实线代表超导棒, 以避免外部导线电阻对范德堡电阻测量的影响。图 3A 的混合电阻网格可以一般化成图 3B 的电阻网格。

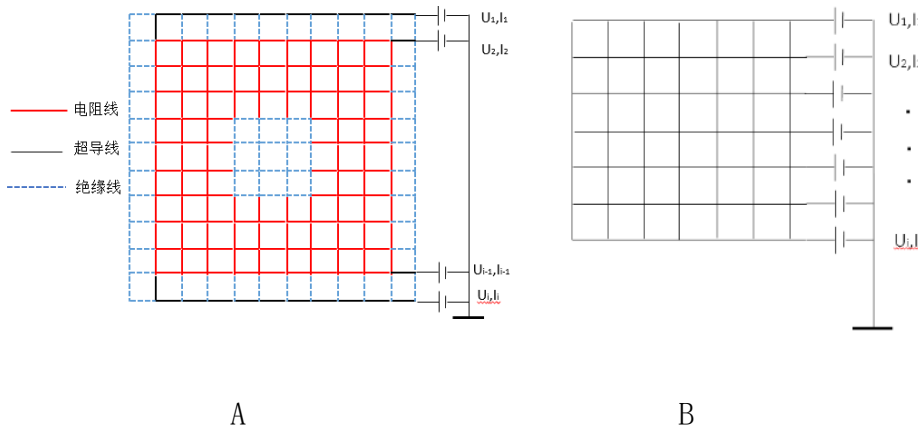


图 3 混合电阻网格模型及其一般化表征

采用向量表达方式, 电阻网络的电流电压关系可以表述为:

$$I = gDU \quad (5)$$

其中 g 为单位电阻电导, $g = \frac{h}{\rho}$. I 和 U 分别为电流向量和电压向量。D 为电导矩阵, D 矩阵代表了电阻网络的性质, 由电阻网络的拓扑结构唯一确定。

李向亭^[2]在 2004 年给出了混合网络的 D 矩阵的逐级构建公式, 如下所示:

$$D'_{ij} = D_{ij} - \frac{D_{i\alpha}D_{\alpha j}}{1 + D_{\alpha\alpha}} \quad (6)$$

添加水平导体棒时:

$$D'_{ij} = D_{ij} - \frac{D_{i\alpha}D_{\alpha j}}{D_{\alpha\alpha}} \quad (7)$$

添加水平绝缘棒时:

$$D'_{ij} = D_{ij} + g(\delta_{\alpha j} - \delta_{\beta j})(\delta_{\alpha i} - \delta_{\beta i}) \quad (8)$$

添加竖直导体棒时:

添加竖直绝缘棒或者水平超导棒时: $D'_{ij} = D_{ij}$ (9)

本文将电导概念推广到网格中任何电棒, 就可以发现单位电阻导体棒的电导都是 g , 绝缘体电导是 0, 超导体电导是无穷大。可以进一步将 D 矩阵计算方法 6-9 简化归并成式 10-11:

添加水平电棒: $D'_{ij} = D_{ij} - \frac{D_{ia}D_{aj}}{g + D_{aa}}$ (10)

添加竖直电棒: $D'_{ij} = D_{ij} + g(\delta_{aj} - \delta_{\beta j})(\delta_{ai} - \delta_{\beta i})$ (11)

按照从左向右构建导体网格, 并随之调整 D 矩阵。通过上述改进可以在保证精度的情况下简化程序, 更便于进行向量并行计算, 提高程序运行速度。

在确定网格的 D 矩阵后, 可以方便的用式 5 计算出网格的电流、电压, 进而计算出网格的范德堡电阻, 进一步获得范德堡函数的取值。

根据上述思路, 利用 MATLAB 软件完成了半导体薄层材料的网格模拟计算程序 (MATLAB 程序见附录)。

由于半导体薄层材料和混合电阻网格电学等价关系的前提条件是混合电阻网络的密度足够大。考虑到无孔薄层材料的范德堡函数理论值为 1, 我们利用上述程序计算了不同密度的纯电阻网格 (无孔薄层材料的电学等价模型) 的范德堡电阻和范德堡函数。结果发现随着电阻网格密度增大, 对应范德堡函数越大, 向理论值 1 无限趋近, 相应计算误差越小, 如图 4 所示。计算发现 100×100 的电阻无孔网格的范德堡函数等于 0.99, 和理论值 1 的误差只有 1%。

