

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。

$T \neq 0K$ ，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 E_v

由激发电子填充

导带 E_c

一、 $E(K)$ 与 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 $K = 0$

$$\begin{aligned} E(K) &= E_c(0) + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_x^2} \right)_{K=0} K_x^2 + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_y^2} \right)_{K=0} K_y^2 + \left(\frac{\partial^2 E}{\partial K_z^2} \right)_{K=0} K_z^2 \right] \\ &= E_c(0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{K_x^2}{m_x^*} + \frac{K_y^2}{m_y^*} + \frac{K_z^2}{m_z^*} \right) \end{aligned}$$

$E_c(0)$ 导带底的能量

各向同性的晶体 $K=0$

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

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

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

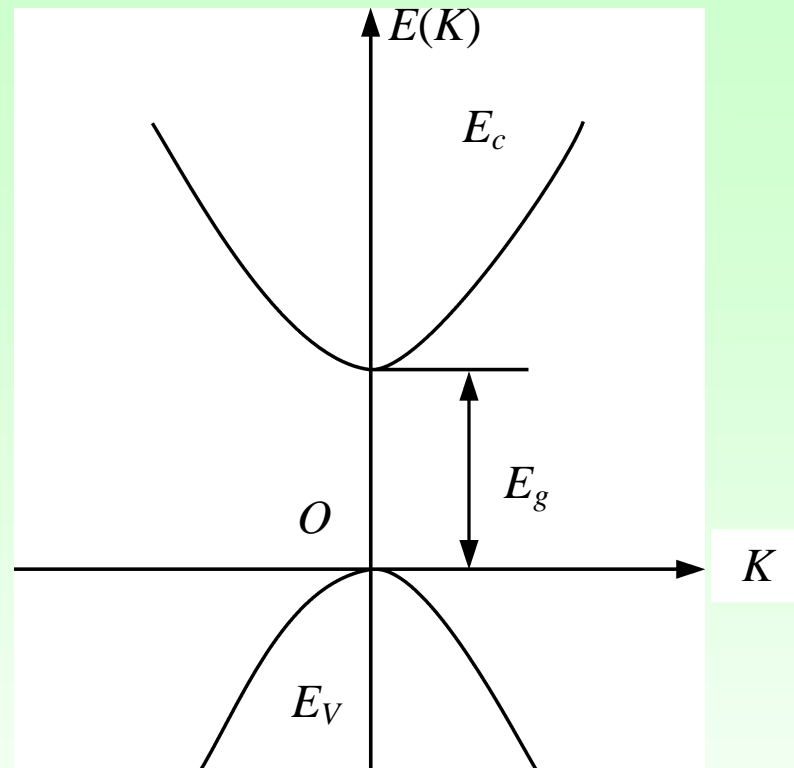
$$E(\mathbf{K}) = E_c(0) + \frac{\hbar^2}{2m_n^*} (K_x^2 + K_y^2 + K_z^2)$$

