中国科学院半导体研究所
Institute of Semiconductors,Chinese Academy of Sciences

后摩尔时代的半导体缺陷与器件物理

邓惠雄

Key Laboratory of Semiconductor Physics and Chip Technologies, Institute of Semiconductors, Chinese Academy of Sciences

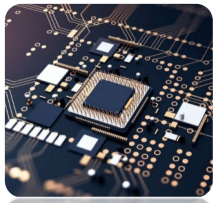
中国科学院半导体研究所半导体芯片物理与技术全国重点实验室

中国科学院大学 2025-06-03

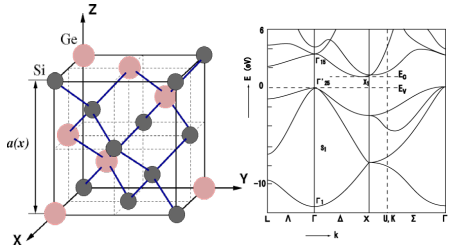
半导体物理是半导体技术的基础与源头

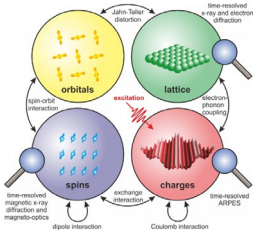
消费/通信　AI/云计算　交通运输　……

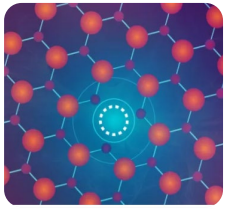
集成电路　光电器件　分立器件　传感器



晶体与能带论　光、电、磁、声　缺陷物理　……

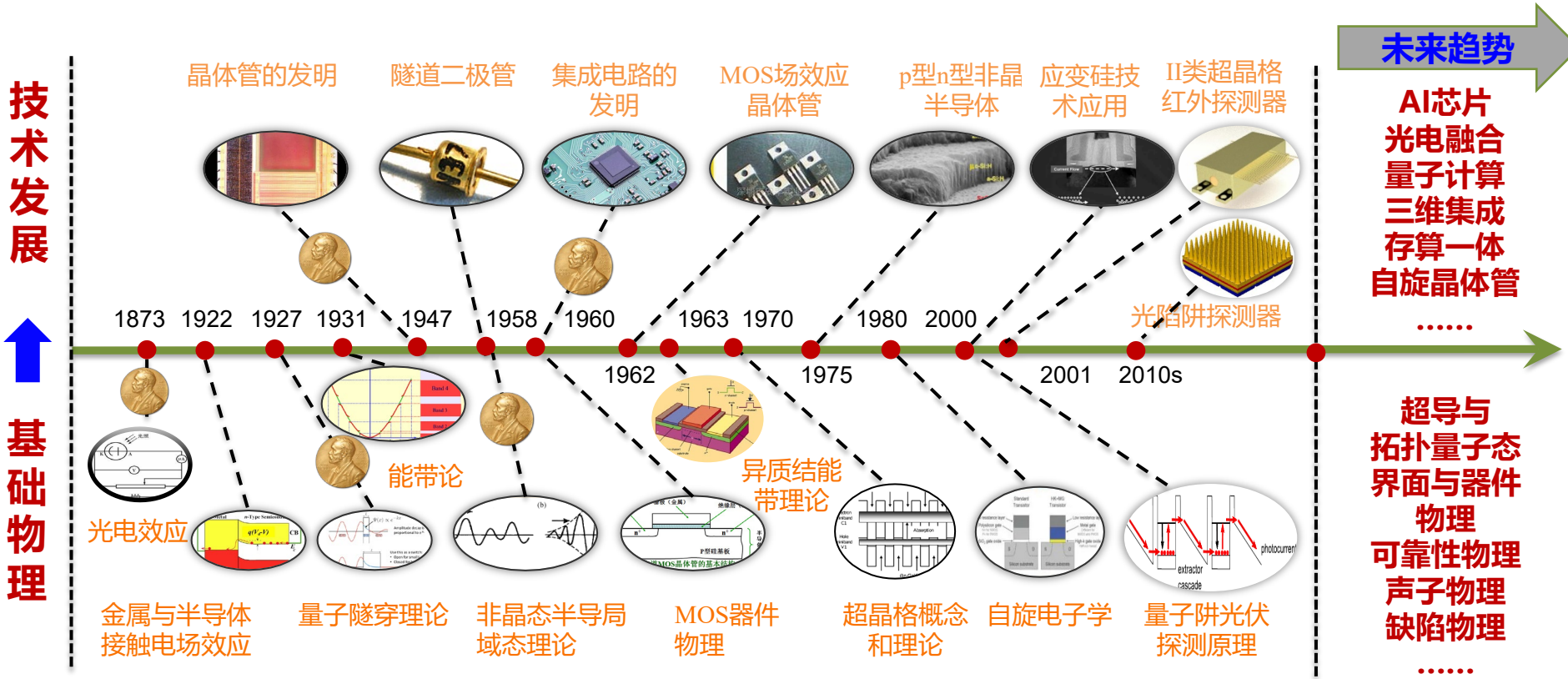






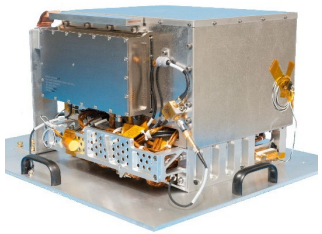
半导体物理发展推动技术的进步

底层物理效应的发现、理解和调控推动了半导体技术的革新迭代！



新原理、新结构、新方法

一台手机背后的9个诺贝尔物理学奖

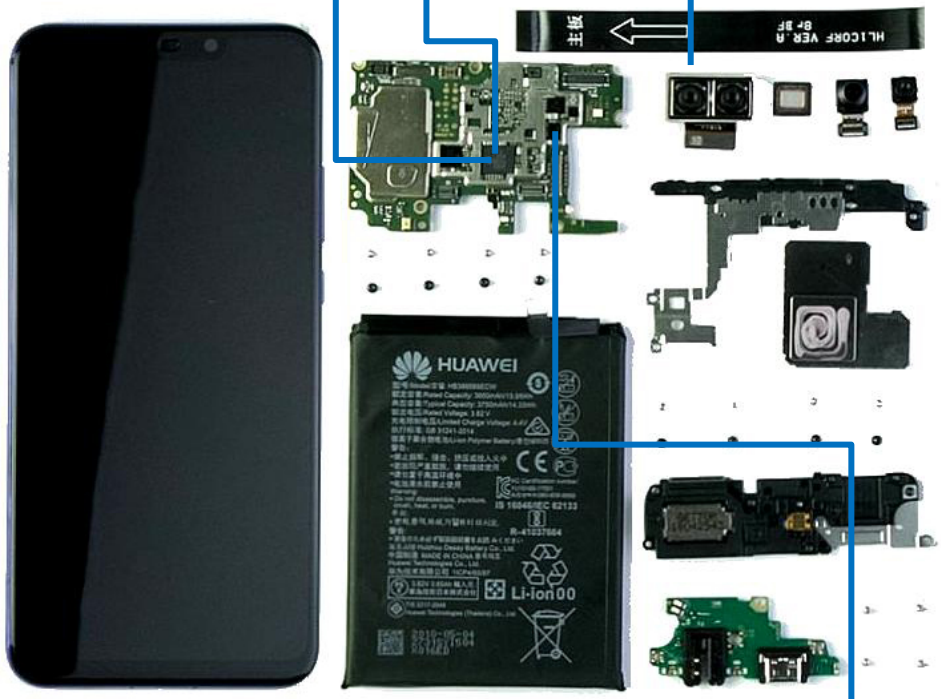


原子钟
1989年物理学奖

晶体管
1956年物理学奖

集成电路
2000年物理学奖

摄像头CCD器件
2009年物理学奖



激光
1964年物理学奖

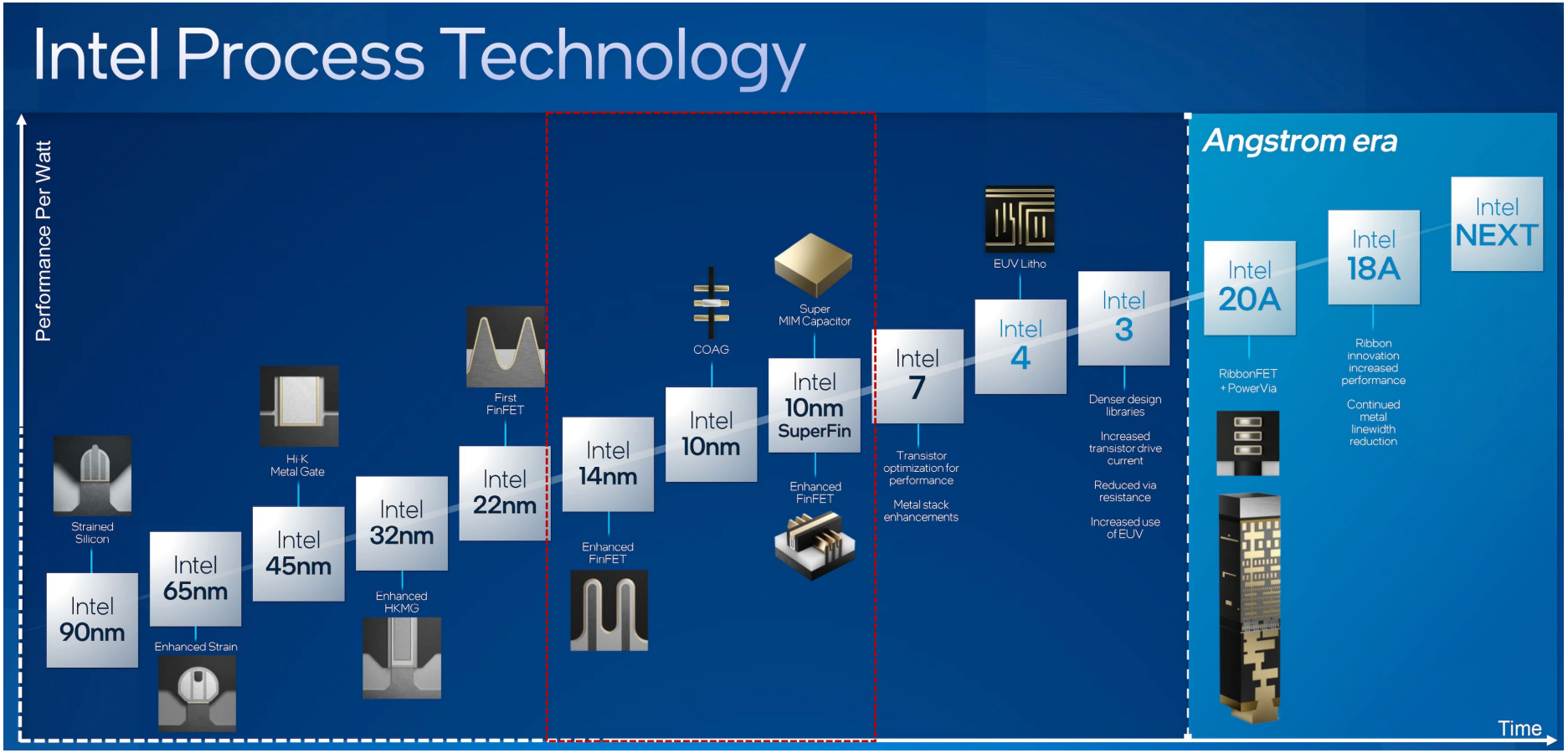
光纤
2009年物理学奖

液晶显示屏
1991年物理学奖

发光二极管
2014年物理学奖

锂电池
2019年化学奖

存储
2007年物理学奖



后摩尔面临新挑战

- **小尺寸** （原子尺度涨落，单原子效应、精准掺杂）
- **量子效应** （相干性，局域束缚，量子隧穿）
- **新沟道材料** （锗、III-V、二维材料、碳纳米管）
- **新物理现象** （自旋、光子、声子、磁、铁电）

基础问题的解决是延续、扩展、超越摩尔的关键

从沙子到芯片：6000多道工艺

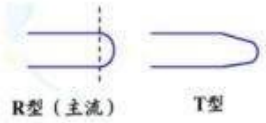
芯片制造：在头发丝厚度上精确无误建好上万个“房子“

超高净环境中完成

半导体芯片制造工艺流程

单晶硅片制造

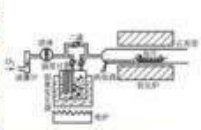
电子级纯度(11个9):
99.99999999999%

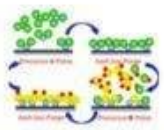


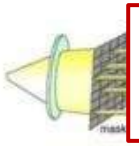
形成氧化层，减少表面缺陷

拉单晶 → 磨外圆 → 切片 → 倒角 → 磨削或研磨 → CMP

前道工艺

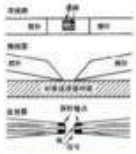






精确可控分区域掺杂，形成pn结

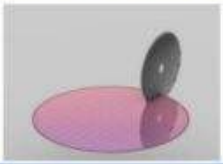
形成电极，防止金属杂质扩散

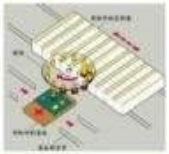


扩散 → 薄膜淀积 → 光刻 → 刻蚀 → 离子注入 → CMP → 金属化 → 测试

进行检测并重复若干次

后道工艺





背面减薄 → 晶圆切割 → 贴片 → 引线键合 → 模塑 → 切筋/成型 → 终测

微信号

掺杂与缺陷控制技术是现代半导体科学的核心技术

集成电路为什么是硅基

Solids
Liquids
Gases
Artificially Prepared

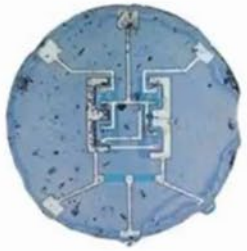
11 IB	12 IIB	13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA
		5 B Boron 10.811 $1s^2 2s^2 2p$ 8.2980	6 C Carbon 12.0107 $1s^2 2s^2 2p^2$ 11.2603	7 N Nitrogen 14.0067 $1s^2 2s^2 2p^3$ 14.5341	8 O Oxygen 15.9994 $1s^2 2s^2 2p^4$ 13.6181	9 F Fluorine 18.9984032 $1s^2 2s^2 2p^5$ 17.4228
		13 Al Aluminum 26.981538 $[Ne]3s^2 3p$ 5.9858	14 Si Silicon 28.0855 $[Ne]3s^2 3p^2$ 8.1517	15 P Phosphorus 30.973761 $[Ne]3s^2 3p^3$ 10.4867	16 S Sulfur 32.065 $[Ne]3s^2 3p^4$ 10.3600	17 Cl Chlorine 35.453 $[Ne]3s^2 3p^5$ 12.9676
