课程信息

- 第七次作业：

  1. 阅读胡老师讲义4-2至4-6小节，刘恩科《半导体物理学》3.2至3.6小节，并解释以下重要概念：费米分布函数、玻尔兹曼分布函数、费米能级、杂质电离、电中性条件、杂质补偿半导体、简并半导体；

  2. 分别写出n和p型半导体、本征半导体、n和p型补偿半导体中的电中性条件；

  3. 画出半导体费米能级随温度变化的关系图。

  4. 以n型硅为例，画出载流子浓度随温度变化的一般规律，并在图中标注低维弱电离区、饱和电离区、高温本征激发区。

第六章

金属电子论

§ 6.1 费米统计和电子热容量

—— 能带理论是一种单电子近似，每一个电子的运动近似看作是独立的，具有一系列确定的本征态

—— 一般金属只涉及导带中的电子，所有电子占据的状态都在一个能带内

1. 费米分布函数

电子气体服从泡利不相容原理和费米 — 狄拉克统计

—— 热平衡下时，能量为E的本征态被电子占据的几率

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

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}$$ —— 费米分布函数

物理意义：能量为**E**的本征态上电子的数目

—— 平均占有数

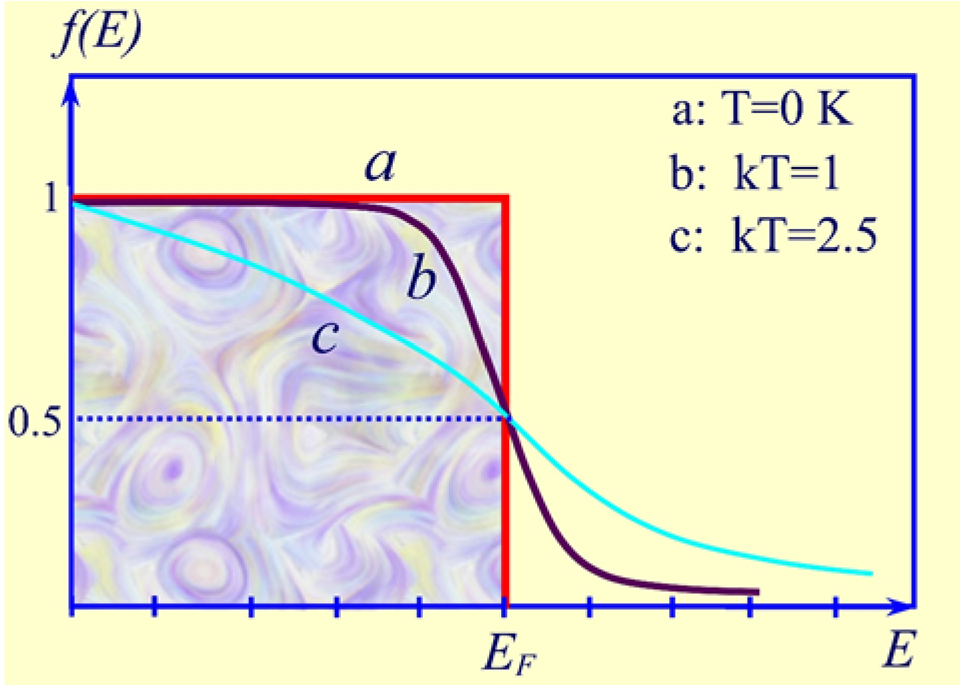
E_F 费米能量或化学势

—— 体积不变时，系统增加一个电子所需的自由能

电子的总数 $N=\sum_i f(E_i)$ —— 对所有的本征态求和

费米分布函数

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



1) $T>0K$

电子填充能量 $E=E_F$ 几率

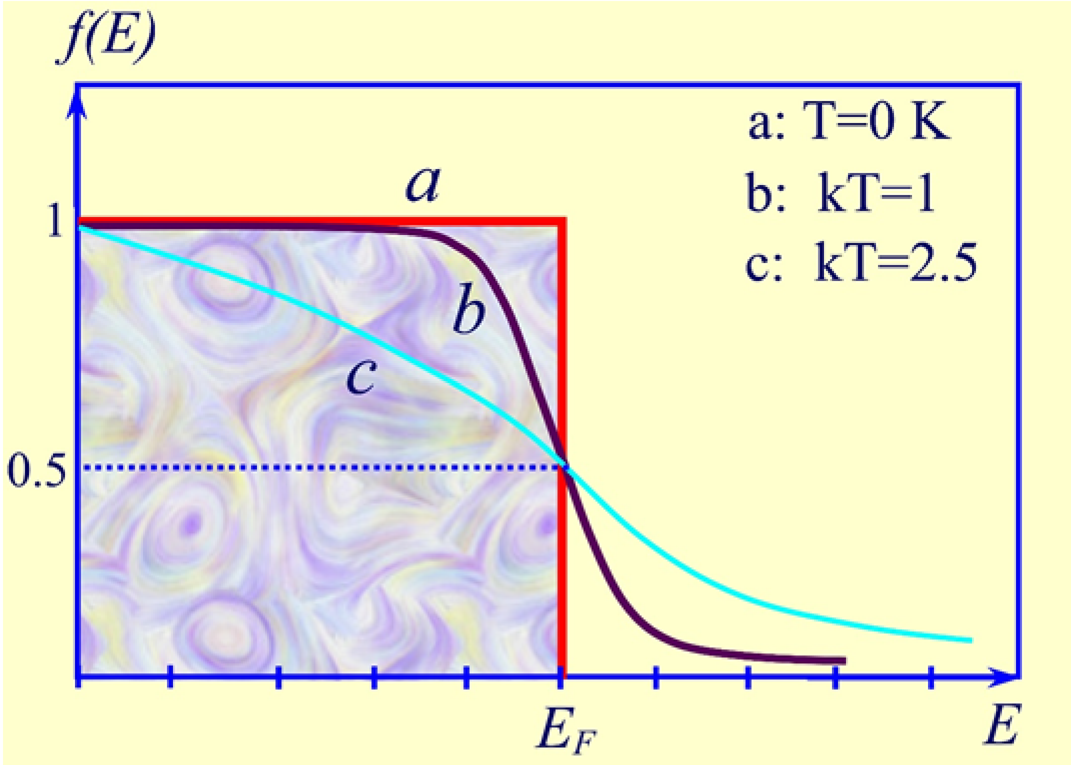
$$f(E_F)=1/2$$

$E-E_F>several\ k_BT$ $\quad e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}>>1$ $\quad f(E)\approx 0$

$E-E_F<several\ k_BT$ $\quad e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}<<1$ $\quad f(E)\approx 1$

