第四章 平衡状态下的半导体

第一节 半导体能带结构

半导体能带特点：**T=0K**时，最高能带满，以上空。

T≠0K，电子激发跃迁

结果：最高能带出现空位(空穴)

上面空带有电子

由价电子填充	价带	**Ev**
由激发电子填充	导带	**Ec**

一、 $E(K)$与 $\boldsymbol{K}$ 的关系

实际应用，只要考虑能带极值附近的关系

设导带底位于 $\boldsymbol{K}=0$

$$E(\boldsymbol{K})=E_c(0)+\frac{1}{2}\left[\left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_x{}^2}\right)_{\boldsymbol{K}=0}K_x{}^2+\left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_y{}^2}\right)_{\boldsymbol{K}=0}K_y{}^2+\left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_z{}^2}\right)_{\boldsymbol{K}=0}K_z^2\right]$$

$$=E_c(0)+\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{K_x{}^2}{m_x^*}+\frac{K_y{}^2}{m_y^*}+\frac{K_z{}^2}{m_z^*}\right)$$

$E_c(0)$ 导带底的能量

$$\frac{1}{m_x^*} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_x{}^2}\right)_{\boldsymbol{K}=0}$$

$$\frac{1}{m_y^*} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_y{}^2}\right)_{\boldsymbol{K}=0}$$

$$\frac{1}{m_z^*} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_z{}^2}\right)_{\boldsymbol{K}=0}$$

各向同性的晶体 $\boldsymbol{K}=0$

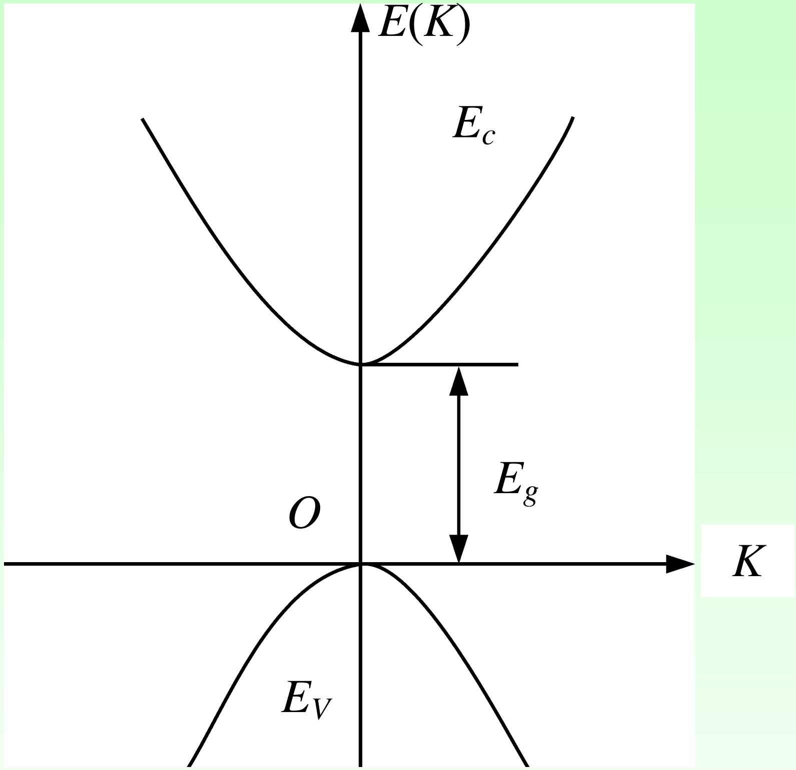
$$m_x^* = m_y^* = m_z^* = m_n^*$$

$$E(\boldsymbol{K}) = E_c(0) + \frac{\hbar^2}{2m_n^*}\left(K_x^2 + K_y^2 + K_z^2\right)$$

$$= E_c(0) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_n^*}$$

$$E(K) = E_c(0) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_n^*}$$

$$E(\boldsymbol{K}) = E_v(0) - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_p^*}$$



二、K空间等能面

等能面： $\vec{K}$空间能量相同的点构成的曲面

$$\frac{K_x^2}{\dfrac{2m_n^*\left[E(\boldsymbol{K})-E_c(0)\right]}{\hbar^2}}+\frac{K_y^2}{\dfrac{2m_n^*\left[E(\boldsymbol{K})-E_c(0)\right]}{\hbar^2}}+\frac{K_z^2}{\dfrac{2m_n^*\left[E(\boldsymbol{K})-E_c(0)\right]}{\hbar^2}}=1$$

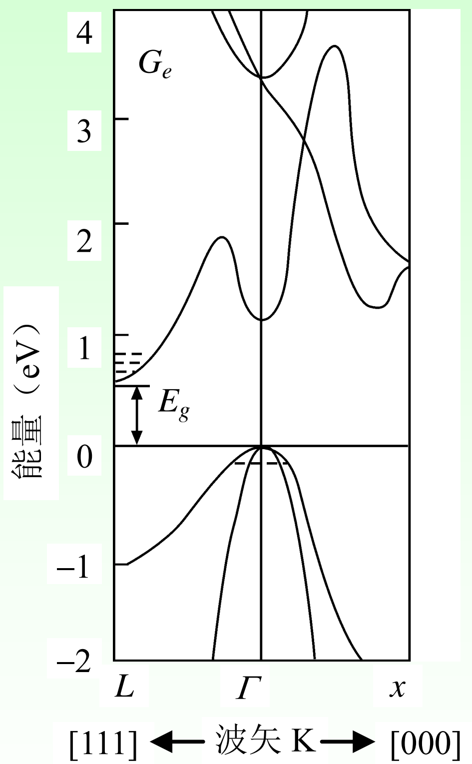
半径：$\sqrt{(2m_n^*/\hbar^2)\left[E(\boldsymbol{K})-E_c(0)\right]}$ 的球面。