29 Cu Copper 63.546 $[Ar]3d^{10} 4s$ 7.7264	30 Zn Zinc 65.409 $[Ar]3d^{10} 4s^2$ 9.3942	31 Ga Gallium 69.723 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p$ 5.9993	32 Ge Germanium 72.64 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^2$ 7.8994	33 As Arsenic 74.92160 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^3$ 9.7886	34 Se Selenium 78.96 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^4$ 9.7524	35 Br Bromine 79.904 $[Ar]3d^{10} 4s^2 4p^5$ 11.8138
47 Ag Silver 107.8682 $[Kr]4d^{10} 5s$ 7.5762	48 Cd Cadmium 112.411 $[Kr]4d^{10} 5s^2$ 8.9938	49 In Indium 114.818 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p$ 5.7864	50 Sn Tin 118.710 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^2$ 7.3439	51 Sb Antimony 121.760 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^3$ 8.6084	52 Te Tellurium 127.60 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^4$ 9.0096	53 I Iodine 126.90447 $[Kr]4d^{10} 5s^2 5p^5$ 10.4513

- 硅储量丰富，稳定性好，无污染，大单晶，**高纯度（缺陷极低），易掺杂，**高热传到率等
- **高度兼容高质量本征氧化物SiO_2使硅区别于Ge成为半导体行业基础材料**
- 硅工艺成熟，形成强大的产业能力

人类第一个晶体管是锗晶体管　　巴丁、肖克利、布拉顿

1958年9月12日，TI的杰克·基尔比（Jack Kilby）发明了世界上第一个集成电路（基于锗）

1959年，仙童的罗伯特·诺伊斯（Robert Noyce）独立发明基于硅的集成电路。创建Intel，制造第一个微处理器



Research Summary

半导体缺陷与器件物理

Defect physics and doping mechanism

PRL 120, 039601 (2018)
PRL 117, 165901 (2016)
PRB 108, 075137 (2023)
PRB 107, 214110 (2023)
PRB 106, 214102 (2022)
PRB 103, 245202 (2021)
PRB 101, 165306 (2020)
PRB 98, 245203, (2019)
PRB 91, 075315 (2015)
PRB 90, 115201 (2014)
PRB 87, 125203 (2013)

Design of optoelectronic Materials

Nature 634, 1080 (2024)
AM 34, 2206486 (2022)
JACS, 145, 24952 (2023)
IEDM pp: 1-4 (2023)
Light Sci. Appl. 10, 69 (2021)
Nano Lett. 22, 9190 (2022)
AM 34, 2270165 (2022)
AFM 101, 165306 (2020)
NPJ Comp. Mat. 6, 1 (2020)
PRM 5, 064604 (2021)
PRX 4, 0210290 (2014)

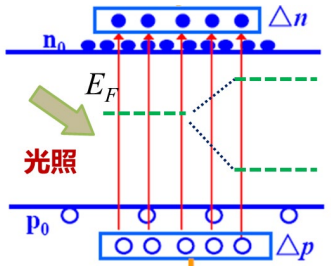
Device performance and reliability

Science 377, 531 (2022)
Nat. Energy, 8, 372 (2023)
Nat. Energy, 2, 17046 (2017)
Nat. Comm. 14, 840 (2023)
Nat. Comm. 11, 4165 (2020)
Sci. Bull. 68, 173 (2023)
PR Applied 15, 064025 (2021)
AFM 28, 1802581 (2018)
APL 120, 042105 (2022)
APL 118, 083102 (2021)
APL 112, 012101 (2018)

后摩尔时代的半导体缺陷与器件物理

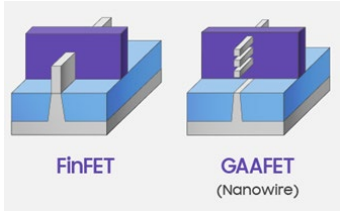
1、掺杂与缺陷物理

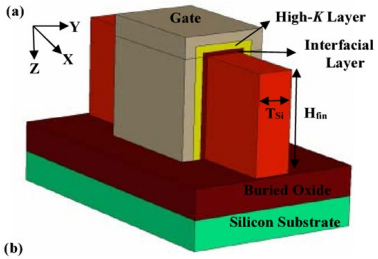
- □ 半导体中金属杂质的扩散机理
- □ 维度无关的缺陷计算理论
- □ 宽禁带半导体非平衡掺杂与缺陷理论