费米分布函数

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



2) $T=0K$

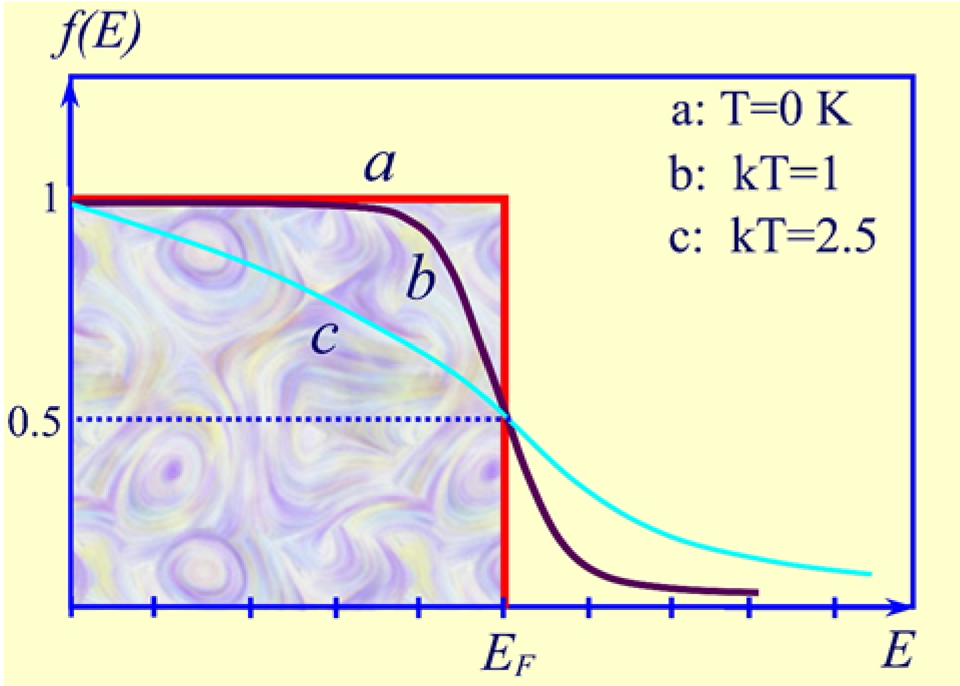
$E<E_F$ $\quad f(E)=1$

$E>E_F$ $\quad f(E)=0$

3) 在较低温度时，分布函数在 $E=E_F$ 处发生很大变化

费米分布函数

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



能量变化范围

$$f(E\ll E_F)=1\longrightarrow f(E\gg E_F)=0$$

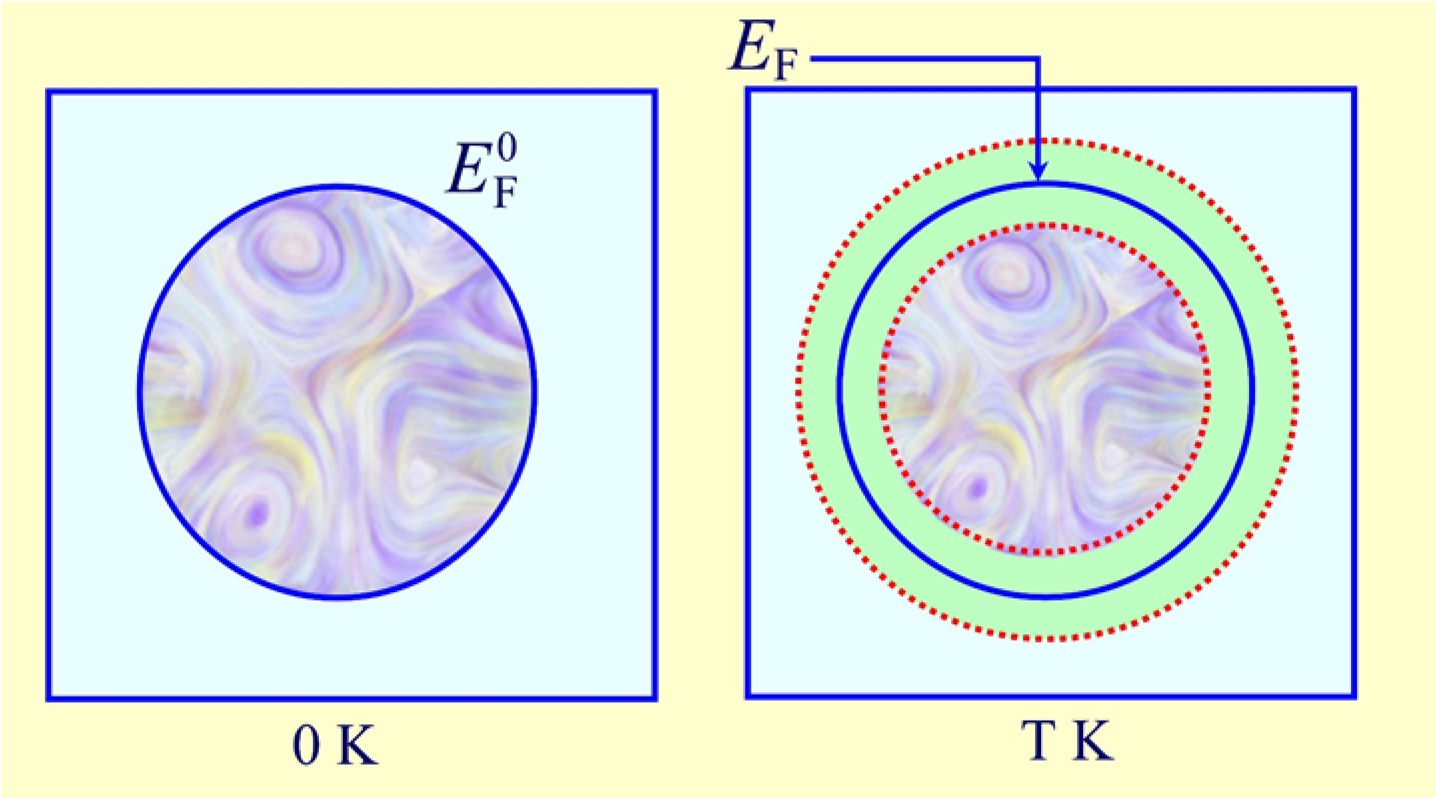
任何温度下，该能量范围约为 $\pm k_BT$

—— 温度上升，能量变化范围变宽

k空间的费米面 $E = E_F$

$T = 0\ K$ 的费米面内所有状态均被电子占有

$T \neq 0\ K$ 费米能量降低，一部分电子被激发到费米面外附近



2. E_F 的确定

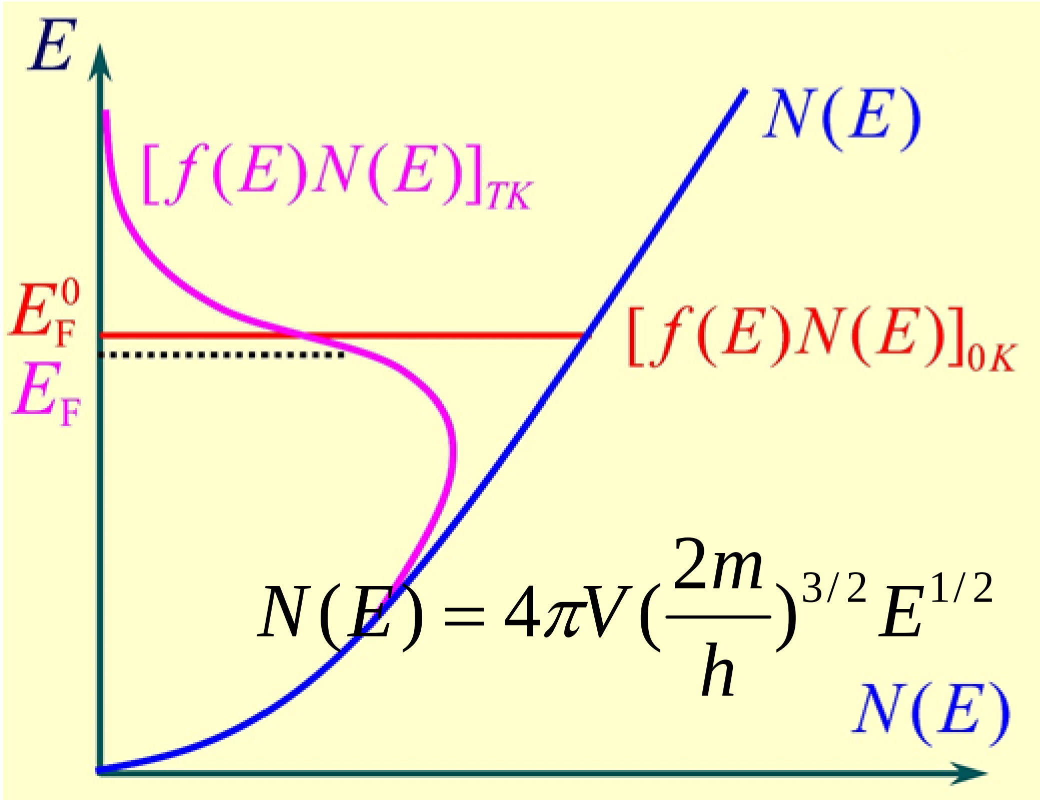
E 到$E+dE$之间状态数 $dZ = N(E)dE$

E 到$E+dE$ 之间的电子数 $dN = f(E)N(E)dE$

金属中总的电子数

$$N = \int_0^{\infty} f(E)N(E)dE$$

—— 取决于费米统计分布函数和电子的能态密度函数



$T=0\,K$ 费米能级 E_F^0 $\begin{cases} f(E)=1, & E<E_F^0 \\ f(E)=0, & E>E_F^0 \end{cases}$

金属中总的电子数 $N=\int_0^{\infty} f(E)N(E)dE=\int_0^{E_F^0} N(E)dE$

自由电子的能态密度 $N(E)=\boxed{4\pi V(\frac{2m}{h^2})^{3/2}}E^{1/2}$

$$C=4\pi V(\frac{2m}{h^2})^{3/2} \quad N(E)=CE^{\frac{1}{2}} \quad N=\frac{2}{3}C(E_F^0)^{3/2}$$