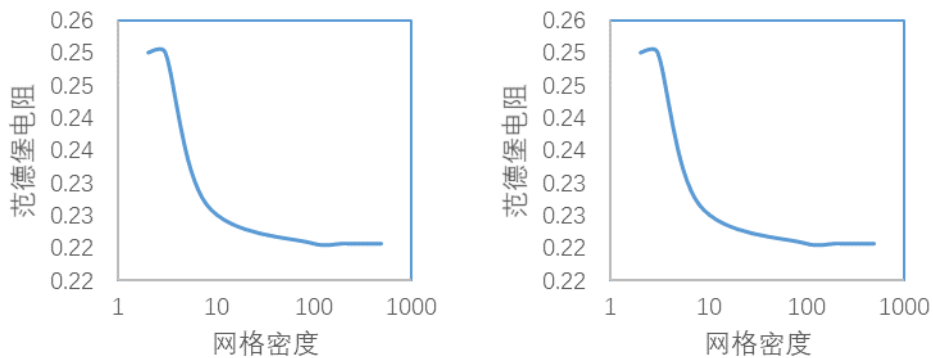


图 4 电阻网格密度和其范德堡函数的对应关系

因此在要求范德堡函数预测误差不超过 1%的前提下, 和薄层材料电学等价

的电阻网络模型的临界密度为 100。大于临界密度的纯电阻网络的范德堡函数和无孔薄层材料的范德堡函数理论值完全吻合, 一方面验证了本文所开发的电学等价模型的正确性, 也初步展示了利用混合电阻网络模型计算半导体薄层材料范德堡函数的可行性。在后续研究中, 统一采用网格密度等于 500 的混合电阻网络作为有孔半导体薄层材料的电学等价模型。

三、开孔大小对薄层半导体材料范德堡函数的影响规律研究

利用 MATLAB 网格模拟程序, 首先计算在正方形的半导体薄层材料的中心挖正方形的孔对范德堡函数的影响, 如图 5A 所示

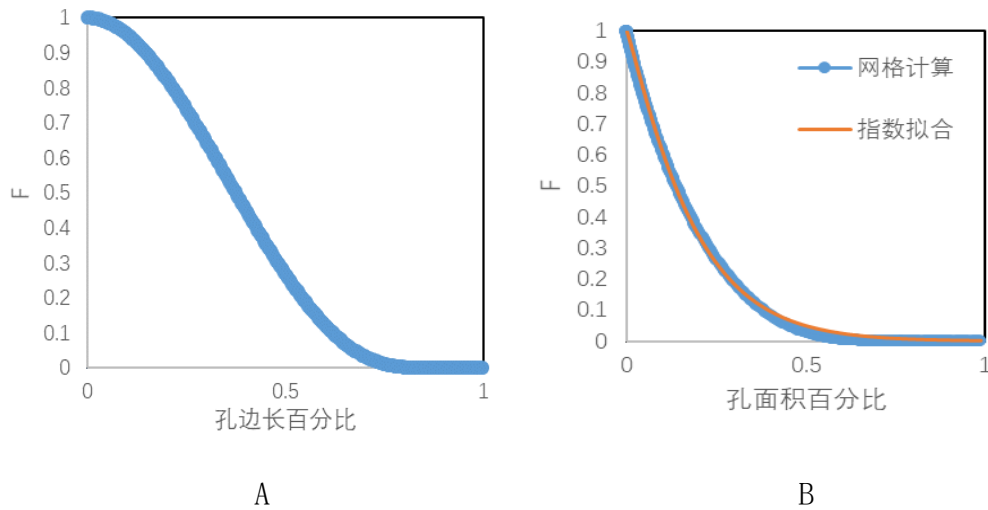


图 5 中心开孔情况下孔大小对半导体薄层材料范德堡函数的影响

从图 5 可以看出当开孔等于零时, 对应无孔半导体薄层, 相应范德堡函数等于 1, 和范德堡方程相吻合。随着开孔的增大, 范德堡函数逐渐降低, 范德堡函数随孔相对面积间呈现明显的指数衰减规律。当开孔占据几何整个半导体薄层时, 范德堡函数降低趋近于零。

