

半导体物理和器件笔记

Huang Andong
andonghuang1991@gmail.com

March 11, 2017

Contents

| | |
|---------------------------|-----------|
| 1 量子力学 | 4 |
| 1.1 量子力学原理 | 4 |
| 1.1.1 量子能量 | 4 |
| 1.1.2 波粒二象性 | 4 |
| 1.1.3 不确定性原理 | 4 |
| 1.2 薛定谔波动方程 | 5 |
| 1.2.1 波动方程 | 5 |
| 1.2.2 波动方程的物理解释 | 6 |
| 1.2.3 边界条件 | 6 |
| 1.3 薛定谔波动方程的应用 | 6 |
| 1.3.1 空间中的自由电子 | 6 |
| 1.3.2 无限势能井 | 7 |
| 1.3.3 阶跃势能井 | 9 |
| 1.3.4 势垒和隧道效应 | 11 |
| 1.4 原子的波理论 | 12 |
| 2 固体量子理论简介 | 14 |
| 2.1 能带的形成 | 14 |
| 2.2 固体中电的传导 | 14 |
| 2.2.1 能带和键模型 | 14 |
| 2.2.2 漂移电流 | 14 |
| 2.2.3 电子等效质量 | 15 |
| 2.2.4 空穴的概念 | 16 |
| 2.3 状态密度方程 | 17 |
| 2.3.1 数学推导 | 17 |
| 2.3.2 扩展到半导体 | 18 |
| 2.4 统计力学 | 19 |
| 2.4.1 统计规律 | 19 |

| | | |
|----------|--------------------|-----------|
| 2.4.2 | 费米-狄拉克概率函数 | 19 |
| 2.4.3 | 分布函数和费米能级 | 20 |
| 3 | 平衡态半导体 | 23 |
| 3.1 | 半导体中的载流子 | 23 |
| 3.1.1 | 电子和空穴的平衡分布 | 23 |
| 3.1.2 | n_0 方程和 p_0 方程 | 24 |
| 3.1.3 | 本征载流子浓度 | 26 |
| 3.1.4 | 费米能级位置 | 27 |
| 3.2 | 掺杂原子与能级 | 27 |
| 3.2.1 | 定型描述 | 28 |
| 3.2.2 | 电离能 | 29 |
| 3.3 | 非本征半导体 | 29 |
| 3.3.1 | 电子和空穴的平衡状态分布 | 29 |
| 3.3.2 | n_0 和 p_0 的乘积 | 31 |
| 3.4 | 施主和受主的统计学分布 | 31 |
| 3.4.1 | 概率分布函数 | 31 |
| 3.4.2 | 完全电离和束缚态 | 31 |
| 3.5 | 电中性状态 | 31 |
| 3.5.1 | 补偿半导体 | 31 |
| 3.5.2 | 平衡电子和空穴浓度 | 32 |
| 3.6 | 费米能级的位置 | 33 |
| 4 | 载流子运输现象 | 35 |
| 4.1 | 载流子的漂流运动 | 35 |
| 4.1.1 | 漂移电流密度 | 35 |
| 4.1.2 | 迁移率 | 37 |
| 4.1.3 | 电导率 | 38 |
| 4.1.4 | 饱和速度 | 38 |
| 4.2 | 载流子扩散 | 39 |
| 4.2.1 | 总电流密度 | 40 |
| 4.3 | 杂质的梯度分布 | 40 |
| 4.3.1 | 感应电场 | 40 |
| 4.3.2 | 爱因斯坦关系 | 41 |
| 5 | 半导体中过剩的载流子 | 44 |
| 5.1 | 载流子的产生与复合 | 44 |
| 5.1.1 | 平衡状态半导体 | 44 |

| | | |
|----------|-----------------------------|-----------|
| 5.1.2 | 过剩载流子的产生与复合 | 45 |
| 5.2 | 过剩载流子的性质 | 46 |
| 5.2.1 | 连续性方程 | 46 |
| 5.2.2 | 与时间有关的扩散项 | 47 |
| 5.3 | 双极运输 | 48 |
| 5.3.1 | 双极运输方程的推导 | 48 |
| 6 | pn 结 | 49 |
| 6.1 | 零偏置下的 pn 结 | 49 |
| 6.1.1 | 电场强度 | 50 |
| 6.1.2 | 空间电荷区宽度 | 52 |
| 6.2 | 反向偏置 | 52 |
| 6.2.1 | 空间电荷区宽度与电场 | 53 |
| 6.2.2 | 结电容 | 53 |
| 6.2.3 | 单边突变结 | 54 |
| 7 | pn 结二极管 | 56 |
| 7.1 | pn 结电流 | 56 |
| 7.1.1 | 边界条件 | 56 |
| 7.1.2 | 少数载流子分布 | 58 |
| 7.1.3 | 理想 pn 结电流 | 59 |
| 8 | 金属 - 半导体和半导体异质结 | 61 |
| 8.1 | 肖特基势垒二极管 | 61 |
| 8.1.1 | 性质上的特征 | 61 |
| 8.1.2 | 理想结的特性 | 62 |
| 8.1.3 | 势垒高度的非理想因素 | 64 |
| 8.1.4 | 表面状态 | 66 |
| 8.1.5 | 电压电流关系 | 66 |
| 9 | MOSFET(金属氧化物半导体场效应管) | 68 |
| 9.1 | MOS 电容 | 68 |

Chapter 1

量子力学

1.1 量子力学原理

1.1.1 量子能量

下面介绍一些基本的概念和公式. 普朗克在 1900 年提出了辐射是以离散量子态进行的.

$$E = h\nu, \quad h = 6.625 \times 10^{-34} J-s \quad (1.1)$$

$$\nu = v/\lambda \quad (1.2)$$

h 为普朗克常量, ν 是辐射的频率.

Definition 1.1 (逸出功 (Work Function)). 把电子从材料激发到真空需要的最小的能量叫做逸出功, 剩下的多余的能量都转化为了光电子的动能. 光电子最大的动能可以写成

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = h\nu - \Phi = h\nu - h\nu_0 \quad (\nu \geq \nu_0) \quad (1.3)$$

$h\nu$ 是入射光子的能量, 而 $\Phi = h\nu_0$ 是该材料的逸出功.

1.1.2 波粒二象性

德布罗意提出了波粒二象性假设. 粒子的波长为

$$\lambda = h/p \quad (1.4)$$

p 为例子的动量.

1.1.3 不确定性原理

海森伯格 1927 年提出了不确定性原理. 动量 Δp 和位置 Δx 的不确定性

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34} J-s \quad (1.5)$$

能量 ΔE 和时间 Δt 的不确定性

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (1.6)$$

不确定原理的一个结果就是, 我们不能决定一个电子的精确位置, 而只能决定在某个位置发现该例子的概率.

1.2 薛定谔波动方程

薛定谔在 1926 年提出了一种叫波动力学的理论, 融合了普朗克的量子理论和德布罗意的波粒二象性. 在波粒二象性的基础上, 我们使用波动理论来描述晶格中电子的运动, 薛定谔波动方程正是用来描述此种运动.

1.2.1 波动方程

一维非相对论薛定谔波动方程为

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = j\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1.7)$$

$\Psi(x, t)$ 是波动方程, $V(x)$ 是与时间无关的势能函数, 显然势能函数只和电子的空间位置相关. 波动方程与时间和空间都相关, 可以写成如下的形式

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \phi(t) \quad (1.8)$$

利用分离变量法可以得到

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) = j\hbar \frac{1}{\phi(t)} \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = \eta \text{ (constant)} \quad (1.9)$$

很容易得到

$$\phi(t) = e^{-j(\eta/\hbar)t} \quad (1.10)$$

由于

$$E = h\nu = \hbar\omega/2\pi = \hbar\omega \quad (1.11)$$

于是有角频率 $\omega = E/\hbar = \eta/\hbar$. 也即 $\eta = E$ (E 为电子总能量)

$$\phi(t) = e^{-j(\eta/\hbar)t} = e^{-j(E/\hbar)t} = e^{-j\omega t} \quad (1.12)$$

然后薛定谔方程中与时间无关的部分为

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) = E \quad (1.13)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0 \quad (1.14)$$

其中 $V(x)$ 为例子的势能, E 是粒子的总能量.

1.2.2 波动方程的物理解释

总的波动方程为

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) = \psi(x)e^{-j(E/\hbar)t} = \psi(x)e^{-j\omega t} \quad (1.15)$$

Max Born 在 1926 年假设 $|\Psi(x, t)|^2 dx$ 是在某个时间点在 x 与 dx 之间发现粒子的概率. 因此 $|\Psi(x, t)|^2$ 也叫做概率密度方程. 且有

$$|\Psi(x, t)|^2 = \left| \psi(x)e^{-j(E/\hbar)t} \right|^2 = |\psi(x)|^2 \quad (1.16)$$

概率密度方程和时间无关.

1.2.3 边界条件

由于 $|\Psi(x, t)|^2$ 代表概率密度, 那么对于某个粒子来说, 在全空间发现粒子的概率必然为 1

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (1.17)$$

波动方程还有两个其他的条件

(1) $\psi(x)$ 必须有界, 单值且连续.

(2) $\partial\psi(x)/\partial x$ 必须有界, 单值且连续.

如果第一个条件不满足, 说明在某个位置发现粒子的概率无穷大, 与不确定性原理矛盾. 对于公式 (1.14), 若总能量 E 和势能 V 都有限, 那么 $\psi(x)$ 二阶导数也有限, 这就说明 $\psi(x)$ 的一阶导数连续, 而一阶导数反映了粒子的动量, 因此也必须是有限和单值的. 最后, 有限的一阶导数也意味着方程本身是连续的.

1.3 薛定谔波动方程的应用

1.3.1 空间中的自由电子

自由空间中的电子, 如果没有受到外界力的作用, 那么其势能 $V(x)$ 是一个常量, 且有 $E > V(x)$ (总能量大于其势能, 即动能不为零). 为了简单起见, 我们假设 $V(x) = 0$, 然后 (1.14) 可以改写成

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (1.18)$$

上式的解为

$$\psi(x) = A \exp\left[\frac{jx\sqrt{2mE}}{\hbar}\right] + B \exp\left[\frac{-jx\sqrt{2mE}}{\hbar}\right] \quad (1.19)$$

我们简写为

$$\psi(x) = A \exp(jkx) + B \exp(-jkx), \quad \text{where } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (1.20)$$

k 被称为波动数. 总的波动方程为

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) = A \exp[j(kx - \omega t)] + B \exp[-j(kx + \omega t)] \quad (1.21)$$

上式说明自由空间的粒子的波动方程为一个行波. 假设粒子在某时刻向 $+x$ 方向传播, 则 $B = 0$.

$$\Psi(x, t) = A \exp[j(kx - \omega t)] \quad (1.22)$$

其中 k 为波数

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{\sqrt{p^2}}{\hbar} = \frac{p}{\hbar} \quad (1.23)$$

或者可以写成

$$p = \hbar k \quad (1.24)$$

结合德布罗意波动公式

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p} = \frac{2\pi\hbar}{\hbar k} = \frac{2\pi}{k} \quad (1.25)$$

上式说明一个给定能量的自由空间粒子, 也将具有给定的波长和动量. 而概率密度则为常数 AA^* , 说明这个粒子在空间里每个位置出现的概率相等.

1.3.2 无限势能井

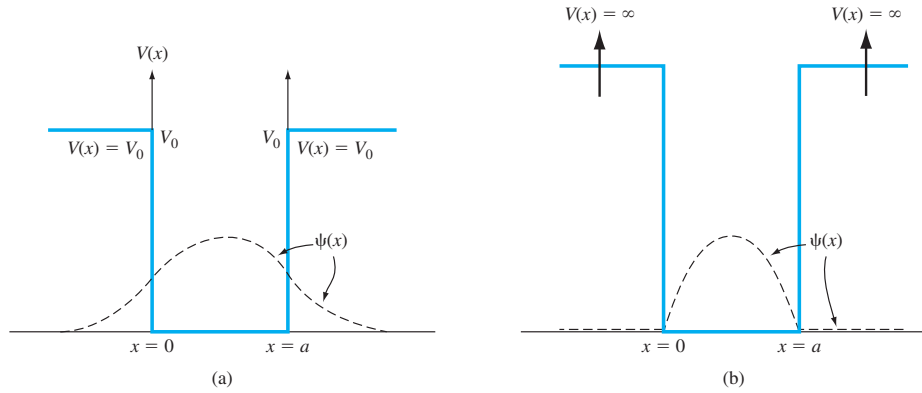


Figure 1.1: (a) 势能函数处处有界 (b) 势能函数在某些区域无界

这里重新回顾下时间无关的薛定谔波动方程

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0 \quad (1.26)$$

对于图1.1中的情况 (b) 势能函数在 I 和 III 区域无界, 则若 E 有界, 则 $(E - V(x))$ 无界, 那么在这两个区域 $\psi(x) = 0$. 一个粒子无法穿透无限势能壁垒, 因此在区域 I 和 III 中发现粒子的概率为 0. 对于区域 II ($V = 0$), 则有

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (1.27)$$

上述方程的解为

$$\psi(x) = A_1 \exp(jkx) + A_2 \exp(-jkx), \quad \text{where } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (1.28)$$

结合两个边界条件

$$\psi(x=0) = \psi(x=a) = 0 \quad (1.29)$$

得到 $A_1 = 0$, 且 $A_2 \sin ka = 0$, 故

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad (1.30)$$

然后利用概率密度归一化条件有

$$\int_0^a A_2^2 \sin^2(kx) dx = 1 \quad (1.31)$$

可得到

$$A_2 = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (1.32)$$

时间无关的波动方程可以表示为

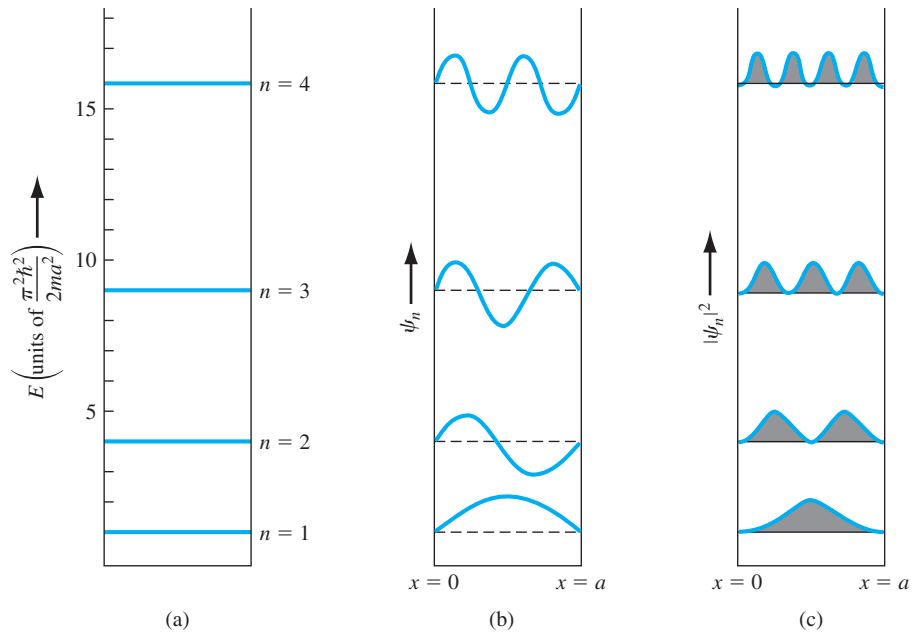


Figure 1.2: 无限势能井中的粒子:(a) 四个最低离散的能级 (b) 波动方程 (c) 概率密度方程

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad \text{where } n = 1, 2, \dots \quad (1.33)$$

上式说明在无限势能井里的电子的波动方程为驻波. 让两个 k 值相等可得

$$\frac{2mE_n}{\hbar^2} = \frac{n^2\pi^2}{a^2} \quad (1.34)$$

由此可以算出电子的总能量为

$$E = E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad \text{where } n = 1, 2, \dots \quad (1.35)$$

上式说明无限势能井中电子的能量是离散的.

1.3.3 阶跃势能井

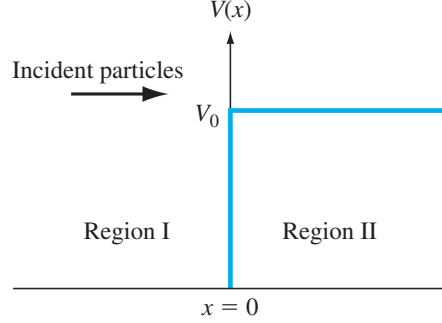


Figure 1.3: 阶跃势能函数示意图

在这个例子当中, 我们假设有一串粒子流从 $x = -\infty$ 向 $+x$ 方向传播. 在这里我们只考虑 $E < V_0$ 的情况, 即粒子的总能量要小于势垒的高度.

对于 I 区域, $V = 0$, 因此有

$$\frac{\partial^2 \psi_1(x)}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_1(x) = 0 \quad (1.36)$$

上述方程的一般解为

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(jk_1 x) + B_1 \exp(-jk_1 x), \quad \text{where } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (1.37)$$

$\exp(jk_1 x)$ 表示向着 $+x$ 方向传播的粒子, 而 $\exp(-jk_1 x)$ 表示向着 $-x$ 方向被反射的粒子. 在自由空间中, 入射和反射的粒子都以行波方式存在.

对于入射波, $A_1 A_1^*$ 是入射粒子的概率密度函数. 如果我们用入射的速度乘以这个概率密度, 那么 $v_i \cdot A_1 \cdot A_1^*$ 就得到了入射粒子的 flux, 其单位为 $\text{cm}^2\text{-s}$. 同理 $v_r \cdot B_1 \cdot B_1^*$ 代表了反射粒子的 flux.

对于区域 II , 我们假设 $V = V_0 > E$, 那么时间无关的波动方程为

$$\frac{\partial^2 \psi_2(x)}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0(x) - E) \psi_2(x) = 0 \quad (1.38)$$

其一般解为

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(jk_1 x) + B_2 \exp(-jk_2 x), \quad (x \geq 0) \quad \text{where } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (1.39)$$

由于波动方程有界, 故 $B_2 = 0$, 因此有

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(jk_1x), \quad (x \geq 0) \quad (1.40)$$

再由 $x = 0$ 处波动方程必须连续, 故 $\psi_1(0) = \psi_2(0)$, 可得到

$$A_1 + B_1 = A_2 \quad (1.41)$$

再根据波动方程处处有界, 其一阶导数也是连续的, 故 $\frac{\partial \psi_1}{\partial x}|_{x=0} = \frac{\partial \psi_2}{\partial x}|_{x=0}$, 把波动方程表达式带入可得

$$jk_1 A_1 - jk_1 B_1 = -k_2 A_2 \quad (1.42)$$

根据上述两个方程, 我们可以用 A_1 来表示 A_2 和 B_1

$$B_1 = \frac{-(k_2^2 + 2jk_1 k_2 - k_1^2)}{k_2^2 + k_1^2} \cdot A_1 \quad (1.43)$$

$$A_2 = \frac{2k_1(k_1 - jk_2)}{k_2^2 + k_1^2} \cdot A_1 \quad (1.44)$$

可以很容易得到粒子反射概率密度函数为

$$B_1 \cdot B_1^* = \frac{(k_2^2 - k_1^2 + 2jk_1 k_2)(k_2^2 - k_1^2 - 2jk_1 k_2)}{(k_2^2 + k_1^2)^2} \cdot A_1 \cdot A_1^* \quad (1.45)$$

我们可以定义一个反射系数 R 来表征反射和入射的粒子通量率.

$$R = \frac{v_r \cdot B_1 \cdot B_1^*}{v_i \cdot A_1 \cdot A_1^*} \quad (1.46)$$

在 I 区, $V = 0$, 因此粒子的总能量 E 等于其动能 $E = T = \frac{1}{2}mv^2$, 据此可以算出入射波数

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m \cdot \frac{1}{2}mv^2}}{\hbar} = \frac{mv}{\hbar} \quad (1.47)$$

因此入射波粒子的速度为

$$v_i = \frac{\hbar}{m} k_1 \quad (1.48)$$

同理在 I 区的反射波粒子的速度为

$$v_i = \frac{\hbar}{m} k_1 \quad (1.49)$$

由此可以算出粒子的通量反射率

$$R = \frac{v_r \cdot B_1 \cdot B_1^*}{v_i \cdot A_1 \cdot A_1^*} = \frac{B_1 \cdot B_1^*}{A_1 \cdot A_1^*} = \frac{(k_2^2 - k_1^2 + 2jk_1 k_2)(k_2^2 - k_1^2 - 2jk_1 k_2)}{(k_2^2 + k_1^2)^2} = 1 \quad (1.50)$$

$R = 1$ 这个结果意味着所有 $E < V_0$ 的入射粒子最终都被反射回了. 但是 A_2 以及 II 区域内发现粒子的概率密度不为 0, 这说明粒子有一定的概率穿透这个壁垒 (尽管自身的动能小于势垒), 这一点违背了经典物理, 但是在量子物理下是允许发生的. 但最终粒子还是会全部回到 I 区, 根据反射系数 $R = 1$ 这个事实.