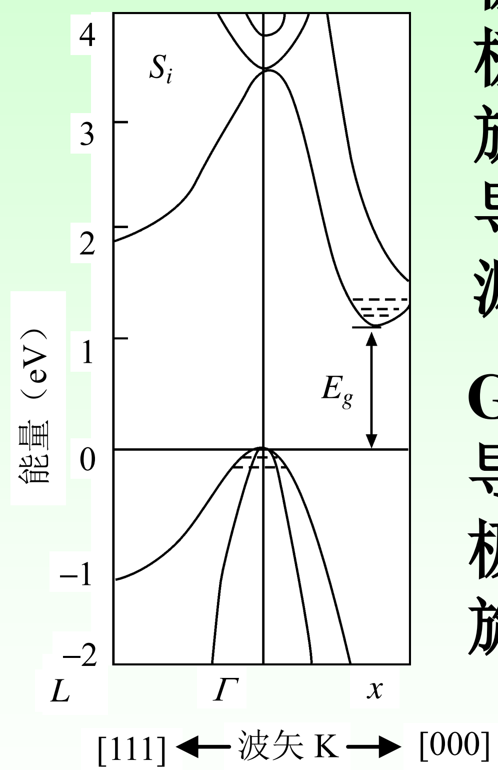
各向异性的晶体，能带极值 $\boldsymbol{K}=0$

$$E(\boldsymbol{K})=E_c(\boldsymbol{K}_0)+\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{(K_x-K_{0x})^2}{m_x^*}+\frac{\left(K_y-K_{0y}\right)^2}{m_y^*}+\frac{(K_z-K_{0z})^2}{m_z^*}\right]$$