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

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

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

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



二、K空间等能面

等能面： \bar{K} 空间能量相同的点构成的曲面

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

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

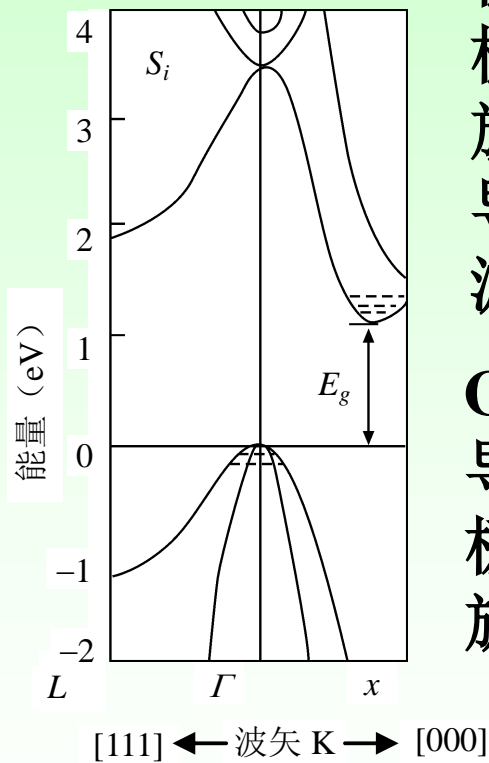
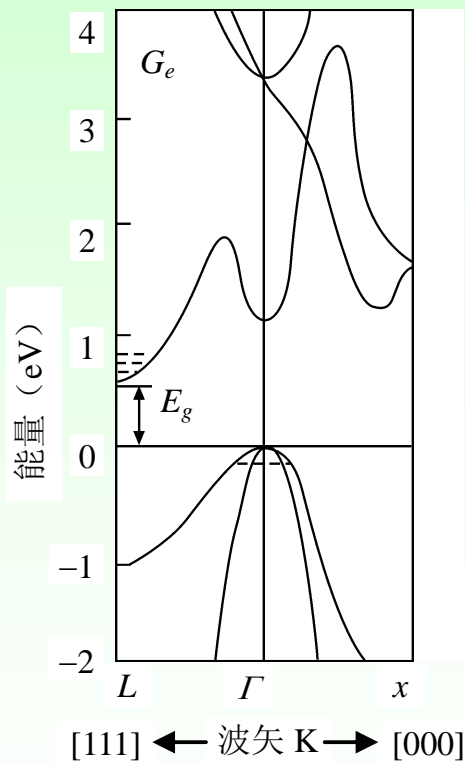
各向异性的晶体，能带极值 $K=0$

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

三、常见半导体的能带结构

导带

1、硅和锗的能带结构



Si:

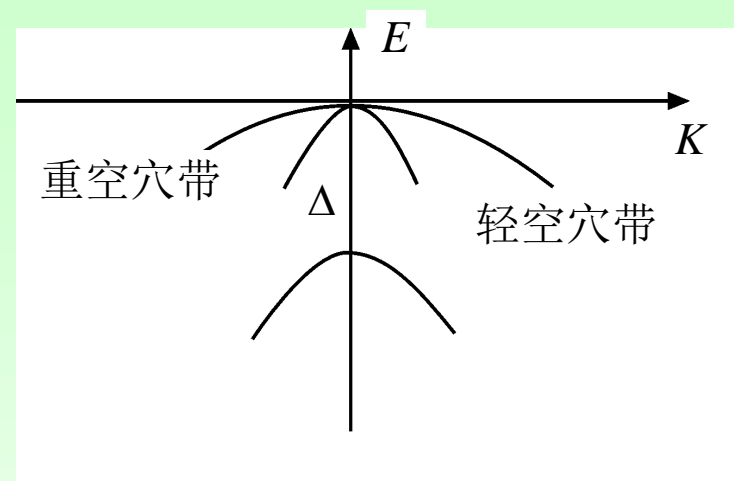
极小值在 $\langle 100 \rangle$ 六个等价方向上，极值附近等能面为沿 $\langle 100 \rangle$ 方向旋转的旋转椭球面，导带极值位于 $\langle 100 \rangle$ 方向的布里渊区中心到边界的0.85倍处。

Ge:

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

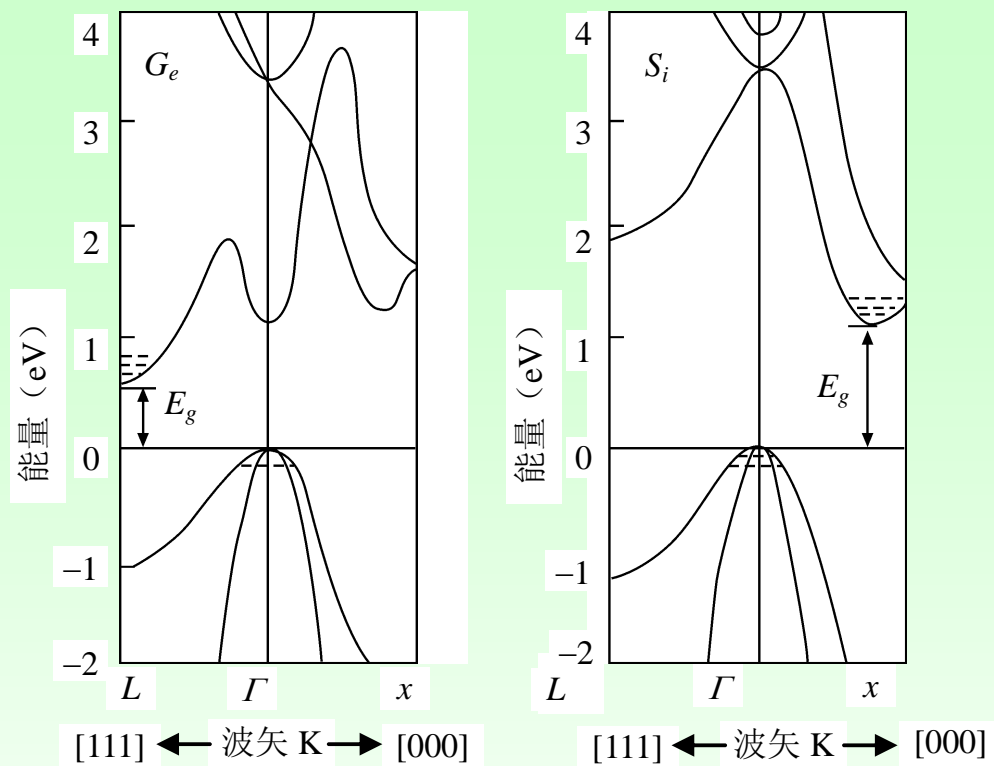
价带

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



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

- 特点：
- a. 同一 \mathbf{K} ，有两个能量，极大值在 $\mathbf{K}=0$ 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 \mathbf{K} 值不同
 - e. 禁带宽度随温度变化



导带底和价带顶不在 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:

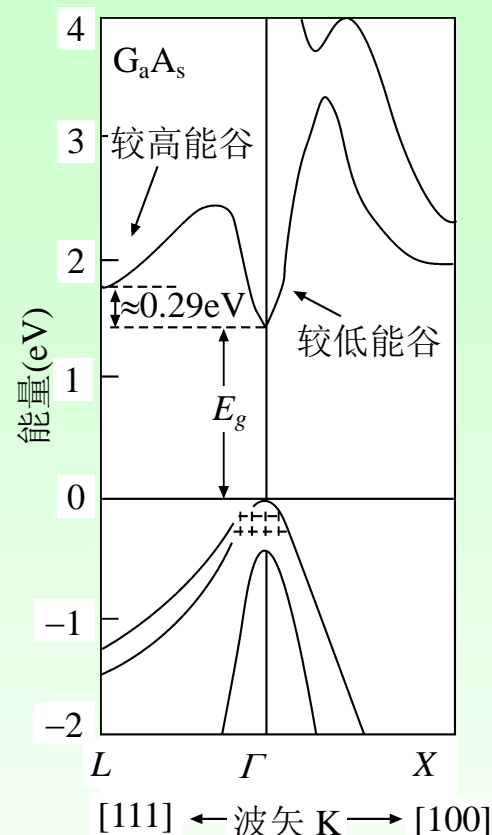
极小值位于 $k=0$ 处, 等能面是球面
<111>方向的极小值比布区中心极小值约高 0.29eV