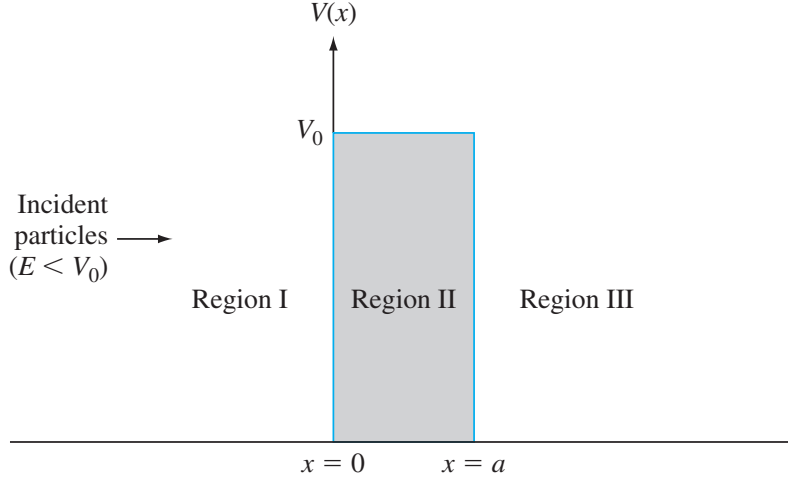


Figure 1.4: 势垒函数示意图

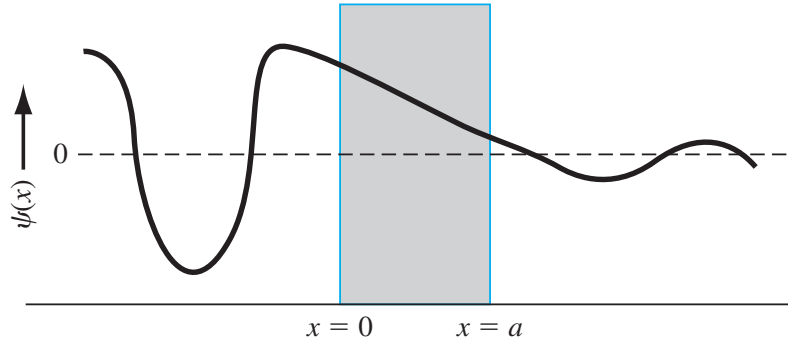


Figure 1.5: 隧道效应意图

1.3.4 势垒和隧道效应

如图, 我们现在考虑一个势垒函数, 入射粒子的总能量要小于势垒 $E < V_0$. 而且粒子从 $-x$ 向着 $+x$ 传播. 这种情况, 我们必须考虑三个区域 I、II、III 中的波动方程

$$\psi_1(x) = A_1 \exp(jk_1x) + B_1 \exp(-jk_1x) \quad (1.51)$$

$$\psi_2(x) = A_2 \exp(jk_2x) + B_2 \exp(-jk_2x) \quad (1.52)$$

$$\psi_3(x) = A_3 \exp(jk_1x) + B_3 \exp(-jk_1x) \quad (1.53)$$

其中

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (1.54)$$

III 区域没有反射, 因此 $B_3 = 0$, 我们在 $x = 0$, $x = a$ 有四个边界方程 (波动方程及其导数连续). 因此我们可以用 A_1 来表示 B_1, A_2, B_2, A_3 . 此时我们可以定义穿透系数, 表征粒子从

I 区域穿过 II 区域到了 III 区域

$$T = \frac{v_t \cdot A_3 \cdot A_3^*}{v_i \cdot A_1 \cdot A_1^*} = \frac{A_3 \cdot A_3^*}{A_1 \cdot A_1^*} \quad (1.55)$$

由于 I, III 区域的势能同时为 0, 故 $v_t = v_i$. 对于特殊的情况 $E \ll V_0$, 我们发现

$$T = 16 \left(\frac{E}{V_0} \right) \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \exp(-2k_2 a) \quad (1.56)$$

这个公式说明粒子有一定的概率穿越比自身能量还要高的势垒到达另外一个区域. 这个效应称为隧道或者隧穿效应, 与经典物理相矛盾. 这种效应可以用于半导体器件的制造, 比如隧道二极管.

1.4 原子的波理论

根据波尔理论, 单个原子中电子的势能函数为

$$V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.57)$$

这里我们需要用球坐标系来解波动方程

$$\nabla^2 \psi(r, \theta, \phi) + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(r, \theta, \phi) = 0 \quad (1.58)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \cdot \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) \\ + \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi = 0 \end{aligned} \quad (1.59)$$

解上述微分方程需要用到分离变量和如下假设

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\phi) \quad (1.60)$$

然后便有

$$\begin{aligned} \frac{\sin^2 \theta}{R} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{1}{\Phi} \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} + \frac{\sin \theta}{\Theta} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \cdot \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) \\ + r^2 \sin^2 \theta \cdot \frac{2m_0}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0 \end{aligned} \quad (1.61)$$

对于上述方程的第二项只和 ψ 有关, 因此我们可以写成

$$\frac{1}{\Phi} \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m^2 \quad (1.62)$$

m 是一个常数 (非质量), 很容易得到

$$\Phi = e^{jm\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.63)$$

对剩下的式子两端同时除以 $\sin^2 \theta$, 便可以分离出 R 的表示式, 此时对应了分离常数 n , 最后可以得到 Θ 的表达式, 利用到了分离常数 l . 分离常数 n, l, m 称为量子数. 其中 n 称为主量子数, l 称为角量子数, m 称为磁量子数. 这些量子数的关系为

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, 3, \dots \\ l &= n-1, n-2, n-3, \dots, 0 \\ |m| &= l, l-1, \dots, 0 \end{aligned} \tag{1.64}$$

其中的每一个量子态都可能被电子占领. 电子的离散量子能量可以表示为

$$E_n = \frac{-m_0 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2 n^2} \tag{1.65}$$

负的电子能量说明被质子束缚, 而当电子的能量为正时, 说明此时电子不再是一个受到约束的电子, 总能量也不会再被量化.

波动方程的解可以写成 ψ_{nlm} , 对于最低的能级, $n=1, l=0, m=0$, 此时波动方程为

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left(\frac{1}{a_0}\right)^{3/2} e^{-r/a_0} \tag{1.66}$$

上述方程是球对称的, 其参数 $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_0 e^2} = 0.529 \text{ \AA}$

Chapter 2

固体量子理论简介

在这一章节中, 我们将

- (1) 开发出单个晶格材料中电子的允带和禁带的概念, 使用导带和价带来描述半导体材料.
- (2) 讨论电子和空穴这两种不同的载流子.
- (3) 开发出能量和动量的关系曲线, 根据这个曲线得出直接和间接能带半导体材料.
- (4) 讨论电子和空穴的有效质量.
- (5) 推导出允带中各个量子态的概率密度.
- (6) 开发出费米 - 狄拉克概率方程, 用来描述允带中电子的统计分布, 以及定义费米能级.

2.1 能带的形成

2.2 固体中电的传导

下面我们讨论电子在不同允带中的运动.

2.2.1 能带和键模型

当 $T = 0K$ 时, 处于最低能带的 $4N$ 价带完全被电子束缚, 价电子组成了共价键, 此时导带则没有电子. 当温度上升, 电子获得能量, 有些电子从价带跃迁到导带, 于是在价带创造了一个空穴.

2.2.2 漂移电流

电流是由电荷的定向运动产生的. 假设有一簇正电荷, 体密度为 $N(cm^{-3})$, 平均漂移速度为 $v_d(cm/s)$, 则其漂移速度为

$$J = qNv_d \quad (A/cm^2) \quad (2.1)$$

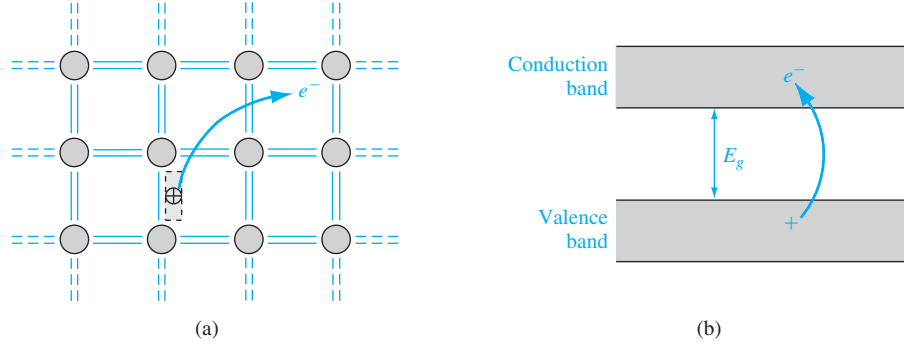


Figure 2.1: (a) 共价键断裂的二维图 (b) 共价键断裂对应的能带线形图及正负电荷的产生.

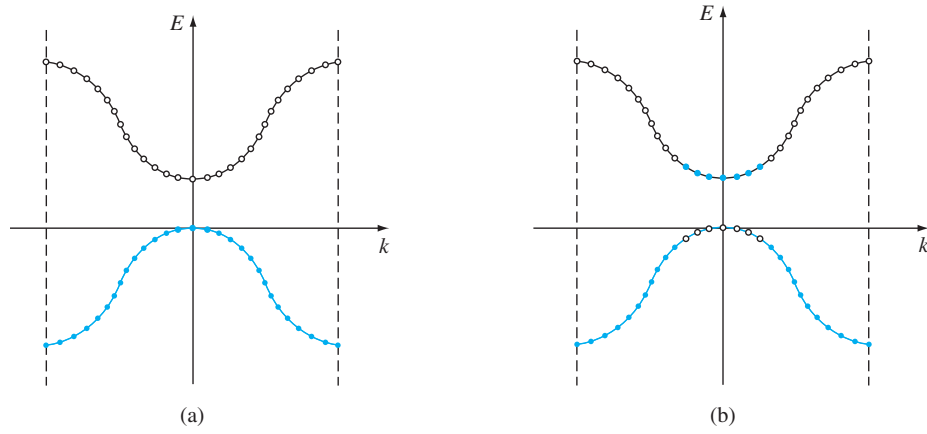


Figure 2.2: 半导体导带和价带的 E-k 关系图 (a) $T = 0K$ (b) $T > 0K$

用平均漂移速度替代单个粒子的速度, 那么漂移电流可以表示为

$$J = q \sum_{i=1}^N v_i \quad (2.2)$$

2.2.3 电子等效质量

在晶格中的电子, 当施加外部电场时, 同时收到内部和外部的力

$$F_{total} = F_{ext} + F_{int} = ma \quad (2.3)$$

其中 F_{total} , F_{ext} 和 F_{int} 分别代表总的力, 外部施加的力, 内部施加的力. 由于非常难定量刻画电子收到晶格内部的各种力, 因此我们只考虑外部的力, 而内部的力全部归为新的等效质量中.

$$F_{ext} = m^* a \quad (2.4)$$

m^* 为电子的有效质量. 此时加速度 a 只和外界施加的力相关. 但是这种假设暗含了

$$F_{int} = (m - m^*)a \quad (2.5)$$

由于 $(m - m^*)$ 为一个常数, 因此内部的力与电子的加速度成正比, 并不是一个常数. 电子的等效质量也可以从 $E - k$ 图上求出, 由于

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.6)$$

根据上式可知, 动量和波数的联系为 $p = \hbar k$, 且

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m} = \frac{\hbar p}{m} \quad (2.7)$$

另外

$$\frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{p}{m} = v \quad (2.8)$$

v 是粒子的速度, E 对波数 k 的一阶导数和速度相关.

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{1}{m} \quad (2.9)$$

E 对波数 k 的一阶导数与粒子质量成反比. 在导带中的电子的 $E - k$ 图在 $k = 0$ 附近可以

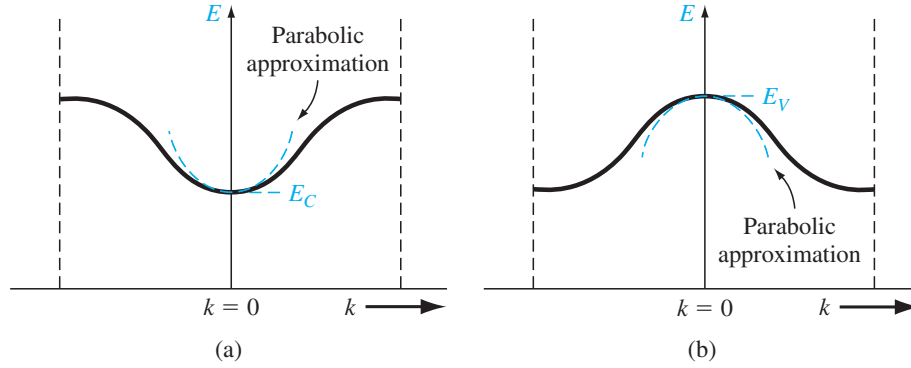


Figure 2.3: (a) 导带中的简化抛物线 $E - K$ 近似 (b) 价带中的简化抛物线 $E - K$ 近似

等效为

$$E - E_C = C_1 k^2 \quad (2.10)$$

E_C 为导带底部能级. 显然在导带中的电子其等效质量为正数

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{2C_1}{\hbar^2} = \frac{1}{m^*} > 0 \quad (2.11)$$

所以在导带中的电子还是正常概念的电子, 下面小节将考虑价带中等效质量为负的电子.

2.2.4 空穴的概念

如上图, 价带中电子的 E_k 图可以近似为

$$E - E_V = -C_2 k^2 \quad (2.12)$$

且有

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{-2C_2}{\hbar^2} = \frac{1}{m^*} < 0 \quad (2.13)$$

可以看出在价带中的电子, 其等效质量为负. 当外界施加一个电场时, 这些电子的宏观表现等价于一群质量为 $\frac{2C_2}{\hbar^2} = \frac{-1}{m^*}$ 的正电荷. 由此, 我们可以定义空穴概念, 这些空穴的密度和价带中空缺的电子能级密度一致.

2.3 状态密度方程

2.3.1 数学推导

首先我们考虑被限制在三维无限势能井里的电子. 三维无限势能井可以表示为

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & \text{for } x, y, z \in (0, a) \\ \infty, & \text{elsewhere} \end{cases}$$

在此假定晶体边长为 a 的立方体. 三维薛定谔波动方程可以根据一维情况推广

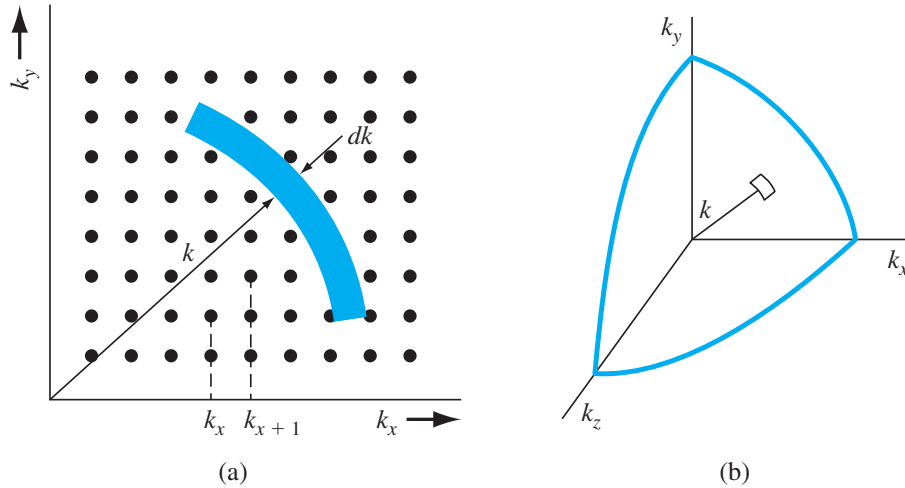


Figure 2.4: (a) k 空间的有效量子态的二维阵列; (b) k 空间的正坐标的八分之一球

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\pi^2}{a^2} \quad (2.14)$$

由于对称性, 可以只考虑 $n_{x,y,z}$ 为正整数的情况, 也就是八分之一圆. 在 k_x 方向, 两个量子态之间的距离是

$$k_{x+1} - k_x = (n_x + 1) \frac{\pi}{a} - n_x \frac{\pi}{a} = \frac{\pi}{a} \quad (2.15)$$

将这个结果推广到三维情况, 一个量子态所占据的空间 V_k 为

$$V_k = \left(\frac{\pi}{a} \right)^3 \quad (2.16)$$

现在就可以确定 k 空间的量子态密度了. k 空间中的体积微分为 $4\pi k^2 dk$. 因此 k 空间的量子态密度的微分为

$$g_T(E)dk = 2 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{\pi}{a}\right)^3} \quad (2.17)$$

其中第一个因子 2 代表了每个量子态的两种自旋状态. 第二个八分之一是指正的八分之一圆. 上式可以简化为

$$g_T(E)dk = \frac{\pi k^2 dk}{\pi^3} \cdot a^3 \quad (2.18)$$

上式给出了量子态密度函数, 由于波数 k 可以用动量表示, 也可以用能量 E 表示

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (2.19)$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2.20)$$

故微分 dk 为

$$dk = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} dE \quad (2.21)$$

将 k^2 和 dk 代入状态密度方程, 得到 E 和 $E + dE$ 之间的能量状态数

$$g_T(E)dE = \frac{4\pi a^3}{h^3} \cdot (2m)^{3/2} \cdot \sqrt{E} dE \quad (2.22)$$

上式给出了体积为 a^3 的晶体中 E 和 $E + dE$ 之间的量子状态数, 在这里我们可以归一化得到单位空间内的量子状态密度

$$g_T(E) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E} \quad (2.23)$$

2.3.2 扩展到半导体

前面我们导出了在三维无限势能井中质量为 m 的电子的有效量子态密度的一般表达式. 推广到半导体时, 由于电子和空穴被半导体晶体束缚, 需要使用到等效质量概念. 对于导带中的电子, 在 $k = 0$ 附近的图形近似抛物线

$$E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (2.24)$$

我们可以把晶体中的电子等效为具有特殊质量 m_n^* 的自由电子. 可以很容易得到导带中电子的量子态密度

$$g_c(E) = \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \quad (E \geq E_c) \quad (2.25)$$

对于空穴

$$E_v - E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \quad (2.26)$$

故在价带中的量子状态密度为

$$g_v(E) = \frac{4\pi(2m_p^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E_v - E} \quad (E \leq E_v) \quad (2.27)$$

在硅晶体中, 当 $T = 300K$ 时, E_c 和 $E_c + kT$ 之间的量子状态数大约为 $N = 2.12 \times 10^{19} cm^{-3}$. 而在 $E_v - kT$ 和 E_v 之间的空穴数大致为 $7.92 \times 10^{18} cm^{-3}$ 个.

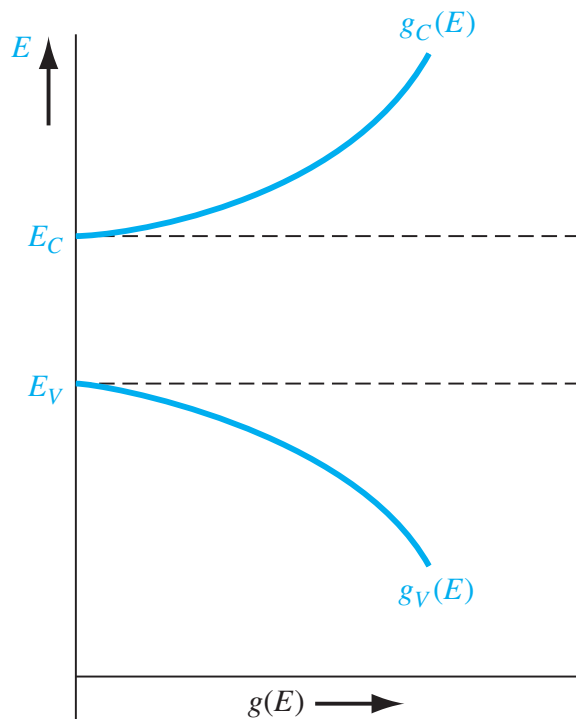


Figure 2.5: 量子状态密度方程

2.4 统计力学

晶体的电学特性是由大量电子的统计学状态决定的.

2.4.1 统计规律

通常有三种分布法则来确定粒子在有效能态中的分布.

第一种分布定律是麦克斯韦 - 玻尔兹曼分布函数. 这种分布认为粒子是可以被一一区分开的, 而且对每个能态所能容纳的粒子数没有限制. 容器中的气体处于相对低压时的状态可以看作是这种分布.

第二种分布定律是波色 - 爱因斯坦分布函数. 这种分布的粒子是不可区分的, 但每个能态所能容纳的粒子数仍然没有限制. 光子的状态或者黑体辐射就是这种分布的例子.

第三种分布定律是费米 - 狄拉克分布函数. 这种分布的粒子也是不可分辨的, 而且每个量子态只允许一个粒子. 晶体中的电子符合这种分布. 在这三种情况中, 都假设粒子之间不存在相互影响.