三、常见半导体的能带结构

1、硅和锗的能带结构





导带

Si：

极小值在<100>六个等价方向上，极值附近等能面为沿<100>方向旋转的旋转椭球面，

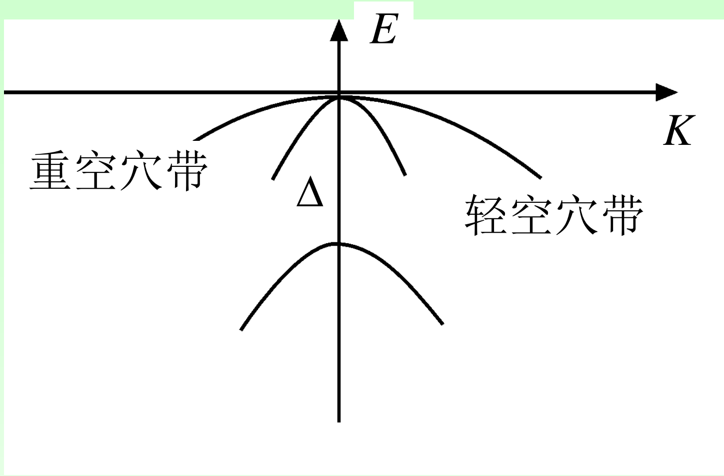
导带极值位于<100>方向的布里渊区中心到边界的0.85倍处。

Ge：

导带极小值在<111>布区边界，极值附近等能面为沿<111>方向旋转的8个旋转椭球面。

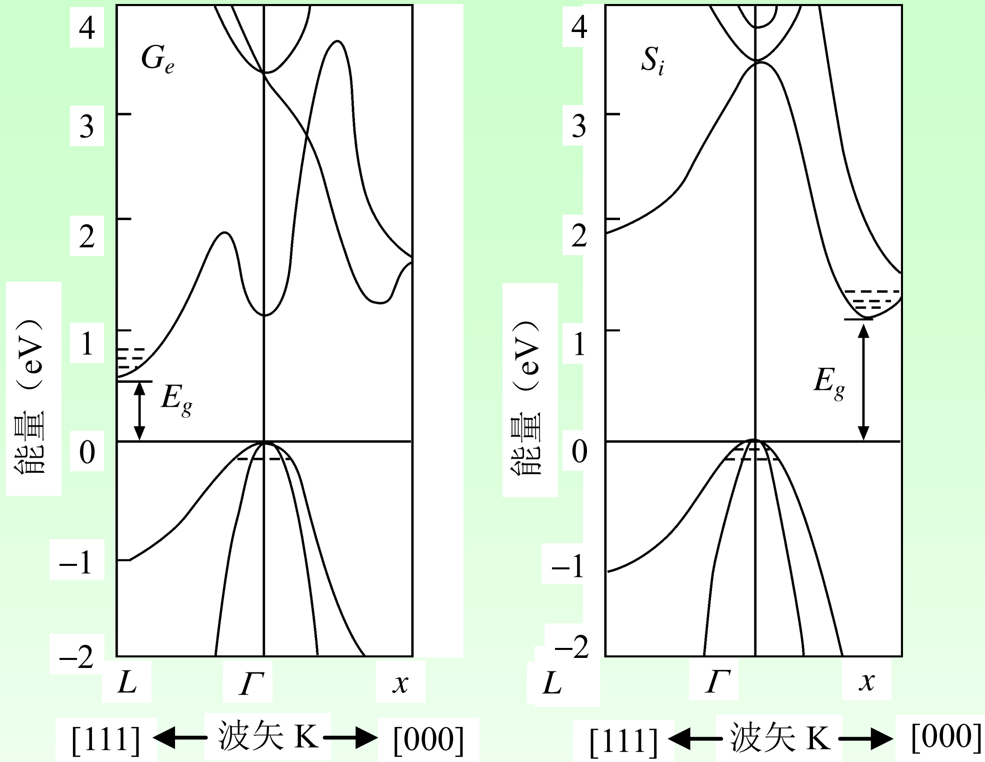
价带

价带顶位于$\boldsymbol{K}=0$，有三个带。
两个最高的在 $\boldsymbol{K}=0$ 处简并，
重空穴带（曲率小）、
轻带空穴（曲率大）。
另一带由自旋-轨道耦合分裂出



$$E(\boldsymbol{K})=E_v-\frac{h^2}{2m_0}\left\{AK^2\pm\left[B^2K^2+C^2\left(K_x^2K_y^2+K_y^2K_z^2+K_z^2K_x^2\right)\right]\right\}^{1/2}$$

特点：a.同一K，有两个能量，极大值在K=0处重合
b.有效质量两个，取负-重空穴，取正-轻空穴
等能面是扭曲面
c.第三个能带能量降低了Δ，等能面接近球面
d.导带底和价带顶K值不同
e.禁带宽度随温度变化



导带底和价带顶不在 $\boldsymbol{K}$ 空间的相同点，具有这种能带特点的半导体称为间接带隙半导体。

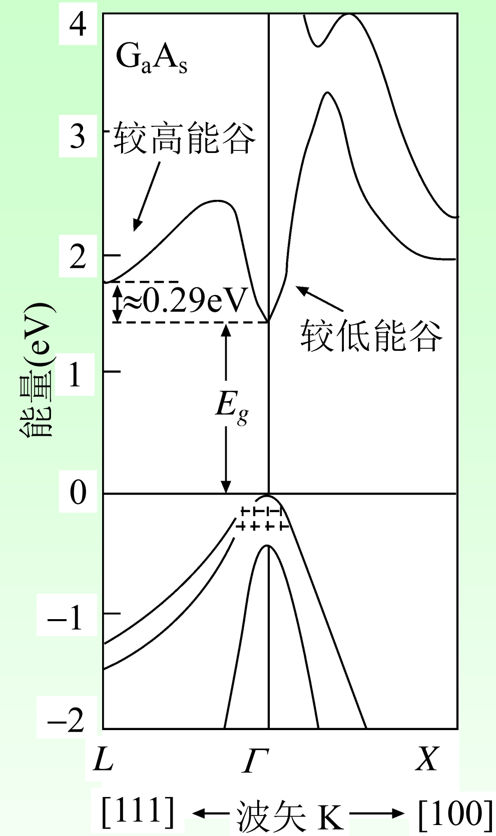
2、Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体的能带结构

1）砷化镓

导带：

极小值位于k=0处，等能面是球面

<111>方向的极小值比布区中心极小值约高 0.29ev



价带：

三能带组成

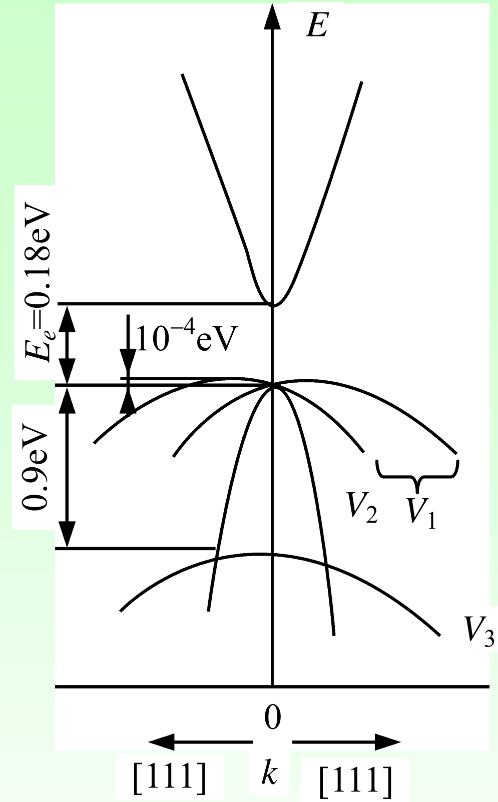
重空穴带极大值偏离K=0，但很少

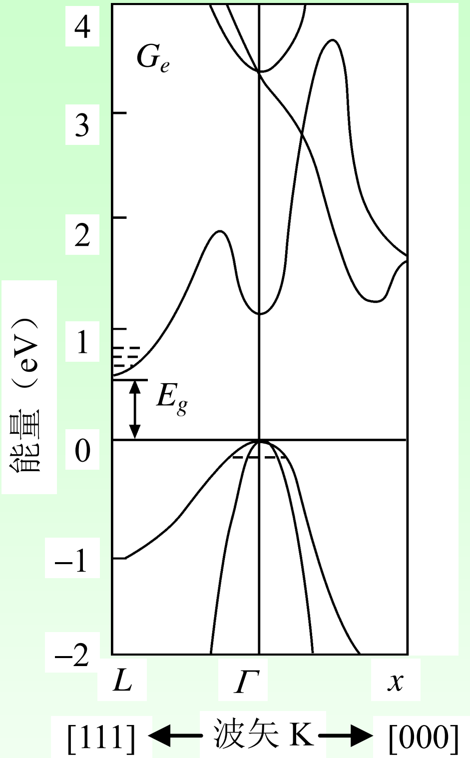
导带底和价带顶在 *K* 空间的相同点，具有这种能带特点的半导体称为直接带隙半导体。