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) 铈化铟

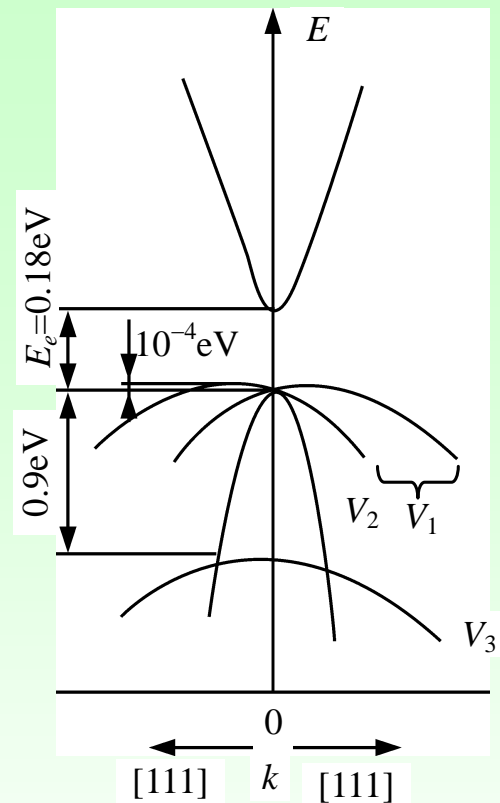
导带:

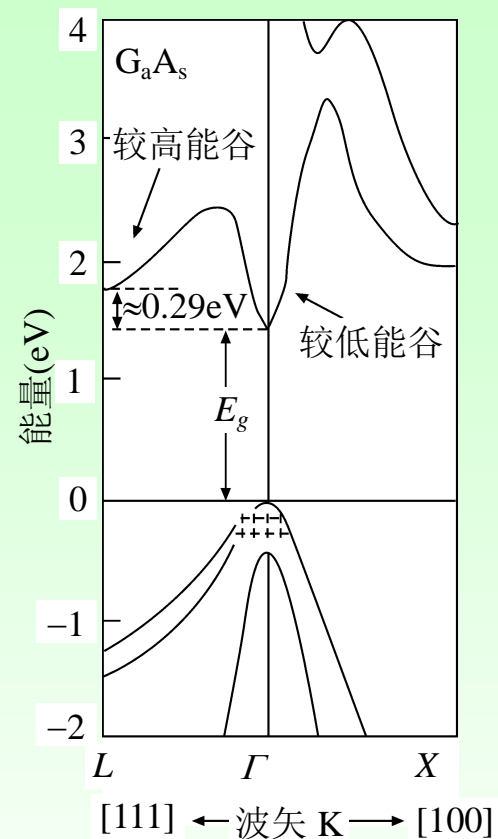
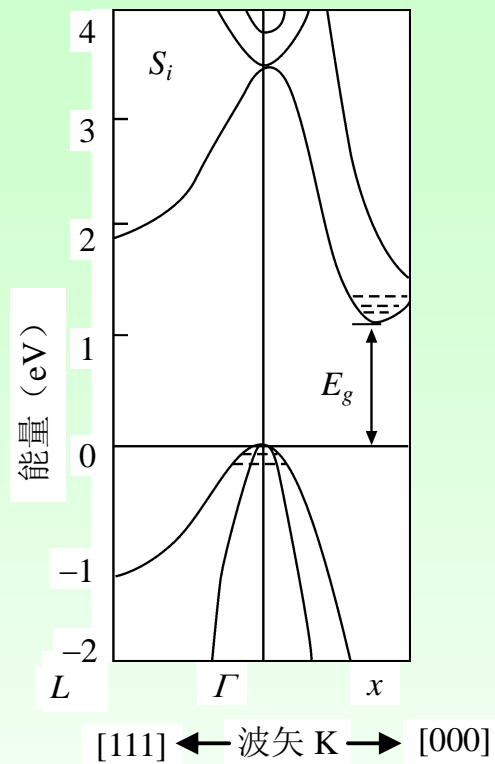
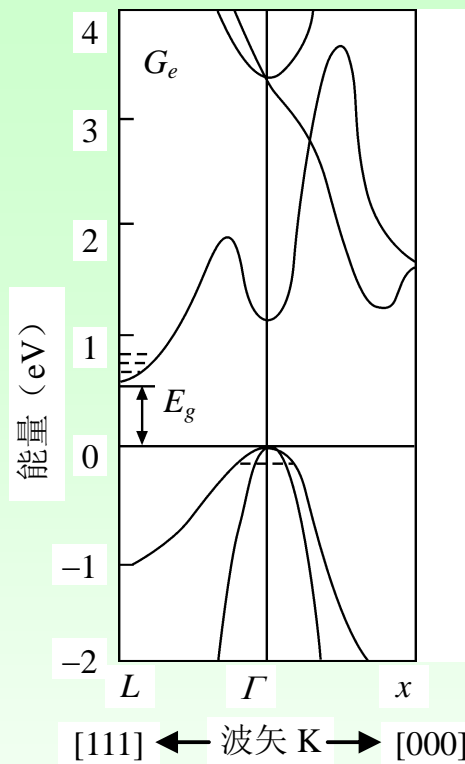
极小值位于 $\mathbf{k}=0$ 处, 等能面是球面
底电子有效质量很小