经验拟合公式如下:

$$F = e^{-(6.5397 \times S^{1.1225})} \quad (12)$$

从图 5B 可以看出, 上述指数经验公式能够完美拟合孔大小和范德堡函数间的对应关系(如图所示), 可用于中央开孔半导体薄层范德堡函数的计算。

为进一步检测上述中心开孔大小对半导体薄层范德堡函数的影响规律, 设计铝箔验证实验: 利用厚度和电导率已知的铝箔纸, 在中心位置开挖不同大小的正

方形孔洞，采用标准范德堡方式测量计算范德堡函数值，如下图所示。

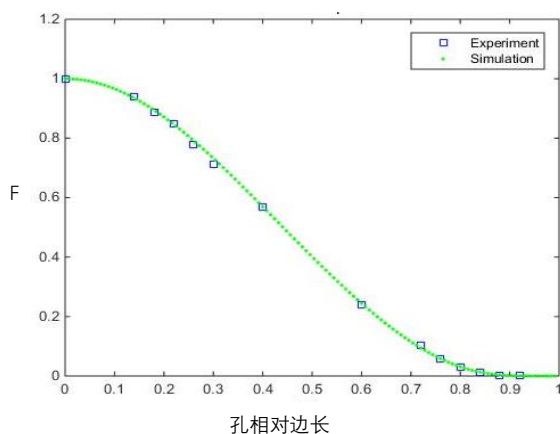


图 6 中间开孔范德堡函数变化规律实验验证

图中方形点代表实验值，绿线为网格模型计算给出的模拟理论值，横轴代表开孔边长和材料边长的比值，即开孔相对边长。分析发现网格模型计算获得范德堡函数模拟理论值和实验结果完全相符高，进一步论证了模型的可靠性。

四、开孔位置对半导体薄层材料范德堡函数的影响研究

和孔大小相对应，孔位置也是薄层材料范德堡函数的可能影响因素之一。孔位置可以用孔中心在两个互相垂直的方向上的偏移量来定量表示：

以正方形网格的正中心最为原点，和正方形边正交的方向建立平面直角坐标系，则中心坐标为零。定义正方形孔在 x , y 两个方向的偏移量为孔中心的横纵坐标与正方形边长一半的比值。可以看出任何开孔在的偏移量都介于-1 到 1 之间。正中心开孔对应的 x 和 y 两个方向的偏移量都为零。偏移量的绝对值越大，越靠近边缘。考虑孔本身具有一定大小，孔中心无法便宜到材料边缘，所以偏移量的绝对值并不能取到 1，而且孔相对面积越大，偏移量绝对值的最大值越小。

为更清晰研究开孔位置对薄层材料范德堡函数的影响规律, 首先研究孔大小固定的情况下范德堡函数随孔位置的变化规律。发现不同孔大小情况下, 薄层材料范德堡函数图像变化趋势基本相同。

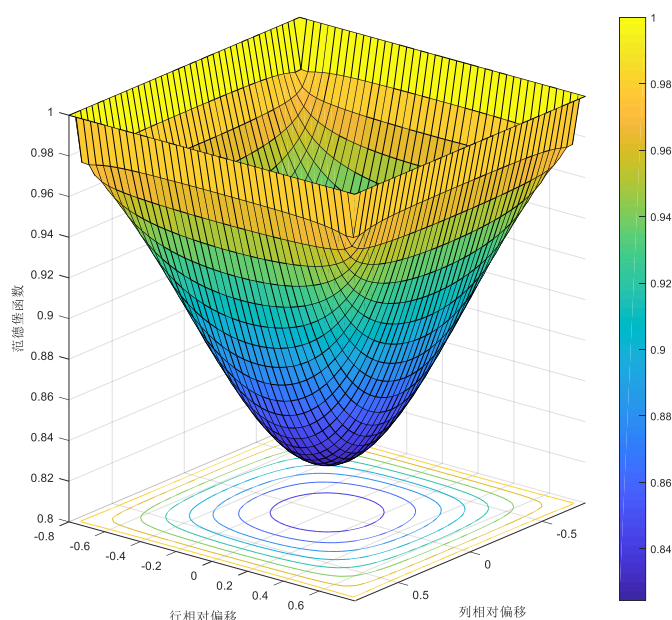


图 6 开孔边长等于薄层材料边长五分之一时孔位置和范德堡函数的对应关系

从图 6 可以看出当开孔位于正方形薄板的中心时范德堡函数的值最小, 孔越接近于边线, 范德堡函数值越大。颜色表征了范德堡函数的值, 越接近黄色, 范德堡函数越大, 越接近紫色, 范德堡函数值越小。