2）锑化铟

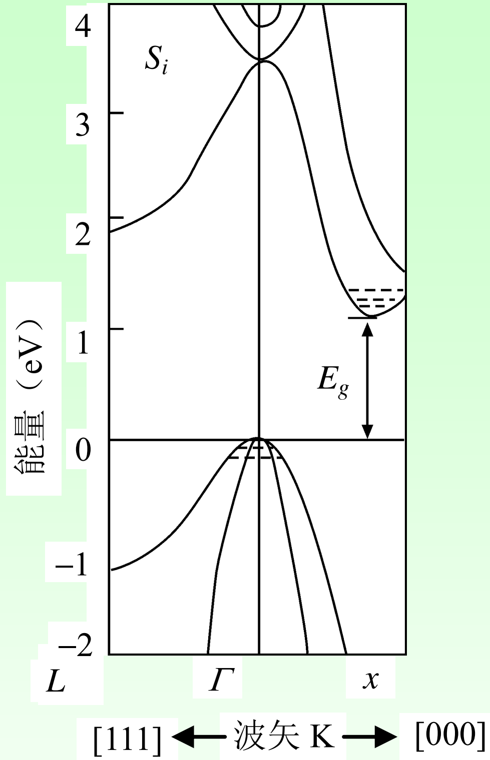
导带：
极小值位于k=0处，等能面是球面
底电子有效质量很小

价带：
三能带组成
重空穴带极大值偏离K=0，但很少
直接带隙半导体

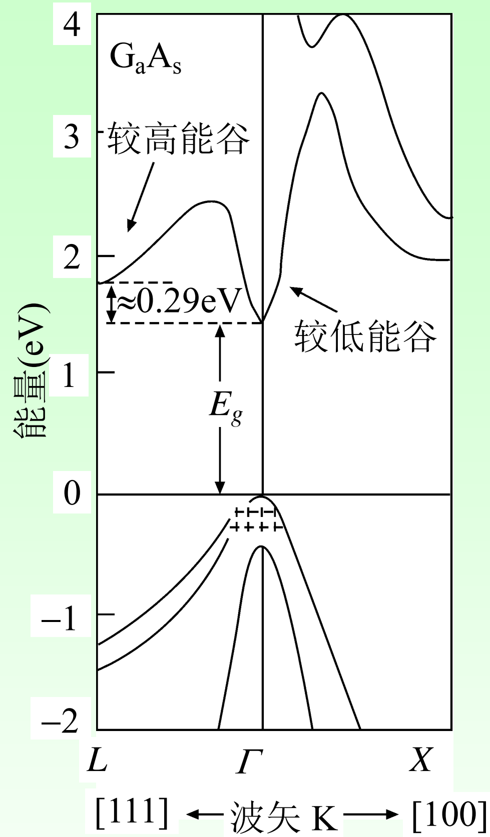




G_e
4
3
2
1
0
−1
−2
能量（eV）
E_g
L
Γ
x
[111] ← 波矢 K → [000]



S_i
4
3
2
1
0
−1
−2
能量（eV）
E_g
L
Γ
x
[111] ← 波矢 K → [000]



G_aA_s
4
3
2
1
0
−1
−2
能量(eV)
较高能谷
≈0.29eV
较低能谷
E_g
L
Γ
X
[111] ← 波矢 K → [100]

第二节 本征半导体和杂质半导体

一、本征半导体极其导电机构

1、实际半导体中的偏离
•原子在平衡位置附近振动
•存在其它化学原子
•存在缺陷
（周期势性被破坏）

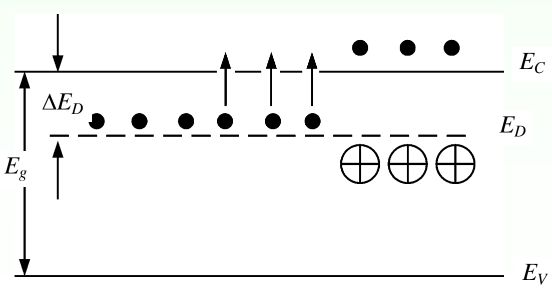
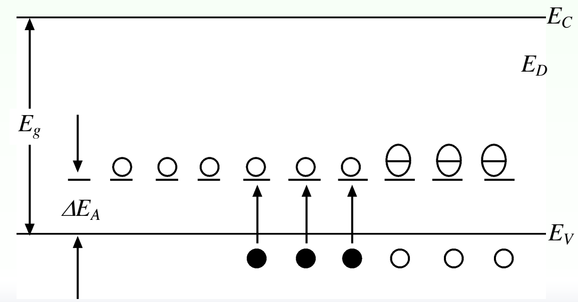
2、本征半导体特点
•无杂质原子
•无缺陷
（严格周期性）