价带:

三能带组成

重空穴带极大值偏离 $\mathbf{K}=0$, 但很少
直接带隙半导体





第二节 本征半导体和杂质半导体

一、本征半导体及其导电机构

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)

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

2、本征半导体特点

- 无杂质原子
- 无缺陷
(严格周期性)

4、本征半导体条件

$$n = p = n_i$$

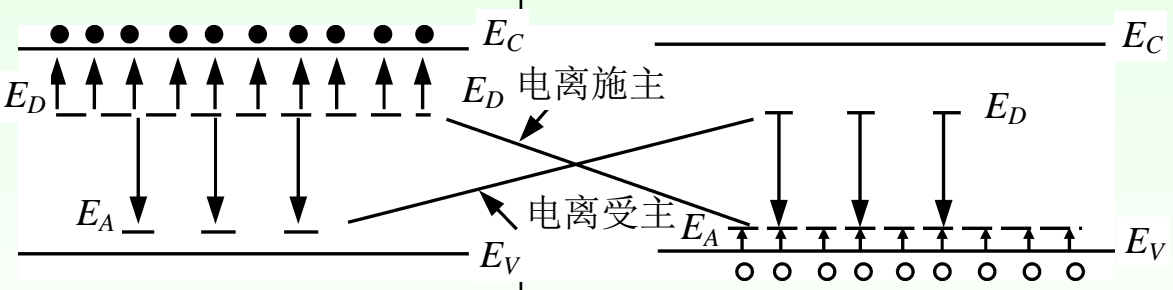
电中性条件

二、杂质半导体及其导电机构

实际半导体中有杂质，还存在缺陷
由于杂质、缺陷存在，使严格周期受到破坏，
在禁带中引入能带状态。

按杂质作用不同分为施主杂质和受主杂质

		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	$\Delta E_D \ll E_g$	$\Delta E_A \ll E_g$
	浅能级电离能	$\Delta E_D = \frac{m_n^* q^4}{8 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2 h^2} = \frac{m_n^*}{m_0} \cdot \frac{E_0}{\epsilon_r^2}$	$\Delta E_A = \frac{m_p^* q^4}{8 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2 h^2} = \frac{m_p^*}{m_0} \cdot \frac{E_0}{\epsilon_r^2}$
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	$N_D \gg N_A$	$N_A \gg N_D$
	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: $N_D \approx N_A$	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

	导带中的电子		价带中的空穴	
计算公式	$n_0 = N/V$ $N = \int_0^E f(E)D(E)dE$		$p_0 = N/V$	
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		$n_0 p_0 = N_c N_v \exp(-\frac{E_c-E_v}{K_BT}) = N_c N_v \exp(-\frac{E_g}{K_BT})$		

第一章 非平衡载流子的统计分析

价带中的空穴

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）

浓度

$$n_0 = N_c \exp \frac{-(E_c - E_F)}{K_B T}$$

$$p_0 = N_v \exp \frac{-(E_F - E_v)}{K_B T}$$

浓度乘积

$$n_0 p_0 = N_c N_v \exp \left(-\frac{E_c - E_v}{K_B T} \right) = N_c N_v \exp \left(-\frac{E_g}{K_B T} \right)$$

五、本征半导体的载流子浓度

1、本征费米能级

$$n_0 = p_0$$

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

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

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

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

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

材料
温度

掺杂且
非简并时

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

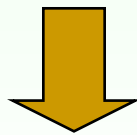
比较
右端

$$n_0 p_0 = n_i^2$$

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 E_g 随温度变化：

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

是 $1/T$
的函数

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

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： $T_{\text{杂质电离}} < T < T_{\text{本征电离}}$ ，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