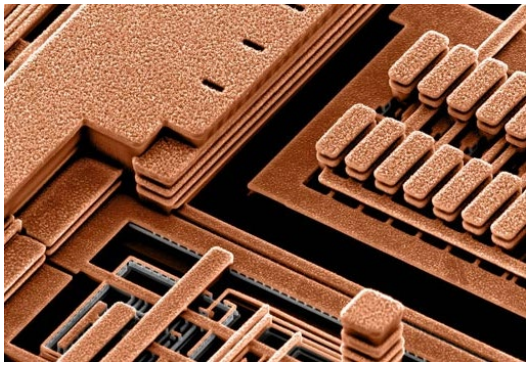
2、器件物理与性能调控

- □ 介电氧化层缺陷与器件可靠性
- □ 铁电晶体管中避免退极化效应的声子软化理论





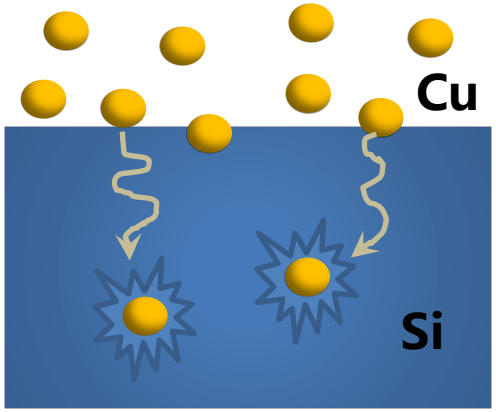
（一）铜互连关键挑战：半导体中金属杂质扩散机理



铜互连

集成电路铜互连：

- 高可靠性
- 高电导率
- 速度比Al提高4倍



铜快扩散问题

铜非常容易扩散进入硅导致深能级缺陷，降低器件性能

PHYSICAL REVIEW LETTERS **94,** 125901 (2005)

Anomalous Diffusion Profiles of Ag in CdTe due to Chemical Self-Diffusion

H. Wolf,[1] F. Wagner,[1] Th. Wichert,[1] and Isolde Collaboration[2]

[1]*Technische Physik, Universität des Saarlandes, D-66041 Saarbrücken, Germany*

[2]*CERN. EP Division. CH-1211 Geneve 23. Switzerland*

碲化镉太阳能电池中银比铜扩散速率更快

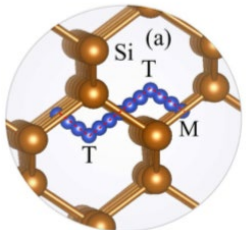
关键挑战：

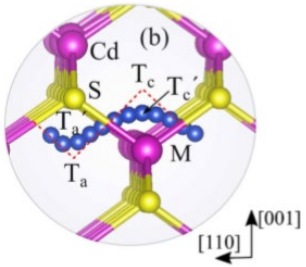
哪些因素决定金属杂质在半导体中扩散性质？

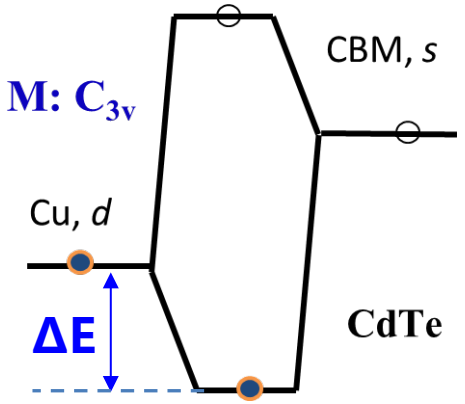
半导体中金属杂质扩散机理

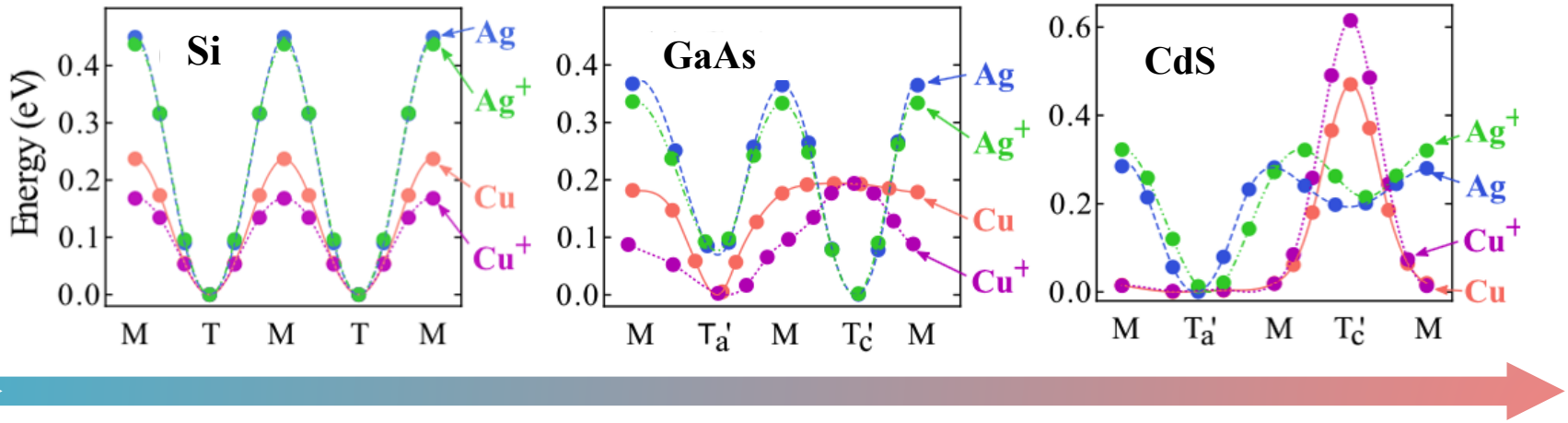
□ 创新点：

提出s-d电子耦合理论，从原子尺度上阐明了影响金属杂质在半导体中扩散的主要因素，指导光电功能器件的设计









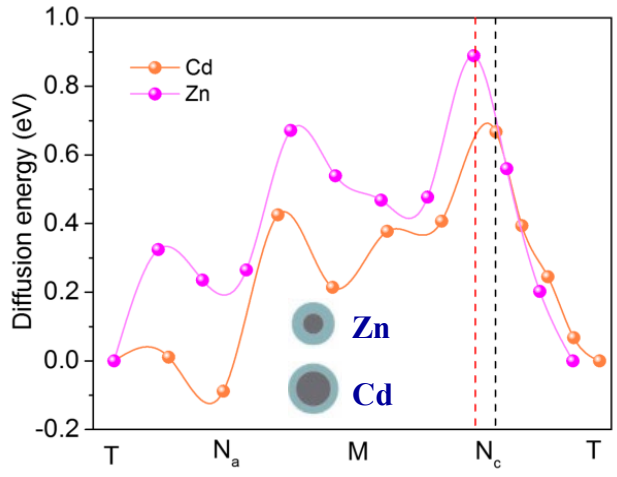
H.-X. Deng *et. al.*, **Phys. Rev. Lett.** 117, 165901 (2016)

半导体中金属杂质扩散机理

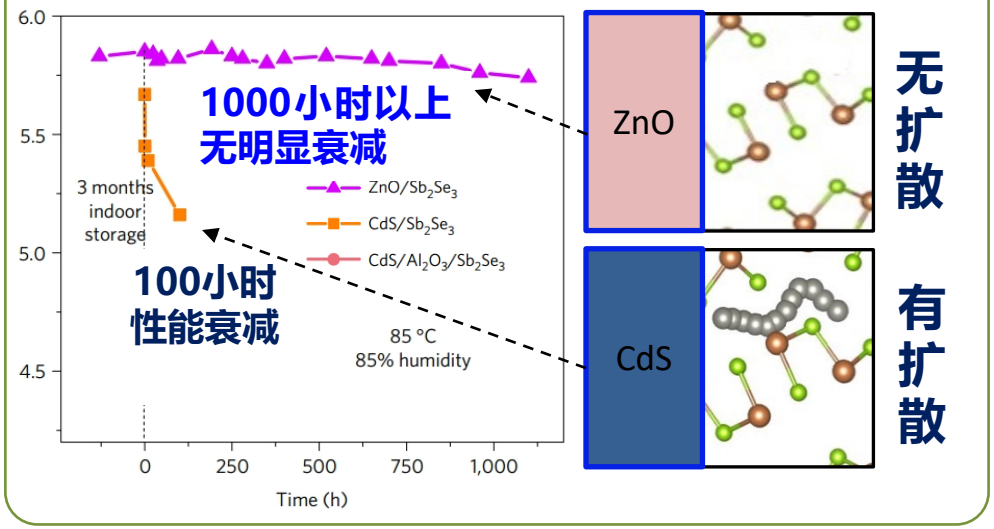
杂质扩散电子耦合理论应用拓展：

澄清Sb_2Se_3半导体中杂质扩散机理，解决制约器件稳定性的关键瓶颈，稳定连续工作时间提高10倍以上

理论设计



实验结果



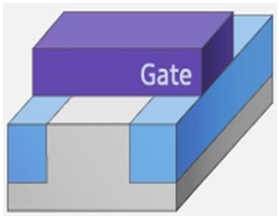
调控界面扩散，提高器件稳定性

Nature Energy 2, 17046 (2017)（同华中科大合作）；Phys. Rev. B 103, 245202 (2021)

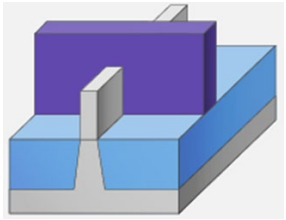
（二）挑战：掺杂和缺陷-器件微缩导致传统模型失效

器件尺寸微缩逼近物理极限

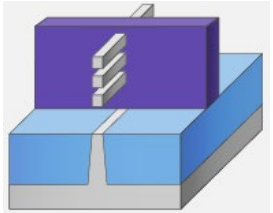
掺杂和缺陷物理性质描述的传统凝胶模型面临失效



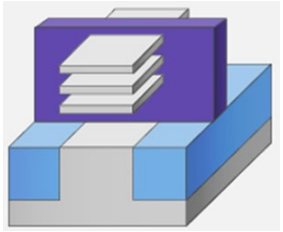
MOSFET



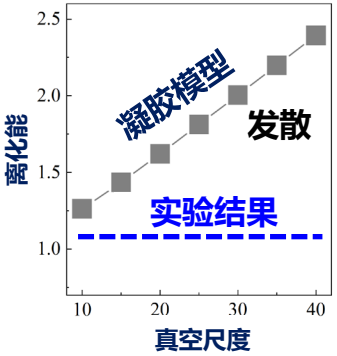
FinFET



GAAFET
(Nanowire)