自由电子的费密能级 $E_F^0=\frac{h^2}{2m}(3n\pi^2)^{2/3}$ $n=\frac{N}{V}$

$T = 0\,K$ 电子的平均能量 —— 平均动能

$$dN = N(E)dE \qquad dN = CE^{1/2}dE$$

$$E_{Kin} = \frac{\int EdN}{N} = [C\int_0^{E_F^0} E^{3/2}dE]/[C\int_0^{E_F^0} E^{1/2}dE] \qquad E_{Kin} = \frac{3}{5}E_F^0$$

结论：在绝对零度下，电子仍具有相当大的平均能量

—— 电子满足泡利不相容原理，每个能量状态上只能容许两个自旋相反的电子

—— 所有的电子不可能都填充在最低能量状态

$T \neq 0\,K$ 电子的费米能量 E_F

总的电子数 $N = \int_0^{\infty} f(E) N(E) dE$

引入函数 $Q(E) = \int_0^{E} N(E) dE$

—— 能量E以下的量子态总数

能态密度 $N(E) = Q'(E)$

应用分部积分 $N = f(E) Q(E)\Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} Q(E)(-\frac{\partial f}{\partial E}) dE$

$$N = f(E)Q(E)\Big|_0^{\infty} + \int_0^{\infty} Q(E)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

$$Q(E) = \int_0^{E} N(E)dE$$

$$N(E) = Q'(E)$$

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

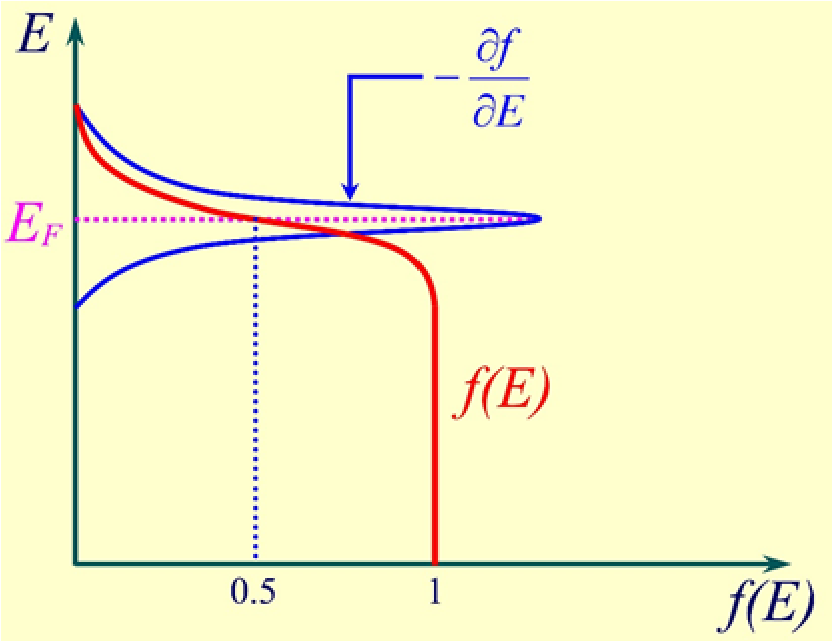
因为 $E \Rightarrow 0,\ \ Q(E) \Rightarrow 0$

$E \Rightarrow \infty,\ \ f(E) \Rightarrow 0$

$$f(E)Q(E)\Big|_0^{\infty} = 0$$

$$N = \int_0^{\infty} Q(E)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

$$N=\int_{0}^{\infty}Q(E)\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)dE$$



分布函数 $f(E)=\dfrac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}$

$$-\frac{\partial f}{\partial E}=\frac{1}{k_BT}\cdot\frac{1}{\left(e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1\right)\left(e^{-\frac{E-E_F}{k_BT}}+1\right)}$$

—— $E-E_F$ 的偶函数

$$N=\int_{-\infty}^{\infty}Q(E)\left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right)dE$$

—— 只在 $E-E_F$ 附近有显著的值，具有δ函数特点

$$N=\int_{-\infty}^{\infty}Q(E)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE \qquad Q(E)=\int_{0}^{E}N(E)dE$$

—— 将 $Q(E)$ 在 E_F 附近按泰勒级数展开

$$Q(E)=Q(E_F)+Q'(E_F)(E-E_F)+\frac{1}{2}Q''(E_F)(E-E_F)^2+\cdots$$

—— 保留到二次项

$$N=Q(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(-\frac{\partial f}{\partial E})dE+Q'(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

$$+\frac{1}{2}Q''(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)^2(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

$$N = Q(E_F)\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}(-\frac{\partial f}{\partial E})dE} + Q'(E_F)\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE}$$

$$+\frac{1}{2}Q''(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)^2(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

第一项 $-[f(\infty)-f(-\infty)] = -[0-1] = 1$

第二项$(-\frac{\partial f}{\partial E})$是 $E-E_F$ 的偶函数 $\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)(-\frac{\partial f}{\partial E})dE = 0$

$$N = Q(E_F) + \frac{1}{2}Q''(E_F)\int_{-\infty}^{\infty}(E-E_F)^2(-\frac{\partial f}{\partial E})dE$$

$$N = Q(E_F) + \frac{1}{2} Q''(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} (E - E_F)^2 \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) dE$$

$$-\frac{\partial f}{\partial E} = \frac{1}{k_B T} \cdot \frac{1}{\left(e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1\right)\left(e^{-\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1\right)}$$

引入积分变数 $\xi = \dfrac{E - E_F}{k_B T} \quad d\xi = \dfrac{1}{k_B T} dE$

$$N = Q(E_F) + \frac{(k_B T)^2}{2} Q''(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi^2 d\xi}{(e^{\xi} + 1)(e^{-\xi} + 1)}$$

$$N = Q(E_F) + \frac{(k_B T)^2}{2} Q''(E_F) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi^2 d\xi}{(e^{\xi}+1)(e^{-\xi}+1)}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\xi^2 d\xi}{(e^{\xi}+1)(e^{-\xi}+1)} = \frac{\pi^2}{3}$$

$$N = Q(E_F) + \frac{\pi^2}{6} Q''(E_F)(k_B T)^2$$

令 $T \to 0K \quad N = Q(E_F^0) \qquad N = Q(E_F^0) = \int_0^{E_F^0} N(E) dE$

对于一般温度 $T = 300\ K \qquad k_B T = 2.6 \times 10^{-2} \mathrm{eV}$

将 $Q(E_F)$ 按泰勒级数在 E_F^0 附近展开，只保留到第二项

$$N = Q(E_F) + \frac{\pi^2}{6} Q''(E_F)(k_B T)^2$$

$$N = Q(E_F^0) + Q'(E_F^0)(E_F - E_F^0) + \frac{\pi^2}{6} Q''(E_F)(k_B T)^2$$

将Q”(E$_F$)按泰勒级数展开，只保留 $Q''(E_F) \approx Q''(E_F^0)$

$$N = Q(E_F^0) + Q'(E_F^0)(E_F - E_F^0) + \frac{\pi^2}{6} Q''(E_F^0)(k_B T)^2$$

$$N = Q(E_F^0) \qquad\qquad E_F = E_F^0 - \frac{\pi^2}{6}\left(\frac{Q''}{Q'}\right)_{E_F^0} (k_B T)^2$$

$$E_F = E_F^0 \{1 - \frac{\pi^2}{6E_F^0}[\frac{d}{dE} \ln Q'(E)]_{E_F^0} (k_B T)^2\}$$

$$E_F = E_F^0\{1 - \frac{\pi^2}{6E_F^0}[\frac{d}{dE}\ln Q'(E)]_{E_F^0}(k_B T)^2\}$$

因为 $Q(E) = \int_0^E N(E)dE$ $\qquad Q'(E) = N(E)$

$$E_F = E_F^0\{1 - \frac{\pi^2}{6E_F^0}[\frac{d}{dE}\ln N(E)]_{E_F^0}(k_B T)^2\}$$