2.4.2 费米 - 狄拉克概率函数

假设第 i 个能级有 g_i 个量子态, 现在有 $N_i (g_i \geq N_i)$ 个粒子来占据这些能级, 由 Pauli 原理, 每个粒子最多只能占据一个量子态, 而根据费米 - 狄拉克分布, 粒子是不可分的, 因此

总的方式数为

$$C_{g_i}^{N_i} = \frac{g_i!}{(g_i - N_i)!} \quad (2.28)$$

对于 n 个能级中所有粒子的排列方式的总数为

$$W = \prod_{i=1}^n \frac{g_i!}{(g_i - N_i)!} \quad (2.29)$$

W 为 $N = \sum_{i=1}^n N_i$ 个电子在该系统的排列总数. 想要得到最大的概率分布, 就要求出 W 的最大值. 我们要保持粒子总数和总能量不变的前提下, 改变 E_i 能级中的 N_i 来改变粒子的分布, 从而求出 W 的最大值. 我们将概率密度函数写为

$$\frac{N(E)}{g(E)} = f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (2.30)$$

其中 E_F 为费米能级, 密度数 $N(E)$ 代表单位体积单位能量的粒子数, 函数 $g(E)$ 代表单位体积单位能量的量子状态数. 函数 $f_F(E)$ 称为费米-狄拉克分布概率函数, 代表了能量为 E 的量子态被电子占据的可能性. 该分布的另一个含义是被电子填充的量子态占总量子态的比率.

2.4.3 分布函数和费米能级

我们考虑温度 $T = 0K$ 的情况, 此时当 $E < E_F$, 费米-狄拉克概率函数为 1, 而当 $E > E_F$, 费米-狄拉克概率函数为 0. 意味着绝对零度时, 费米能级以下所有量子态都被电子占领, 费米能级以上没有电子存在. 如下图所示

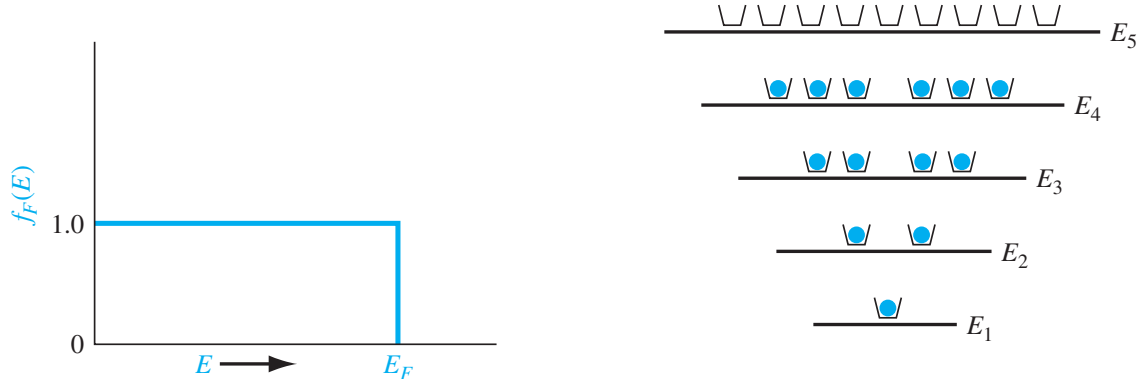


Figure 2.6: (a) $T = 0K$ 时费米概率函数与能量的关系图; (b) $T = 0K$ 时一个特定系统的分离能级和量子态

当 $T = 0K$ 时, 假设系统有 N_0 个电子, 那么电子在量子态中的分布如下图虚线所示. 电子处于最低能量状态, 从而使低于 E_F 的状态都被填满, 高于 E_F 的状态都为空. 若该系统的 $g(E)$, N_0 都已知, 就可以确定费米能级 E_F .

$$N_0 = \int_0^{E_F} g(E) dE \quad (2.31)$$

当温度上升时, 电子获得热能, 一部分电子会跃迁到高能级中, 也就意味着有效能量状态中的电子分布发生了改变. 我们可以大概计算一下 $T = 300K$ 时比费米能级高 $3kT$ 的能级

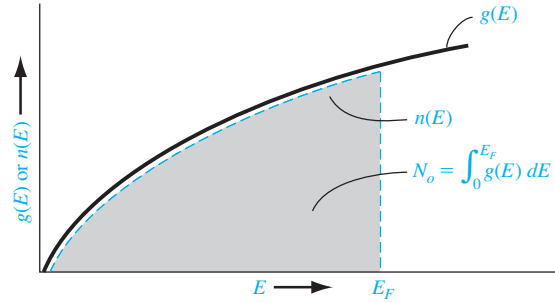


Figure 2.7: $T = 0K$ 时量子状态密度方程 $g(E)$

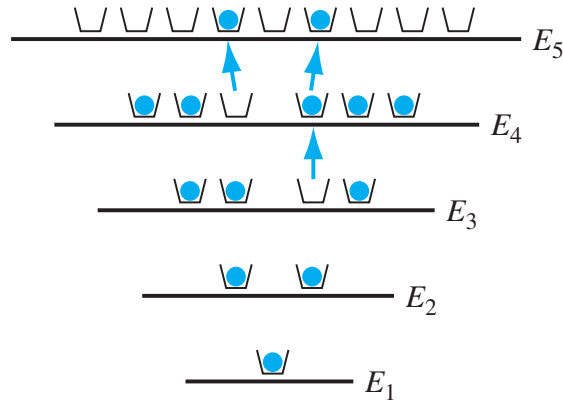


Figure 2.8: $T > 0K$ 时系统的分离能级和量子态

被电子占领的概率. 根据 (2.30)

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{3kT}{kT}\right)} = 4.74\% \quad (2.32)$$

某个量子态被空置的概率为

$$1 - f_F(E) = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (2.33)$$

$f_F(E)$ 和 $1 - f_F(E)$ 关于费米能级是对称的, 如图 (2.9) 所示现在我们考虑 $E - E_F \gg kT$ 的情况, 此时费米分布函数可以简化成

$$f_F(E) \approx \exp\left(\frac{-(E - E_F)}{kT}\right) \quad (2.34)$$

方程 (2.34) 称为简约玻尔兹曼近似. 如图 (2.10). 当我们设定这个近似误差为 5% 以内时, 可以解出 $E - E_F \approx 3kT$, 近似误差在 2% 以内时, 可以解出 $E - E_F \approx 3.9kT$.

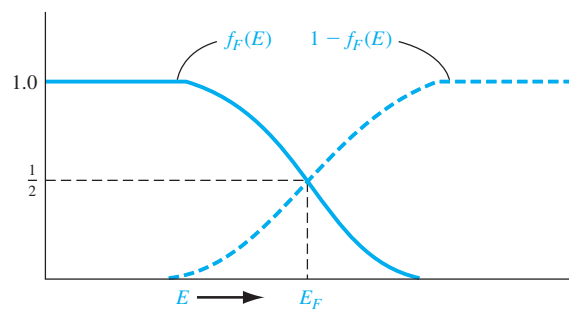


Figure 2.9: 费米概率函数以及量子态被空置的概率

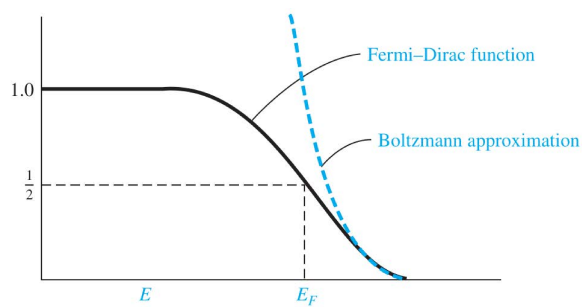


Figure 2.10: 费米狄拉克概率方程的麦克斯韦 -玻尔兹曼近似

Chapter 3

平衡态半导体

平衡态是指没有外界影响 (如电压、电场、磁场或者温度梯度等) 作用于半导体上的状态. 在这种状态下, 材料的所有特性均与时间无关.

3.1 半导体中的载流子

3.1.1 电子和空穴的平衡分布

导带电子关于能量的分布为导带中允许量子态的密度与某个量子态被电子占据的概率的乘积. 其公式为

$$n(E) = g_c(E)f_F(E) \quad (3.1)$$

其中 $f_F(E)$ 是费米概率分布函数, $g_c(E)$ 是导带中的量子态密度. 在整个导带能量范围对式 (3.1) 积分就得到了导带中单位体积的总电子浓度.

同理, 价带中空穴与能量有关的分布为价带允许量子态的密度与某个量子态不被电子占据的概率乘积. 我们可以将其写为

$$p(E) = g_v(E)[1 - f_F(E)] \quad (3.2)$$

在整个价带内对式 (3.2) 积分便可以得到价带中单位体积的总空穴数.

如图 (3.1) 所示, $T > 0K$ 时, E_F 近似位于 E_c 和 E_v 之间二分之一处. 此时, 如果我们假设电子和空穴的有效质量相等, 则 $g_c(E)$ 和 $g_v(E)$ 关于禁带能量 $0.5(g_c(E) + g_v(E))$ 对称. 此前已经知道了, $E > E_F$ 时的 $f_F(E)$ 函数与 $E < E_F$ 时的 $1 - f_F(E)$ 函数关于能量 $E = E_F$ 对称. 这就意味着 $E = E_F + dE$ 时的 $f_F(E)$ 函数与 $E = E_F - dE$ 时的 $1 - f_F(E)$ 函数相等. 如果 $g_c(E)$, $g_v(E)$ 对称, 那么为了获得相等的电子和空穴浓度, 费米能级必然位于禁带能量中. 如果电子和空穴的有效质量并不精确相等, 那么有效状态和密度函数 $g_c(E)$, $g_v(E)$ 不会关于禁带中央精确对称. 本征半导体费米能级将从禁带中央轻微地移动, 以保持电子和空穴浓度相等.

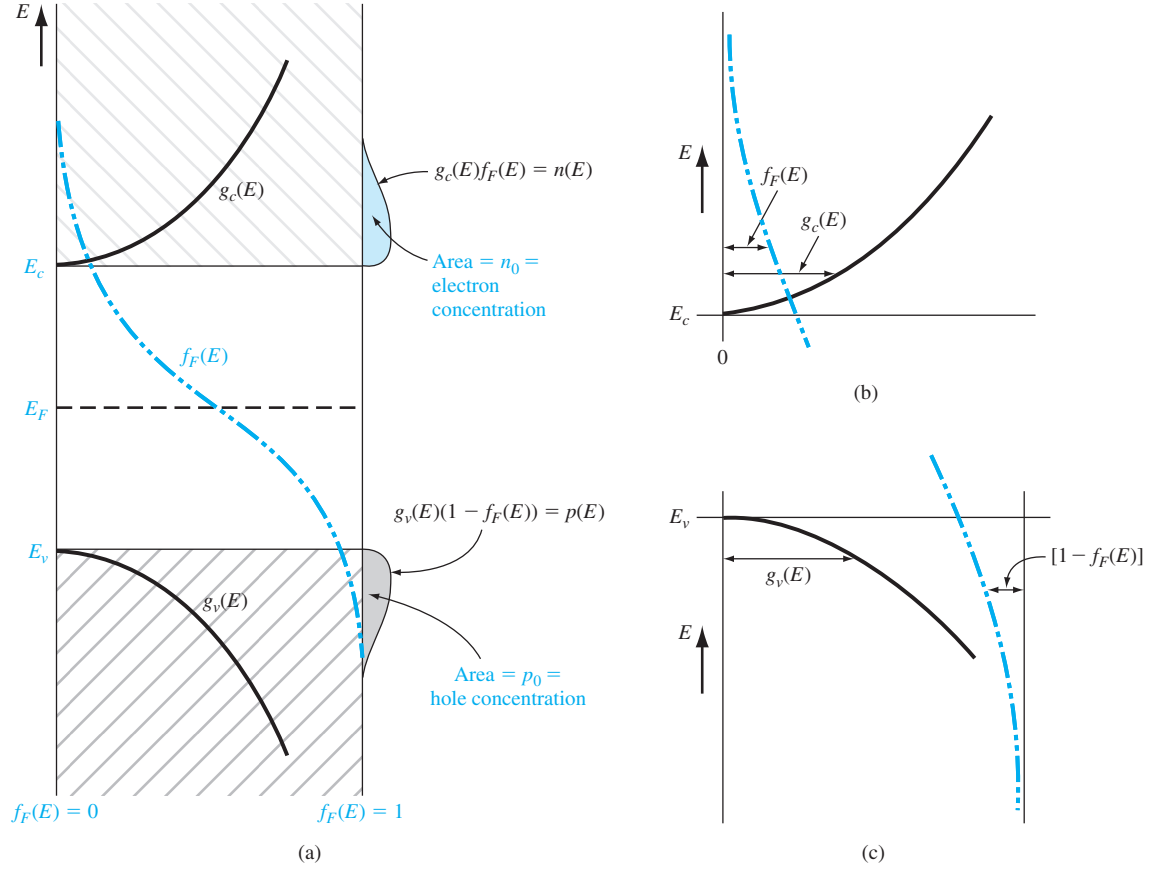


Figure 3.1: (a) 状态密度函数, 费米-狄拉克概率分布函数, 以及 E_F 位于禁带中央附近时表示电子和空穴浓度的面积; (b) 导带边缘放大图; (c) 价带边缘的放大图

3.1.2 n_0 方程和 p_0 方程

在推导热平衡电子浓度 n_0 和空穴浓度 p_0 的方程式, 我们将使用简约玻尔兹曼假设 (2.34). 在热平衡时电子浓度为

$$n_0 = \int g_c(E) f_F(E) dE \quad (3.3)$$

积分下限为 E_c , 积分上限为允许的导带能量的最大值. 但是由于费米概率分布函数随着能量增加而呈指数衰减, 因此可以把积分上限设为无穷大. 我们利用简约玻尔兹曼假设可以得到带到电子热平衡浓度为

$$n_0 = \int g_c(E) f_F(E) dE \approx \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \exp\left(\frac{-(E - E_F)}{kT}\right) dE \quad (3.4)$$

对上式做一个积分变量替换

$$\eta = \frac{E - E_c}{kT} \quad (3.5)$$

则有

$$n_0 = \frac{4\pi(2m_n^*kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right) dE \int_0^{\infty} \sqrt{\eta} e^{-\eta} d\eta \quad (3.6)$$

积分项为伽马函数, 其值为

$$\int_0^\infty \sqrt{\eta} e^{-\eta} d\eta = \frac{1}{2} \sqrt{\pi} \quad (3.7)$$

因此有

$$n_0 = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right) \quad (3.8)$$

我们可以定义参数 N_c 为

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (3.9)$$

所以导带电子的热平衡浓度可以表示为

$$n_0 = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right] \quad (3.10)$$

参数 N_c 称为导带有效状态密度. 若假设 $m_n^* = m_0$, 则 $T = 300K$ 时有效状态密度函数值为 $N_c = 2.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 这是大多数半导体中 N_c 的数量级.

假设 $T = 300K$ 时硅的费米能级位于导带下方 $0.25eV$ 处, 且此时硅中 $N_c = 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, 那么

$$f_F(E_c) \approx \exp \left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right] = \exp \left(\frac{-0.25}{0.0259} \right) \approx 6.34 \times 10^{-5} \quad (3.11)$$

相应的电子浓度为

$$n_0 = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right] = 1.8 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} \quad (3.12)$$

需要注意, 某个能级被占据的概率很小, 但是有大量的能级存在, 所以电子浓度值也是可观的. 另外在 $T = 300K$ 时, $kT \approx 0.0259eV$.

同理可得价带中空穴的热平衡浓度

$$p_0 = \int g_v(E) [1 - f_F(E)] dE \quad (3.13)$$

若价带中 $(E_F - E_v) \gg kT$, 那么对玻尔兹曼近似改动可以得到

$$[1 - f_F(E)] dE \approx \exp \left[\frac{-(E_F - E)}{kT} \right] \quad (3.14)$$

$$p_0 \approx \int_{-\infty}^{E_v} \frac{4\pi(2m_p^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E_v - E} \exp \left(\frac{-(E_F - E)}{kT} \right) dE \quad (3.15)$$

同样使用积分变换

$$\zeta = \frac{E_v - E}{kT} \quad (3.16)$$

则有

$$p_0 = \frac{-4\pi(2m_p^* kT)^{3/2}}{h^3} \exp \left(\frac{-(E_F - E_v)}{kT} \right) \int_{+\infty}^0 \sqrt{\zeta} e^{-\zeta} d\zeta \quad (3.17)$$

因此有

$$p_0 = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{-(E_F - E_v)}{kT} \right) \quad (3.18)$$

我们可以定义参数 N_v 为

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (3.19)$$

所以价带空穴的热平衡浓度可以表示为

$$p_0 = N_v \exp \left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT} \right] \quad (3.20)$$

N_v 为价带有效状态密度. 当 $T = 300K$ 时, 对于大多数半导体, N_v 的数量级也是 $10^{19} cm^{-3}$. 需要牢记的是

$$N_c, N_v \sim (m^* T)^{3/2} \quad (3.21)$$

$T = 300K$ 时, 硅的 $N_v = 1.04 \times 10^{19} cm^{-3}$

Table 3.1: 有效状态密度和有效质量

| | $N_c(cm^{-3})$ | $N_v(cm^{-3})$ | m_n^*/m_0 | m_p^*/m_0 |
|-----|-----------------------|-----------------------|-------------|-------------|
| 硅 | 2.8×10^{19} | 1.04×10^{19} | 1.08 | 0.56 |
| 砷化镓 | 4.7×10^{17} | 7.0×10^{18} | 0.064 | 0.48 |
| 锗 | 1.04×10^{19} | 6.0×10^{18} | 0.55 | 0.37 |

3.1.3 本征载流子浓度

本征半导体中导带中的电子浓度等于价带中的空穴浓度值, 因为电子和空穴是成对出现的. 本征半导体中电子浓度和空穴浓度分别表示为 n_i, p_i . 由于 $n_i = p_i$, 我们通常简单地用 n_i 表示本征载流子浓度.

本征半导体的费米能级称为本征费米能级, 或 $E_F = E_{Fi}$, 且有

$$n_0 = n_i = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT} \right] \quad (3.22)$$

$$p_0 = p_i = n_i = N_v \exp \left[\frac{-(E_{Fi} - E_v)}{kT} \right] \quad (3.23)$$

将上述两式合并有

$$\begin{aligned} n_i^2 &= N_c N_v \exp \left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT} \right] \cdot \exp \left[\frac{-(E_{Fi} - E_v)}{kT} \right] \\ &= N_c N_v \exp \left[\frac{-(E_c - E_v)}{kT} \right] = N_c N_v \exp \left[\frac{-E_g}{kT} \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

其中 E_g 为禁带宽度. 对于给定的半导体材料, 当温度恒定时, n_i 为定值, 与费米能级无关.

Table 3.2: $T = 300K$ 时公认的 n_i 值

| | |
|-----|------------------------------------|
| 硅 | $n_i = 1.5 \times 10^{10} cm^{-3}$ |
| 砷化镓 | $n_i = 1.8 \times 10^6 cm^{-3}$ |
| 锗 | $n_i = 2.4 \times 10^{13} cm^{-3}$ |

3.1.4 费米能级位置

下面我们将精确计算出本征费米能级的位置. 由于电子浓度和空穴浓度相等, 令式 (3.44) 和式 (3.20) 相等, 则有

$$N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT} \right] = N_v \exp \left[\frac{-(E_{Fi} - E_v)}{kT} \right] \quad (3.25)$$

对上式两端同时取对数有

$$E_{Fi} = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{1}{2}kT \ln \left(\frac{N_v}{N_c} \right) \quad (3.26)$$

把式 (3.9) 和式 (3.19) 带代入上式有

$$E_{Fi} = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right) \quad (3.27)$$

我们定义禁带中央能量为 E_{midgap}

$$E_{midgap} = \frac{1}{2}(E_c + E_v) \quad (3.28)$$

则

$$E_{Fi} - E_{midgap} = \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right) \quad (3.29)$$

如果 $m_p^* = m_n^*$, 则本征费米能级在禁带中央, 若 $m_p^* > m_n^*$, 则本征费米能级会稍高于禁带中央, 若 $m_p^* < m_n^*$, 则本征费米能级会稍低于禁带中央. 因为状态密度函数与载流子的有效质量直接相关, 有效质量越大意味着状态密度越大, 因此本征费米能级位置也必定将随状态密度的增大而发生移动, 以保持电子和空穴数量相等.

$T = 300K$ 时, 硅的本征费米能级相对禁带中央位置为

$$E_{Fi} - E_{midgap} = \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_p^*}{m_n^*} \right) = \frac{3}{4}0.0259 \ln \left(\frac{0.56}{1.08} \right) = -0.0128eV = -12.8meV \quad (3.30)$$

$12.8meV$ 与硅的禁带宽度的一半 ($560meV$) 相比可以忽略。

3.2 掺杂原子与能级

掺杂半导体称为非本征半导体.

3.2.1 定型描述

在硅晶格中掺杂入 V 族元素, 如磷, 由于 V 族元素有五个价电子, 其中四个与硅原子结合形成共价键, 剩下的第五个则松散地束缚于磷原子上, 第五个价电子称为施主电子. 磷原子失去施主电子后带正电. 在温度极低时, 施主电子束缚在磷原子上. 但是很显然, 激发价电子进入导带所需的能量, 与激发那些共价键束缚的电子所需的能量相比, 会小得多. 下图画出了我们所设想的能带图, 能级 E_d 是施主电子的能量状态.

如果施主电子获得了少量能量, 如热能, 就能激发到导带, 留下一个带正电的磷原子. 导带中的这个电子此时能在整个晶体中形成电流, 而带正点的磷离子固定不动. 因为这种类型的杂质原子向导带提供了电子, 所以我们称之为施主杂质原子. 由于施主杂质原子增加导带电子而不产生价带空穴, 所以此时的半导体称为 n 形式半导体.