MBCFET™
(Nanosheet)



器件沟道层　三维 ➡ 低维化（二维，一维）

先进制程中掺杂与缺陷物理性质的描述缺乏理论支撑！

挑战：掺杂和缺陷-器件微缩导致传统模型失效

国外针对传统缺陷凝胶模型失效主要理论模型

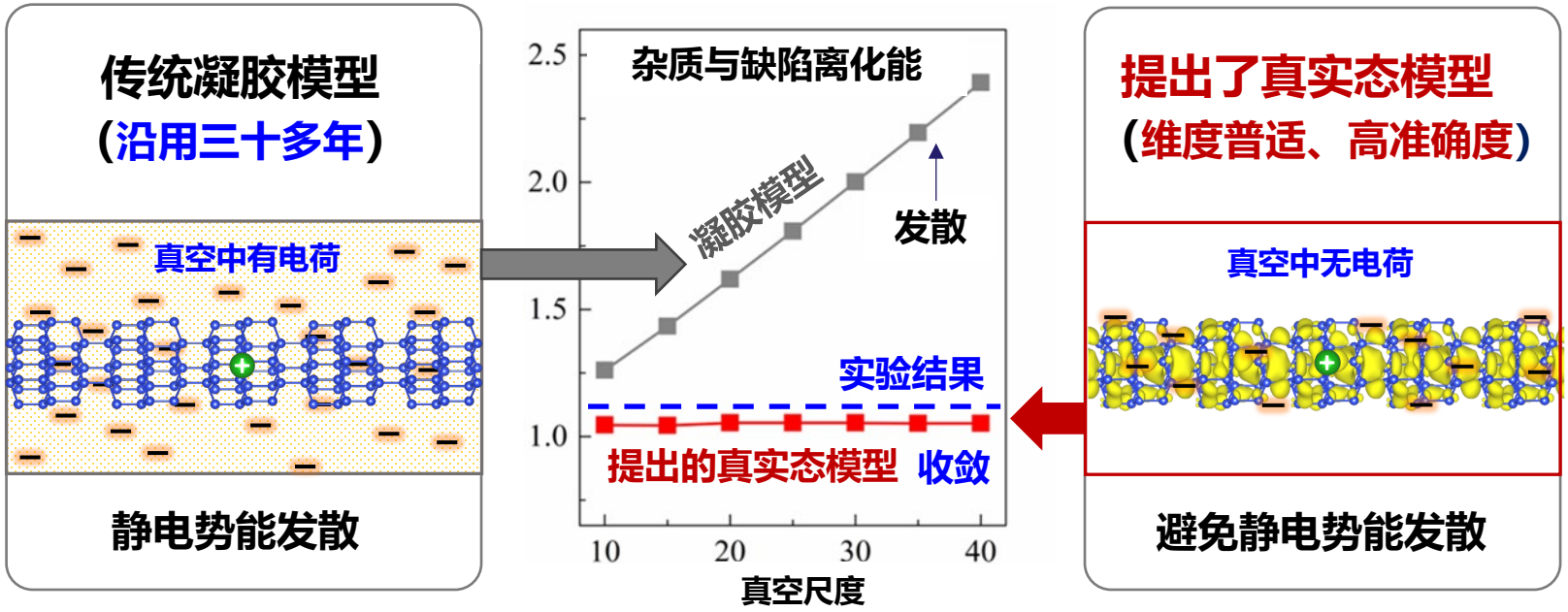
美国	科罗拉多博尔德大学 Alex Zunger教授 （APS Fellow, MRS Fellow）	LZ修正模型 (2005) (凝胶后处理，经验参数)
	加州大学圣塔芭芭拉分校 C. Van de Walle 教授 （美国工程院院士 IEEE Fellow，MRS Fellow）	FNV修正模型 (2009) (凝胶后处理，经验参数)
	伦斯勒理工学院 S. B. Zhang 教授 (APS Fellow)	凝胶渐进外推模型(2015) (复杂，外推形式不唯一)
欧洲	德国马普研究所 Matthias Scheffler教授 （德国国家科学院院士，APS Fellow）	赝原子近似模型 (2013) (虚拟态，偏离实际)

基于凝胶态或虚拟态修正与近似处理（在特定条件下弥补与实验结果的差距）

需发展普适、高效、精确的真实态模型

维度普适真实态缺陷计算模型

针对挑战：随器件尺寸微缩，描述掺杂和缺陷性质的凝胶模型面临发散难题



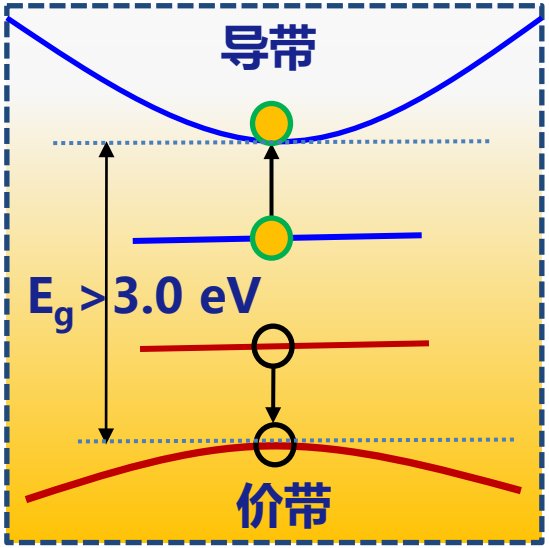
提出基于第一性原理的维度普适真实态缺陷计算模型，解决发散难题，为低维半导体中精确掺杂与缺陷调控奠定理论基础

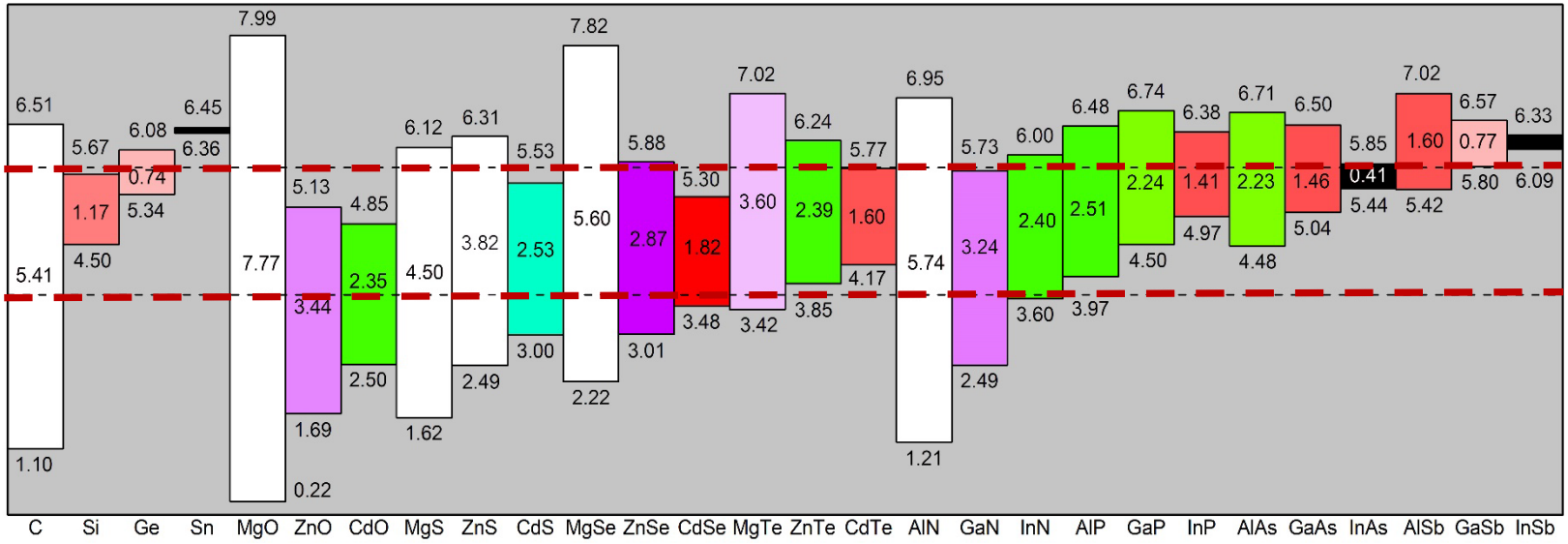
Phys. Rev. Lett. 120, 039601 (2018) ; Phys. Rev. B 101, 165306 (2020) ; Phys. Rev. B. 108, 245305 (2023)

（三）宽禁带半导体掺杂与缺陷存在的挑战

宽禁带与超宽禁带：

- **双极性掺杂：** 只能实现一种掺杂类型，n型或者是p型，但难以同时实现二者
- **p型掺杂困难**





宽禁带半导体掺杂与缺陷

① 降低受主形成能（控制化学势等）；

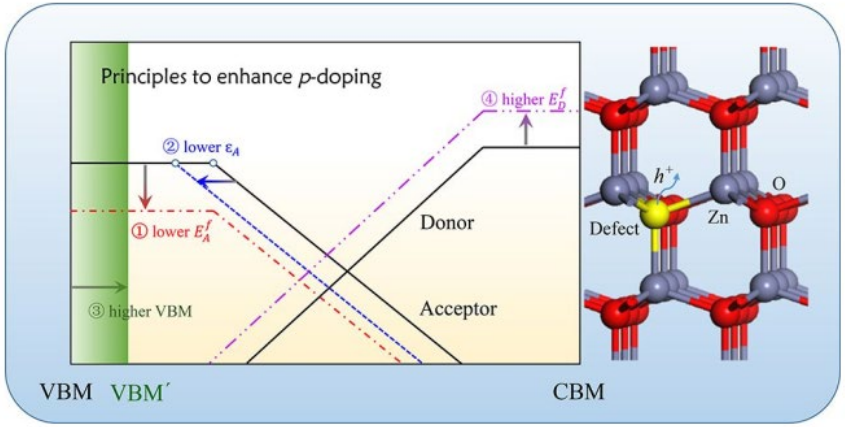
② 降低受主电离能（Cluster doping，Doping complex *etc.*）；

③ 提高主体材料VBM（合金，共掺等）；

④ 抑制施主补偿作用(提高补偿缺陷形成能)。

热力学平衡条件下实验上仍然无法实现宽禁带氧化物高浓度p型掺杂

Ru-Yue Cao, Hui-Xiong Deng* and Jun-Wei Luo* , ACS Applied Materials & Interfaces 11, 24837(2019) .