因此在开孔大小固定的情况下, 中央位置开孔对半导体材料的范德堡函数影响较大, 而边缘开孔则对范德堡函数影响较小, 当开孔移动到薄层材料边缘后, 开孔材料就退化为无孔半导体材料, 对应范德堡函数趋向于 1。

五、孔大小、开孔位置对半导体薄层材料范德堡函数综合影响研究

为研究孔大小和开孔位置对半导体薄层材料范德堡函数影响的综合效应, 采用电阻网格模型, 分别模拟计算开孔边长为薄层半导体材料边长 $1/10$ 、 $1/5$ 、 $3/10$ 、 $4/10$ 时, 孔位置偏移对范德堡函数的变化, 如下图所示:

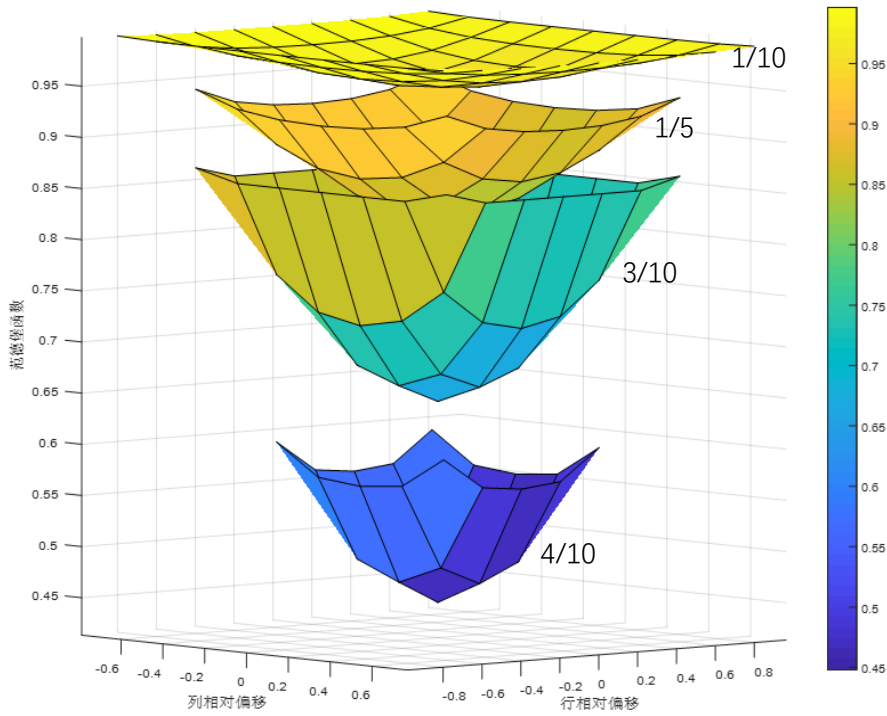


图 7 开孔大小和开孔位置对薄层材料范德堡函数的影响

综合分析图 7 中不同孔大小对应的范德堡函数曲面, 发现孔偏移对应的范德堡函数的变化规律趋势几乎完全相同: 中央开孔对应的范德堡函数最小, 开孔偏移中心越远, 范德堡函数越大, 逐渐向无孔情况下的理论值 1 靠拢。同时开孔越大, 范德堡曲面越低, 对应的范德堡函数越小。

开孔越小, 范德堡函数曲面越平坦, 孔位置对范德堡函数的影响越不显著, 比如当孔面积小于总面积的 10% 时, 范德堡函数由于孔位置带来的差距小于 3%。所以在孔很小的情况下, 时, 小孔可以当作中心孔来处理。

综合正方形孔的大小和孔的位置, 可以得出拟合公式:

$$F = e^{0.1342Q - 6.5397 \times S^{1.1225}} \quad (13)$$

$$\text{其中 } Q = \frac{\sqrt{x \text{ 方向的偏移量}^2 + y \text{ 方向的偏移量}^2}}{\sqrt{2}}$$

