

2023春半导体物理

关于强电离区的补充讨论

宋冰睿 王民泽

2023年4月23日



3-12 杂质半导体中的电离

- 若硅中施主杂质电离能 $\Delta E_D = 0.04 \text{ eV}$, 施主杂质浓度分别为 10^{15} cm^{-3} , 10^{18} cm^{-3} 。计算 ① 99% 电离; ② 90% 电离; ③ 50% 电离时温度各为多少?

对于 99% 和 90% 电离, 可以认为此时位于强电离区 (P72), 将 N_c 表达式代入上题中的 D_- 表达式, 可计算得 (式 3-54, P72)

$$\left(\frac{\Delta E_D}{k_0}\right)\left(\frac{1}{T}\right) = \left(\frac{3}{2}\right)\ln T + \ln \left[\frac{D_-}{N_D} \cdot \frac{(2\pi k_0 m_n^*)^{3/2}}{h^3}\right]$$

$$\text{① 99\% 电离时, } D_- = 1\%, \text{ 则有 } \begin{cases} N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3} \Rightarrow \frac{464.21}{T} = \frac{3}{2}\ln T - 3.64 \Rightarrow T = 127.72\text{K} \\ N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3} \Rightarrow \frac{464.21}{T} = \frac{3}{2}\ln T - 10.55 \Rightarrow T = 1411.70\text{K} \end{cases}$$

$$\text{② 90\% 电离时, } D_- = 10\%, \text{ 则有 } \begin{cases} N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3} \Rightarrow \frac{464}{T} = \frac{3}{2}\ln T - 1.33 \Rightarrow T = 86.58\text{K} \\ N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3} \Rightarrow \frac{464}{T} = \frac{3}{2}\ln T - 8.24 \Rightarrow T = 469.73\text{K} \end{cases}$$

宋冰睿 王民泽

2023春半导体物理习题课

2023/4/21

10

本题其实仍存在未解之处¹——第(1)问 $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时, 按强电离区求得的 $T \sim 1400\text{K}$, 是不是太高了? 此时, 根据 n_i 的表达式 3-34, 并计及 $E_g(T)$ 随温度的变化 (P24), 不难算得

$$\frac{n_i(1400)}{n_i(300)} \approx 1.456 \times 10^9 \quad (1)$$

结合表 3-2 给出的 $n_i(300) = 1.02 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$, 得到 $n_i(1400) \approx 1.485 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3} > 10N_D$. 因此本征激发已渐渐占据主导地位, 处于过渡区或本征激发区, 似不能直接套用强电离区的公式 (因为对应公式是根据略去了本征空穴浓度的简化电中性条件 3-47 推导出的).

然而按照惯常思路, 99% 电离正处于 "将要完全电离" 的边缘. 此时杂质肯定几乎完全电离 (因而排除低温弱电离区 & 中间电离区), 但又没有 "物理意义上的" 全部电离 (因而排除 (*) 过渡区 & 本征激发区), 即只能位于强电离区. 为何会出现这样的矛盾呢?

结合 P71 下方的叙述 "若施主全部电离的大约标准是 90% 的施主杂质电离" 容易想到: 为什么不是 99%, 99.9% 甚至 100% 呢? 倘若果真如此, 对应的 D_- 即为 1%, 0.1% 和 0%, 那么根据 P71 最后一式 (其由式 3-52 改写而来), 将

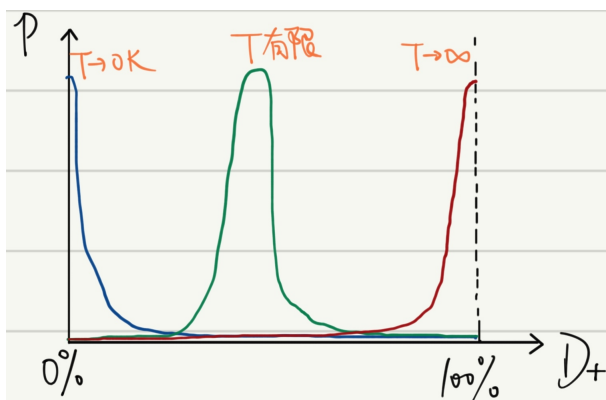
¹感谢周星辰同学的提问.

直接导致求得的"杂质全部电离的浓度上限 N_D "越来越小,直至 $\rightarrow 0$. 换句话说,要想杂质真正完全电离,除非 $N_D \rightarrow 0$.

因此只能认为, 90%就是约定俗成的电离度上限, 或说处于强电离区的电离度上限. 一旦超过该电离度, 就进入过渡区或本征激发区了. 但该观点尚未得到物理意义上的诠释, 即, 为何升至本征激发占主导地位的温度时仍有杂质没有电离?

根据量子力学的概率诠释思想不难解释. 在原先考虑某一温度下的电离度时, 我们总认为它是可由温度唯一确定的值. 这是经典解释; 而根据概率幅观点, 即使温度保持不变, 在不同时刻对电离度作的"观测", 得到的结果也不一定相同. 测得的电离度可能按特定的概率分布在一定百分比内波动.

对照下图或许可以更清晰地理解这一思路. 在一般的量子力学语境下, "概率密度幅"产生离散的维度一般是实空间或动量空间, 即波函数(的模方); 而现在, 我们不过是将图像上横轴的维度换成了有限区间(0%~100%)的电离度(不妨记为 $D_+ = 1 - D_-$).



考虑高低温的两种极端情况.

- 0K时, 概率密度函数 $p(D_+, T=0)$ 成为原点处的Dirac函数——可严格认为此时电离度不可能取0%以外的其它值, 因为此时没有任何能量可以激发杂质使其电离.
- 高温时(例如上述的1400K), 对应的 D_+ 约为99%. 但99%并非与0%对称的"极端情况", 100%才是. 然而可以预见, 无论怎么升高温度, 100%的 D_+ 都是达不到的. 这可以用化学反应平衡的观点来理解. 不妨认为杂质(1)完全不电离($D_+ = 0\%$)和(2)完全电离($D_+ = 100\%$)是该反应的两种端点状态, 并认为初始时杂质或处于(1)状态, 或处于(2)状态. 则在温度一定的情况下, 无论(1)(2)何种状态, 最终达到的电离度("反应进程")是相同的, 且这个终态不可能是(1)(2)两者其一. 上面所说的 $D_+ = 0\%$ 是由于0K本身即为理想情形, 不可能真实达到. 因此可以合理外推, 由于热力学温度没有上限(暂不考虑Planck温度), 完全电离的(2)状态也是达不到的. $p(D_+, T)$ 始终无法成为100%处的Dirac函数.

综上, 第一页末尾(*)处的叙述是不严谨的. 我们只能认为此时就是过渡区或本征激发区, 甚至即使进入本征激发区后的很高温度, 杂质还是不能"物理意义上的"全部电离.

由该结论衍生出的问题非常明显——1400K的答案不准确. 为保险起见, 使用原始的电中性条件3-42来求解, 不过给出的温度数值不在正常预期. 对此, 我们尚未找到很好的解决方法; 如同学们就此问题有自己的思路和观点, 欢迎联系我们讨论~