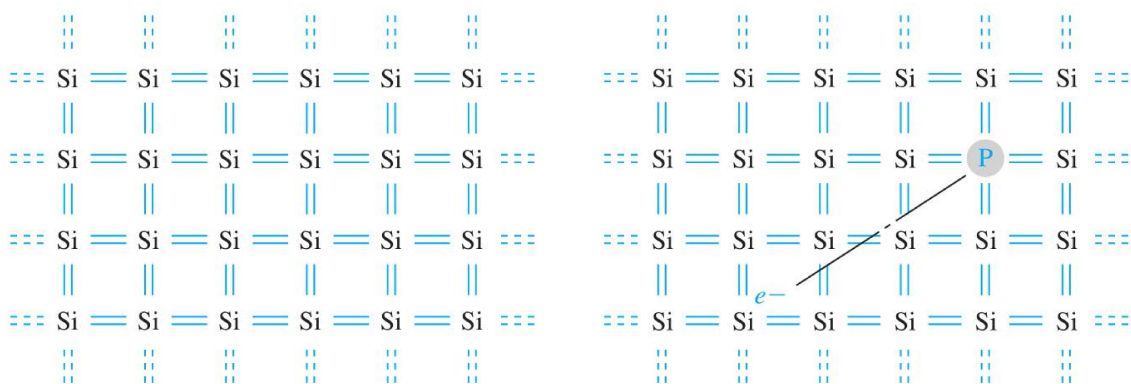


Figure 3.2: (a) 本征硅晶格的二维表示; (b) 掺有一个磷原子的硅晶格的二维表示

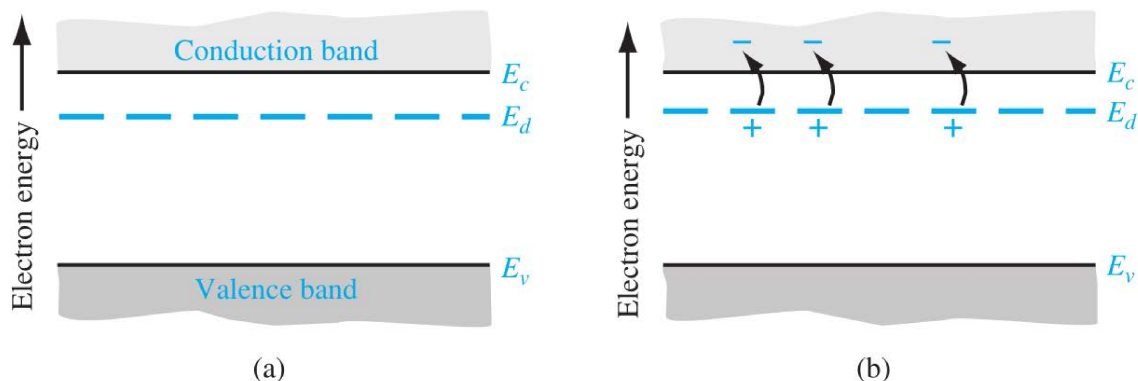


Figure 3.3: (a) 带有分立的施主能级的能带图; (b) 施主能级电离能带图

现在假定掺入 III 族元素, 如硼, 作为硅的杂质. III 族元素有三个价电子, 并且与硅都结合形成共价键. 有一个共价键的位置是空的. 如果有一个电子想要填充这个空位, 因为此时硼原子带负电, 它的能量必须比价电子的能量高. 但是占据这个空位的电子并不具有足够的

能量进入到导带, 它的能量远小于导带底部能量. III 族元素原子从价带中获得电子, 因此我们称之为受主杂质原子. 受主杂质原子能在价带中产生空穴, 但是不在导带中产生电子. 我们称这类半导体材料为 p 型材料.

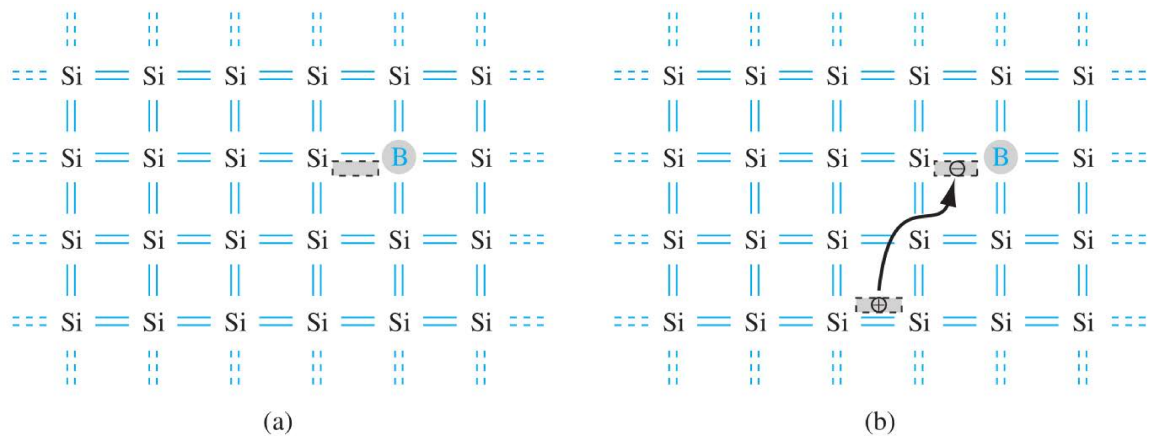


Figure 3.4: (a) 掺有一个硼原子的硅晶格的二维表示; (b) 硼原子电离产生空穴

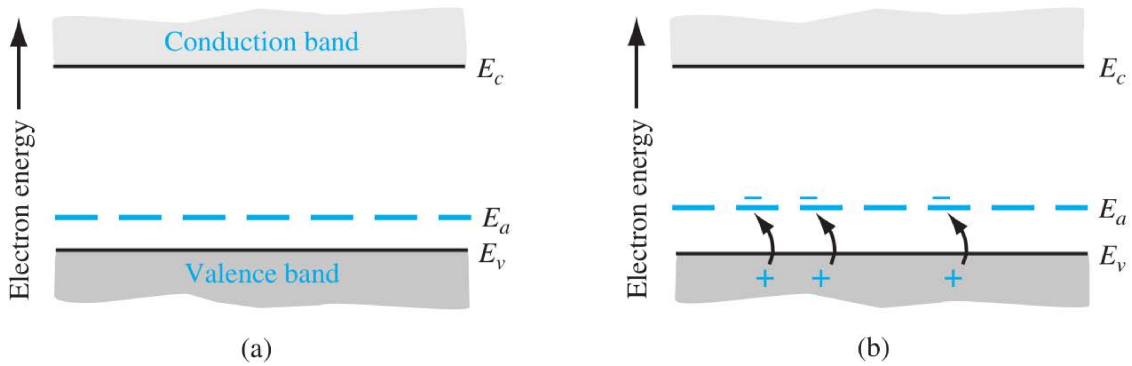


Figure 3.5: (a) 带有分立的受主能级的能带图; (b) 受主能级电离能带图

3.2.2 电离能

To be continued...

3.3 非本征半导体

在非本征半导体中, 电子或空穴两者中的一种将占据主导作用.

3.3.1 电子和空穴的平衡状态分布

图 (3.6(a)) 显示了 $E_F > E_{Fi}$ 的情况, 此时电子浓度高于空穴浓度, 为 n 型掺杂, 很显然, 只有费米能级更高时, 在导带的量子能态才有更大的几率被电子占领, 才会有更多的自

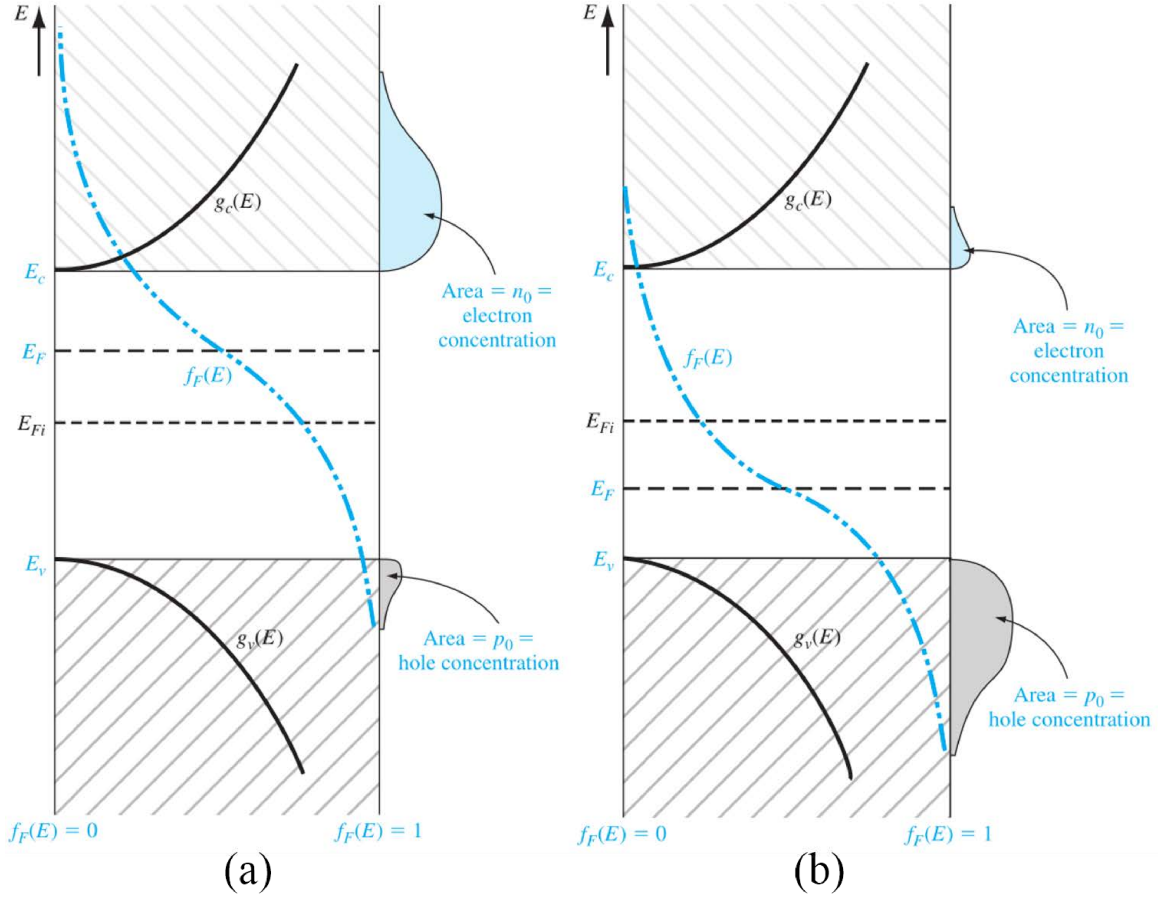


Figure 3.6: (a)n 型半导体 E_F 高于本征费米能级; (b)p 型半导体 E_F 低于本征费米能级时的状态函数密度, 费米 -狄拉克概率分布函数以及代表电子浓度和空穴浓度

由电子出现. 图 (3.6(b)) 显示了 $E_F < E_{Fi}$ 的情况, 此时电子浓度低于空穴浓度, 为 p 型掺杂, 很显然, 只有费米能级更低时, 在价带的量子能态才有更大的几率不被电子占领 (或者说被空穴占领), 才会有更多的空穴出现.

$$n_0 = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right] \quad (3.31)$$

$$p_0 = N_v \exp \left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT} \right] \quad (3.32)$$

上述两个公式说明了费米能级是如何影响 n_0 和 p_0 的浓度的. 我们也可以推导出热平衡状态下电子浓度和空穴浓度的另一种表达形式

$$\begin{aligned} n_0 &= N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right] = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_{Fi}) + (E_F - E_{Fi})}{kT} \right] \\ &= N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_{Fi})}{kT} \right] \exp \left[\frac{(E_F - E_{Fi})}{kT} \right] \\ &= n_i \exp \left[\frac{(E_F - E_{Fi})}{kT} \right] \end{aligned} \quad (3.33)$$

同理有

$$p_0 = p_i \exp \left[\frac{-(E_F - E_{Fi})}{kT} \right] \quad (3.34)$$

从式子 (3.33)(3.34) 可以看出, 当 E_F 变大时, 电子浓度 n_0 变大, 空穴浓度 p_0 变小, 反之亦反.

3.3.2 n_0 和 p_0 的乘积

根据式 (3.44) 和 (3.20) 表达式可得

$$n_0 p_0 = N_c N_v \exp \left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right] \exp \left[\frac{-(E_F - E_v)}{kT} \right] \quad (3.35)$$

该式也可以写成

$$n_0 p_0 = N_c N_v \exp \left[\frac{-E_g}{kT} \right] = n_i^2 \quad (3.36)$$

对于某一温度下的给定的半导体材料, 其 n_0 和 p_0 的乘积总是一个常数, 与掺杂浓度无关. 但需要注意的是, 上述关系式是基于玻尔兹曼近似得到的, 如果此假设不成立, 那么上述关系式也不成立.

3.4 施主和受主的统计学分布

3.4.1 概率分布函数

推导费米-狄拉克概率分布函数的基本前提是 Pauli 不相容原理, 它规定每个量子态只允许容纳一个粒子.

3.4.2 完全电离和束缚态

To be continued...

3.5 电中性状态

在热平衡条件下, 半导体处于电中性, 净电荷密度为零. 下面将定义补偿半导体, 并确定以施主和受主浓度为函数的电子浓度和空穴浓度.

3.5.1 补偿半导体

补偿半导体是指在同一区域内同时含有施主和受主杂质原子的半导体. 当 $N_d > N_a$ 时, 就形成了 n 型补偿半导体; 当 $N_d < N_a$ 时, 就形成了 p 型补偿半导体; 当 $N_d = N_a$ 时, 就形成了完全型补偿半导体, 它具有本征半导体的特性. 后面我们会看到, 在器件生产过程中, 补偿半导体的出现是必然的.

3.5.2 平衡电子和空穴浓度

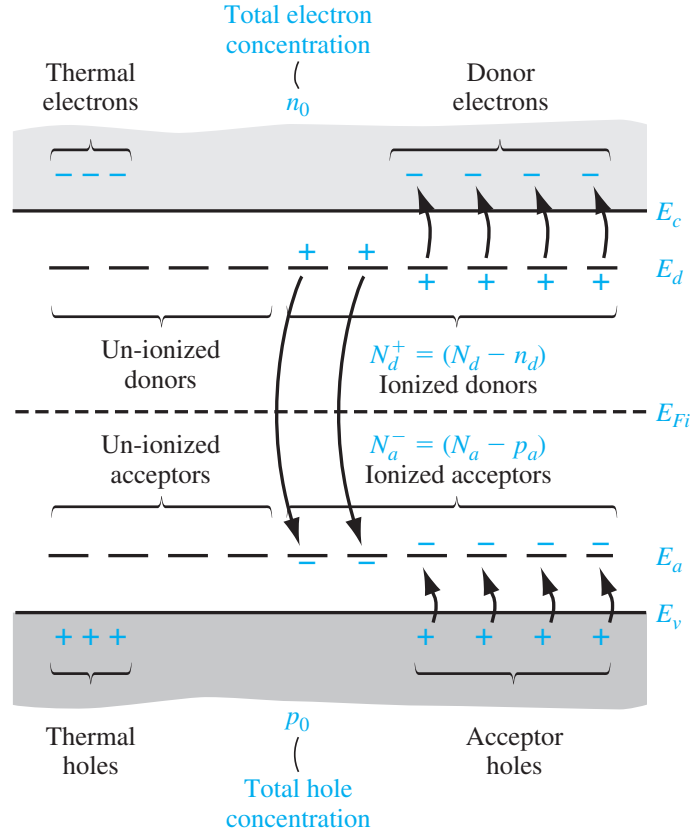


Figure 3.7: 补偿型半导体能带图揭示了电离和非电离的施主和受主状态

由电中性条件有

$$n_0 + N_a^- = p_0 + N_d^+ \quad (3.37)$$

或者

$$n_0 + (N_a - p_a) = p_0 + (N_d - n_d) \quad (3.38)$$

其中 n_d 是指电子占据施主能级的密度 (施主未电离), N_d 是掺杂施主密度, N_d^+ 是电离的施主浓度; p_a 是受主能级中空穴密度, N_a 是掺杂受主元素密度, N_a^- 是电离受主浓度. 上述公式说的是补偿型半导体热平衡时导带中的电子 (负电) 密度加上电离后带负电的受主浓度等于价带中的空穴密度加上电离后带正电的施主的密度.

假设完全电离, 则 n_d 和 p_a 均为零, 故有

$$n_0 + N_a = p_0 + N_d \quad (3.39)$$

如果用 n_i^2/n_0 表示 p_0 , 那么上式可以写为

$$n_0 + N_a = \frac{n_i^2}{n_0} + N_d \quad (3.40)$$

进一步有

$$n_0^2 - (N_d - N_a)n_0 - n_i^2 = 0 \quad (3.41)$$

于是可以解出电子的浓度 n_0

$$n_0 = \frac{(N_d - N_a)}{2} + \sqrt{\left(\frac{(N_d - N_a)}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (3.42)$$

公式 (3.43) 对于 $N_a = 0$ 的情况也适用. 当掺杂浓度 $N_d \gg n_i$ 时, 基本导带中的电子浓度等于掺杂浓度. 但是掺杂浓度和 n_i 差不多时, 导带中的电子浓度还会受到本征载流子浓度的影响, 特别当温度非常高时, n_i^2 占据主导, 此时半导体将失去其非本征 (extrinsic) 特性.

对于空穴, 同理我们可以解出

$$p_0 = \frac{(N_a - N_d)}{2} + \sqrt{\left(\frac{(N_a - N_d)}{2}\right)^2 + n_i^2} \quad (3.43)$$

3.6 费米能级的位置

假设玻尔兹曼假设有效, 那么根据

$$n_0 = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right] \quad (3.44)$$

我们可以求解出

$$E_c - E_F = kT \ln \frac{N_c}{n_0} \quad (3.45)$$

其中 n_0 由公式 (3.43) 给出, 如果掺杂浓度远远高于本征载流子浓度, 即 $N_d \gg n_i$, 则有 $n_0 \approx N_d$, 于是

$$E_c - E_F = kT \ln \left(\frac{N_c}{N_d} \right) \quad (3.46)$$

若是补偿型半导体, 则上式改写为

$$E_c - E_F = kT \ln \left(\frac{N_c}{N_d - N_a} \right) \quad (3.47)$$

对于 n 型半导体, 我们还可以推导出不同于费米能级位置的表达式, 根据 (3.33)

$$n_0 = n_i \exp \left[\frac{(E_F - E_{Fi})}{kT} \right] \quad (3.48)$$

可以得到

$$E_F - E_{Fi} = kT \ln \left(\frac{n_0}{n_i} \right) \quad (3.49)$$

对于 p 型半导体同理有

$$E_F - E_v = kT \ln \left(\frac{N_v}{p_0} \right) \quad (3.50)$$

若 $N_a \gg n_i$, 则

$$E_F - E_v = kT \ln \left(\frac{N_v}{N_a} \right) \quad (3.51)$$

我们也可以推导出费米能级与本征费米能级之差的表达式.

$$E_{Fi} - E_F = kT \ln \left(\frac{p_0}{n_i} \right) \quad (3.52)$$

Chapter 4

载流子运输现象

半导体中的电子和空穴都会产生电流, 我们把载流子的这种运动过程称为运输 (Carrier Transport).

4.1 载流子的漂移运动

在电场里的作用下载流子的运动称为漂移运动, 载流子电荷的净漂移形成漂移电流.

4.1.1 漂移电流密度

如果密度为 ρ 的正电荷以平均漂移速度 v_d 运动, 则其形成的漂移电流密度为

$$J_{drf} = \rho v_d \quad (4.1)$$

其中 J 的单位是 $Ccm^{-2}s^{-1}$ 或者 Acm^{-2} . 若体电荷是带正点的空穴, 那么

$$J_{p|drf} = (ep)v_{dp} \quad (4.2)$$

其中 $J_{p|drf}$ 表示空穴形成的漂移电流, 而 v_{dp} 表示空穴的平均漂移速度.

在电场的作用下, 空穴的运动方程为

$$F = m_p^* a = eE \quad (4.3)$$

在电场的作用下, 晶体中的空穴获得加速度, 速度增加. 当载流子同晶体中的原子碰撞后, 载流子粒子损失了大部分或者全部能量. 然后粒子将重新开始加速并且获得能量, 直到下一次受到散射. 这一过程不断重复. 因此, 在整个过程中, 粒子将具有一个平均漂移速度. 在弱电场情况下, 平均漂移速度与电场成正比.

$$v_{dp} = \mu_p E \quad (4.4)$$

其中 μ_p 称为**空穴迁移率 (hole mobility)**. 迁移率描述了粒子在电场作用下的运动情况. 迁移率的单位是 $cm^2V^{-1}s^{-1}$. 空穴的漂移电流可以用迁移率表示

$$J_{p|drf} = (ep)v_{dp} = e\mu_p pE \quad (4.5)$$

同理可以得到电子的漂移电流密度为

$$J_{n|drf} = (-en)v_{dn} = (-en)(-\mu_n E) = e\mu_n nE \quad (4.6)$$

下面给出 $T = 300K$ 时低掺杂浓度下的一些典型迁移率. 电子和空穴对漂移电流都有贡献,

Table 4.1: $T = 300K$ 时, 低掺杂浓度下的典型迁移率值

| | $\mu_n(cm^2V^{-1}s^{-1})$ | $\mu_p(cm^2V^{-1}s^{-1})$ |
|------|---------------------------|---------------------------|
| Si | 1350 | 480 |
| GaAs | 8500 | 400 |
| Ge | 3900 | 1900 |

所以总漂移电流密度是电子漂移电流密度与空穴漂移密度之和.

$$J_{drf} = e(\mu_n + \mu_p p)E \quad (4.7)$$

Problem 4.1.1. 当 $T = 300K$ 时, GaAs 的掺杂浓度为 $N_a = 0$, $N_d = 10^{16}cm^{-3}$, 设杂质全部电离, 电子和空穴的迁移率如表 (4.1.1). 若外加电场强度为 $E = 10Vcm^{-1}$, 求漂移电流密度.

