第一章 掺杂

1.1 基础知识

施主原子 (Donor)： 常见 V 族元素，掺杂后产生 n 型半导体

受主原子 (Acceptor) : 常见 III 族元素，掺杂后产生 p 型半导体

掺杂会使得禁带附近出现能级，使得禁带宽度变窄。

图 1.1: 掺杂引起的能级变化

1.2 施主能级与受主能级的统计分布

在施主能级上为空的概率，也就是施主的电子变成载流子的概率，

$$\frac{N_D^+}{N_D} = 1 - f(E_D) = \frac{1}{1 + g_D e^{(E_F - E_D)/k_BT}}$$

在受主能级上占据的概率，也就是受主的空穴变成载流子的概率

$$\frac{N_A^-}{N_A} = f(E_A) = \frac{1}{1 + g_A e^{(E_A - E_F)/k_BT}}$$

其中 g_D, g_A 是能级的简并度，通常分别取 $2, 4$。可以将其转换为 e^{ϵ/k_BT} 的形式，使得整体保持与之前费米狄拉克分布形式的一致，修正后的能级称为等效能级。

$$E'_D = E_D - \epsilon$$

$$E'_A = E_A + \epsilon$$

其中 N_D 是总的掺杂施主浓度，N_D^+ 是电离的施主浓度。N_A 是总的掺杂受主浓度，N_A^- 是电离的受主浓度。

电荷密度为

$$\rho = q(p - n + N_D^+ - N_A^-)$$

电中性条件

$$\int_V \rho \mathrm{d}V = 0$$

$$\begin{aligned} N_V e^{-(E_F - E_V)/k_BT} &- N_A e^{-(E_C - E_F)/k_BT} \\ &+ \frac{N_D}{1 + 2e^{(E_F - E_D)/k_BT}} - \frac{N_A}{1 + 4e^{E_A - E_F}/k_BT} = 0 \end{aligned} \tag{1.1}$$

从掺杂的角度认识本征载流子浓度即为：电离的掺杂离子浓度均为 0，此时 $n=p=n_i$。

1.3 载流子浓度与温度的关系

本节以及之后几节都以施主掺杂为例，受主掺杂类似。

在温度接近 $0K$ 时，几乎不会出现带 - 带之间的跃迁，大部分载流子由电离提供。在室温情况下，掺杂离子几乎完全电离，但是跃迁仍然较少，载流子浓度呈现为稳定的状态。再升高温度，材料本身的载流子被激发出来，最终超过掺杂原子电离出的载流子成为主要贡献者。

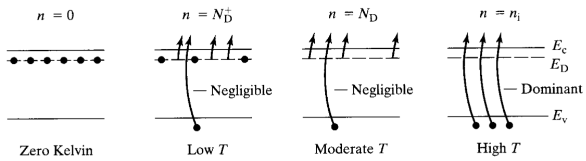

图 1.2: 温度与跃迁

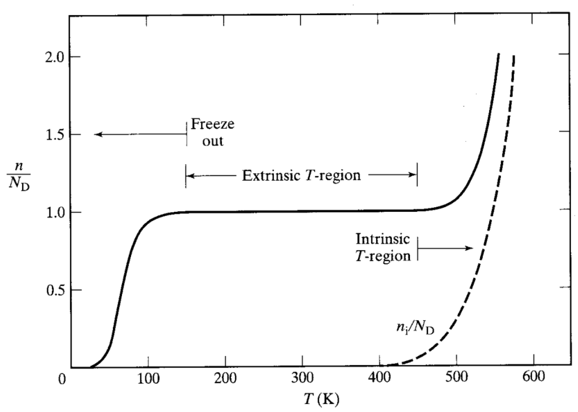

图 1.3: 载流子浓度与温度关系

1.4 平衡态的载流子浓度

1.1 中，$N_A^- = 0$，即

$$p - n + N_D^+ = 0$$

对于 N_D^+

$$n = N_C e^{-\beta(E_C - E_F)}$$

那么

$$e^{\beta E_F} = \frac{n}{N_C} e^{\beta E_C}$$

$$N_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2e^{(E_F - E_D)/k_B T}} = \frac{N_D}{1 + 2\left[\dfrac{n}{N_C} e^{\beta(E_C - E_D}\right]} \equiv \frac{N_D}{1 + \dfrac{n}{N_\xi}}$$

其中 N_ξ 是对特定温度可以计算的常数

$$N_\xi \equiv (N_C/g_D) e^{-(E_c - E_D)/k_B T}$$

同时 $np = n)i^2$ 式 1.1 化简为

$$\frac{n_i^2}{n} - n + \frac{N_D}{\dfrac{n}{N_\xi} + 1} = 0$$

按照上一节讨论的温度分类进行讨论

1. 低温：$N_D \gg n_i$

$$-n + \frac{N_D}{\dfrac{n}{N_\xi} + 1} = 0$$

$$n = \frac{N_\xi}{2} \left[\left(1 + \frac{4N_D}{N_\xi} \right)^{1/2} - 1 \right]$$

2. 室温：上式仍成立但是此时 $N_\xi \gg N_D$ ，泰勒展开近似得到

$$n = N_D$$

3. 高温：此时完全电离 $N_D^+ = N_D$ 而且 n_i 已经无法忽视，N_ξ 相当大。

$$\frac{n_i^2}{n} - n + N_D = 0$$

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

满足

$$n \approx \begin{cases} N_D, N_D \gg n_i \\ n_i, n_i \gg N_D \end{cases}$$

1.5 费米能级的确定

在本征状态下，即无掺杂时，$E_F = E_i$ 满足

$$n = p$$

$$N_C e^{-\beta(E_c - E_F)} = N_V e^{+\beta(E_v - E_F)}$$

解得

$$E_F = E_i = \frac{E_G}{2} + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{N_V}{N_C}$$

这里 $E_G = \dfrac{E_c + E_v}{2}$
在室温掺杂下 $n = N_D$ ，那么有

$$n = N_C e^{-\beta(E_c - E_F)} \Rightarrow E_F = E_C + \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{n}{N_C} \right)$$

在非本征状态下，由上一章的公式

$$E_F - E_i = kT \ln \left(N_D / n_i \right)$$

$$E_i - E_F = kT \ln \left(N_A / n_i \right)$$