对于近自由电子 $N(E) \propto E^{1/2}$

$$E_F = E_F^0[1 - \frac{\pi^2}{12}(\frac{k_B T}{E_F^0})^2]$$ —— 温度升高费米能级下降

$$E_F = E_F^0 [1 - \frac{\pi^2}{12} (\frac{k_B T}{E_F^0})^2]$$ —— 温度升高费米能级下降

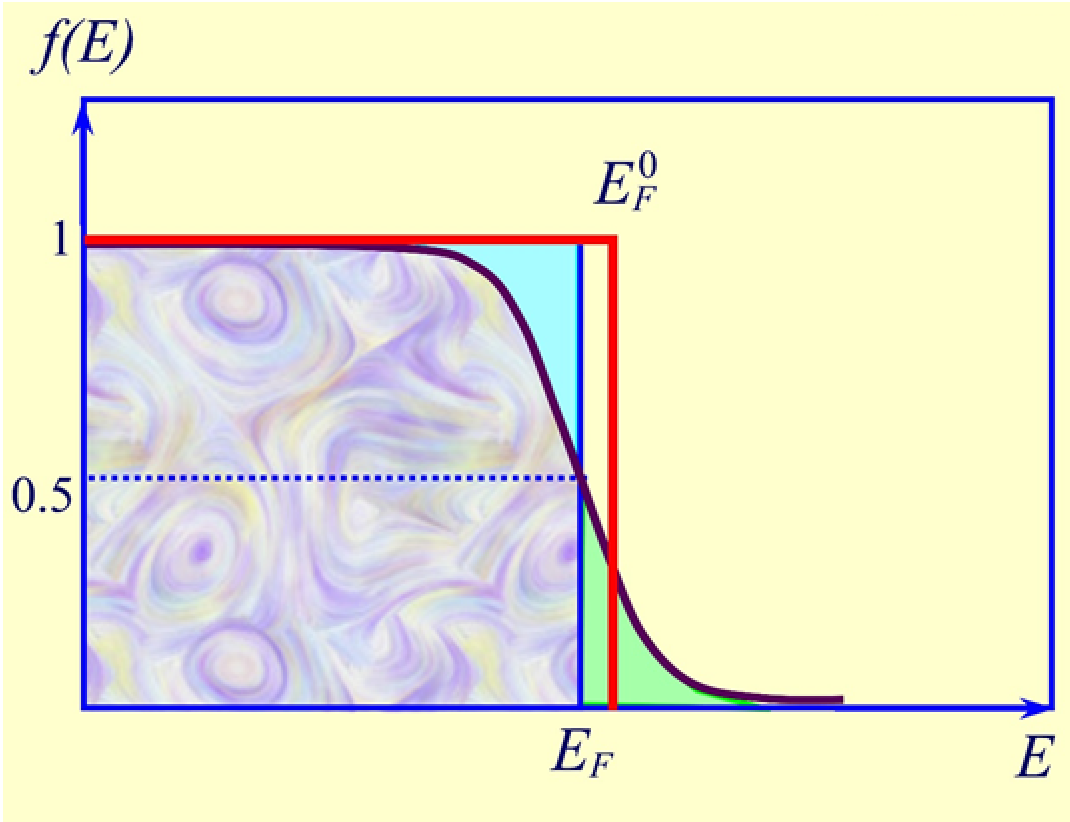
$$T = 300\ K$$

$$k_B T = 2.6 \times 10^{-2}\ \text{eV}$$

$$E_F^0 \sim several\ eV$$

$$\frac{k_B T}{E_F^0} << 1$$

$$E_F \approx E_F^0$$



§ 6.2　功函数和接触势差

1. 热电子发射和功函数

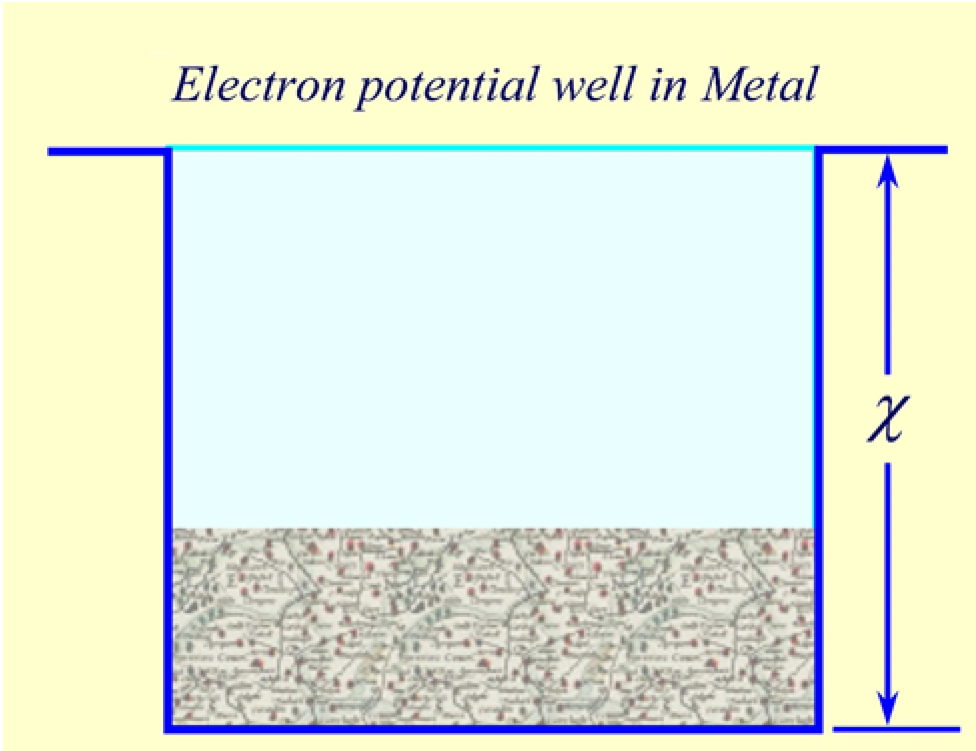
热电子发射电流密度　$j \sim e^{-\frac{W}{k_B T}}$　**W** —— 功函数

金属中电子势阱高度为χ

—— 正离子的吸引

—— 电子从外界获得足够的能量，有可能脱离金属

—— 产生热电子发射电流



经典电子论热电子发射电流密度的计算

—— 电子服从麦克斯韦速率分布率

速度在 $\vec{v} \to \vec{v} + d\vec{v}$ 区间的电子数密度

$$dn = n_0\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}} d\vec{v} \qquad d\vec{v} = dv_x dv_y dv_z$$

—— 电子沿X方向发射，发射电流密度

$$j = n_0\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z \int_{\frac{1}{2}mv^2 > \chi} dv_x (-qv_x) e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}$$

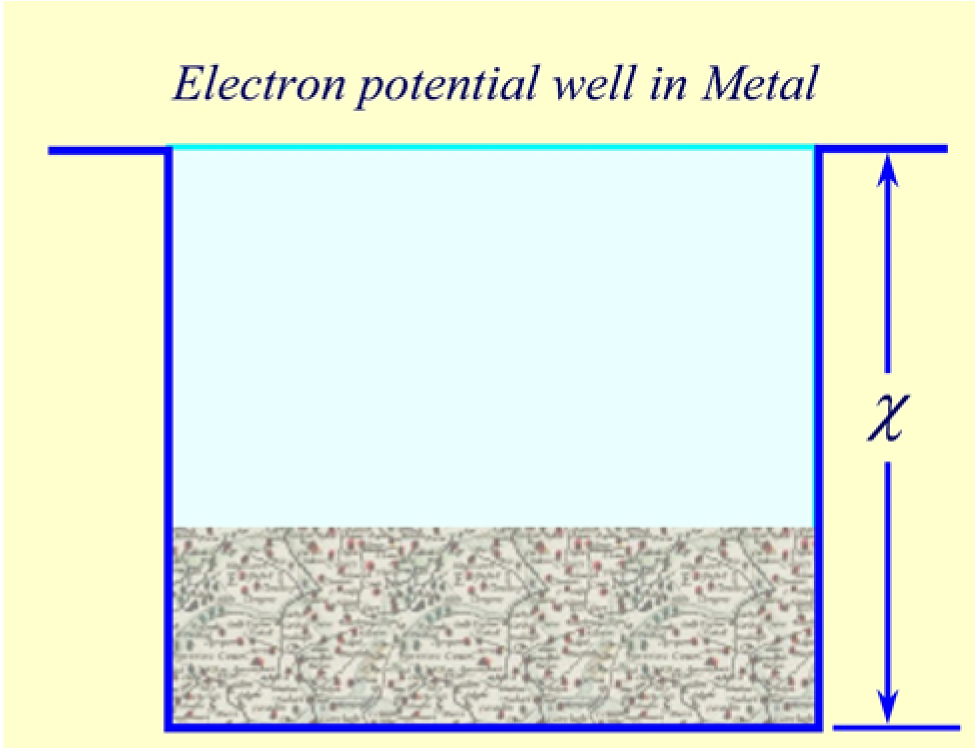
$$j = n_0\left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z \int_{\frac{1}{2}mv^2>\chi} dv_x(-qv_x)e^{-\frac{mv^2}{2k_BT}}$$