Solution 4.1.1. 此半导体为 n 型半导体, 多数载流子的浓度为

$$n = \frac{(N_d - N_a)}{2} + \sqrt{\left(\frac{(N_d - N_a)}{2}\right)^2 + n_i^2} \approx 10^{16}cm^{-3} \quad (4.8)$$

少数载流子空穴的浓度为

$$p = \frac{n_i^2}{n} = \frac{(1.8 \times 10^6)^2}{10^{16}} = 3.24 \times 10^{-4}cm^{-3} \quad (4.9)$$

n 型非本征半导体漂移电流为

$$J_{drf} = e(\mu_n + \mu_p p)E \approx e\mu_n N_d E = (1.6 \times 10^{-19})(8500)(10^{16})(10) = 136 Acm^2 \quad (4.10)$$

Remark 4.1. 上面例子说明, 半导体上加较小的电场就能获得很大的漂移电流密度, 在非本征半导体中, 漂移电流密度基本上取决于多数载流子.

4.1.2 迁移率

空穴加速度与外力如电场力之间的关系为

$$F = m_p^* \frac{dv}{dt} = eE \quad (4.11)$$

其中 v 为电场作用下的漂移速度, 不包含热运动的速度. 假设初始漂移速度为零, 则上式对时间积分为

$$v = \frac{eEt}{m_p^*} \quad (4.12)$$

下图是无外加电场半导体中空穴的随机热运动示意图. τ_{cp} 表示碰撞的平均时间. 如果外加一个小电场 E , 空穴将在电场 E 的方向上发生漂移, 但是它的漂移速度仅仅是随机热运动速度的微小扰动, 平均碰撞时间不会显著变化. 如果把碰撞或散射前粒子的平均最大速度为

$$v_{d|peak} = \left(\frac{e\tau_{cp}}{m_p^*} \right) E \quad (4.13)$$

可见平均漂移速度为最大漂移速度的一半

$$\bar{v}_d = \frac{1}{2} \left(\frac{e\tau_{cp}}{m_p^*} \right) E \quad (4.14)$$

实际的彭汉族昂不像上述没顶那么简单, 但是该模型具有统计学性质. 在考虑了统计分布影响的精确模型中, 上述式子讲没有因此 $1/2$. 空穴迁移率为

$$\mu_p = \frac{v_{dp}}{E} = \frac{e\tau_{cp}}{m_p^*} \quad (4.15)$$

对电子进行类似分析也有

$$\mu_n = \frac{v_{dn}}{E} = \frac{e\tau_{cn}}{m_n^*} \quad (4.16)$$

在半导体中有两种散射机制影响载流子的迁移率: **晶格散射 (phonon or lattice scattering)** 和 **电离杂质散射 (ionized impurity scattering)**.

当温度高于绝对零度, 半导体原子在晶格位置上做无规则热振动, 破坏了理想的周期势场. 导致载流子电子, 空穴与振动的晶格原子发生作用, 这种晶格散射也叫声子散射. 温度越高, 那么原子振动越剧烈, 散射概率增大, 因此根据散射理论, 在一阶近似情况下有

$$\mu_L \propto T^{-3/2} \quad (4.17)$$

在室温下杂质已经电离, 在电子或空穴与杂质之间存在库伦作用. 当温度升高时, 载流子随机热运动增强, 减少了位于电离杂质散射中心附近的时间. 库伦作用时间越短, 受到散射的影响就越小, μ_I 就越大. 如果电离杂质散射中心数量增加, 那么载流子与电离杂质散射中心碰撞的概率就相应的增加, μ_I 值减小.

$$\mu_I \propto \frac{T^{+3/2}}{N_I} \quad (4.18)$$

其中 $N_I = N_d^+ + N_a^-$ 表示半导体电离杂质总浓度.

dt/τ 表示在微分时间 dt 内散射的概率, 两种散射过程相互独立, 因此在 dt 时间内散射的概率为两者之和

$$\frac{dt}{\tau} = \frac{dt}{\tau_I} + \frac{dt}{\tau_L} \quad (4.19)$$

故有

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_I} + \frac{1}{\mu_L} \quad (4.20)$$

4.1.3 电导率

根据公式 (4.7), 漂移电流密度公式可以表示为

$$J_{drf} = e(\mu_n n + \mu_p p)E = \sigma E \quad (4.21)$$

其中 σ 表示半导体材料的电导率, 单位是 $(\Omega \cdot cm)^{-1}$. 电导率就是载流子浓度和迁移率的函数. 电阻率是电导率的倒数, 单位是 Ωcm

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{e(\mu_n + \mu_p p)} \quad (4.22)$$

对于条形半导体材料两端加上电压 V 就会产生电流 I , 假设条形横截面为 A , 长度为 L , 则

$$J = \frac{I}{A} \quad (4.23)$$

$$E = \frac{V}{L} \quad (4.24)$$

故

$$J = \frac{I}{A} = \sigma E = \sigma \frac{V}{L} \quad (4.25)$$

因此

$$V = \frac{L}{\sigma A} I = \frac{\rho L}{A} I = IR \quad (4.26)$$

上述公式就是半导体中的欧姆定律.

4.1.4 饱和速度

一般来说外加电场不会显著改变电子的能量, 假如外加电场大约为 $75V/cm$, 对于 $T = 300K$ 时, 硅的热运动速度大约为 $10^7 cm/s$, 而低掺杂硅中电子迁移率为 $\mu_n = 1300 cm^2 V^{-1} s^{-1}$, 漂移速度大约为 $10^5 cm/s$, 大致为热运动速度的 1%. 但是当外加电场达到很大时, 载流子的漂移速度严重偏离了弱电场的线性关系. 例如硅电子漂移速度在外加电场达到 $30kV/s$ 时达到饱和, 饱和速度大致为 $10^7 cm/s$. 实验中得出了硅中电子对电场的关系式

$$v_n = \frac{v_s}{\sqrt{1 + \left(\frac{E_{on}}{E}\right)^2}} \quad (4.27)$$

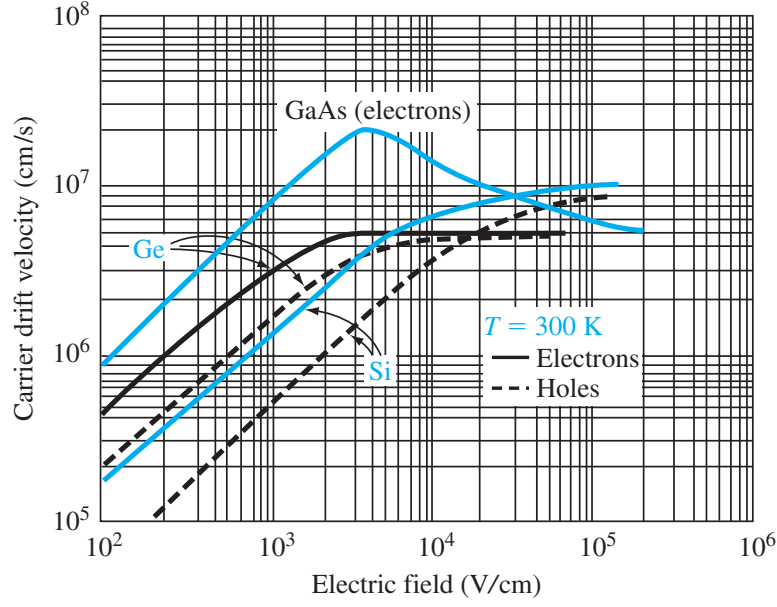


Figure 4.1: 材料载流子速度和外加电场的关系图

对于空穴有

$$v_p = \frac{v_s}{1 + \left(\frac{E_{op}}{E} \right)} \quad (4.28)$$

其中在 $T = 300K$ 时, $v_s = 10^7 cm/s$, $E_{on} = 7 \times 10^3 V/cm$, $E_{op} = 2 \times 10^4 V/cm$

4.2 载流子扩散

若电子的平均自由程即电子在两次碰撞之间走过的平均距离为 l ($l = v_{th}\tau_{cn}$), 那么 $x = -l$ 处向右运动的电子和 $x = +l$ 处向左运动的电子都将通过 $x = 0$ 处, 故 x_0 处沿 $+x$ 方向的电子流速 F_n 为

$$F_n = \frac{1}{2}n(-l)v_{th} - \frac{1}{2}n(+l)v_{th} = \frac{1}{2}v_{th}[n(-l) - n(+l)] \quad (4.29)$$

进一步有

$$F_n = -v_{th}l \frac{n(-l) - n(+l)}{-2l} = -v_{th}l \frac{dn}{dx} \quad (4.30)$$

因此电流密度为

$$J = -eF_n = ev_{th}l \frac{dn}{dx} \quad (4.31)$$

上述公式的直观理解可以令 $dx = l$, 然后 $J = ev_{th}(dn)$ 了, 这个和漂移速度表达式非常像, 但是这种驱动力不是来源于外界电场, 而是内部载流子浓度在空间上的分布不均, 即 dn . 在这里我们定义电子扩散系数 $D_n = v_{th}l$, 其单位为 cm^2/s .

$$J_{nx|dif} = eD_n \frac{dn}{dx} \quad (4.32)$$

对于空穴有

$$J_{px|dif} = -eD_p \frac{dp}{dx} \quad (4.33)$$

4.2.1 总电流密度

半导体中总电流包括电子漂移电流和扩散电流, 空穴漂移电流和扩散电流, 对于一维情况有

$$J = en\mu_n E_x + ep\mu_p E_x + eD_n \frac{dn}{dx} - eD_p \frac{dp}{dx} \quad (4.34)$$

推广到三维

$$J = en\mu_n E + ep\mu_p E + eD_n \nabla n - eD_p \nabla p \quad (4.35)$$

4.3 杂质的梯度分布

4.3.1 感应电场

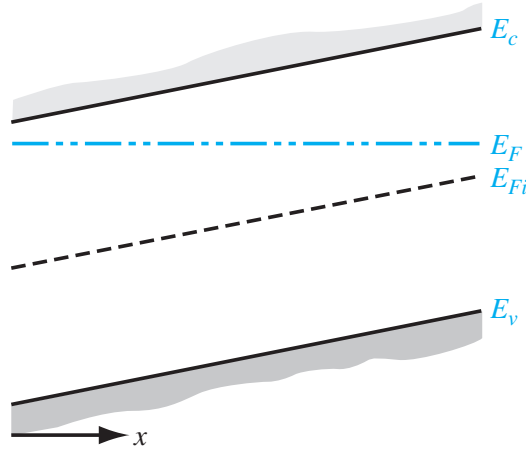


Figure 4.2: 非均匀半导体热平衡时的能带图

考虑一块非均匀掺入施主的杂质原子的 n 型半导体, 掺杂浓度随着 x 增加而减小, 多数载流子电子从高浓度区域向低浓度区域沿着 $+x$ 方向扩散, 留下了带正点的施主杂质离子. 分离的正负电荷产生了一个沿着 $+x$ 的内建电场, 抵抗了扩散过程. 当达到平衡状态时, 扩散载流子的浓度并不等于固定杂质的浓度, 感生电场组织了正负电荷的进一步分离. 大多数情况下, 扩散感应出的空间电荷数只占据杂质浓度的很小部分.

电势 ϕ 等于电子势能除以电子电量 $(-e)$

$$\phi = +\frac{1}{e}(E_F - E_{Fi}) \quad (4.36)$$

一维情况下感生电场定义为

$$E_x = -\frac{d\phi}{dx} = \frac{1}{e} \frac{dE_{Fi}}{dx} \quad (4.37)$$

当电场加载在 n 型半导体两端, 每个电子都会经历一个 $-qE$ 的力, 而这个力等于负的势能的梯度

$$-qE = -\frac{dE_c}{dx} \quad (4.38)$$

就爱如满足准中性条件, 电子浓度与施主杂质浓度基本相等, 则有

$$n_0 = n_i \exp \left[\frac{E_F - E_{Fi}}{kT} \right] \approx N_d(x) \quad (4.39)$$

求解 $E_F - E_{Fi}$ 得

$$E_F - E_{Fi} = kT \ln \left(\frac{N_d(x)}{n_i} \right) \quad (4.40)$$

两边对 x 微分得到

$$-\frac{dE_{Fi}}{dx} = \frac{kT}{N_d(x)} \frac{dN_d(x)}{dx} \quad (4.41)$$

故

$$E_x = -\frac{kT}{e} \frac{1}{N_d(x)} \frac{dN_d(x)}{dx} \quad (4.42)$$

4.3.2 爱因斯坦关系

考虑图 (4.2) 中所示的非均匀掺杂半导体. 假设没有外加电场, 半导体处于热平衡, 则电子电流和空穴电流分别等于零 (否则某个地方的电子或空穴会随时间凭空增加).

$$J_n = 0 = en\mu_n E_x + eD_n \frac{dn}{dx} \quad (4.43)$$

设半导体满足准中性条件, 即 $n \approx N_d(x)$, 则上式可以重写为

$$J_n = 0 = e\mu_n N_d(x) E_x + eD_n \frac{dN_d(x)}{dx} \quad (4.44)$$

把公式 (4.42) 代入上式有

$$0 = -e\mu_n N_d(x) \left(\frac{kT}{e} \right) \frac{1}{N_d(x)} \frac{dN_d(x)}{dx} + eD_n \frac{dN_d(x)}{dx} \quad (4.45)$$

由此我们

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{kT}{e} \quad (4.46)$$

同理我们由空穴电流为零, 可以得到

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{kT}{e} \quad (4.47)$$

因此有

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{kT}{e} \quad (4.48)$$

可以看到扩散系数和迁移率不是彼此独立的参数. 公式 (4.48) 给出的扩散系数和迁移率之间的关系称为爱因斯坦关系. 在 $T = 300K$, $\frac{kT}{e}$ 大致为 $1/40$, 即扩散系数约为迁移率的 $1/40$.

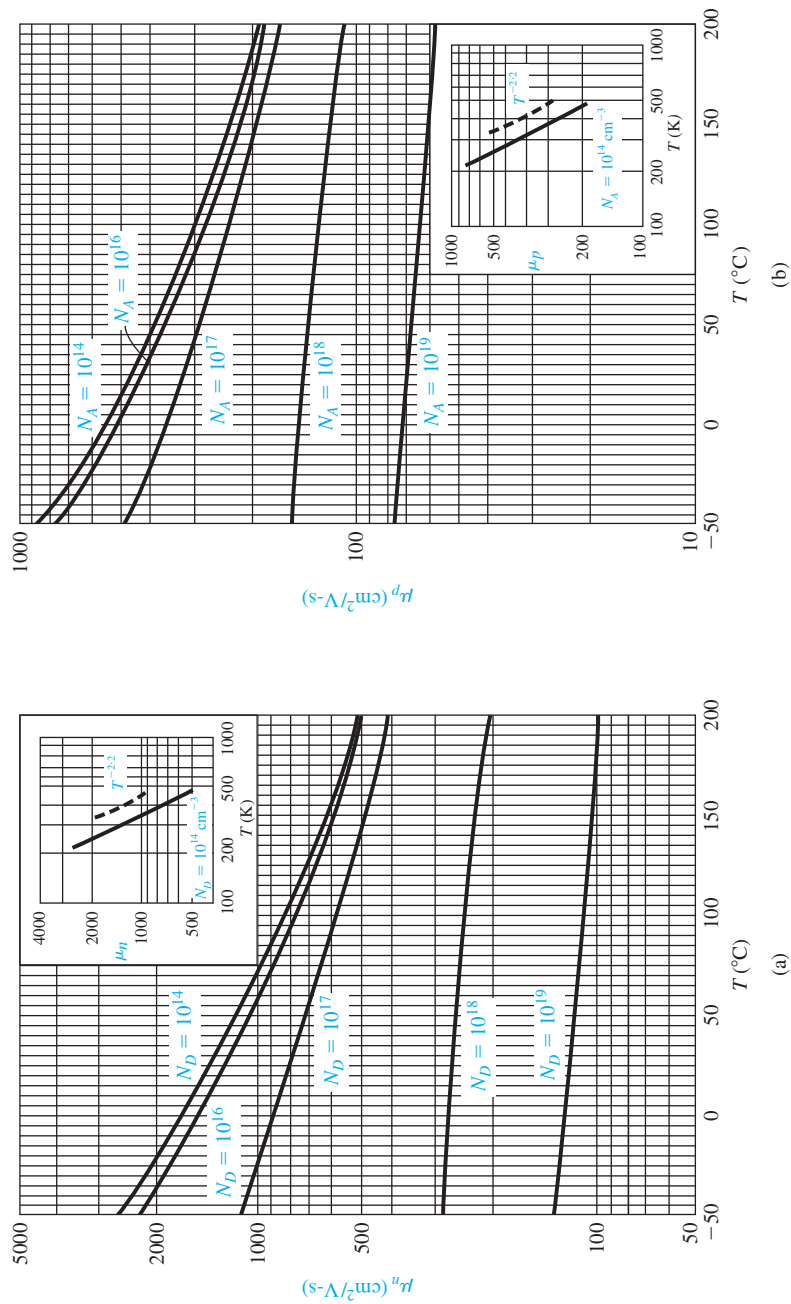


Figure 5.2 | (a) Electron and (b) hole mobilities in silicon versus temperature for various doping concentrations. Inserts show temperature dependence for “almost” intrinsic silicon. (From Pierret [8].)

Figure 4.3: 材料迁移率和温度的关系图

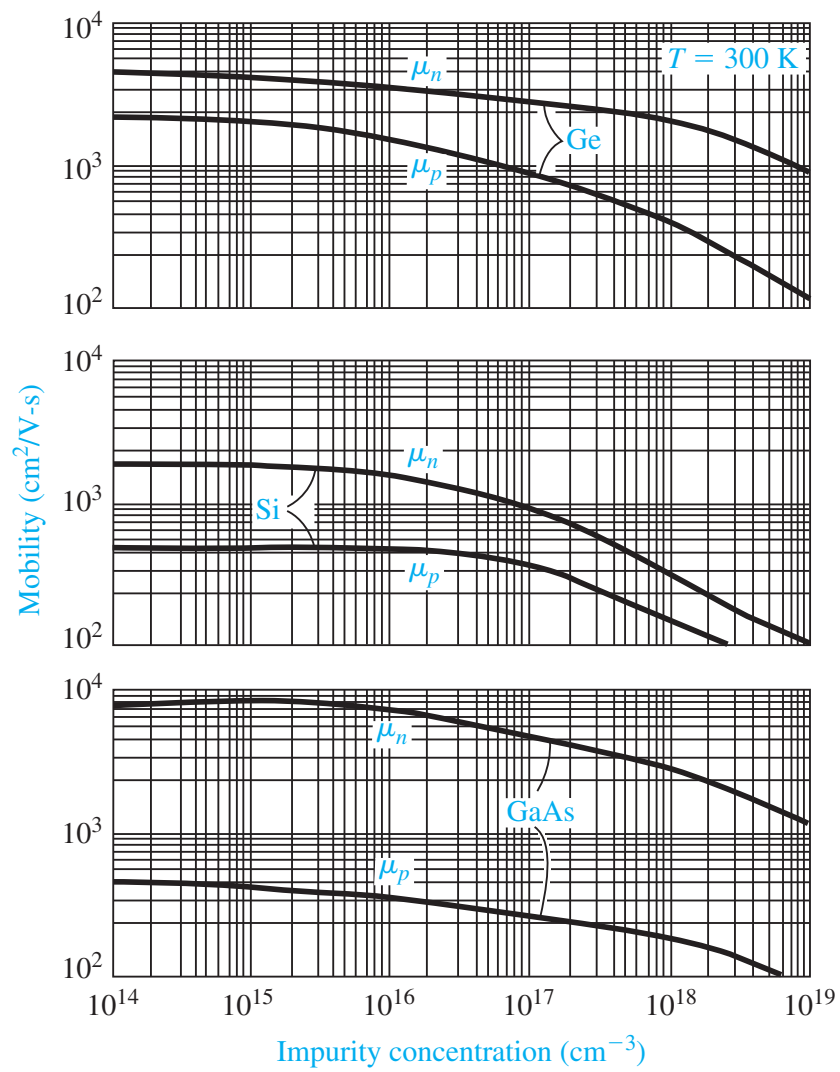


Figure 4.4: 材料迁移率和掺杂浓度的关系图

Chapter 5

半导体中过剩的载流子

5.1 载流子的产生与复合

5.1.1 平衡状态半导体

由于热学过程的随机性, 电子会不断收到热激发而从价带跃迁入导带. 同时导带中电子会在晶体中随机移动, 当其靠近空穴时就有可能落入价带中的空穴状态. 这种复合过程同时消灭了电子和空穴. 在热平衡状态下, 电子和空穴的产生率一定与它们的复合率相等. 如图 (5.1) 分别令 G_{n0} 和 G_{p0} 为电子和空穴的产生率, 单位是 $cm^{-3}s^{-1}$, 即单位时间单位空间内