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

电子未占据施主能级的几率

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

空穴占据受主能级的几率

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

空穴未占据受主能级的几率

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

2、杂质能级上的杂质浓度

施主能级上电子浓度 n_D

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

受主能级上空穴 p_A

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

电离施主浓度 n_D^+

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

电离受主浓度 p_A^-

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

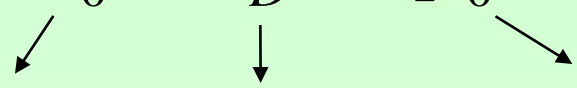
3. 杂质能级与杂质电离程度

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	$E_D - E_F \ll K_B T$	费米能级远在 E_D 之下	全电离
	$E_D - E_F \gg K_B T$	费米能级远在 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	$E_F - E_A \ll K_B T$	费米能级远在 E_A 之上	全电离
	$E_F - E_A \gg K_B T$	费米能级远在 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

$T \uparrow$ ，杂质全电离，无本征激发

$T \uparrow$ ，本征激发开始

$T \uparrow$ ，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 $n_D^+ \ll N_D$

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

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

$T \rightarrow 0$

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

$$\lim_{T \rightarrow 0K} (T \ln T) = 0$$

低温极限、只有施主杂质n型半导体，
 E_F 位于 $E_C \sim E_D$ 中线处。

2) E_F 位置的变化

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

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

T	N_c	dE_F/dT	E_F
→0K	→ 0	→ +∞	上升很快
↑	↑	↓	随 T 升高而增大，但速度变小
↑	$N_c = (N_D/2)e^{-3/2}$ $= 0.11N_D$	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，