$$j = -n_0 q\left(\frac{k_B T}{2\pi m}\right)^{1/2} e^{-\frac{\chi}{k_BT}}$$

—— 比较热电子发射电流密度 $j \sim e^{-\frac{W}{k_BT}}$

功函数 $W = \chi$

$$j = -n_0 q\left(\frac{k_B T}{2\pi m}\right)^{1/2} e^{-\frac{\chi}{k_B T}}$$



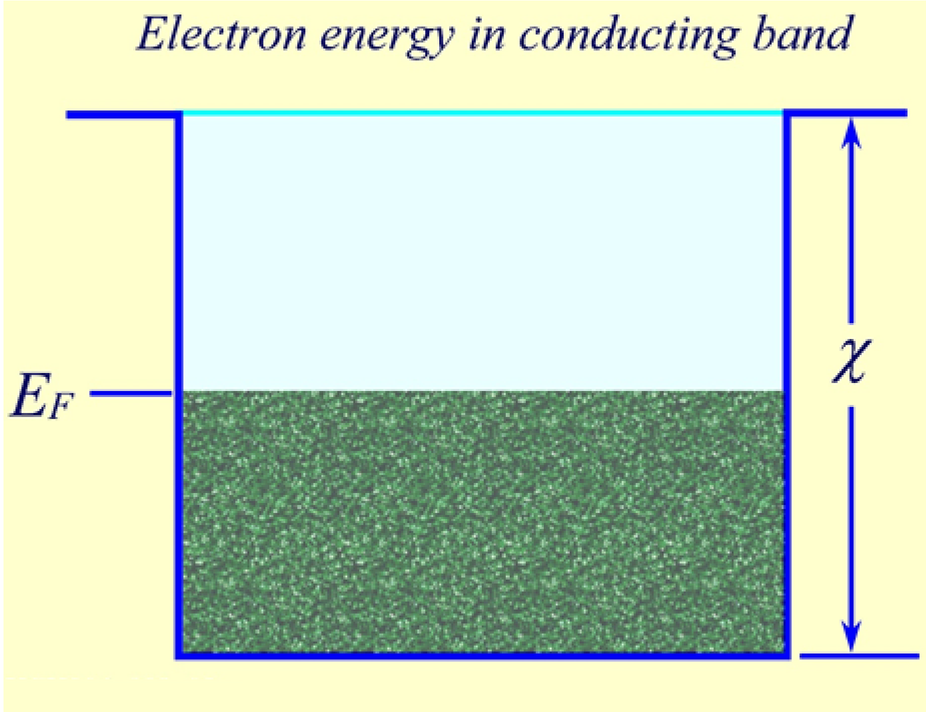
功函数 $W = \chi$

—— 经典电子论中的电子相当于导带中的电子，导带底与势阱对应

χ —— 导带底一个电子离开金属必须做的功

量子理论热电子发射电流密度的计算

—— 电子的能量 $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$



—— 将电子看作准经典粒子

—— 电子的速度

$$\vec{v}(k) = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}}{m} \qquad E = \frac{1}{2}mv^2$$

单位体积（**V=1**）中，在 $d\vec{k}=dk_x dk_y dk_z$ 中量子态数

$$dZ=2\cdot\frac{1}{(2\pi)^3}d\vec{k}$$

$$\vec{v}(k)=\frac{\hbar\vec{k}}{m}$$

对 $\vec{k}=\frac{1}{\hbar}m\vec{v}$ 两边微分

$$dk_x=\frac{1}{\hbar}mdv_x \qquad dk_y=\frac{1}{\hbar}mdv_y \qquad dk_z=\frac{1}{\hbar}mdv_z$$

$$dZ=2\cdot(\frac{m}{2\pi\hbar})^3 d\vec{v}$$

$$d\vec{v}=dv_x dv_y dv_z$$

$$dZ = 2 \cdot (\frac{m}{2\pi\hbar})^3 d\vec{v}$$

费米分布函数 $f(v) = \frac{1}{e^{(\frac{1}{2}mv^2 - E_F)/k_B T} + 1}$

平均电子数 $dn = 2 \cdot (\frac{m}{2\pi\hbar})^3 \frac{1}{e^{(\frac{1}{2}mv^2 - E_F)/k_B T} + 1} d\vec{v}$

离开金属表面满足 $\frac{1}{2}mv^2 - E_F >> k_B T$

$$dn = 2 \cdot (\frac{m}{2\pi\hbar})^3 e^{E_F/k_B T} e^{-mv^2/2k_B T} d\vec{v}$$

$$dn = 2\cdot\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 e^{E_F/k_BT} e^{-mv^2/2k_BT} d\vec{v}$$

与经典结果 $dn = n_0\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2} e^{-mv^2/2k_BT} d\vec{v}$

$$j_{Classical} = -n_0 q\left(\frac{k_BT}{2\pi m}\right)^{1/2} e^{-\frac{\chi}{k_BT}}$$ 对比

$$2\cdot\left(\frac{m}{2\pi\hbar}\right)^3 e^{E_F/k_BT} \xrightarrow{replace} n_0\left(\frac{m}{2\pi k_BT}\right)^{3/2}$$

$$j_{Quantum} = -\frac{4\pi m(k_B T)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{\chi - E_F}{k_B T}}$$

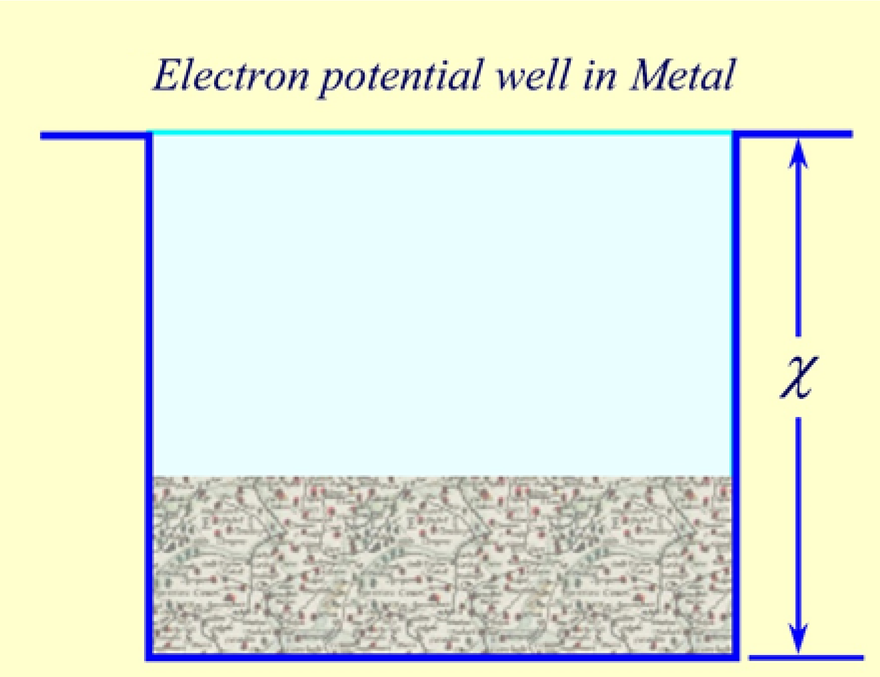
—— 比较热电子发射电流密度 $j \sim e^{-\frac{W}{k_B T}}$