VOLUME 92, NUMBER 15 PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 16 APRIL 2004

Doping by Large-Size-Mismatched Impurities: The Microscopic Origin of Arsenic- or Antimony-Doped *p*-Type Zinc Oxide

VOLUME 86, NUMBER 25 PHYSICAL REVIEW LETTERS 18 JUNE 2001

Control of Doping by Impurity Chemical Potentials: Predictions for *p*-Type ZnO

VOLUME 90, NUMBER 25 PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 27 JUNE 2003

Cluster-Doping Approach for Wide-Gap Semiconductors: The Case of *p*-Type ZnO

PRL 108, 215501 (2012) PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 25 MAY 2012

***p*-Type Conductivity in N-Doped ZnO: The Role of the N_{Zn}-V_O Complex**

PRL 102, 016402 (2009) PHYSICAL REVIEW LETTERS week ending 9 JANUARY 2009

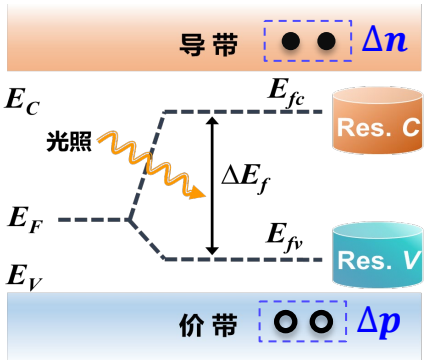
Fully *Ab Initio* Finite-Size Corrections for Charged-Defect Supercell Calculations

Christoph Freysoldt and Jörg Neugebauer

宽禁带半导体非平衡掺杂理论

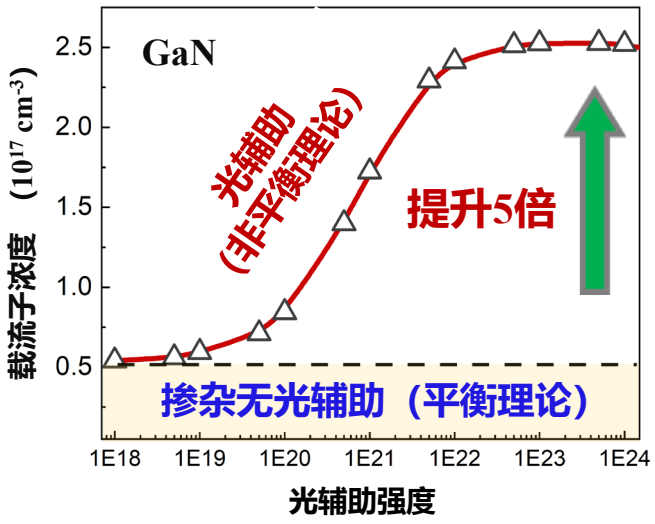
挑战：热力学平衡条件下由于自补偿、自钝化效应，存在掺杂瓶颈

热力学非平衡掺杂理论

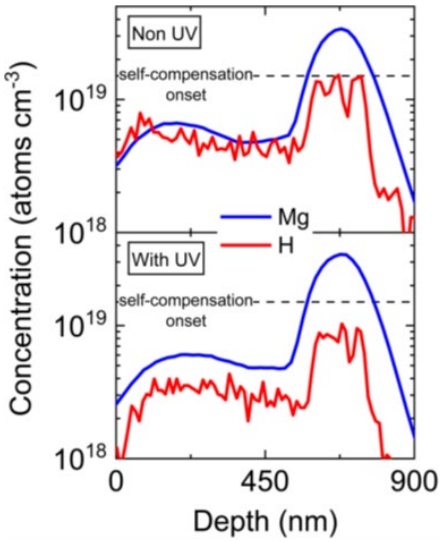


热力学非平衡载流子导致
准费米能偏移非对称性

提升宽禁带p型掺杂浓度



实验验证



发展光照等条件下热力学非平衡掺杂理论，发现非平衡载流子可以有效抑制补偿缺陷的形成，提升宽禁带半导体p型掺杂浓度

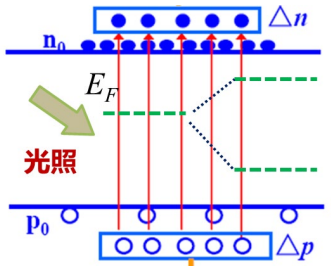
H.-X. Deng*, *et. al.*, Phys. Rev. B 106, 214102 (2022)；

邓惠雄，魏苏淮，李树深，宽禁带半导体掺杂机制研究进展，科学通报 68, 1753 (2023)

后摩尔时代的半导体缺陷与器件物理

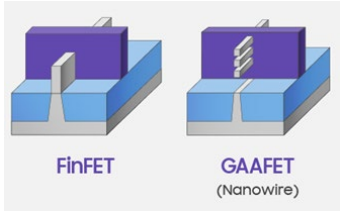
1、掺杂与缺陷物理

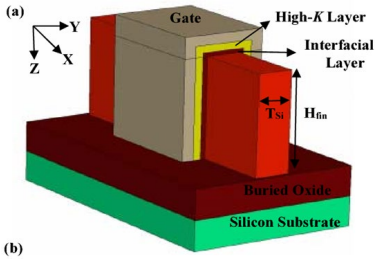
- □ 半导体中金属杂质的扩散机理
- □ 维度无关的缺陷计算理论
- □ 宽禁带半导体非平衡掺杂与缺陷理论