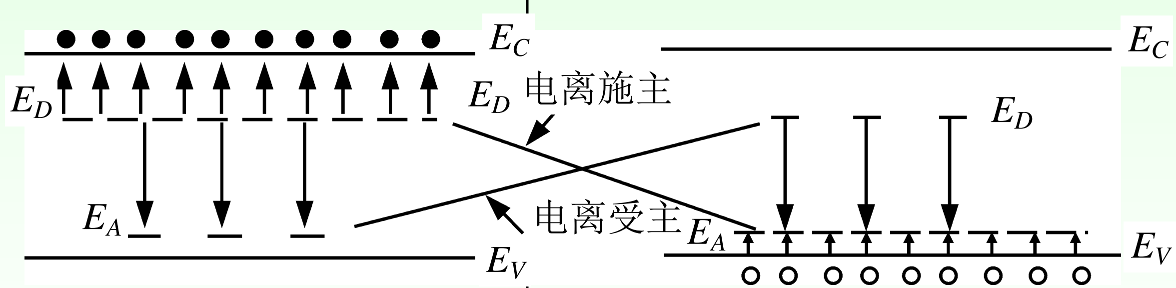
3、导电机构
•载流子：电子、空穴
•价带中电子热激发到导带，
电场下，空穴（价）
电子（导）导电

4、本征半导体条件

$$n = p = n_i$$

电中性条件

		施主	受主
杂质		V族（P）	Ⅲ族（B）
导电	载流子	电子	空穴
	机制	杂质电离-电子跃迁	杂质电离-空穴-跃迁
	杂质电离能	$\Delta E_D << E_g$	$\Delta E_A << E_g$
	浅能级电离能	$\Delta E_D = \frac{m_n^* q^4}{8\varepsilon_r^2 \varepsilon_0^2 h^2} = \frac{m_n^*}{m_0} \cdot \frac{E_0}{\varepsilon_r^2}$	$\Delta E_A = \frac{m_p^* q^4}{8\varepsilon_r^2 \varepsilon_0^2 h^2} = \frac{m_p^*}{m_0} \cdot \frac{E_0}{\varepsilon_r^2}$
能级	位置	比E_c低ΔE_D，接近E_c	比E_v高ΔE_A，接近E_v
	特点	独立能级，短线表示	独立能级，短线表示
	图式		

		施主	受主
半导体类型		电子型，n型	空穴型，P型
杂质补偿作用（施主与受主杂质之间相互抵消的作用）	条件	$N_D>>N_A$	$N_A >> N_D$
	有效浓度	N_D-N_A	N_A-N_D
	用途	改变某区域导电类型	
	图式		
	高度补偿	条件：$N_D≈N_A$	实质：杂质多，但不能提供电子或空穴

第三节 热平衡载流子的统计分析

		导带中的电子	价带中的空穴
计算公式		$n_0 = N/V$ $\quad N = \int_0^E f(E)D(E)dE$	$p_0 = N/V$
状态密度 $D(E)$		$(V/2\pi^2\hbar^3)(2m_n^*)^{3/2}(E-E_c)^{1/2}$	$(V/2\pi^2\hbar^3)(2m_p^*)^{3/2}(E_V-E)^{1/2}$
统计分布 $f(E)$	简并（费米）	$f(E)=1/[\exp(\frac{E-E_F}{K_BT})+1]$	$1-f(E)=1/[\exp(\frac{E_F-E}{K_BT})+1]$
	非简并（波-兹）	$f_B(E)=A\exp(-E/K_BT)$	$1-f_B(E)=B\exp(E/K_BT)$
	实例	**n型半导体掺杂少时，导带电子少**	**p型半导体掺杂少时，价带空穴少**
非简并半导体浓度	积分限	$\int_{E_c}^{E_c'} \Rightarrow \int_{E_c}^{\infty}$	$\int_{E_v}^{E_v'} \Rightarrow \int_{E_v}^{\infty}$
	浓度	$n_0 = N_c \exp\frac{-(E_c-E_F)}{K_BT}$	$p_0 = N_v \exp\frac{-(E_F-E_v)}{K_BT}$
浓度乘积		$n_0p_0 = N_cN_v\exp(-\frac{E_c-E_v}{K_BT}) = N_cN_v\exp(-\frac{E_g}{K_BT})$	

第三节 热平衡载流子的统计分析

价带中的空穴

计 公

状 密 D(

统 分 f(

有效状态密度N_c、N_v：导（价）带中的所有量子态都集中在导带底E_c（价带顶E_v ）处时，状态密度

$$N_c = 2\left(\frac{m_n^* K_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$N_v = 2\left(\frac{m_p^* K_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

只与T有关，与杂质无关

适用于非简并半导体

（本征、杂质）

非简并半导体浓度	浓度	$n_0 = N_c \exp\frac{-(E_c - E}{K}$	$p_0 = N_v \exp\frac{-(E_F - E_v)}{K_B T}$
浓度乘积		$n_0 p_0 = N_c N_v \exp(-\frac{E_c - E_v}{K_B T}) = N_c N_v \exp(-\frac{E_g}{K_B T})$	

五、本征半导体的载流子浓度

1、本征费米能级

$$n_0 = p_0$$

$$N_C \exp(-\frac{E_C - E_F}{K_B T}) = N_V \exp(-\frac{E_F - E_V}{K_B T})$$

$$E_F = E_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{K_B T}{2} \ln \frac{N_V}{N_C}$$

$$E_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3K_B T}{4} \ln \frac{m_p^*}{m_n^*}$$