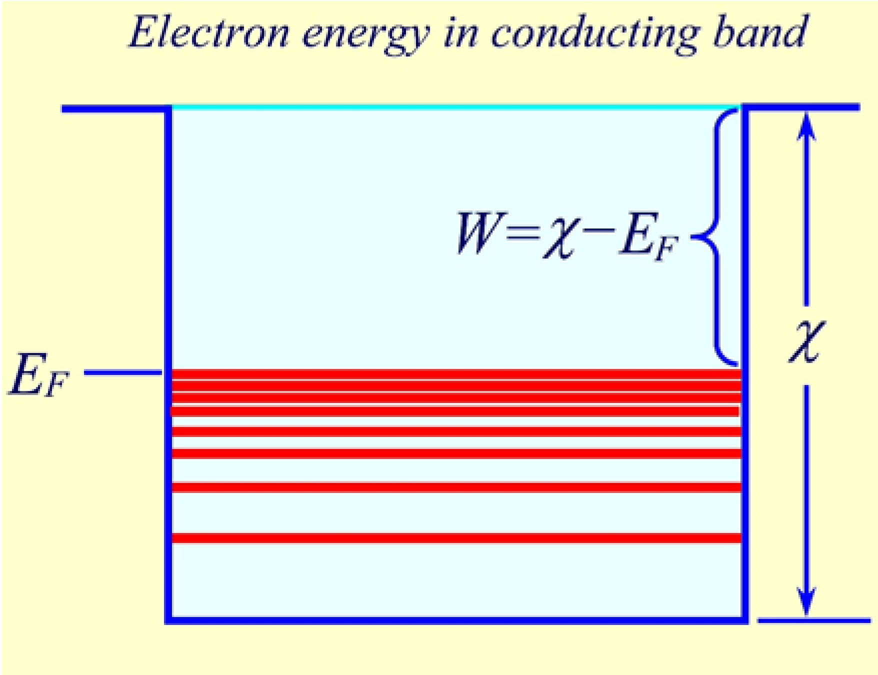
功函数 $W = \chi - E_F$

W —— 导带中费米能级附近的电子离开金属必须做的功

$$j_{Classical} = -n_0 q\left(\frac{k_B T}{2\pi m}\right)^{1/2} e^{-\frac{\chi}{k_B T}} \qquad j_{Quantum} = -\frac{4\pi m (k_B T)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{\chi - E_F}{k_B T}}$$

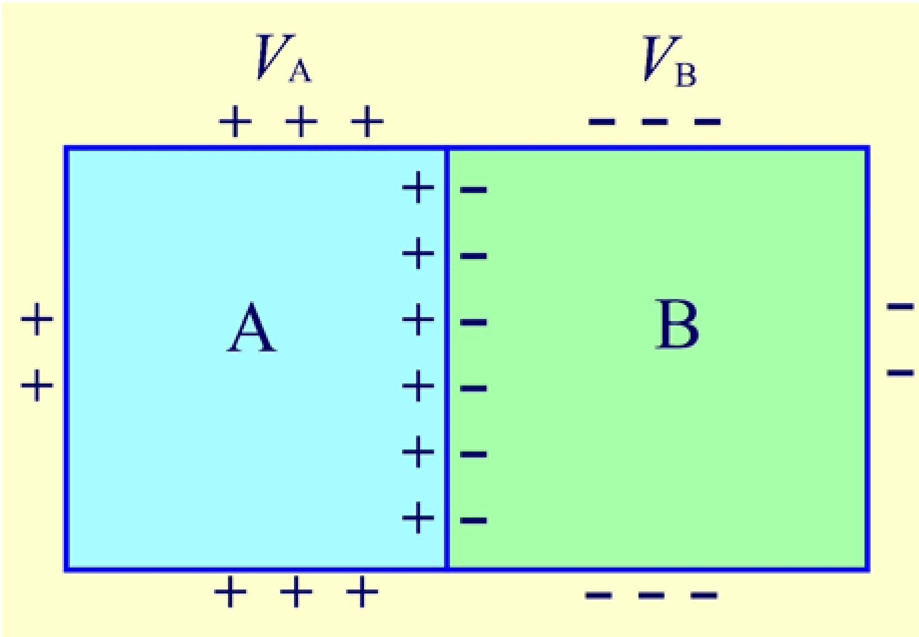
$$W = \chi \qquad W = \chi - E_F$$

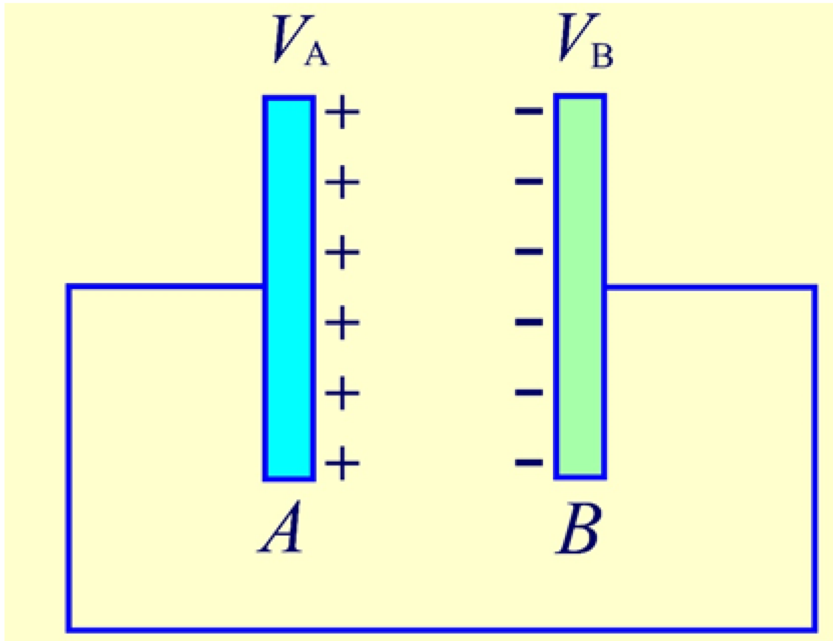




2. 不同金属中电子的平衡和接触电势

—— 任意两块不同的金属**A**和**B**相互接触，由于两块金属的费米能级不同，相互接触时发生电子交换，达到平衡后，在两块金属中产生了接触电势差





接触电势差的计算

单位时间从金属**A**单位表面逸出的电子数 —— 电流密度

$$I_1 = \frac{4\pi m(k_B T)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{W_A}{k_B T}}$$

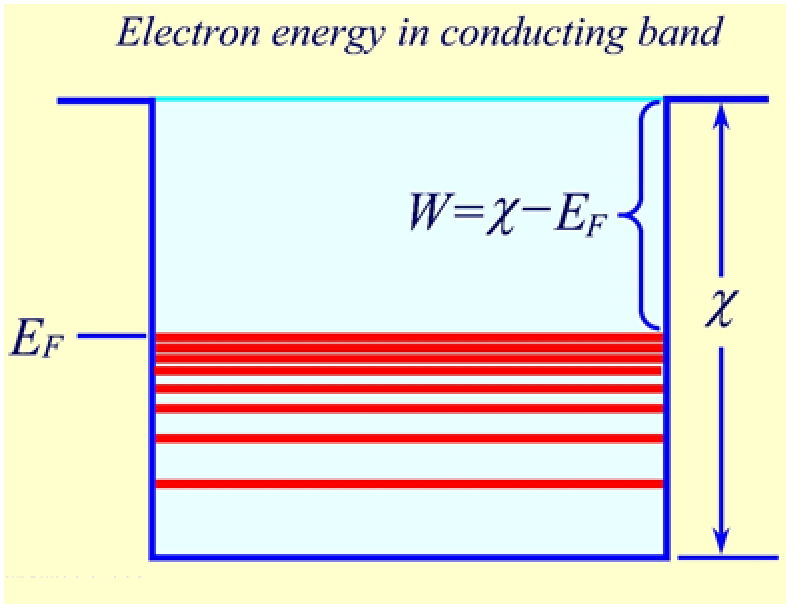
$$W_A = \chi - E_{FA}$$

单位时间从金属**B**单位表面逸出的电子数

$$W_B = \chi - E_{FB}$$

$$I_2 = \frac{4\pi m(k_B T)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{W_B}{k_B T}}$$

