

半導体のまほう

SEMICONDUCTORS NO MAHOU

riku☆0w0

mygo@soyor.in

ITP (インタネットやめた・トラックで死ぬ・ピーマン嫌い)



迷子でもいい、迷子でも進め。

二〇二三・霜月〇三

Contents

1 半导体中的电子	4
1.1 半导体的晶格结构与结合性质	4
1.1.1 金刚石型结构和共价键	4
1.1.2 闪锌矿型结构和混合键	5
1.1.3 纤锌矿型结构	5
1.2 半导体中的电子状态和能带	5
1.2.1 半导体中的电子状态和能带	5
1.2.2 导体, 半导体, 绝缘体	8
1.3 半导体中电子的运动, 有效质量	8
1.3.1 半导体中的 $E(k)$ 与 k 的关系	8
1.3.2 半导体中电子的平均速度	9
1.3.3 半导体中电子的加速度	10
1.4 本征半导体中的空穴	10
2 回旋共振与导带和价带结构	11
2.1 回旋共振	11
2.1.1 k 空间等能面	11
2.1.2 回旋共振	12
2.2 硅和锗的能带结构	14
2.2.1 硅和锗的导带结构	14
3 半导体中的杂质和缺陷能级	17
3.1 Si、Ge 晶体中的杂质能级	17
3.1.1 替位式杂质和间隙式杂质	17
3.1.2 施主杂质、施主能级	17
3.1.3 受主杂质、受主能级	18
3.1.4 浅能级杂质电离能的简单计算	19
3.1.5 杂质的补偿作用	20
3.2 缺陷、位错能级	20
3.2.1 点缺陷	20
3.2.2 位错	20

4 半导体中载流子的统计分布	21
4.1 状态密度	21
4.1.1 状态密度	21
4.1.2 状态密度有效质量	22
4.2 费米能级和载流子统计分布	22
4.2.1 费米分布函数	22
4.2.2 玻尔兹曼分布函数	23
4.2.3 导带中电子浓度和价带中空穴浓度	23
4.2.4 载流子浓度乘积 $n_0 p_0$	25
4.3 本征半导体的载流子浓度	25
4.4 杂质半导体的载流子浓度	26
4.4.1 杂质能级上的电子和空穴	26
4.4.2 n 型半导体的载流子浓度	27
4.5 一般情况下的载流子分布	32
4.6 简并半导体	32
4.6.1 简并半导体的载流子浓度	32
4.6.2 简并化条件	33
5 半导体的导电性	35
5.1 载流子的漂移运动和迁移率	35
5.1.1 欧姆定律	35
5.1.2 漂移速度和迁移率	36
5.1.3 半导体电导率和迁移率	37
5.2 载流子的散射	37
5.3 迁移率与杂质浓度和温度的关系	37
5.3.1 平均自由时间与散射概率的关系	37
5.3.2 电导率、迁移率和平均自由时间的关系	38
5.3.3 电导有效质量	39
5.3.4 电阻率	39
6 非平衡载流子	40
6.1 非平衡载流子的注入和复合	40
6.2 非平衡载流子的寿命	41
6.3 准费米能级	41
6.4 复合理论	43
6.4.1 载流子复合的分类	43
6.4.2 直接复合	43
6.4.3 间接复合	44
6.4.4 表面复合	49
6.5 陷阱效应	49
6.6 载流子的扩散运动	50
6.7 载流子的漂移扩散 爱因斯坦关系式	53
6.8 连续性方程	55

PREFACE

本 note 纯属作者自娱自乐 (期末复习), 仅适用于学过サーモダイナミックス、スタティスティッコルフィジックス、クアンテムフィジックス、ソリッドステートフィジックス的读者 (オタク), 没学完的快便乘猫娘



teru☆

riku☆0w0
二〇二三・師走廿一

Chapter 1

半导体中的电子

1.1 半导体的晶格结构与结合性质

1.1.1 金刚石型结构和共价键

Si, Ge 等元素属于 IV 族元素, 外层具有四个价电子。这些元素通过**共价键**结合形成晶体, 晶格结构与C 元素的金刚石晶体的晶格相同, 属于**金刚石型结构**。这种结构中, 每个原子周围有四个近邻原子, 组成正四面体结构。这四个原子处于正四面体的顶角上, 它们与中心原子各自贡献一个价电子为两个原子共有, 并形成共价键。金刚石结构的配位数是 4。