2、器件物理与性能调控

- □ 介电氧化层缺陷与器件可靠性
- □ 铁电晶体管中避免退极化效应的声子软化理论





（一）缺陷导致器件可靠性退化

- 尺寸缩小
- 工艺复杂

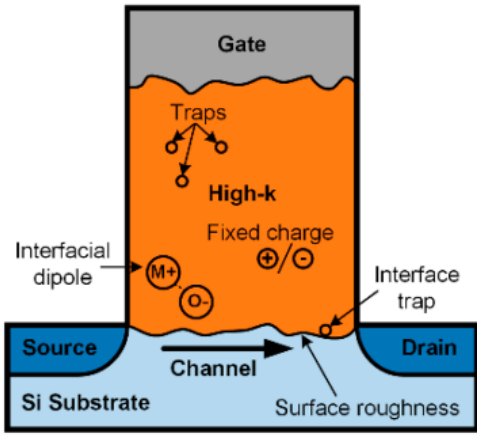
→

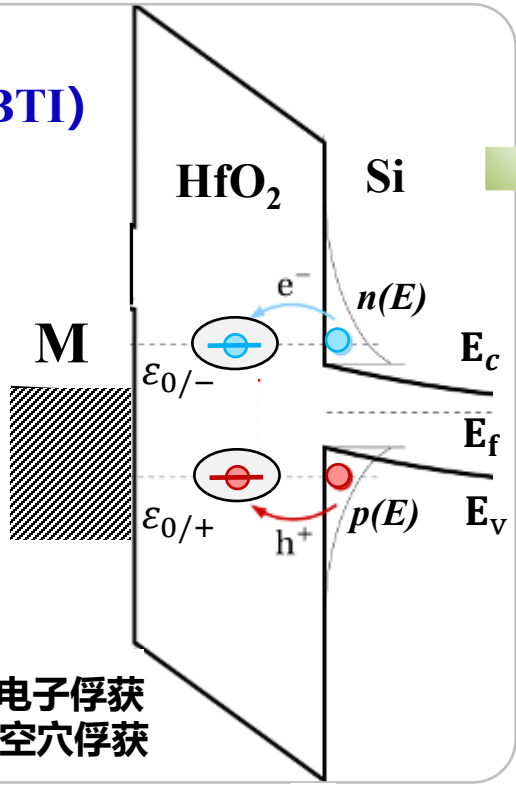
- 单个缺陷影响大增
- 缺陷出现概率大增

→

缺陷已成为制约器件可靠性关键瓶颈

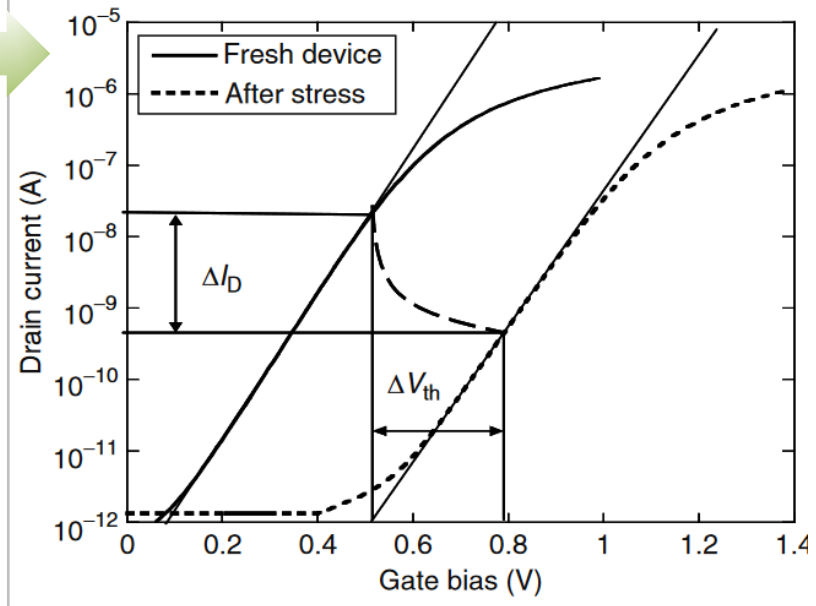
温度偏压不稳定性（BTI）





正偏压不稳定性（PBTI）：电子俘获
负偏压不稳定性（NBTI）：空穴俘获

器件阈值电压漂移

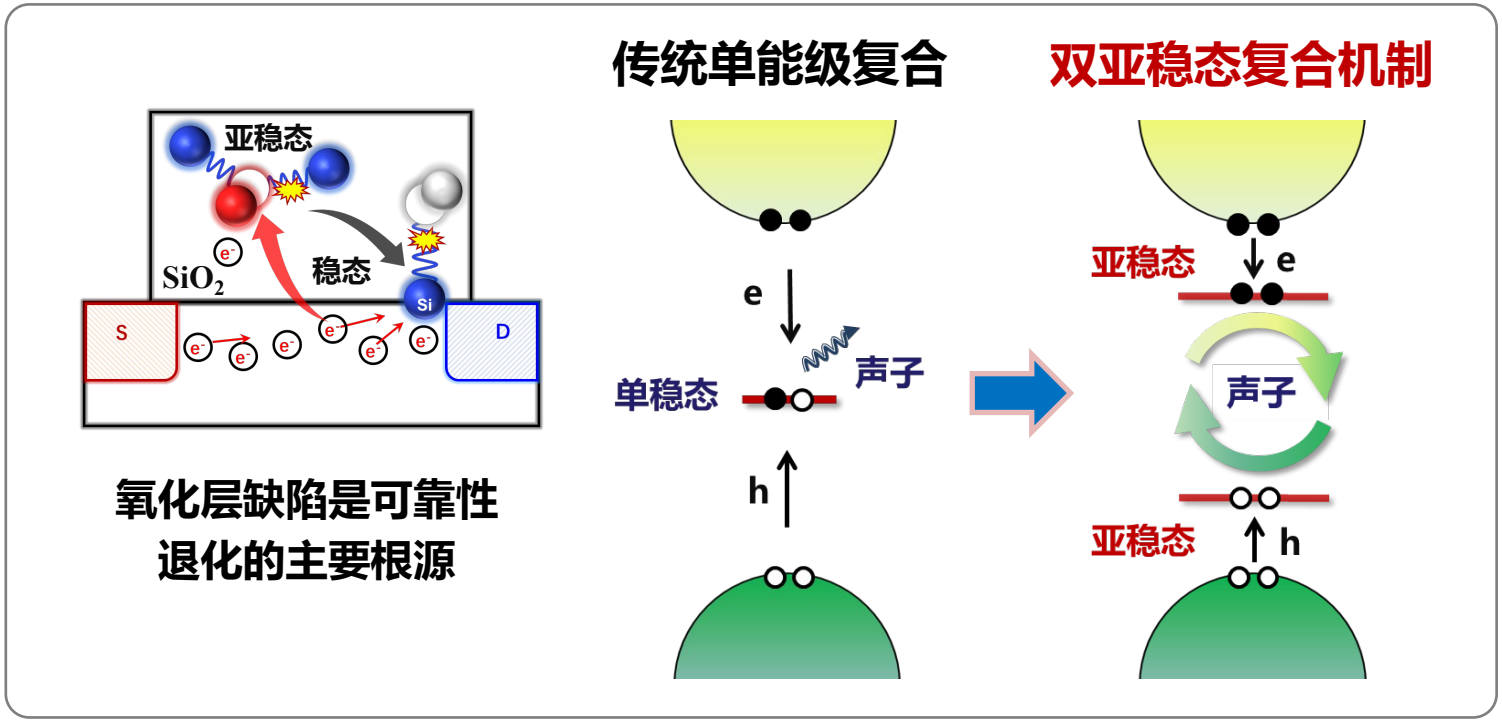


关键问题：何种缺陷是导致器件性能退化甚至失效的致命缺陷？

如何设计优化？

氧化层中缺陷导致载流子复合

挑战：氧化层中缺陷-载流子相互作用微观机理复杂，可靠性退化机制不清



提出了SiO2氧化层氧空位缺陷双亚稳态非辐射复合机理

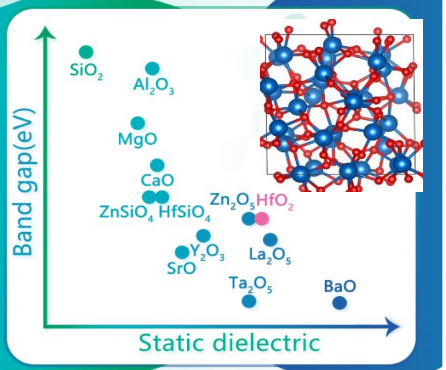
J. Am. Chem. Soc. 145, 24952 (2023)

建立高K氧化物缺陷数据库

半导体器件氧化层缺陷数据库

Defect Database of Semiconductor Oxides

氧化层是半导体器件的核心组成部分，是先进集成电路制造的关键技术。氧化层中缺陷的微观性质是影响半导体器件性能调控和可靠性退化的关键因素。本数据库通过大规模高通量计算探索常见半导体器件中氧化层电缺陷物理性质的"基因谱"，为微电子氧化层缺陷的精确测量和表征提供支持。