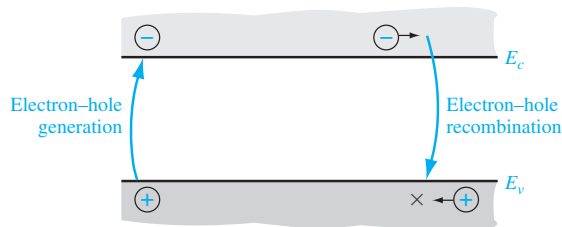


Figure 5.1: 电子和空穴的产生与复合

产生的数量. 对于直接带隙产生来说, 电子和空穴是成对出现的, 因此一定有

$$G_{n0} = G_{p0} \quad (5.1)$$

分别令 R_{n0} 和 R_{p0} 为电子和空穴的复合率, 单位仍然是 $cm^{-3}s^{-1}$. 对于直接带隙产生来说, 电子和空穴是成对消失的, 因此一定有

$$R_{n0} = R_{p0} \quad (5.2)$$

因此对于热平衡状态来说, 电子和空穴的浓度与时间无关, 因此产生和复合的概率相等

$$G_{n0} = G_{p0} = R_{n0} = R_{p0} \quad (5.3)$$

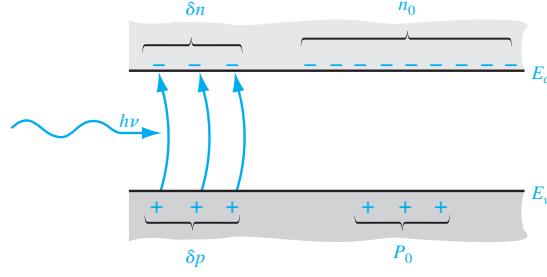


Figure 5.2: 光产生过剩电子和空穴的密度

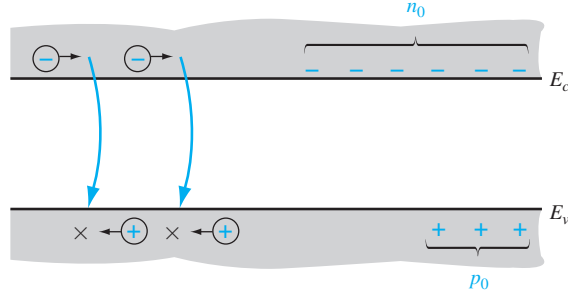


Figure 5.3: 过剩载流子复合后重建热平衡

5.1.2 过剩载流子的产生与复合

Table 5.1: 本章中用到的一些相关符号

| 符号 | 定义 |
|------------------------|--------------------------|
| n_0, p_0 | 热平衡电子和空穴的浓度 (时间空间无关) |
| n, p | 总电子和空穴的浓度 (可能是时间或者位置的函数) |
| $\delta n = n - n_0$ | 过剩电子的浓度 (可能是时间或者位置的函数) |
| $\delta p = p - p_0$ | 过剩空穴的浓度 (可能是时间或者位置的函数) |
| g'_n, g'_p | 过剩电子和空穴产生率 |
| R'_n, R'_p | 过剩电子和空穴复合率 |
| τ_{n0}, τ_{p0} | 过剩少数载流子电子和空穴的寿命 |

假设外界有高能光子入射半导体, 从而导致价带中电子被激发到导带. 这种额外电子和空穴就称为过剩电子和过剩空穴. 此时平衡状态受到扰动, 此时半导体不再处于热平衡状态, 即 $np \neq n_0 p_0 = n_i^2$.

$$\frac{dn(t)}{dt} = \alpha_r [n_i^2 - n(t)p(t)] \quad (5.4)$$

其中

$$n(t) = n_0 + \delta n(t) \quad (5.5)$$

$$p(t) = p_0 + \delta p(t) \quad (5.6)$$

$\alpha_r n_i^2$ 是热平衡状态的生成率.

$$\begin{aligned} \frac{d(\delta n(t))}{dt} &= \alpha_r [n_i^2 - (n_0 + \delta n(t))(p_0 + \delta p(t))] \\ &= -\alpha_r \delta n(t) [(n_0 + p_0) + \delta n(t)] \end{aligned} \quad (5.7)$$

考虑 p 型材料 ($p_0 \gg n_0$), 过剩载流子小注入条件 ($\delta n(t) \ll p_0$) 下有

$$\frac{d(\delta n(t))}{dt} = -\alpha_r p_0 \delta n(t) \quad (5.8)$$

上述方程解为非平衡浓度的指数衰减函数

$$\delta n(t) = \delta n(0) e^{-\alpha_r p_0 t} = \delta n(0) e^{-t/\tau_{n0}} \quad (5.9)$$

其中 $\tau_{n0} = 1/(\alpha_r p_0)$. 且 τ_{n0} 用来代表过剩少数载流子的寿命. 对于直接带间复合, 有

$$R'_n = R'_p = -\frac{d(\delta n(t))}{dt} = \alpha_r p_0 \delta n(t) = \frac{\delta n(t)}{\tau_{n0}} \quad (5.10)$$

一般情况下, 产生率和复合率是时间和空间的函数.

5.2 过剩载流子的性质

扩散和漂移同时存在时, 称为双极运输 (ambipolar transport).

5.2.1 连续性方程

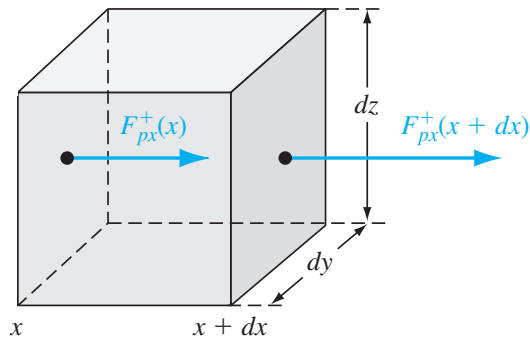


Figure 5.4: 微分体积元中空穴粒子流图

下面讨论电子和空穴的连续性方程. 参数 F_{px}^+ 是空穴粒子的流量 (flux), 单位为 $cm^{-2}s^{-1}$. 对于 x 方向的粒子流密度有

$$F_{px}^+(x + dx) = F_{px}^+(x) + \frac{\partial F_{px}^+}{\partial x} dx \quad (5.11)$$

微分体积元中沿着 x 方向的粒子流产生的空穴净增量为

$$\frac{\partial p}{\partial t} dx dy dz = [F_{px}^+(x+dx) - F_{px}^+(x)] dy dz = -\frac{\partial F_{px}^+}{\partial x} dx dy dz \quad (5.12)$$

空穴的产生率和复合率也会影响微分体积中的空穴浓度, 于是微分体积元中单位时间空穴的总增加量为

$$\frac{\partial p}{\partial t} dx dy dz = -\frac{\partial F_{px}^+}{\partial x} dx dy dz + g_p dx dy dz - \frac{p}{\tau_{pt}} dx dy dz \quad (5.13)$$

其中 p 为空穴密度, 单位时间单位空间内空穴数量的增加等于由外部流入的空穴数加上单位时间内生成的空穴数, 再减去单位时间内复合导致的空穴减少量. 空穴复合率由 p/τ_{pt} 给出, τ_{pt} 包括热平衡载流子寿命以及过剩载流子寿命. 上式可以精简为

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial F_{px}^+}{\partial x} + g_p - \frac{p}{\tau_{pt}} \quad (5.14)$$

同理对于一维电子连续性方程有

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{\partial F_{nx}^-}{\partial x} + g_n - \frac{n}{\tau_{nt}} \quad (5.15)$$

5.2.2 与时间有关的扩散项

$$J_p = en\mu_p E - eD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (5.16)$$

$$J_n = en\mu_n E + eD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (5.17)$$

两边同时除以电荷就得到了粒子流量 flux

$$\frac{J_p}{+e} = F_p^+ = n\mu_p E - D_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (5.18)$$

$$\frac{J_n}{-e} = F_p^- = -n\mu_n E - D_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (5.19)$$

将上述两式子带入到连续性方程 (5.14)(5.15) 中

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\mu_p \frac{\partial(pE)}{\partial x} + D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + g_p - \frac{p}{\tau_{pt}} \quad (5.20)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = +\mu_n \frac{\partial(nE)}{\partial x} + D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + g_n - \frac{n}{\tau_{nt}} \quad (5.21)$$

且

$$\frac{\partial(pE)}{\partial x} = E \frac{\partial p}{\partial x} + p \frac{\partial E}{\partial x} \quad (5.22)$$

故我们有

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p \left(E \frac{\partial p}{\partial x} + p \frac{\partial E}{\partial x} \right) + g_p - \frac{p}{\tau_{pt}} \quad (5.23)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu_n \left(E \frac{\partial n}{\partial x} + n \frac{\partial E}{\partial x} \right) + g_n - \frac{n}{\tau_{nt}} \quad (5.24)$$

5.3 双极运输

5.3.1 双极运输方程的推导

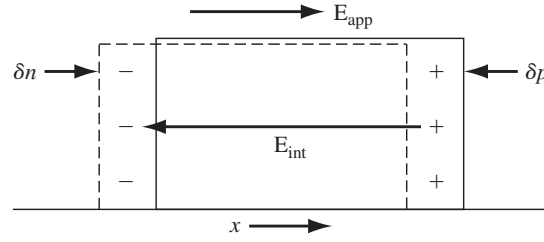


Figure 5.5: 过剩电子和空穴分离产生的内建电场

半导体内电场包含了外加电场和内建电场

$$E = E_{app} + E_{int} \quad (5.25)$$

泊松方程把过剩电子和空穴浓度与内建电场联系起来了

$$\nabla \cdot E = \nabla \cdot E_{int} = \frac{e(\delta p - \delta n)}{\epsilon_s} = \frac{\partial E_{int}}{\partial x} \quad (5.26)$$

ϵ_s 为介电常数.

Chapter 6

pn 结

6.1 零偏置下的 pn 结

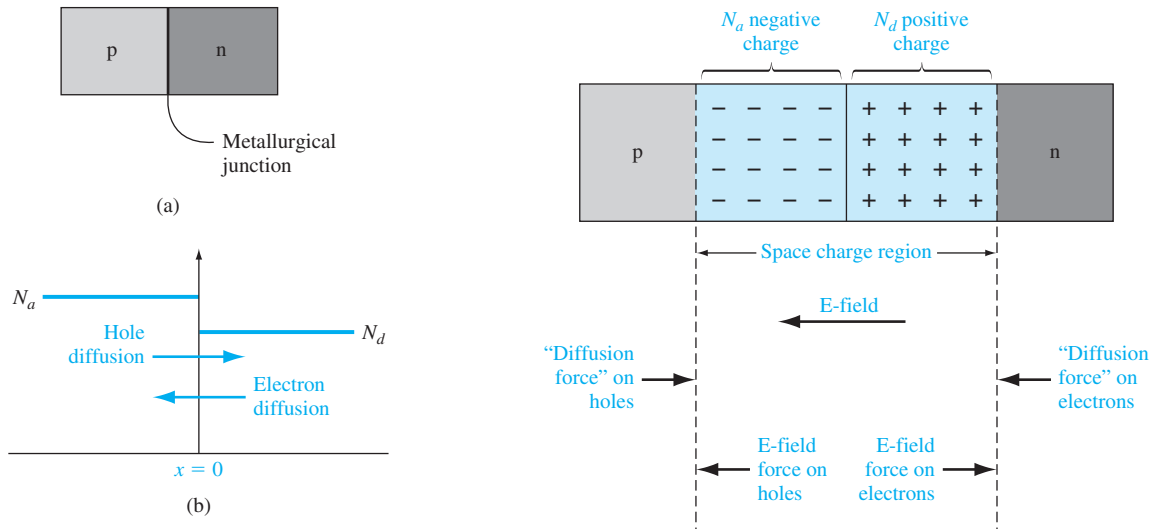


Figure 6.1: PN 结内建电场示意图

由于 pn 结两端载流子掺杂浓度差异, 在 pn 结处发生扩散, 从而产生内建电势差 V_{bi} , 热平衡状态下的 pn 结的能带图如 (6.2) 根据图 (6.2) 我们有

$$V_{bi} = |\phi_{Fn}| + |\phi_{Fp}| \quad (6.1)$$

n 区内的导带电子浓度可以表示为

$$n_0 = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT} \right] \quad (6.2)$$

也可以表示为

$$n_0 = n_i \exp \left[\frac{-(E_F - E_{Fi})}{kT} \right] \quad (6.3)$$

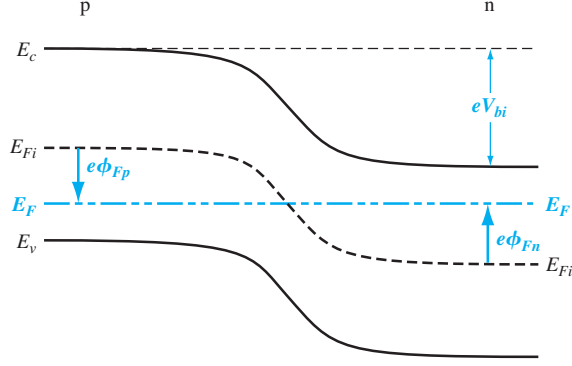


Figure 6.2: 热平衡状态下 pn 结的能带图

因此 n 区的电势 ϕ_{Fn} 为

$$e\phi_{Fn} = E_{Fi} - E_F \quad (6.4)$$

故

$$n_0 = n_i \exp \left[\frac{-e\phi_{Fn}}{kT} \right] \quad (6.5)$$

假设 $n_0 = N_d$, 求解 ϕ_{Fn}

$$\phi_{Fn} = \frac{-kT}{e} \ln \left(\frac{N_d}{n_i} \right) \quad (6.6)$$

对于 p 区空穴

$$e\phi_{Fp} = E_{Fi} - E_F \quad (6.7)$$

$$p_0 = N_a = n_i \exp \left[\frac{E_{Fi} - E_F}{kT} \right] = n_i \exp \left[\frac{e\phi_{Fp}}{kT} \right] \quad (6.8)$$

故有

$$\phi_{Fp} = \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{N_a}{n_i} \right) \quad (6.9)$$

最后, 我们可以得到 V_{bi} 和掺杂浓度的关系

$$V_{bi} = \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) = V_t \ln \left(\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) \quad (6.10)$$

其中 $V_t = kT/e$ 为热电压.

6.1.1 电场强度

如图 (6.3), 根据电场的一维泊松方程

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = \frac{-\rho(x)}{\epsilon_s} = -\frac{dE(x)}{dx} \quad (6.11)$$

电荷密度 $\rho(x)$ 为

$$\rho(x) = \begin{cases} -eN_a, & -x_p < x < 0 \\ -eN_d, & 0 < x < x_n \end{cases}$$

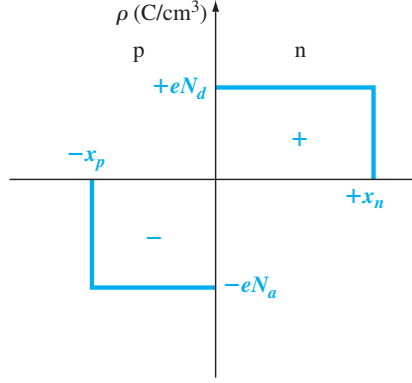


Figure 6.3: 突变结近似均匀掺杂 pn 结的空间电荷密度

对泊松方程积分有

$$E = \int \frac{\rho(x)}{\varepsilon_s} dx = - \int \frac{eN_a}{\varepsilon_s} dx = \frac{-eN_a}{\varepsilon_s} x + C_1 \quad (6.12)$$

利用条件 $x = -x_p$ 处 p 型区域内电场为零, 可以得到 C_1 , 故

$$E = \frac{-eN_a}{\varepsilon_s} (x + x_p), \quad -x_p < x < 0 \quad (6.13)$$

同理对于 n 型半导体内

$$E = \frac{-eN_d}{\varepsilon_s} (x_n - x), \quad 0 < x < x_n \quad (6.14)$$

再利用 $x = 0$ 处电场函数连续可得

$$N_a x_p = N_d x_n \quad (6.15)$$

其实上述条件可以通过在整个 abrupt Junction 使用高斯方程, 此区域内净电荷为零来得到. 得到了整个区域的电场, 我们就可以算出 pn 结上的内建电压了

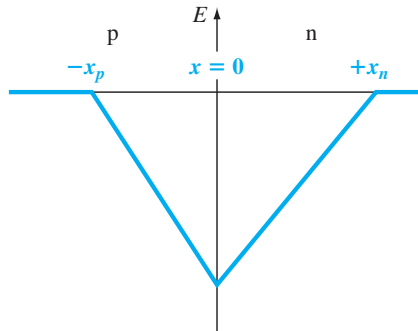


Figure 6.4: 均匀掺杂 pn 结空间电荷区的电场

$$\phi(x) = - \int E(x) dx = \int \frac{eN_a}{\varepsilon_s} (x + x_p) dx = \frac{eN_a}{\varepsilon_s} \left(\frac{x^2}{2} + x_p \cdot x \right) + C'_1 \quad (6.16)$$

我们令 $x = -x_p$ 处的电势为零, 则可以确定常数 $c_1' = eN_a x_p^2 / (2\varepsilon_s)$, 由此

$$\phi(x) = \frac{eN_a}{2\varepsilon_s}(x + x_p)^2, \quad -x_p < x < 0 \quad (6.17)$$

同理对 n 区域内电场积分, 且令 $x = 0$ 处电势连续得到

$$\phi(x) = \frac{eN_a}{\varepsilon_s} \left(x_n \cdot x - \frac{x^2}{2} \right) + \frac{eN_a}{2\varepsilon_s} x_p^2, \quad 0 < x < x_n \quad (6.18)$$

内建电势 V_{bi} 等于 $x = x_n$ 处的电势

$$V_{bi} = |\phi(x = x_n)| = \frac{e}{2\varepsilon_s} (N_d x_n^2 + N_a x_p^2) = \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) \quad (6.19)$$

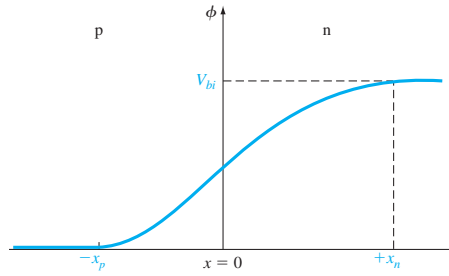


Figure 6.5: 均匀掺杂 pn 结空间电荷区的电势

6.1.2 空间电荷区宽度

我们结合公式 (6.15)(6.19) 有

$$x_n = \left(\frac{2\varepsilon_s V_{bi}}{e} \left[\frac{N_a}{N_d} \right] \left[\frac{1}{N_a + N_d} \right] \right)^{1/2} \quad (6.20)$$

$$x_p = \left(\frac{2\varepsilon_s V_{bi}}{e} \left[\frac{N_d}{N_a} \right] \left[\frac{1}{N_a + N_d} \right] \right)^{1/2} \quad (6.21)$$

总的耗尽区宽度 W 为

$$W = x_n + x_p = \left(\frac{2\varepsilon_s V_{bi}}{e} \left[\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right] \right)^{1/2} \quad (6.22)$$

6.2 反向偏置

反偏下 pn 结的能带图如 (6.6), 总的电势差 V_{total} 增加了. 外加的电压为反偏电压, 那么总电势差可以表示为

$$V_{total} = V_{bi} + V_R = |\phi_{Fn}| + |\phi_{Fp}| + V_R \quad (6.23)$$

其中 V_R 为反偏电压的大小.

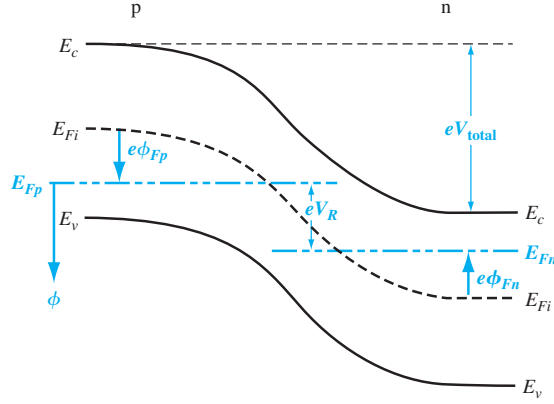


Figure 6.6: 反偏下 pn 结的能带图

6.2.1 空间电荷区宽度与电场

当加入反向偏置时, 空间电荷区会拓宽, 此时空间总电荷区宽度的推导, 只需要把 V_{bi} 换成 V_{total}

$$W = \left(\frac{2\epsilon_s(V_{bi} + V_R)}{e} \left[\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right] \right)^{1/2} \quad (6.24)$$

可以发现, 如果两边掺杂浓度相差很大, 空间电荷区宽度基本上是由掺杂少的一边决定的. 进一步, 我们可以发现在 pn 冶金结处电场最大

$$E_{max} = \frac{-eN_a x_p}{\epsilon_s} = \frac{-eN_d x_n}{\epsilon_s} = - \left(\frac{2e(V_{bi} + V_R)}{\epsilon_s} \left[\frac{N_a N_d}{N_a + N_d} \right] \right)^{1/2} \quad (6.25)$$

pn 结内最大的电场也可以表示为

$$E_{max} = \frac{-2(V_{bi} + V_R)}{W} \quad (6.26)$$

下面给出公式 (6.26) 的一个直观理解. 结合图 (6.4) 可以知道, 在 p 区和 n 区电场随空间都是线性的, 所以两边总电势可以表示为

$$\frac{1}{2} E_{max} x_p + \frac{1}{2} E_{max} x_n = \frac{1}{2} E_{max} (x_p + x_n) = \frac{1}{2} E_{max} W = -(V_{bi} + V_R) \quad (6.27)$$

因此可得公式 (6.26). 本质上 pn 结特性只和 N_a 与 N_d 有关, 因此两个不同的方程就足以确定整个器件特性.