硅、锗、砷化镓的第二项小得多，所以本征半导体的费米能级基本上在禁带中央处 。

2、本征载流子浓度

$$n_i = n_0 = p_0 = (N_C N_V)^{1/2} \exp(-\frac{E_g}{2K_B T})$$

材料

温度

掺杂且非简并时

$$n_0 p_0 = N_C N_V \exp(-\frac{E_g}{K_B T})$$

比较右端

$$n_0 p_0 = n_i^2$$

非简并半导体热平衡载流子浓度乘积

本征载流子浓度平方

与杂质无关

适用本征半导体材料、非简并的杂质半导体材料

将 N_C, N_V $\hbar$ 和 K_B 代入，且考虑Eg随温度变化：

$$n_i = n_0 = p_0 = (N_C N_V)^{1/2} \exp(-\frac{E_g}{2K_B T})$$

是 $1/T$ 的函数

$$\underline{\ln n_i} = 常数 - \frac{3}{2}\ln\frac{1}{T} - \frac{E_g(0)}{2K_B}\underline{\frac{1}{T}}$$

随T变化缓慢，可忽略

本征半导体：n_0，p_0随T迅速变化，器件性能不稳定。

杂质半导体：$T_{杂质电离} < T < T_{本征电离}$，载流子主要来源于杂质电离，若杂质全电离，n_0，p_0一定，器件就能稳定工作。

六、杂质半导体的载流子分布

施主能级不能同时被自旋相反的两个电子占据，
不能用费米分布函数来表示杂质能级被占据的几率

1、载流子占据杂质能级的几率

电子占据施主能级的几率

$$f_D(E)=\frac{1}{\frac{1}{2}\exp(\frac{E_D-E_F}{K_BT})+1}$$

电子未占据施主能级的几率

$$1-f_D(E)=\frac{1}{1+\frac{1}{2}\exp(\frac{E_F-E_D}{K_BT})}$$

空穴占据受主能级的几率

$$f_A(E)=\frac{1}{\frac{1}{2}\exp(\frac{E_F-E_A}{K_BT})+1}$$

空穴未占据受主能级的几率

$$1-f_A(E)=\frac{1}{1+\frac{1}{2}\exp(\frac{E_A-E_F}{K_BT})}$$

2、杂质能级上的杂质浓度

施主能级上电子浓度 n_D

$$n_D = N_D f_D(E) = \frac{N_D}{1+\frac{1}{2}\exp(\frac{E_D - E_F}{K_B T})}$$

受主能级上空穴 p_A

$$p_A = N_A f_A(E) = \frac{N_A}{1+\frac{1}{2}\exp(\frac{E_F - E_A}{K_B T})}$$

电离施主浓度 n_D^+

$$n_D^+ = N_D - n_D = N_D[1 - f_D(E)] = \frac{N_D}{1+2\exp(\frac{E_F - E_D}{K_B T})}$$

电离受主浓度 p_A^-

$$p_A^- = N_A - p_A = N_A[1 - f_A(E)] = \frac{N_A}{1+2\exp(\frac{E_A - E_F}{K_B T})}$$

3．杂质能级与杂质电离程度

杂质能级与费米能级相对位置能
反映电子和空穴占据杂质能级的情况

对施主 $E_D - E_F \gg K_B T$ 费米能级远在$\mathbf{E_D}$之下 全电离

$E_D - E_F \ll K_B T$ 费米能级远在$\mathbf{E_D}$之上 未电离

$E_D - E_F = K_B T$ 电离1/3，未电离2/3

对受主 $E_F - E_A \gg K_B T$ 费米能级远在$\mathbf{E_A}$之上 全电离

$E_F - E_A \ll K_B T$ 费米能级远在$\mathbf{E_A}$之下 未电离

$E_F - E_A = K_B T$ 电离1/3，未电离2/3

七、n型半导体的载流子浓度

电中性条件：　$n_0 = n_D^+ + p_0$

导带中电子浓度　施主电离浓度　价带中空穴浓度

$$N_c \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T}\right) = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_C}{K_B T}\right) + \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(-\frac{E_D - E_F}{K_B T}\right)}$$

电离过程：　低温时，杂质电离

T↑，杂质全电离，无本征激发

T↑，本征激发开始

T↑，本征激发强烈

1、低温弱电离区

1）E_F位置

电中性条件 $n_0 = n_D^+$

$$N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T}\right) = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(-\frac{E_D - E_F}{K_B T}\right)}$$

温度很低时 $n_D^+ << N_D$

$$N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T}\right) = \frac{1}{2} N_D \exp\left(\frac{E_D - E_F}{K_B T}\right)$$

$$E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \left(\frac{K_B T}{2}\right)\ell n\left(\frac{N_D}{2N_C}\right)$$

$T \to 0$

$$\lim_{T \to 0K} E_F = \frac{E_C + E_D}{2}$$

$$\lim_{T \to 0K} \left(T \ln T\right) = 0$$

低温极限、只有施主杂质n型半导体，E_F位于E_C~E_D中线处。

$$N_c = 2\left(\frac{m_n^* K_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

2）E_F位置的变化

$$\frac{\mathrm{d}E_F}{\mathrm{d}T} = \frac{K_B}{2}\ln\left(\frac{N_D}{2N_c}\right) + \frac{K_B T}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}T}(-\ln 2N_C) = \frac{K_B}{2}\left[\ln\left(\frac{N_D}{2N_c}\right) - \frac{3}{2}\right]$$