如果 $W_A < W_B \qquad E_{FA} > E_{FB}$



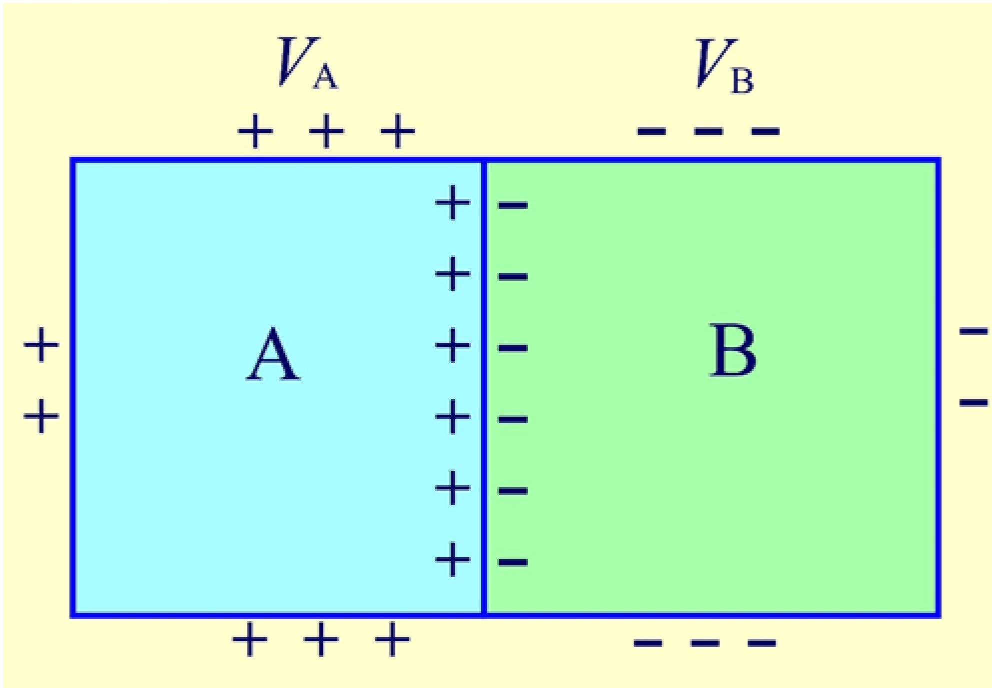
$$I_1 = \frac{4\pi m (k_B T)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{W_A}{k_B T}} \qquad I_2 = \frac{4\pi m (k_B T)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{W_B}{k_B T}}$$

$W_A < W_B \qquad W = \chi - E_F$

$E_{FA} > E_{FB} \qquad I_1 > I_2$

—— **A**板接触面带正电

B板接触面带负电



—— 金属的静电势 $\quad V_A > 0, \quad V_B < 0$

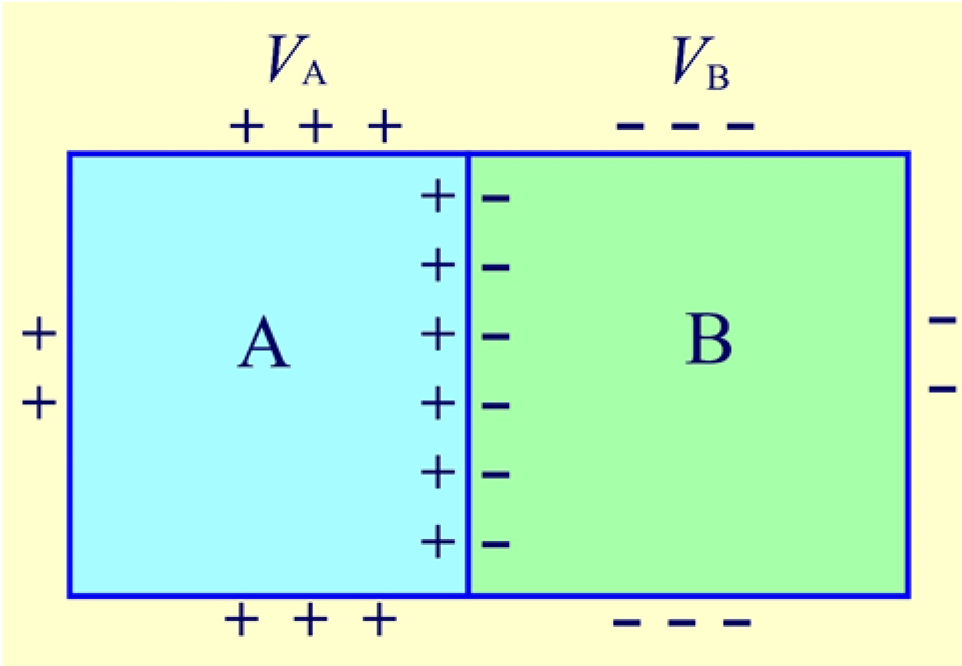
—— 两块金属中的电子分别具有附加的静电势能

$$-qV_A < 0 \quad and \quad -qV_B > 0 \qquad\qquad V_A > 0, \quad V_B < 0$$

金属**A**和金属**B**发射电子数

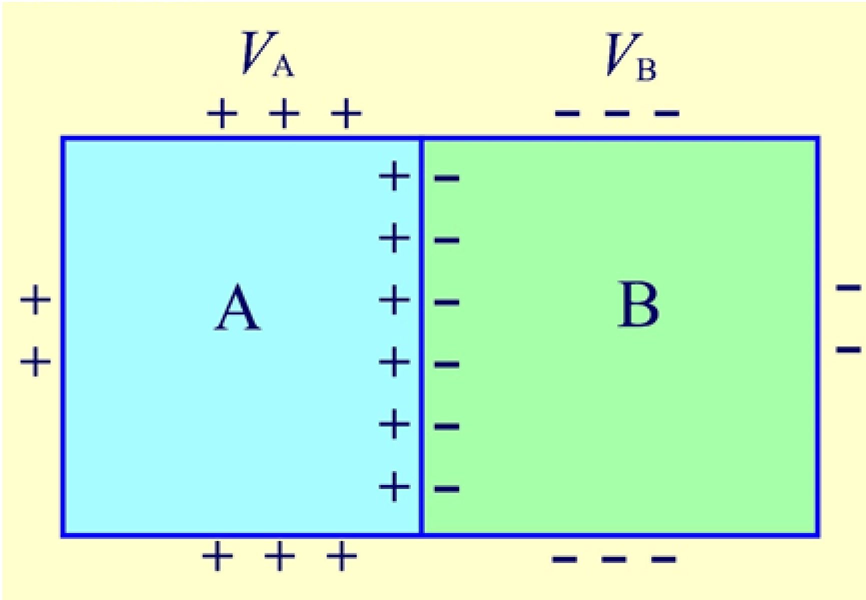
$$I_1' = \frac{4\pi m(k_BT)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{W_A + qV_A}{k_BT}}$$

$$I_2' = \frac{4\pi m(k_BT)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{W_B + qV_B}{k_BT}}$$



$$I_1' = \frac{4\pi m(k_B T)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{W_A + qV_A}{k_B T}}$$