六、拓展范德堡方法测量有孔薄层材料电阻率

综合以上开孔对半导体薄层范德堡函数的影响规律研究, 我们开发出了一种测量有孔薄片半导体材料导电性能的新方法, 具体如下:

1. 首先测量半导体薄层材料中开孔的相对面积 S , 孔偏移量 Q 以及材料厚度 h 三个的几何拓扑参数。
2. 带入拟合公式 13 (或者混合网格模型), 求得此时范德堡函数的值 F ;
3. 按照经典范德堡方法测量获得两个范德堡电阻值 R_x 和 R_y
4. 将第二步获得范德堡函数数值以及第三步获得的范德堡电阻代入拓展范德堡方程, 求解方程获得该薄片半导体材料电阻率。

经过开孔铝箔实验验证发现, 这种拓展范德堡方法给出的电阻率和实验值基本吻合。在孔面积不超过半导体薄层总面积的 30% 时, 基于指数经验公式 13 的电阻率测量误差小于 5%, 而基于混合网格模型的电阻率测量误差则进一步降低到 0.5% 以下。

七、总结与展望

针对薄层半导体材料, 建立了一种能够准确模拟其导电性能的混合电阻网格模型。通过模拟计算和实验检测, 发现薄层半导体开孔导致范德堡函数下降, 范德堡函数随开孔相对面积的增大呈现指数衰减; 中央开孔对范德堡函数的影响较大, 边缘开孔时范德堡函数接近无孔情况。建立了根据开孔几何特性计算半导体薄层材料范德堡函数的指数经验公式, 并结合实验验证, 拓展经典的范德堡方法, 形成一种精确测量有孔半导体薄层材料电阻率的新策略。

在后续研究中, 将尝试将方形半导体薄层中进行方形开孔研究获得规律进行拓展, 研究其对于任何开孔形状是否具有有一般性。后续应用方面, 考虑采用半导体薄层的光学影像自动设定孔参数, 利用经验公式 (计算量小, 可以用于各种小型手持测量设备) 或者电阻网格模型 (计算量大, 需要高性能计算机才能实现, 但通用性强, 可以直接应用于任意形状、任意开孔的薄层半导体材料电阻率测量) 直接计算其范德堡函数值, 从而开发有孔半导体薄层材料电阻率自动化测量设备。

另外根据本文发现的薄层材料开孔特性和其电阻率的对应关系, 也提示了一种通过电阻率测量间接分析材料中孔特性等微观拓扑结构的思路。

参考文献

1. I. J Van Der PAUW, A method of Measuring Specific Resistivity and Hall Effect of Discs of Arbitrary Shape. *Philips. Res. Repts*, 1958, 13(1):1-9
2. Xiangting Li and David J. Bergman, A Mixed-Transfer-Matrix Method for Simulating Normal Conductor/Perfect Insulator/Perfect Conductor Random Networks, *Journal of Statistical Physics*, 2004, 117 (3-4) :427-452
3. R Magier , DJ Bergman, Strong-field magnetotransport in a normal conductor/perfect conductor/insulator disordered composite material: Simulations of a discrete model, *Phys. rev. b*, 2011, 83 (17) :173-184

致谢

首先感谢我的班主任许建丽老师, 是她引领我进入物理的殿堂, 对我科创论文的选题提出了许多建设性意见, 并一直支持我进行科创活动。同时, 我要感谢上海交通大学李向亭老师, 他是我物理科创活动的校外导师, 指导我的整个物理科创活动, 帮助我修改实验方案, 指导我数据分析和论文写作。我也要感谢我的爸爸妈妈, 是他们的默默付出, 给我克服困难的运气和力量。最后感谢在课题进行过程中, 给我提出建议, 激发我的灵感、在各自课题研究中携手共进的上海中学科技班的同学们。

学术诚信声明

本参赛团队声明所提交的论文是在老师指导下进行的研究工作及取得的科研成果。尽本团队所知,除了文中特别加以标注和致谢中所罗列的内容外,论文中不包含其他人已经发表或者撰写过的研究成果,没有任何剽窃、抄袭、造假等违反学术道德、学术规范的行为,也没有侵犯任何其他人或组织的科研成果及专利。对本研究所做的任何贡献的同学、老师均已在论文中作了明确的说明并表示了谢意。若有不实之处,本人愿意承担一切相关责任

参赛队员签名:

指导老师签名:

日期: 2018 年 9 月 9 日