$$\text{电中性条件} \quad n_0 = N_D$$

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

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 $n_0 = N_D + p_0$

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

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

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

$N_D / 2n_i$ 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

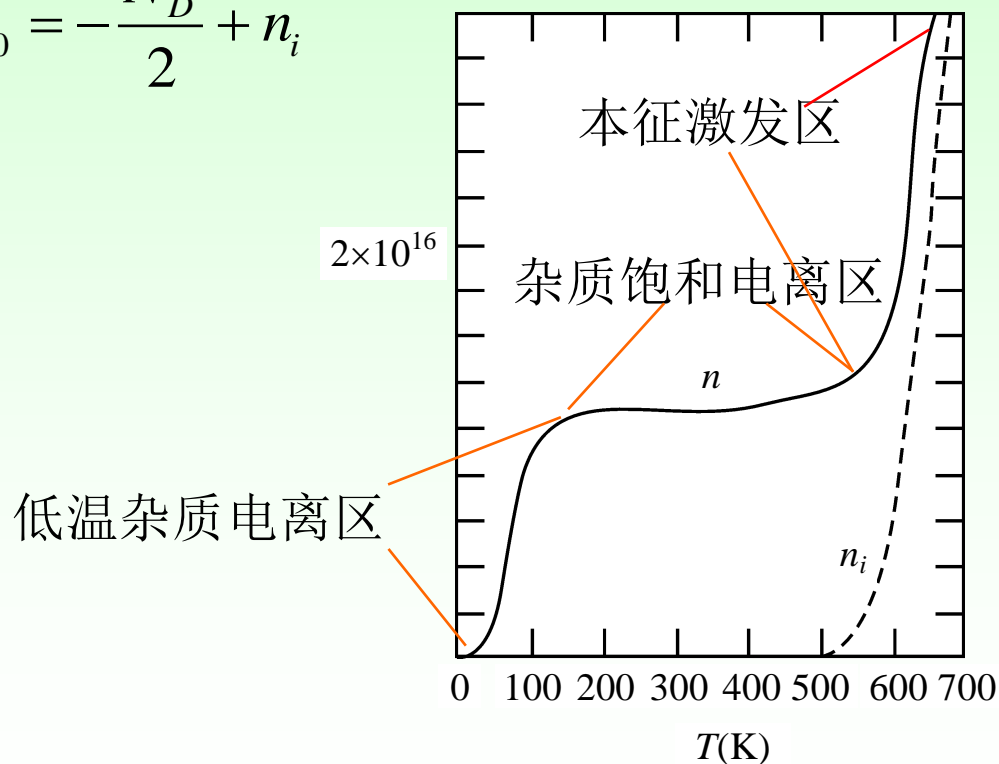
近本征激发区

$$N_D \ll n_i$$

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

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

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

$$N_D \ll n_i$$

$$n_0 \approx N_D$$

$$p_0 \approx N_D$$

$$n_0 = p_0$$

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

$$N_D < N_C \quad N_A < N_V$$

轻掺杂

费米能级处于禁带中

用玻耳兹曼函数
分析载流子分布

非简并半导体

掺杂浓度很高

$$N_D \geq N_C \quad N_A \geq N_V$$

重掺杂

费米能级与导带底或价带顶重合，
甚至进入导带或价带

用费米函数分析载流子分布
载流子的简并化

简并半导体

一、简并半导体的载流子浓度

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

费米积分

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

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

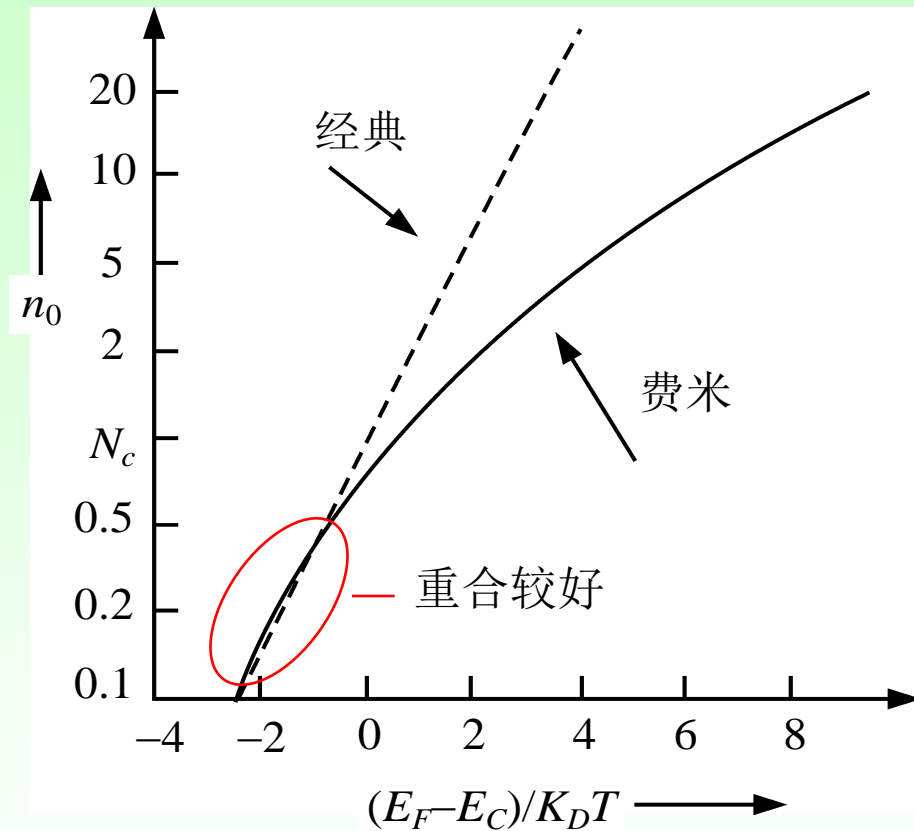
$$p_0 = N_V \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2}\left(\frac{E_V - E_F}{K_B T}\right)$$

二、简并化条件

$E_C - E_F > 2K_B T$ 非简并

$0 < E_C - E_F \leq 2K_B T$ 弱简并

$E_C - E_F \leq 0$ 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

$$n_0 = n_D^+$$

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

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

$$F_{1/2}(0) = 0.6$$

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

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)