T	N_C	$\mathrm{d}E_F/\mathrm{d}T$	E_F
→0K	→ 0	$\to +\infty$	上升很快
↑	↑	↓	随*T*升高而增大，但速度变小
↑	$N_C = (N_D/2)\mathrm{e}^{-3/2} = 0.11N_D$	0	上升到极大值
↑		<0	下降
↑	$N_C = 0.5N_D$	<0	回到E_C~E_D中线
↑	$N_C > 0.5N_D$	<0	低于中线。$E_F=E_C$，1/3电离

杂质含量越高，E_F达到极大值的温度也越高

2、强电离区（全电离、饱和电离）

一方面杂质已基本上电离，另一方面本征激发不太明显，

电中性条件 $n_0 = N_D$

$$E_F = E_C + K_B T ln(\frac{N_D}{N_C})$$

一般掺杂浓度下 $N_C > N_D$

T一定， N_D 越大， E_F 越向导带方向靠近，

N_D 一定，T越高， E_F 越向本征费米能级靠近

3、高温过渡区

导带中的电子一部分来源于全部电离的杂质，另一部分则由本征激发提供。

$$n_0 = n_i \exp\left(-\frac{E_i - E_F}{K_B T}\right)$$

电中性条件 $n_0 = N_D + p_0$

$$p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{K_B T}\right)$$

$$N_D = n_0 - p_0 = n_i\left[\exp\left(-\frac{E_i - E_F}{K_B T}\right) - \exp\left(\frac{E_i - E_F}{K_B T}\right)\right] = 2n_i \mathrm{sh}\left(\frac{E_F - E_i}{K_B T}\right)$$

$$E_F = E_i + K_B T[\mathrm{sh}^{-1}\left(N_D/2n_i\right)]$$

$N_D/2n_i$ 很小时 $E_F - E_i$ 也很小，E_F 接近于 E_i

$N_D/2n_i$ 增大时 $E_F - E_i$ 增大， E_F 接近饱和区

载流子浓度：

$$n_0 = \frac{N_D}{2}\left[1+\sqrt{1+\frac{4n_i^2}{N_D^2}}\right]$$

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \left(\frac{2n_i^2}{N_D}\right)\left[1+\left(1+\frac{4n_i^2}{N_D^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right]^{-1}$$