6.2.2 结电容

电容反映了在外界偏压扰动下系统电荷的变化情况, 即

$$C = \frac{dQ}{dV_R} = \frac{eN_d dx_n}{dV_R} \quad (6.28)$$

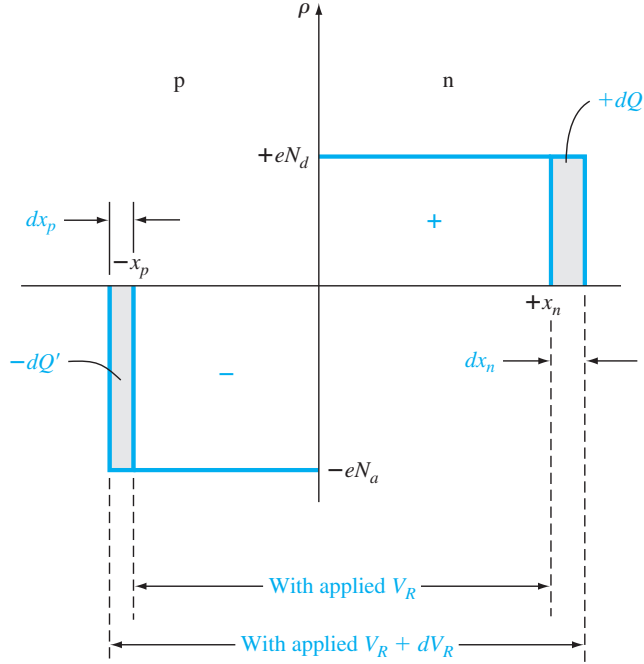


Figure 6.7: 均匀掺杂 pn 结空间电荷区宽度反偏电压改变的微分变化量

而 x_n 为

$$x_n = \left(\frac{2\varepsilon_s(V_{bi} + V_R)}{e} \left[\frac{N_a}{N_d} \right] \left[\frac{1}{N_a + N_d} \right] \right)^{1/2} \quad (6.29)$$

故有

$$C = \left[\frac{e\varepsilon_s N_a N_d}{2(V_{bi} + V_R)(N_a + N_d)} \right]^{1/2} = \frac{\varepsilon_s}{W} \quad (6.30)$$

上述表达式与单位面积平行板电容表达式是一样的. 仔细观察图 (6.7) 其实就可以发现这一结论.

6.2.3 单边突变结

如图 (6.8), 考虑一种单边突变结的特殊 pn 结. 若 $N_a \gg N_d$, 称这种结为 p^+n 结. 于是总空间电荷区宽度表达式为

$$W \approx \left(\frac{2\varepsilon_s(V_{bi} + V_R)}{eN_d} \right)^{1/2} \quad (6.31)$$

此时会有 $x_p \ll x_n$, 且 $W \approx x_n$, 即结宽度几乎就是轻掺杂区的宽度. 此时 p^+n 结电容为

$$C \approx \left[\frac{e\varepsilon_s N_d}{2(V_{bi} + V_R)} \right]^{1/2} = \frac{\varepsilon_s}{W} \quad (6.32)$$

上式可以变化为

$$\left(\frac{1}{C} \right)^2 = \frac{2(V_{bi} + V_R)}{e\varepsilon_s N_d} \quad (6.33)$$

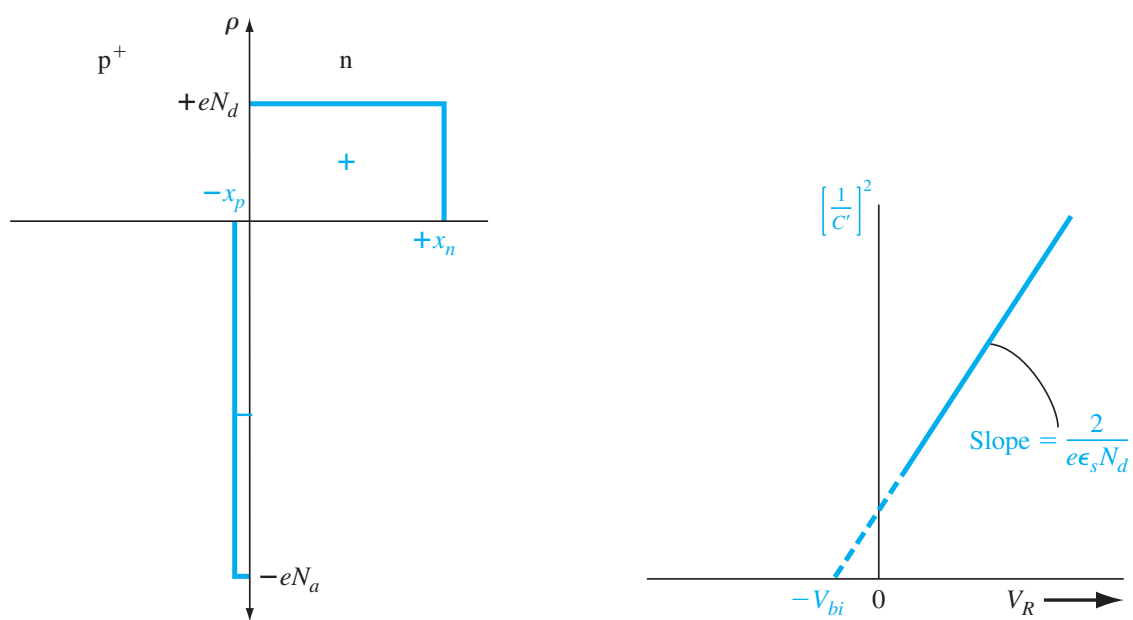


Figure 6.8: 单边 pn 结和电容

Chapter 7

pn 结二极管

7.1 pn 结电流

7.1.1 边界条件

Table 7.1: 本章中用到的一些相关符号

| 符号 | 定义 |
|-----------------------------|----------------------|
| N_a | pn 结内 p 区的受主浓度 |
| N_d | pn 结内 n 区的施主浓度 |
| $n_{n0} = N_d$ | 热平衡状态下 n 区内的多子电子浓度 |
| $p_{n0} = n_i^2/N_d$ | 热平衡状态下 n 区内的少子电子浓度 |
| $p_{p0} = N_a$ | 热平衡状态下 p 区内的多子电子浓度 |
| $n_{p0} = n_i^2/N_a$ | 热平衡状态下 p 区内的少子电子浓度 |
| n_p | p 区内少子电子的浓度 |
| p_n | n 区内少子空穴的浓度 |
| $n_p(-x_p)$ | 空间电荷区边缘处 p 区内的少子电子浓度 |
| $p_n(x_n)$ | 空间电荷区边缘处 n 区内的少子空穴浓度 |
| $\delta n_p = n_p - n_{p0}$ | p 区内过剩少数载流子的浓度 |
| $\delta p_n = p_n - p_{n0}$ | n 区内过剩少数载流子空穴的浓度 |

上一章节我们得到内建电势的表达式

$$V_{bi} = V_t \ln \left(\frac{N_a N_d}{n_i^2} \right) \quad (7.1)$$

变形有

$$\frac{n_i^2}{N_a N_d} = \exp \left(\frac{-eV_{bi}}{kT} \right) \quad (7.2)$$

假设杂质完全电离, n 区电子浓度就等于施主浓度 $n_{n0} \approx N_d$, 而 p 区的少子电子浓度为 n_i^2/N_a . 故上式可写成

$$n_{p0} = n_{n0} \exp\left(\frac{-eV_{bi}}{kT}\right) \quad (7.3)$$

上式把平衡状态下 p 区少子电子浓度与 n 区内多子电子的浓度联系在一起了. 当加载了正

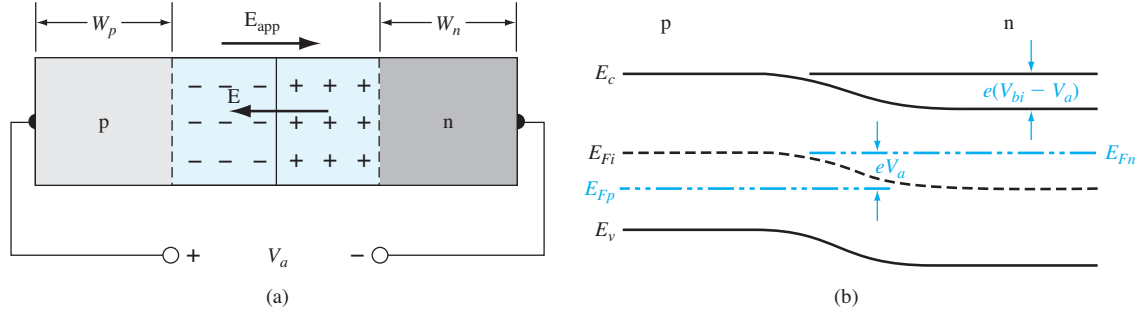


Figure 7.1: (a) 由正向电压感生的电场和空间电荷区电场方向的正偏 pn 结; (b) 相应的能带图

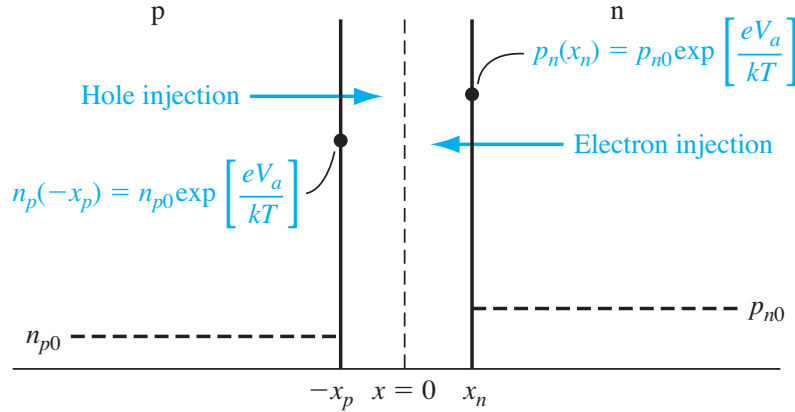


Figure 7.2: 正偏电压形成的空间电荷区边缘处的过剩少子浓度图

向电压时, 大部分的偏压影响都落在了 pn 结上. 外加的正向电压, 打破了热平衡状态, 阻止多数载流子穿越空间电荷区的电场被削弱了, n 区内的多子电子被注入到 p 区, 而 p 区的多子被空穴被注入到 n 区. 此时关系式 (7.3) 可以表示为

$$n_p = n_{n0} \exp\left[\frac{-e(V_{bi} - V_a)}{kT}\right] = n_{n0} \exp\left(\frac{-eV_{bi}}{kT}\right) \exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) \quad (7.4)$$

由于我们采用了小注入假设, 多子电子的浓度 n_{n0} 基本保持不变, 但是少子浓度 n_p 会偏离其热平衡 n_{p0} 好几个数量级.

$$n_p = n_{p0} \exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) \quad (7.5)$$

同理正向偏压下, 注入到 n 区内的 p 区少子空穴也经历了上述过程

$$p_n = p_{n0} \exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) \quad (7.6)$$

其中 p_n 为 n 区内空间电荷区边缘处少子空穴的浓度. 图 (7.2) 显示正向偏压时 p 区和 n 区内均存在过剩少数载流子.

7.1.2 少数载流子分布

在一维情况下 n 区内过剩少子空穴的双极运输方程为

$$\frac{\partial(\delta p_n)}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p E \frac{\partial(\delta p_n)}{\partial x} + g' - \frac{\delta p_n}{\tau_{pt}} \quad (7.7)$$

其中 $\delta p_n = p_n - p_{n0}$ 是过剩少子空穴的浓度, 且等于总的少子浓度与热平衡少子浓度的差值. 为了简化计算和理解, 我们假设在 n 区内 $x > x_n$ 区域 $E = 0$, 且 $g' = 0$. 我们还假设 pn 结处于稳态, 则 $\partial(\delta p_n)/\partial t = 0$, 则

$$\frac{\partial^2(\delta p_n)}{\partial x^2} - \frac{\delta p_n}{L_p^2} = 0 \quad (x > x_n) \quad (7.8)$$

其中 $L_p^2 = D_p \tau_{p0}$. 同理, p 区过剩少子电子的浓度满足下式:

$$\frac{\partial^2(\delta n_p)}{\partial x^2} - \frac{\delta n_p}{L_n^2} = 0 \quad (x < x_p) \quad (7.9)$$

其中 $L_n^2 = D_n \tau_{n0}$.

总的少子浓度边界条件为

$$p_n(x_n) = p_{n0} \exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) \quad (7.10)$$

$$n_p(-x_p) = n_{p0} \exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) \quad (7.11)$$

$$p_n(x \rightarrow +\infty) = p_{n0} \quad (7.12)$$

$$n_p(x \rightarrow -\infty) = n_{p0} \quad (7.13)$$

当少子经过空间电荷区扩散进入中性半导体区时, 它们会与多子复合. 假设 $W_n \gg L_p$, $W_p \gg L_n$. 再离空间电荷区很远的地方, 过剩少数载流子的浓度必须趋近于零. 这种 pn 结称为长 pn 结果.

式 (7.8) 通解为

$$\delta p_n(x) = p_n(x) - p_{n0} = A e^{x/L_p} + B e^{-x/L_p} \quad (x \geq x_n) \quad (7.14)$$

式 (7.9) 通解为

$$\delta n_p(x) = n_p(x) - n_{p0} = A e^{x/L_n} + B e^{-x/L_n} \quad (x \leq -x_p) \quad (7.15)$$

由边界条件 (7.12)(7.13) 可知 A 和 D 必须为零. 最后解出当 $x \geq x_n$ 处的过剩少数子浓度为

$$\delta p_n(x) = p_n(x) - p_{n0} = p_{n0} \left[\exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \exp\left(\frac{x_n - x}{L_p}\right) \quad (7.16)$$

$x \leq -x_p$ 处的过剩少数子浓度为

$$\delta n_p(x) = n_p(x) - n_{p0} = p_{n0} \left[\exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \exp\left(\frac{x_p - x}{L_n}\right) \quad (7.17)$$

图 (7.3) 显示了少数子浓度随着空间电荷区边缘向中性区内延伸的距离的增大而指数衰减, 并

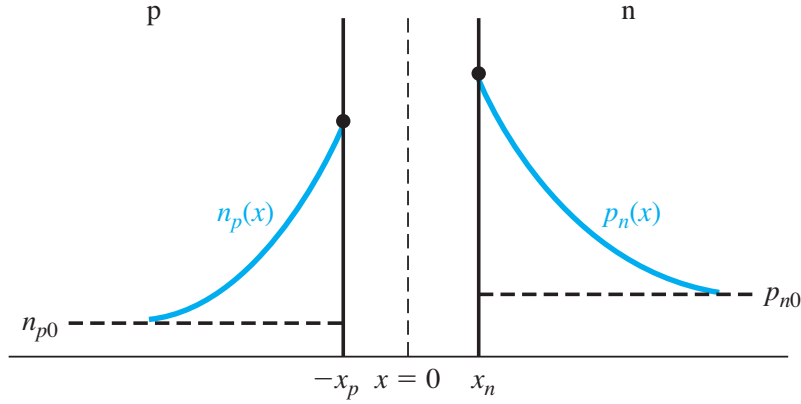


Figure 7.3: 正偏条件下 pn 结内部的稳态少数子浓度图

逐渐趋向其热平衡值.

正偏压降低了 pn 结的内建电势差, n 区的电子穿过了空间电荷区注入到 p 区, 形成了 p 区的过剩少数载流子. 这些过剩电子逐渐向电中性 p 区内扩散, 然后与多子空穴复合. 这样, 过剩少数电子的浓度就随着距离的增加而指数衰减. 上述过程同适用于穿过空间电荷区注入到 n 区内的空穴.

7.1.3 理想 pn 结电流

首先我们假设流过 pn 结的电流为电子电流与空穴电流之和. 应该注意, 我们假设流过耗尽区的电子电流与空穴电流值为定值. 由于 pn 结内的电子电流与空穴电流分别为连续函数, 则 pn 结的电流即为 $x = x_n$ 处的少数空穴扩散电流与 $x = -x_p$ 处的少数电子扩散电流之和. 如图 (7.3) 所示, 少数浓度的梯度产生了扩散电流. 由于采用了空间电荷区以外区域的电场为零的假设, 因此我们可以忽略任何少数漂移电流的成分. 上述求 pn 结电流的方法如图 (7.4) 所示.

我们可以通过下式确定 $x = x_n$ 处的少数空穴扩散电流密度:

$$J_p(x_n) = -eD_p \left. \frac{dp_n(x)}{dx} \right|_{x=x_n} \quad (7.18)$$

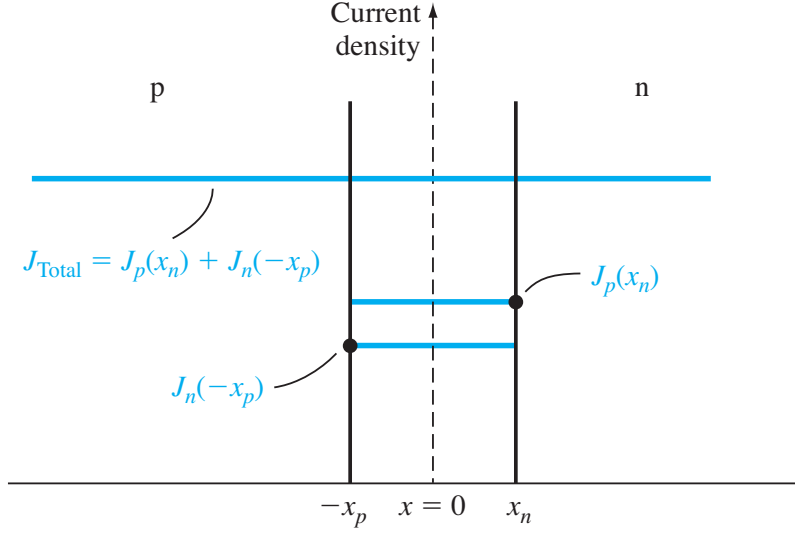


Figure 7.4: PN 结空间电荷区内电子电流和空穴电流的密度图

由于采用了均匀掺杂假设, 热平衡载流子的浓度为常量, 所以上式可以写为

$$J_p(x_n) = -eD_p \frac{d(\delta p_n(x))}{dx} \Big|_{x=x_n} \quad (7.19)$$

把公式 (7.16)(7.17) 代入上式由

$$J_p(x_n) = \frac{eD_p p_{n0}}{L_p} \left[\exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \quad (7.20)$$

同理可以计算出 $x = -x_p$ 处电子扩散电流密度

$$J_n(-x_p) = -eD_n \frac{d(\delta n_p(x))}{dx} \Big|_{x=-x_p} = \frac{eD_n n_{p0}}{L_n} \left[\exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \quad (7.21)$$

总电流密度为

$$J = J_p(x_n) + J_n(-x_p) = \left[\frac{eD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{eD_n n_{p0}}{L_n} \right] \left[\exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \quad (7.22)$$

我们令

$$J_s = \frac{eD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{eD_n n_{p0}}{L_n} \quad (7.23)$$

则有

$$J = J_s \left[\exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \quad (7.24)$$

Chapter 8

金属 - 半导体和半导体异质结

前面两章中我们讨论了 pn 结, 它们是由同一种半导体材料组成的, 通常称为同质结. 这一章节中, 我们将讨论由不同材料组成的结, 即金属 - 半导体和半导体异质结, 这两种结也能制成二极管.

半导体器件或集成电路必须与外部电路相连. 这种连接是通过金属 - 半导体结的非整流接触实现的, 即欧姆接触. 欧姆接触是接触电阻很低的结, 且在结两边都能形成电流的接触. 我们将讨论产生金属 - 半导体欧姆接触的条件.

8.1 肖特基势垒二极管

这一节讲述金属 - 半导体的整流接触, 即肖特基势垒二极管. 多数情况下, 整流接触发生在 n 型半导体中, 我们将主要讨论金属和 n 型半导体形成的整流接触.

8.1.1 性质上的特征

特定金属与 n 型半导体接触前的理想能带如图 (8.1). 真空能级作为参考能级, 参数 ϕ_m 为金属功函数, ϕ_s 为半导体功函数, χ 是电子亲和能. 接触前, 半导体的费米能级高于金属的费米能级, 热平衡时为了使费米能级连续变化, 半导体中的电子流向比它能级低的金属中, 带正电荷的空穴仍留在半导体中, 从而形成了一个空间电荷区 (耗尽层).