$$I_2' = \frac{4\pi m(k_B T)^2 q}{(2\pi\hbar)^3} e^{-\frac{W_B + qV_B}{k_B T}}$$

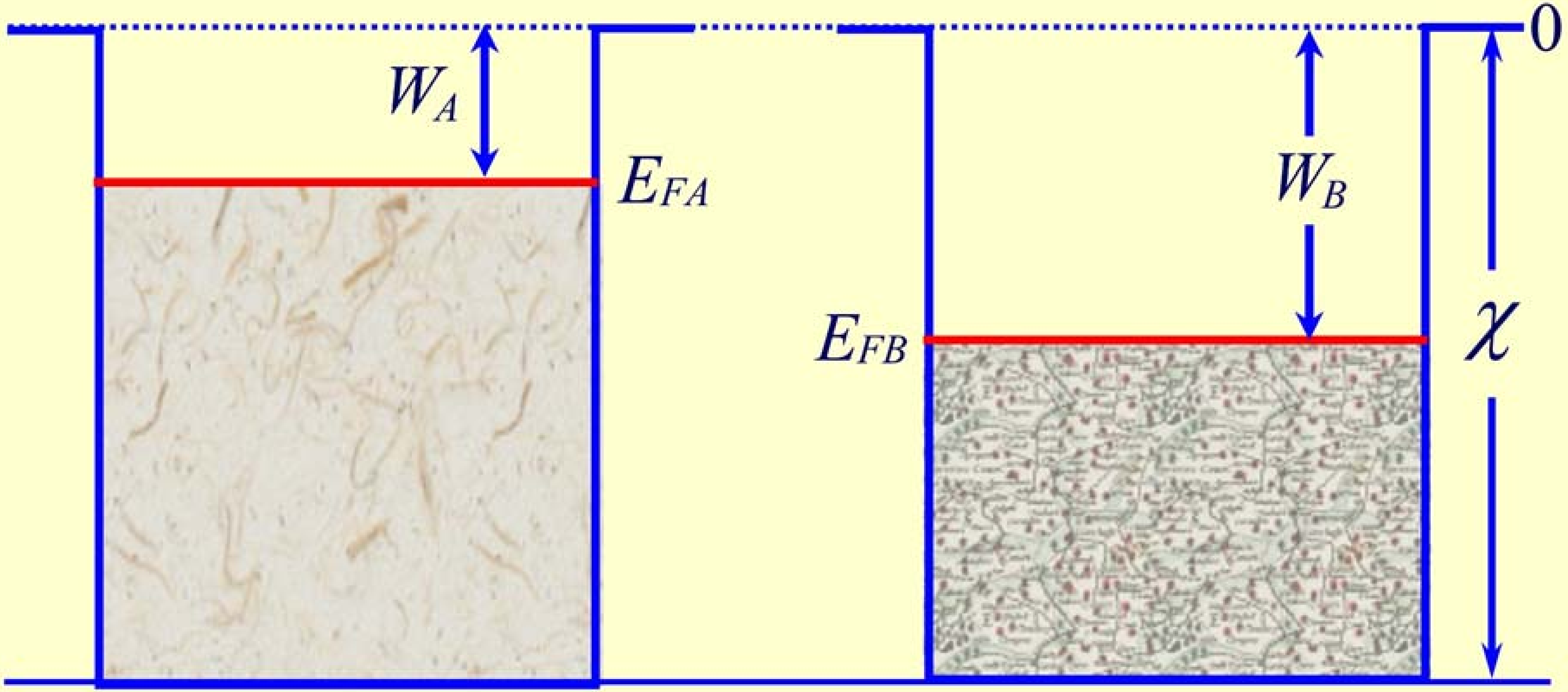


—— 当两块金属达到平衡时 $I_1' = I_2'$

$$W_A + qV_A = W_B + qV_B$$

接触电势差 $V_A - V_B = (W_B - W_A)/q$

接触电势差 $V_A - V_B = (W_B - W_A)/q$

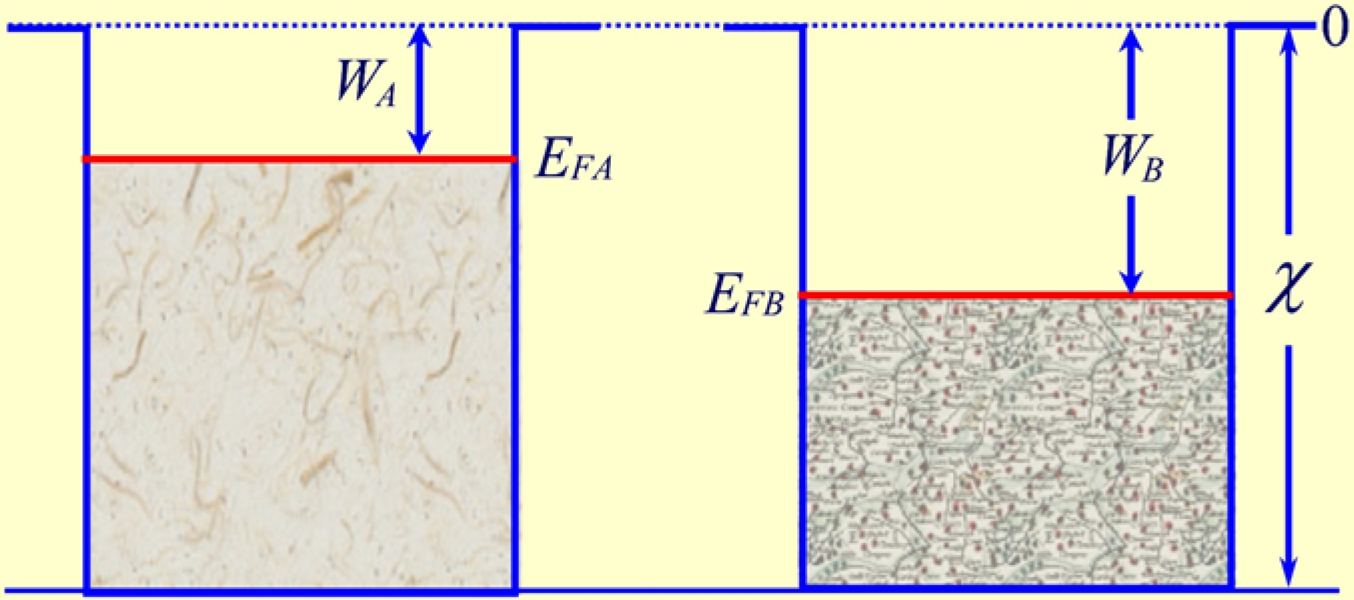


$$W_A + qV_A = W_B + qV_B$$

—— 接触电势差来源于两块金属的费米能级不一样高

—— 电子从费米能级较高的金属流向费米能级较低的金属

—— 达到平衡时，两块金属的费米能级相同，接触电势差补偿了原来两块金属的费米能级差



$$V_A > 0, \quad V_B < 0$$

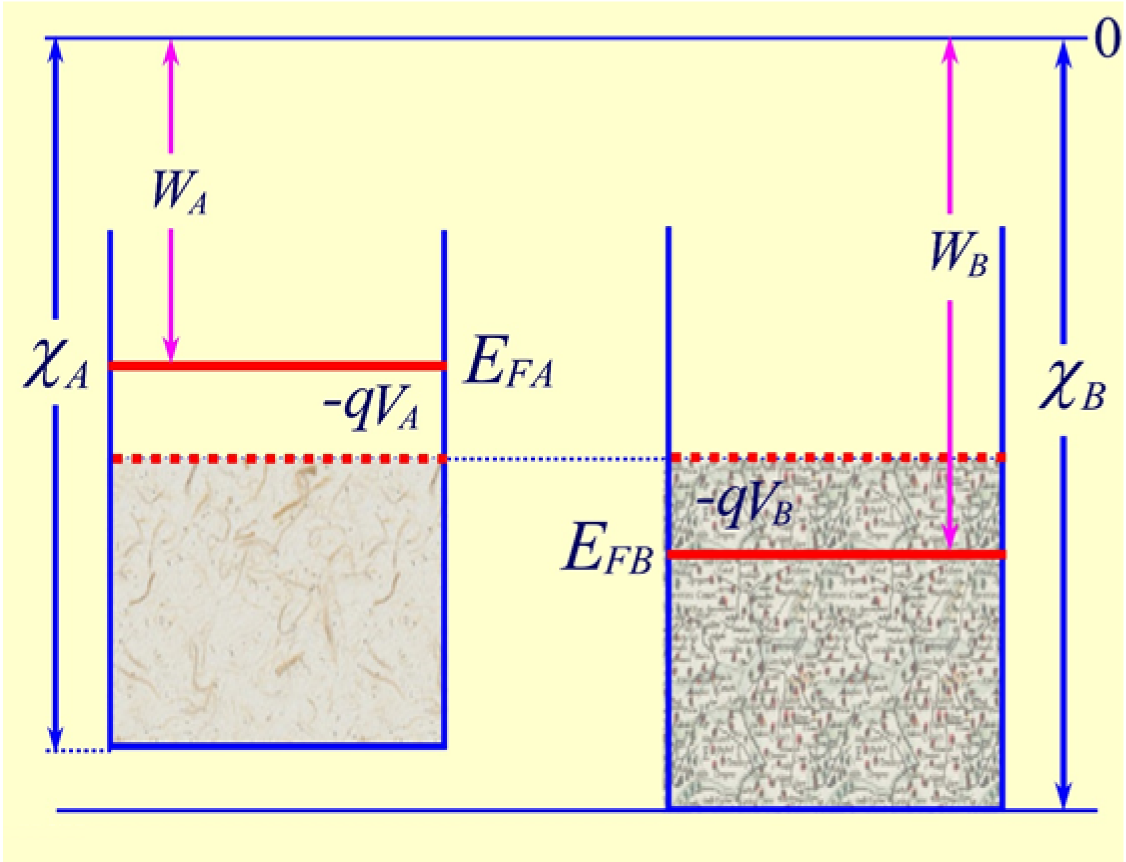
接触电势差

$$V_A - V_B = \frac{W_B - W_A}{q}$$

—— 如果两种金属的真空能级不同

$$W_A = \chi_A - E_{FA}$$

$$W_B = \chi_B - E_{FB}$$



$$V_A - V_B = \frac{E_{FA} - E_{FB}}{q} + \frac{\chi_A - \chi_B}{q}$$

金属化学势

- 金属化学势序列：铝，锌，锡，镉，铅，锑，铋，汞，铁，铜，银，金，铂，钯。
- 当其中任何一种金属与排在其后的金属接触时，它本身的电势将高于后者。
- 温差电动势：两种不同的金属接成闭合回路，并在两个接触点处于不同温度时，回路产生温差电动势。
- 泊尔贴效应：当电流流过两个金属接触点时，一个点吸热，一个点放热。它是温差电动势的逆效应。
- 汤姆孙效应：当电流流过具有温度梯度的导体时，导体中除放出焦耳热外，还会在导体内出现放热和吸热现象。