近杂质饱和电离区

$$N_D \gg n_i$$

$$n_0 = N_D + \frac{n_i^2}{N_D}$$

$$p_0 = n_0 - N_D = \frac{n_i^2}{N_D}$$

n型半导体的电子浓度比空穴浓度大得多，
电子称为多数载流子，简称多子；
空穴称为少数载流子，简称少子

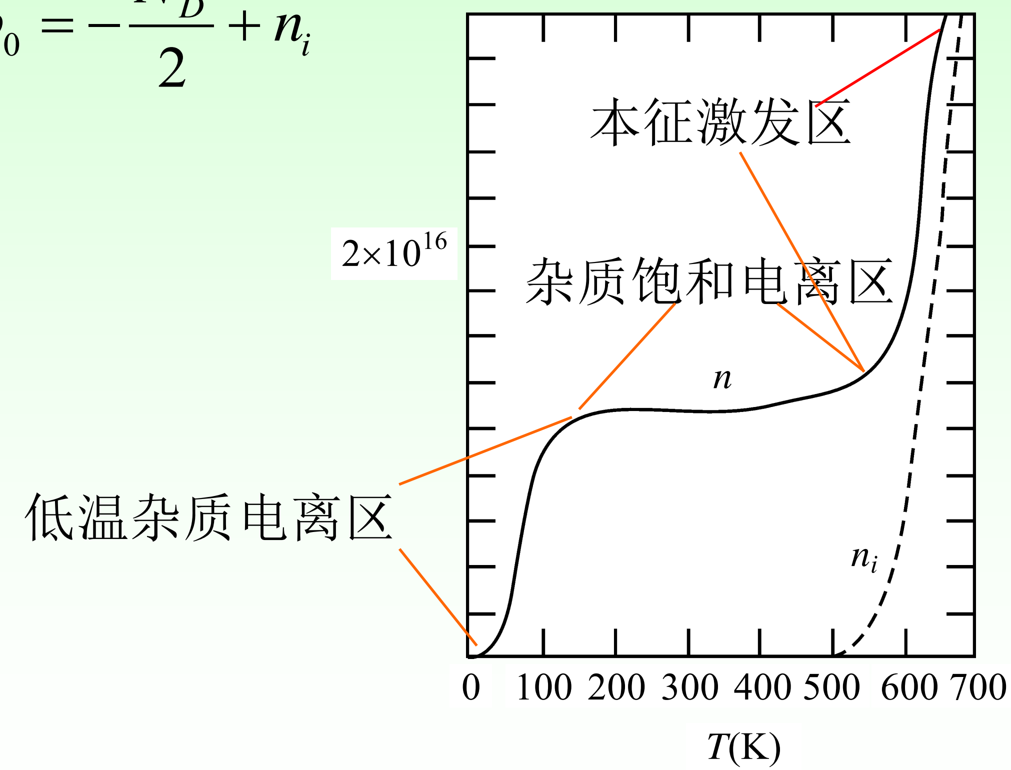
近本征激发区

$$N_D << n_i$$

$$n_0 = \frac{N_D}{2} + n_i$$

$$p_0 = -\frac{N_D}{2} + n_i$$

更接近本征激发区
杂质浓度超高，达到
本征激发起主要作用
的温度也越高



4、高温本征区

$$N_D << n_i$$

$$n_0 \gg N_D \qquad\qquad p_0 \gg N_D$$

$$n_0 = p_0$$

E_F在禁带中心

杂质浓度越高，达到本征激发起主要作用的温度也越高

p型半导体的载流子浓度讨论类似，公式见书

第四节 简并半导体

掺杂浓度低	掺杂浓度很高
$N_D < N_C \quad N_A < N_V$	$N_D \geqslant N_C \qquad N_A \geqslant N_V$
轻掺杂	重掺杂
费米能级处于禁带中	费米能级与导带底或价带顶重合，甚至进入导带或价带
用玻耳兹曼函数分析载流子分布	用费米函数分析载流子分布 载流子的简并化
非简并半导体	**简并半导体**

一、简并半导体的载流子浓度

$$n_0 = \frac{\left(2m_n^*\right)^{3/2}}{2\pi^2\hbar^3}\int_{E_C}^{\infty}\frac{\left(E-E_C\right)^{1/2}}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{K_BT}\right)}\mathrm{d}E$$

费米积分

$$F_{1/2}\left(\xi\right) = F_{1/2}\left(\frac{E_F - E_C}{K_BT}\right)$$

$$n_0 = N_C\frac{2}{\sqrt{\pi}}F_{1/2}\left(\frac{E_F - E_C}{K_BT}\right)$$

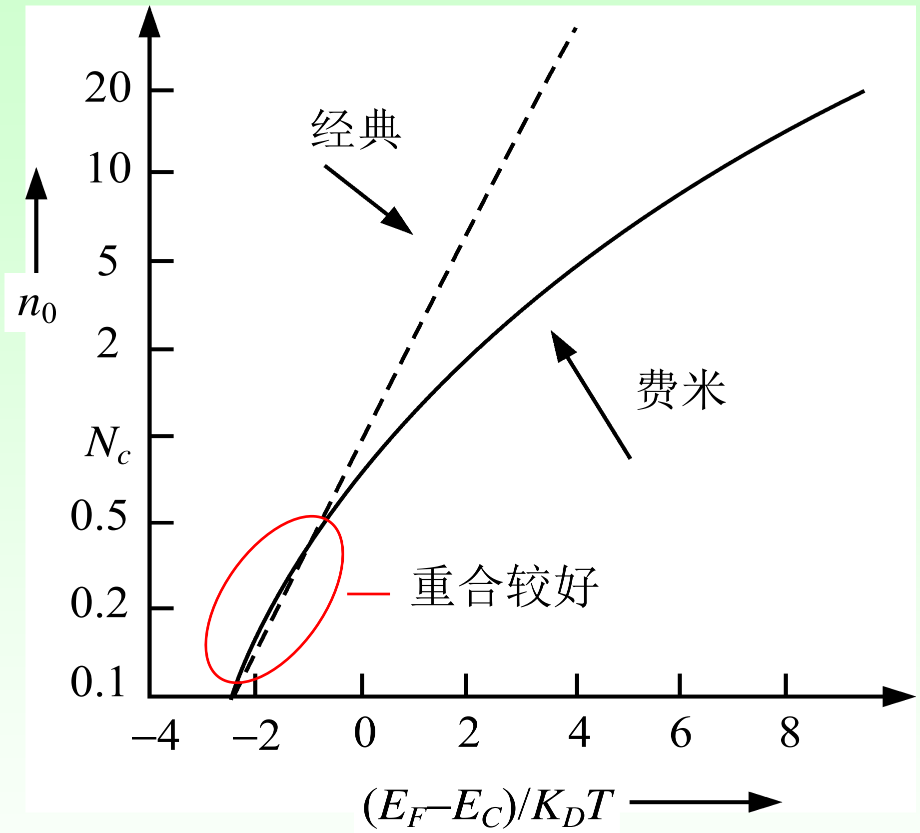
$$p_0 = N_V\frac{2}{\sqrt{\pi}}F_{1/2}\left(\frac{E_V - E_F}{K_BT}\right)$$

二、简并化条件

$E_C - E_F > 2K_BT$ 非简并

$0 < E_C - E_F \leqslant 2K_BT$ 弱简并

$E_C - E_F \leqslant 0$ 简并



三、简并时的杂质浓度

n型半导体，杂质激发的温度范围

电中性条件 $n_0 = n_D^+$ $$N_C \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}\left(\frac{E_F - E_C}{K_B T}\right) = \frac{N_D}{1 + 2\exp\left(\frac{E_F - E_D}{K_B T}\right)}$$

$$N_D = \frac{2N_C}{\sqrt{\pi}}\left[1 + 2\exp\left(\frac{\Delta E_D}{K_B T}\right)\right] F_{1/2}(0) \qquad F_{1/2}(0) = 0.6$$

$$N_D = 0.68 N_C \left[1 + 2\exp\left(\frac{\Delta E_D}{K_B T}\right)\right]$$ 最小值为3

结论：发生简并时

N_D 接近或大于 N_C

杂质电离能越小，则杂质浓度较小时就会发生简并。

四、杂质带导电

	杂质浓度	杂质原子间距	被杂质原子束缚电子共有化运动	杂质能级
非简并	低	远	无	禁带中独立
简并	高	近	有	能带（杂质能带）