Database Statistics

形成能(Formation Energy):3050

弛豫能(Relaxation Energy):979

转变能级(Transition Level):3050

激活能(Activation Energy):979

缺陷结构(Defect Structure):1525

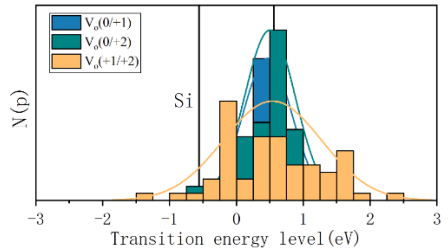
缺陷类型：所有本征缺陷，工艺杂质：H，F，N等

物理性质：缺陷构型，缺陷位置；形成能、跃迁能级、缺陷激活能、缺陷弛豫能统计分布等

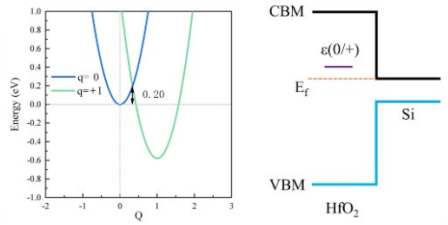
已完成1525缺陷体系，总数据量超过了1万多条

北京大学主持国家重大科研仪器项目的研制 "半导体器件氧化层电缺陷演化原位分析系统" ）资助

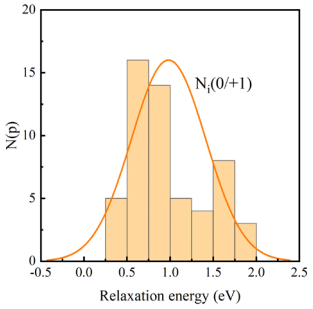
转变能级



激活能



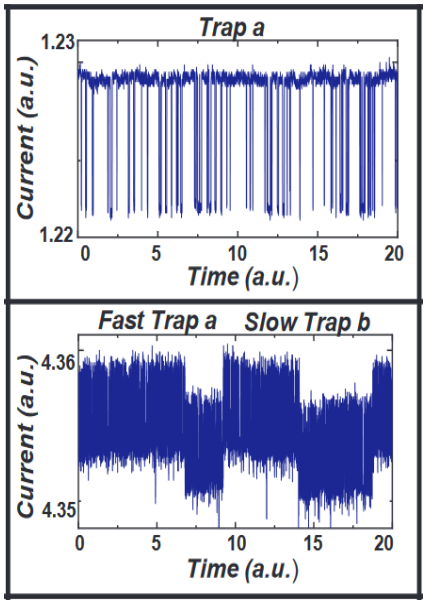
弛豫能

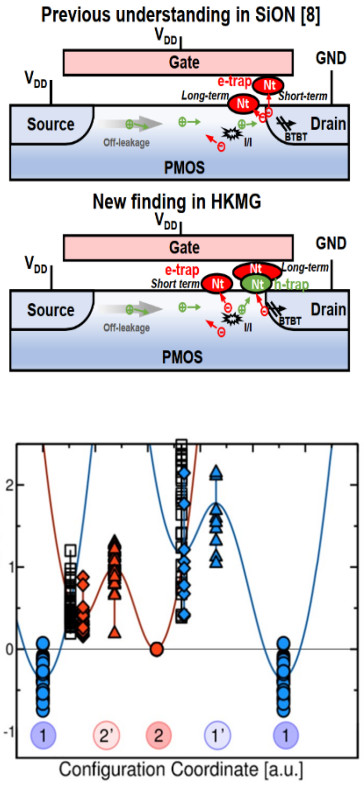


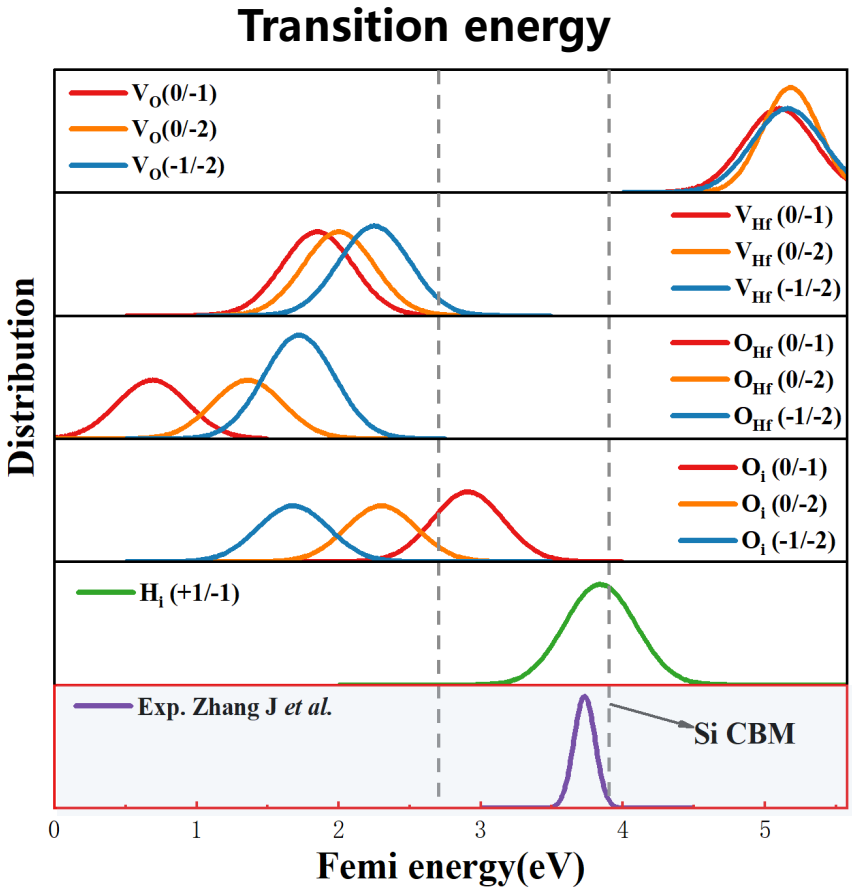
可靠性问题：确定实验结果中的缺陷来源

温度偏压不稳定性

RTN信号





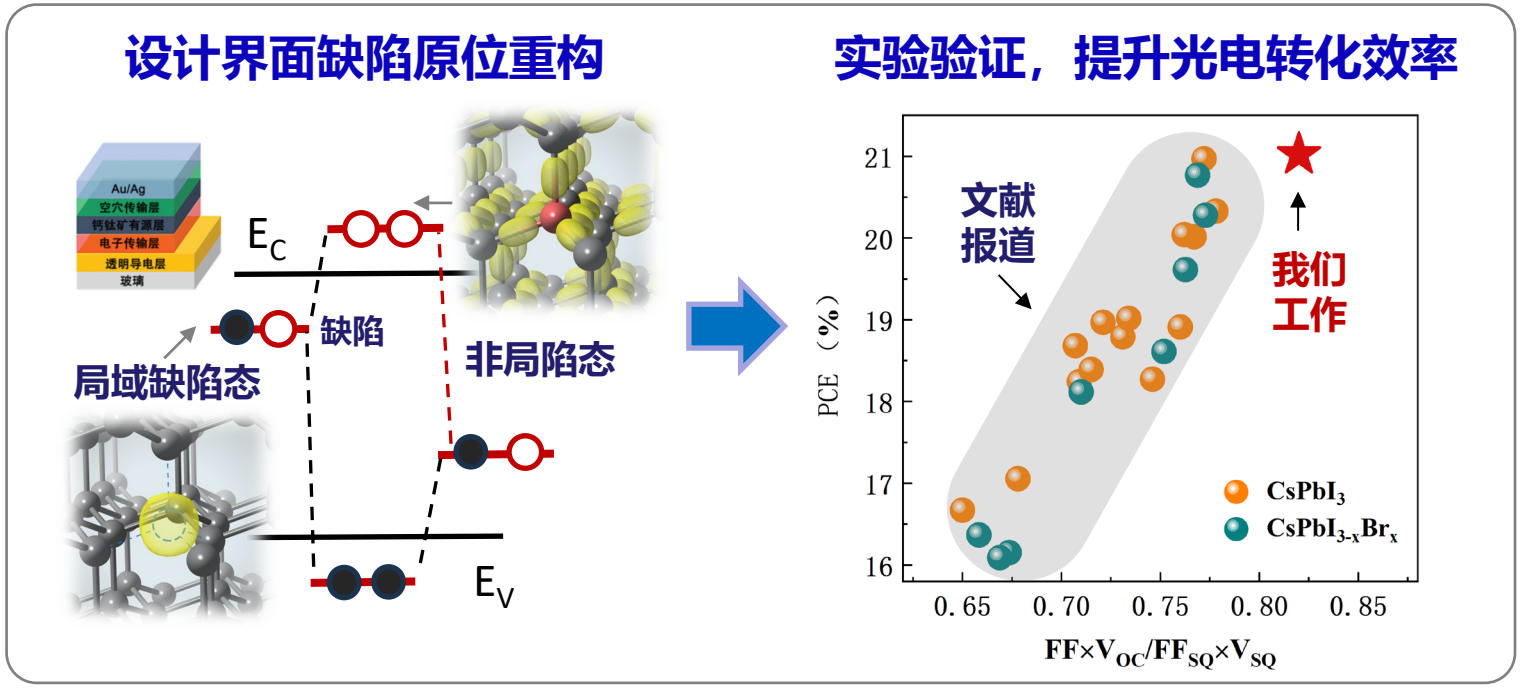


证实氢间隙可能是导致正偏压不稳定性的主要微观缺陷来源

同北大，上海交大合作　IEDM, pp:1-4 (2023)　IEEE TED, 70, 4518 (2023)

（二）器件界面缺陷调控与性能提升

挑战：界面缺陷复杂多样，严重制约器件性能

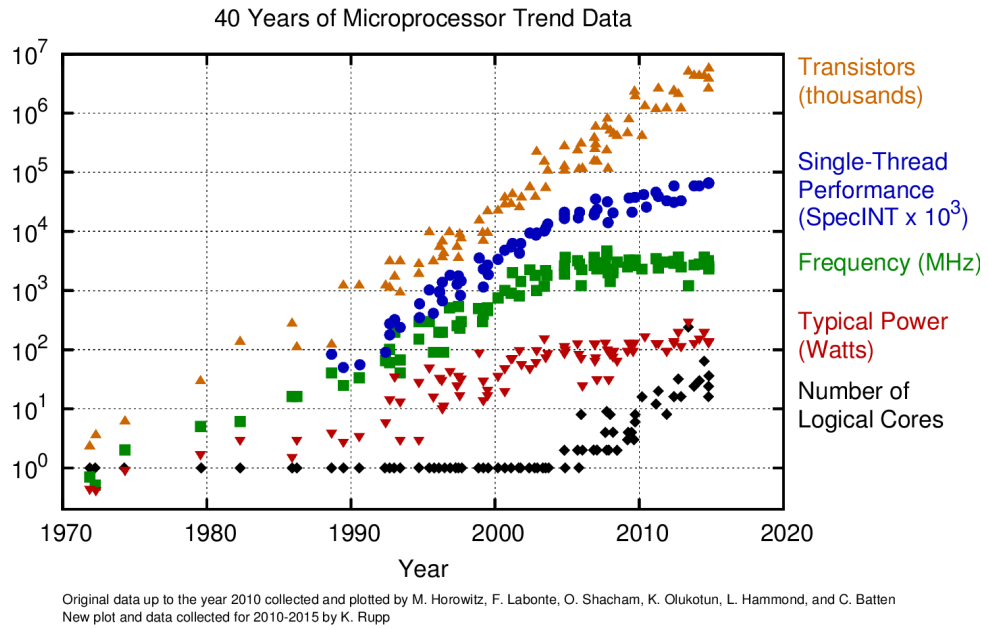


提出利用高电负性元素诱导界面缺陷原位钝化重构，降低缺陷俘获截面的优化策略，指导实验，实现光电转化效率高效突破

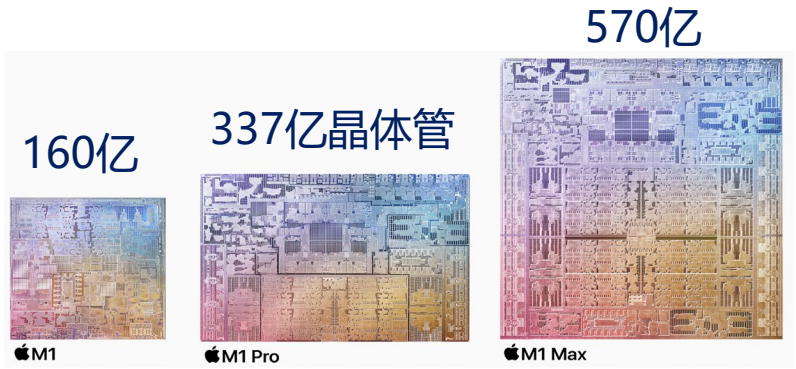
Nat. Energy, 8, 372 (2023)； Science, 377, 531 (2022)（同实验合作）