参数 ϕ_{B0} 是半导体的理想势垒高度, 金属中的电子向半导体中移动所遇见的势垒. 该势垒为

$$\phi_{B0} = \phi_m - \chi \quad (8.1)$$

当半导体和金属接触后, 电子要向从金属跑到半导体, 其能量只需要大于半导体导带 E_c 和金属的 E_F 之差, 即 ϕ_{B0} . 另外半导体一侧的电子要想跨越结到金属去则需要克服空间电荷区形成的内建电势差 V_{bi} .

$$V_{bi} = \phi_{B0} - \phi_n \quad (8.2)$$

V_{bi} 是半导体掺杂浓度的函数, 类似于 pn 结中的情况.

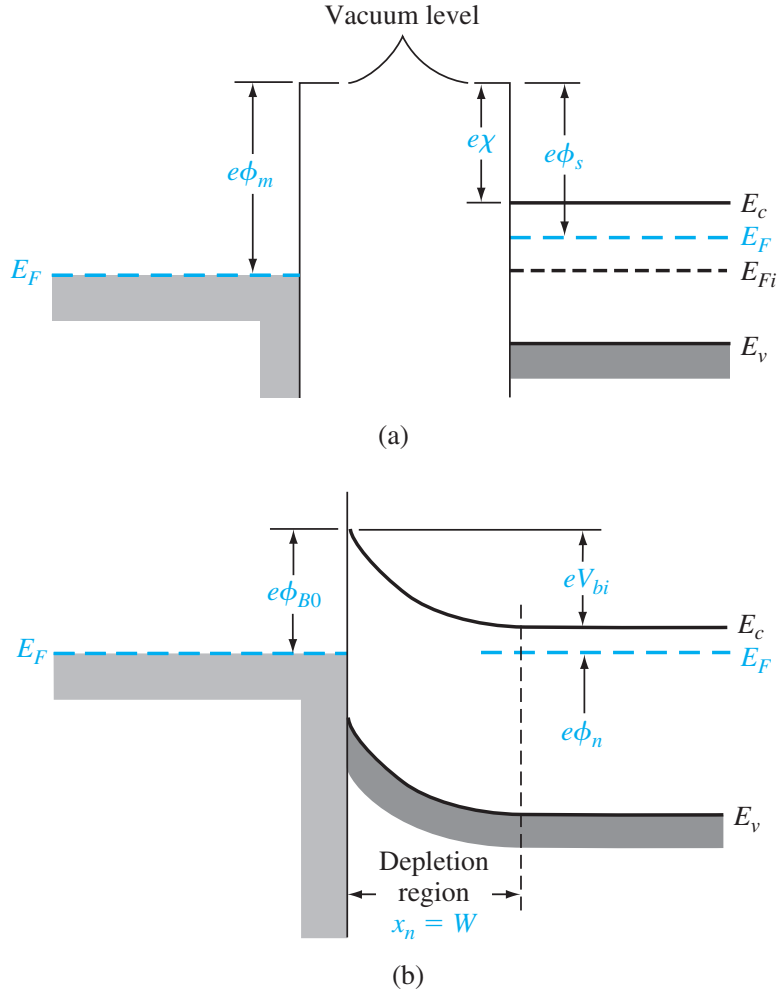


Figure 8.1: (a) 接触前金属半导体能带图; (b) 理想的金属与 n 型半导体结 ($\phi_m > \phi_s$) 的能带图

8.1.2 理想结的特性

我们可以用处理 pn 结同样的方法来处理异质结的静电特性. 空间电荷区电场用泊松方程描述

$$\frac{dE}{dx} = \frac{\rho(x)}{\varepsilon_s} \quad (8.3)$$

$$E = \int \frac{eN_d}{\varepsilon_s} dx = \frac{eN_dx}{\varepsilon_s} + C_1 \quad (8.4)$$

由于空间边界的电场强度为零, 可求得积分常数为

$$C_1 = -eN_dx_n\varepsilon_s \quad (8.5)$$

$$E = -\frac{eN_d(x_n - x)}{\varepsilon_s} \quad (8.6)$$

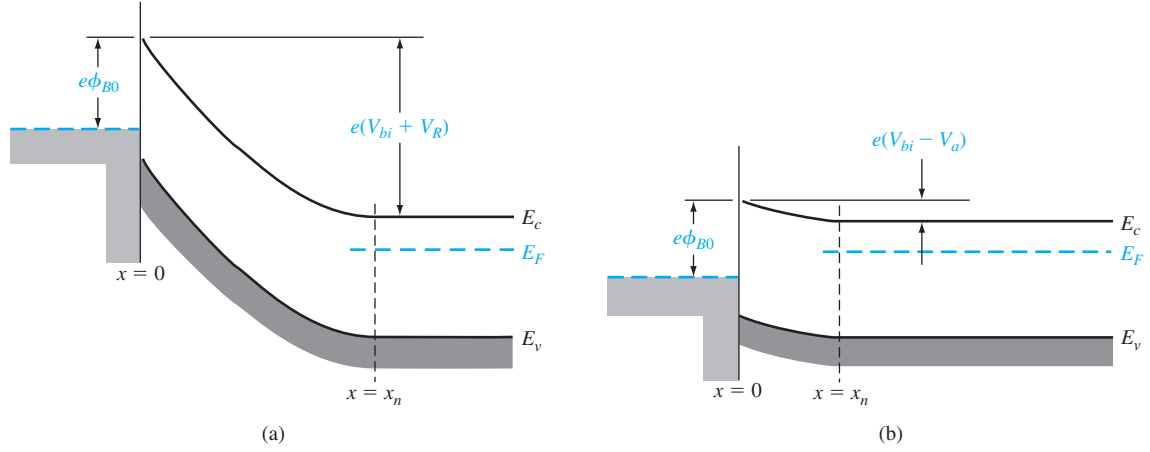


Figure 8.2: 有偏压时理想金属半导体结的能带图:(a) 反偏; (b) 正偏

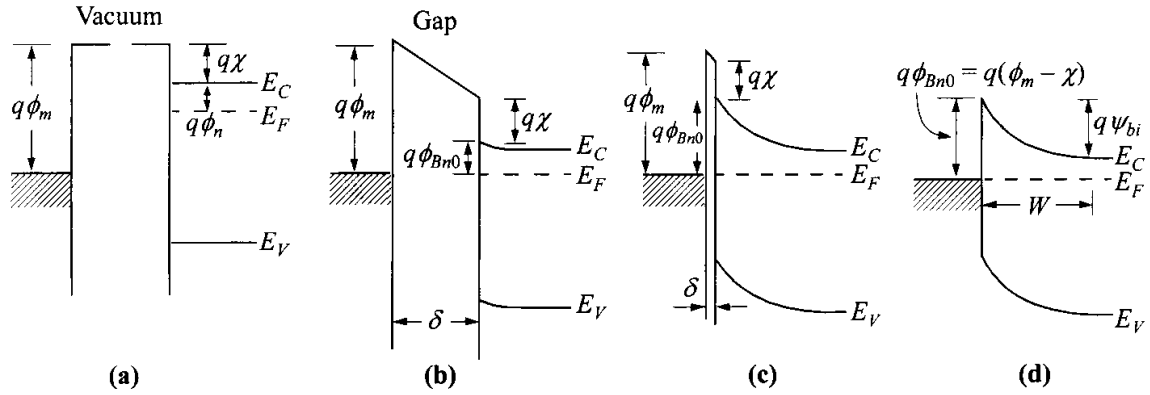


Figure 8.3: 金属 - 半导体接触能带图. 金属和半导体 (a) 分离系统中; (b) 连接为一个系统; (c) 间隔 δ 减小; (d) 间隔 δ 变为零

对于均匀掺杂的半导体来说, 场强是距离的线性函数, 在金属与半导体接触处, 场强达到最大值. 由于金属场强为零, 所以在金属 - 半导体的金属区中一定存在表面负电荷. 其实这个和单边 pn 结非常像 $W = x_n$.

$$\frac{1}{2}E_{max}x_n = \frac{1}{2} \cdot \frac{eN_d x_n}{\epsilon_s} x_n = V_{bi} + V_R \quad (8.7)$$

因此有

$$W = x_n = \left[\frac{2\epsilon_s(V_{bi} + V_R)}{eN_d} \right]^{1/2} \quad (8.8)$$

由于电荷耗尽区是均匀的, 因此我们可以把这部分电荷等效为在 $x_n/2$ 处, 电量为 eN_d 的平行板电容

$$Q = ex_n N_d = V_{bi} C = V_{bi} \cdot \frac{\epsilon_s}{x_n/2} \quad (8.9)$$

由此可得公式 (8.8).

考虑图 (8.3), 我们可以求出半导体费米能级和导带之间的能级差 ϕ_n

$$N_d = N_c \exp\left(\frac{-(E_c - E_F)q}{kT}\right) = N_c \exp\left(\frac{-\phi_n q}{kT}\right) \quad (8.10)$$

$$\phi_n = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_c}{N_d}\right) \quad (8.11)$$

此时的 V_{bi} 可以求得

$$V_{bi} = \phi_{B0} - \phi_n = \phi_m - \chi - \phi_n = \phi_m - \chi - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_c}{N_d}\right) \quad (8.12)$$

结电容可以对结电荷进行微分

$$C = eN_d \frac{dx_n}{dV_R} = \left[\frac{e\epsilon_s N_d}{2(V_{bi} + V_R)} \right]^{1/2} \quad (8.13)$$

我们把上式转换下

$$\left(\frac{1}{C}\right)^2 = \frac{2(V_{bi} + V_R)}{e\epsilon_s N_d} \quad (8.14)$$

由此, 我们可以根据电容和偏压的关系, 得出掺杂浓度 N_d , 有了掺杂浓度, 那么一切都能计算出来了.

Problem 8.1.1. 考虑由 tungsten 和 n 型硅形成肖特基二极管, $T = 300K$, $N_d = 3 \times 10^{15} cm^{-3}$, 求: (a) 理想肖特基势垒高度 (b) 内建电势差 (c) 加 $V_R = 5V$ 反偏压时的电场强度的峰值 (d) 就爱 $V_R = 5V$ 反偏压时的结电容.

8.1.3 势垒高度的非理想因素

有一种势垒的镜像力降低效应, 如图 (8.4). 镜像电场对于电子的力为

$$F = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_s(2x)^2} = -eE \quad (8.15)$$

由此可得

$$-\phi(x) = \int_x^\infty E dx' = \int_x^\infty \frac{e}{4\pi\epsilon_s(2x')^2} dx' = \frac{-e}{16\pi\epsilon_s x} \quad (8.16)$$

注意这里的电势能 $-e\phi(x)$ 是指把一个镜像电子搬移到无穷远处所需要做的功. 假定无穷远出为零电势点. 电介质中存在电场时 (这个电场不是上面积分的电场), 电势表达式为

$$-\phi(x) = \frac{-e}{16\pi\epsilon_s x} - Ex \quad (8.17)$$

在恒定电场影响下, 电子的电势曲线如图 (8.4c), 势垒由于镜像作用峰值减小了, 这种势垒减小效应就是肖特基效应. 我们可以对上式求导数, 得到极大值

$$\frac{d\phi(x)}{dx} = 0 \quad (8.18)$$

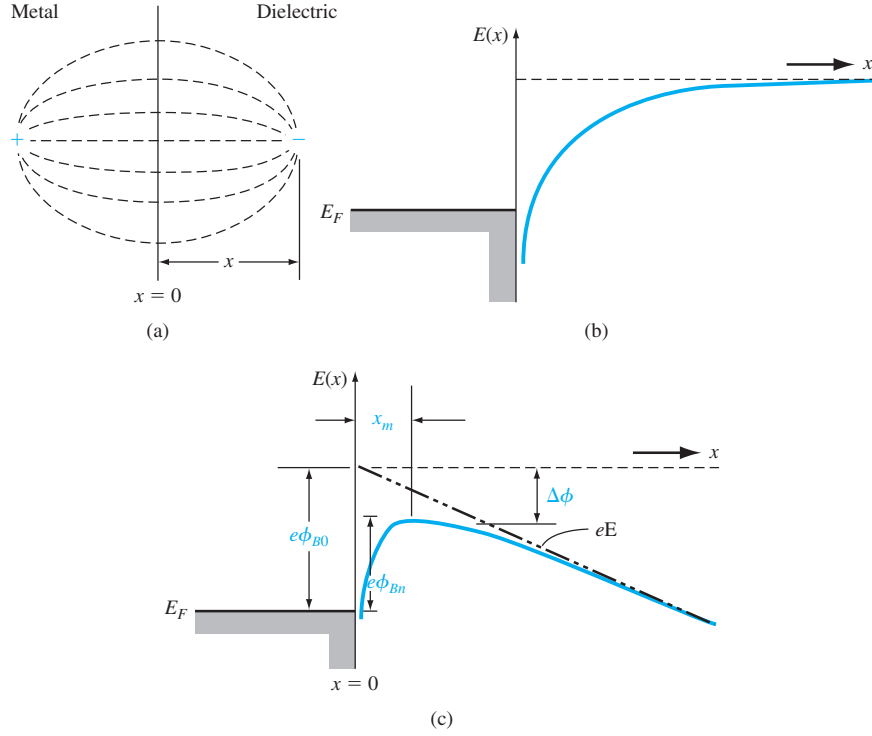


Figure 8.4: (a) 金属 - 半导体表面镜像电场线; (b) 零电场时的电势能; (c) 恒定电场时的电势能

$$x_m = \sqrt{\frac{e}{16\pi\epsilon_s E}} \quad (8.19)$$

需要注意, 此电势 $\phi(x)$ 是相对真空而言的, 而势垒减小值为由镜像电场引起的势垒下降

$$\Delta\phi = -\phi(x_m) = \sqrt{\frac{eE}{4\pi\epsilon_s}} \quad (8.20)$$

在实际的肖特基二极管中, 内部的电场 E 不会是距离的一个常值函数, 根据耗尽电荷近似理论可以认为这个电场是结表面的最大电场

$$\mathcal{E} = \sqrt{\frac{2eN_d|\psi_s|}{\epsilon_s}} \quad (8.21)$$

这个表面电势为

$$|\psi_s| = \phi_{Bn0} - \phi_n + V_R \quad (8.22)$$

我们把这个近似的恒定电场带入 $\Delta\phi$ 表达式

$$\Delta\phi = -\phi(x_m) = \sqrt{\frac{e\mathcal{E}_m}{4\pi\epsilon_s}} = \left[\frac{e^3 N_d |\psi_s|}{8\pi^2 \epsilon_s^3} \right]^{1/4} \quad (8.23)$$

对于反向偏置 V_R 为正, 那么 $|\psi_s|$ 增大, $\Delta\phi$ 增大, 那么意味着势垒比零偏时降低了更多, 此时势垒高度比零偏置稍微低一点. 反之, 如果是正向偏置 $V_R < 0$, 那么 $|\psi_s|$ 减小, $\Delta\phi$ 减小,

那么意味着势垒比零偏时升高了, 此时势垒高度比零偏置稍微高一些. 由此可见, 势垒高度是偏置的函数, 正向偏置时, 势垒更高, 反向偏置时, 势垒更低, 如图 (8.6) 所示.

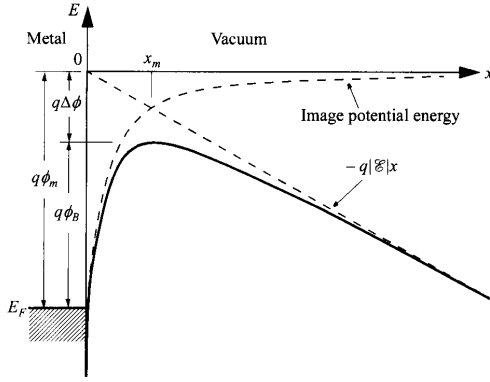


Figure 8.5: 金属半导体镜像效应图 2

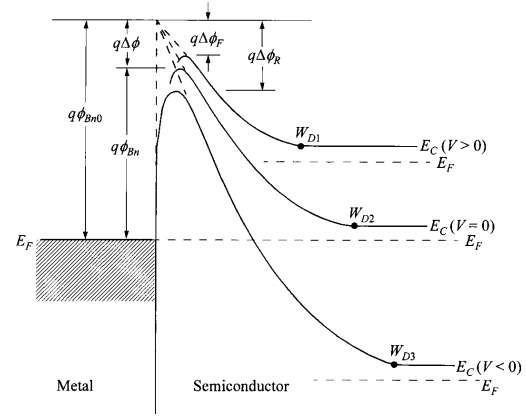


Figure 8.6: 金属半导体势垒和偏置的关系

8.1.4 表面状态

金属半导体表面层和表面状态图如 (8.7)(8.8)

8.1.5 电压电流关系

在金属 - 半导体结中的电流, 主要是多数载流子的运动, 比如 n 型半导体, 主要载流子就是电子啦. 下面我们将根据热电子假设 (thermionic emission), 即势垒高度要远大于 kT , 这样麦克斯韦 - 玻尔兹曼假设就可以近似使用了. 如图 (8.9). 半导体中电子流向金属导致的电流 J_{sm} , 这个电流大小和那些能量可以跨国势垒的电子浓度有关

$$J_{sm} = e \int_{E'_c}^{\infty} v_x dn \quad (8.24)$$

其中 E'_c 是热电子发射到金属所需要的最小的能量. v_x 是载流子运输的速度. 电子浓度的微分为

$$dn = g_c(E) f_F(E) dE = \frac{4\pi(2m_n^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \exp\left(\frac{-(E - E_F)}{kT}\right) dE \quad (8.25)$$

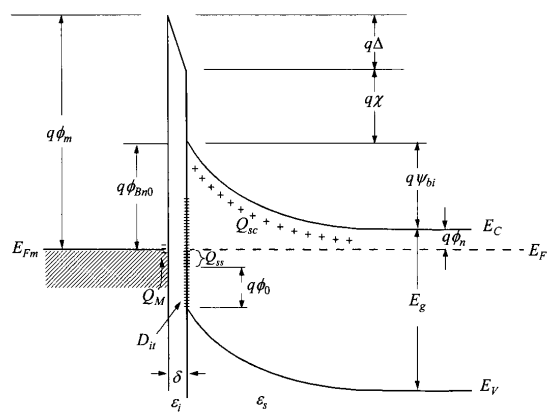
$$\frac{1}{2} m_n^* v^2 = E - E_c \quad (8.26)$$

流过结的总电流有

$$J = \left[A^* T^2 \exp\left(\frac{-e\phi_{Bn}}{kT}\right) \right] \left[\exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \quad (8.27)$$

其中

$$A^* = \frac{4\pi e m_n^* k^2}{h^3} \quad (8.28)$$



- ϕ_m = Work function of metal
- ϕ_{Bn0} = Barrier height (without image-force lowering)
- ϕ_0 = Neutral level (above E_F) of interface states
- Δ = Potential across interfacial layer
- χ = Electron affinity of semiconductor
- ψ_{bi} = Built-in potential
- δ = Thickness of interfacial layer
- Q_{sc} = Space-charge density in semiconductor
- Q_{ss} = Interface-trap charge
- Q_M = Surface-charge density on metal
- D_{it} = Interface-trap density
- ϵ_i = Permittivity of interfacial layer (vacuum)
- ϵ_s = Permittivity of semiconductor

Figure 8.7: 金属半导体表面层和表面状态图

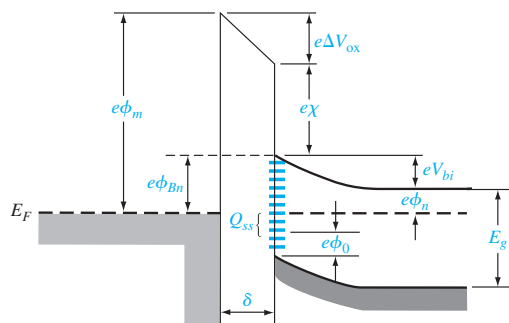


Figure 8.8: 金属半导体表面层和表面状态图 2

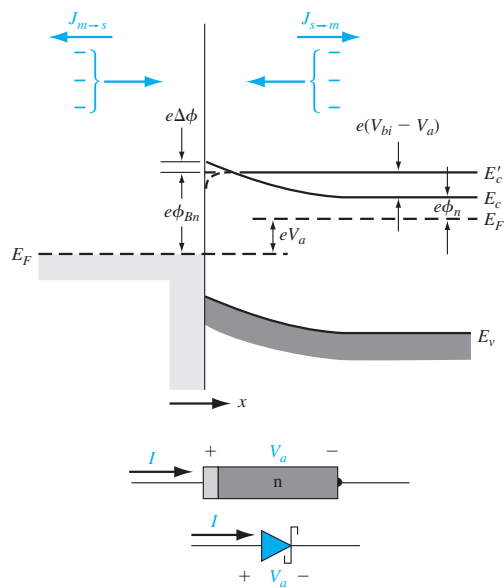


Figure 8.9: 正向偏置下的金属半导体包含镜像效应的能带图

Chapter 9

MOSFET(金属氧化物半导体场效应管)

9.1 MOS 电容

Table 9.1: 材料对本征硅的近似接触电势 (V)

| 材料 | $\phi_J - 0.4$ |
|---------------------|----------------|
| 银 (Ag) | -0.3 |
| 金 (Au) | 0 |
| 铜 (Cu) | +0.15 |
| 镍 (Ni) | +0.6 |
| 铝 (Al) | +1.35 |
| 镁 (Mg) | +0.6 |
| 非本征硅 (Extrinsic Si) | $-\phi_F$ |
| 本征硅 (Intrinsic Si) | +1.35 |