（三）研究背景：负电容铁电晶体管

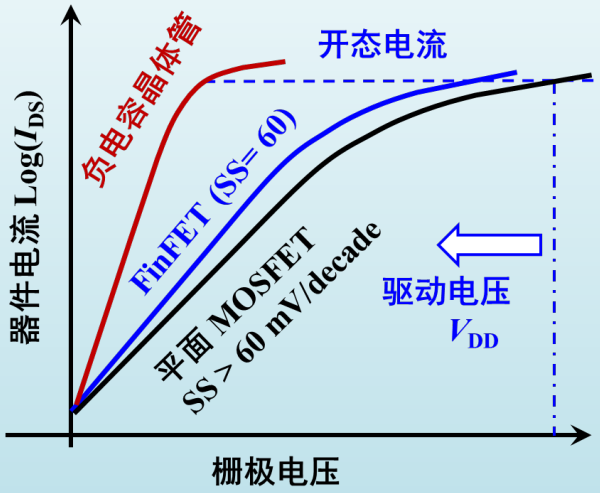
功 耗 瓶 颈



Original data up to the year 2010 collected and plotted by M. Horowitz, F. Labonte, O. Shacham, K. Olukotun, L. Hammond, and C. Batten
New plot and data collected for 2010-2015 by K. Rupp



负电容晶体管突破亚阈值极限



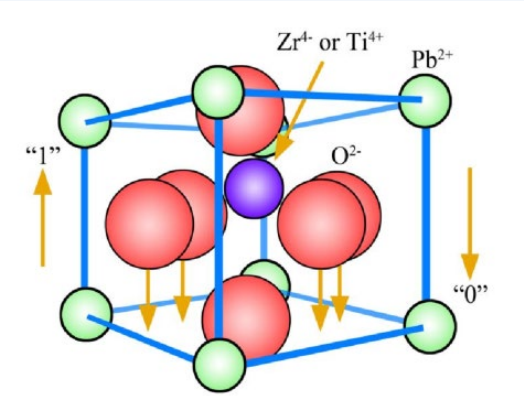
亚阈值摆幅：

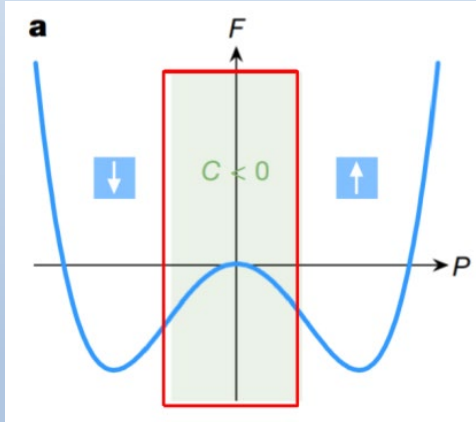
$$SS = \frac{\partial V_{GS}}{\partial(\log_{10} I_{DS})} = \frac{\partial V_{GS}}{\partial \Psi_S} \times \frac{\partial \Psi_S}{\partial(\log_{10} I_{DS})}$$

$$= \left(1 + \frac{C_S}{C_{ins}}\right) \times \frac{kT}{q} \ln 10$$

栅控　输运

传统铁电材料面临挑战





负电容

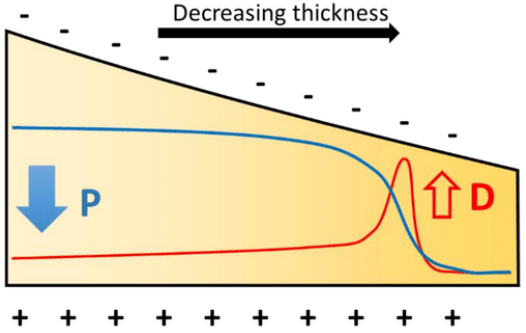
$C=dQ/dV \Longrightarrow dQ/dV<0$

传统铁电材料： $BaTiO_3$、$Pb(Zr,Ti)O_3$、$Sr_{1-y}Bi_{2+x}Ta_2O_9$、$LiNbO_3$、$BaMgO_3$、$BiFeO_3$ ……

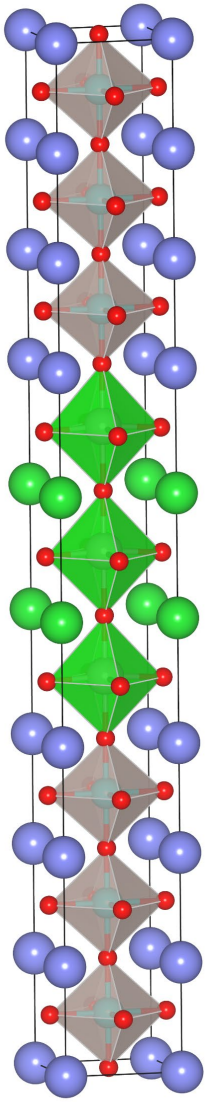
面临难题：

1）与CMOS工艺不兼容

2）随尺度缩小退极化

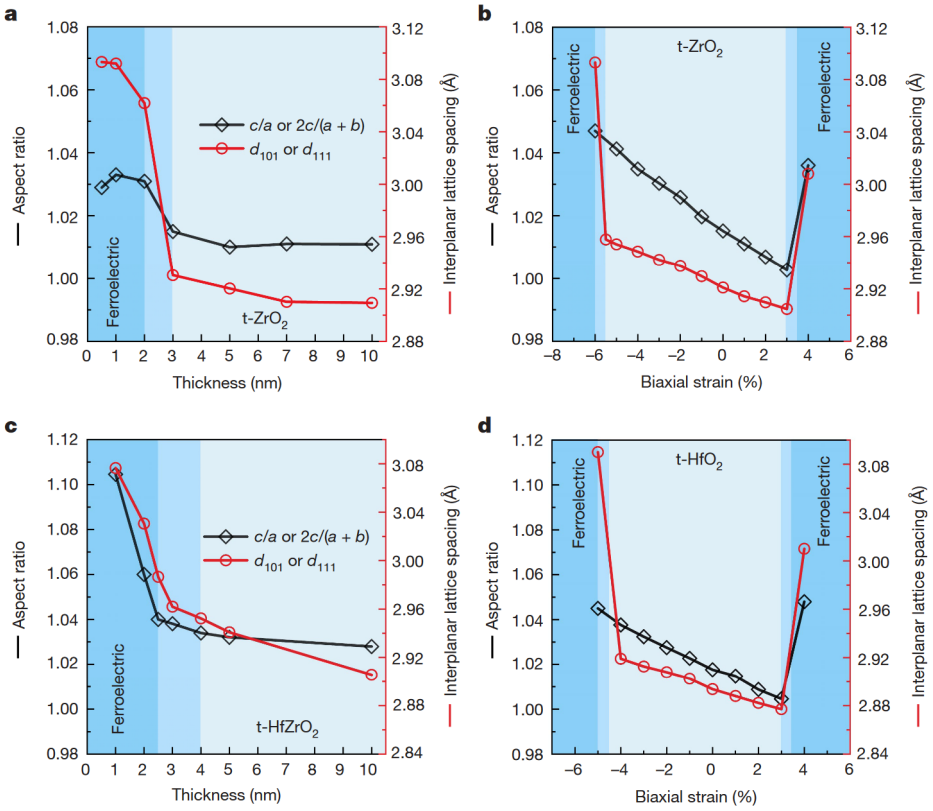


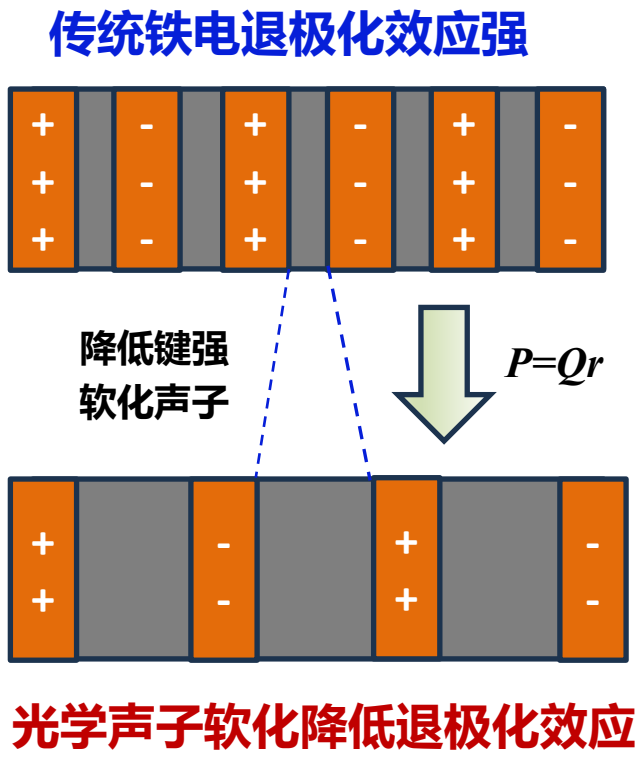
如： $BaTiO_3$ 低于130nm发生退极化现象



避免铁电退极化效应

提出光学声子软化避免退极化效应的新机制，为设计高k栅介电层材料和发展超小铁电等新原理器件提供新思路





H.-X. Deng*, S.-H. Wei*, J.-W. Luo*, *et. al.*, , **Nature** 634, 1080 (2024)

致谢

Collaborators

夏建白院士　　黄如院士
李树深院士　　王润生教授
魏苏淮教授　　黎大兵研究员
骆军委研究员　魏钟鸣研究员
游经碧研究员　纪志罡教授

学生：杨凯科、肖金、蔡雪芬、张才鑫、郭丹、刘竹友、沈涛、邱晨、张陈、胡玉莹，曹茹月

中华人民共和国科学技术部
Ministry of Science and Technology of the People's Republic of China
国家自然科学基金委员会
National Natural Science Foundation of China
中国科学院
CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

感谢科技部、基金委、中科院资助

Thank You for Your Attention !

欢迎报考半导体所!