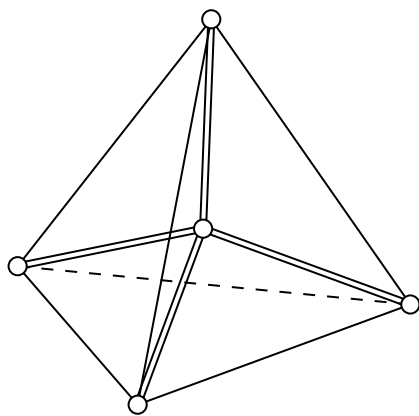


Figure 1.1: 正四面体结构

实验测得 Si 和 Ge 的晶格常数 a 分别为 0.543102 nm 和 0.565791 nm。

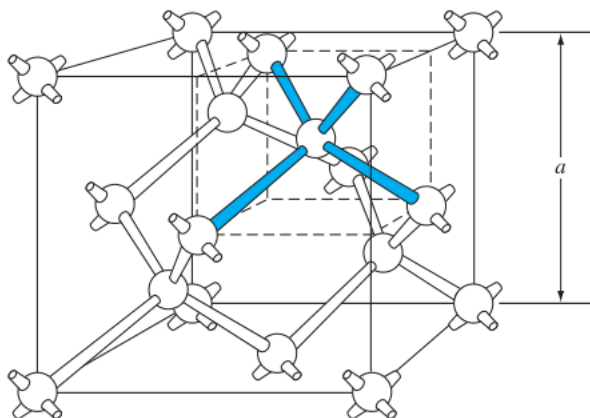


Figure 1.2: 金刚石晶胞

1.1.2 闪锌矿型结构和混合键

III 族元素 Al, Ga, In 和 V 族元素 P, As, Sb 形成的 III-V 族化合物是半导体材料，它们具有闪锌矿型结构，这种结构和金刚石结构相似，但它由两种不同的原子组成。这种结构依靠共价键结合，但有一定的离子键成分。

1.1.3 纤锌矿型结构

纤锌矿型结构与闪锌矿型结构类似，以正四面体结构为基础构成，但它具有六方对称性。其结合性质也具有一定的离子性。

1.2 半导体中的电子状态和能带

1.2.1 半导体中的电子状态和能带

晶体中的电子介于孤立原子中的电子和自由电子之间。孤立原子中的电子在原子核和其他电子的势场中运动；自由电子在零势场中运动。

首先介绍自由电子的运动。

微观粒子具有波粒二象性。一个质量 m_0 的自由电子以速度 \mathbf{v} 运动，其动量与能量为：

$$\mathbf{p} = m_0 \mathbf{v} \quad (1.2.1)$$

$$E = \frac{1}{2} \frac{|\mathbf{p}|^2}{m_0} \quad (1.2.2)$$

根据波粒二象性，此自由粒子可用频率为 ν ，角频率 $\omega = 2\pi\nu$ ，波长为 λ 的自由波函数表示：

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (1.2.3)$$

其中， A 为常数， \mathbf{k} 为波数，规定其为矢量，称为**波数矢量**或**波矢**，其大小：

$$k = |\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (1.2.4)$$

方向平行于波面法线，为波的传播方向。

自由电子能量与动量和波的角频率和波矢的关系为：

$$E = \hbar\nu = \hbar\omega \quad (1.2.5)$$

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (1.2.6)$$

式中， $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ， h 为普朗克 (Planck) 常数。

考虑一维情况，选择 Ox 轴方向与波传播方向一致，此时波函数为：

$$\Psi(x, t) = Ae^{ikx}e^{-i\omega t} = \psi(x)e^{-i\omega t} \quad (1.2.7)$$

其中

$$\psi(x) = Ae^{ikx} \quad (1.2.8)$$

称为**自由电子波函数**，它是沿 x 方向传播的平面波，遵循定态薛定谔 (Schrödinger) 方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (1.2.9)$$

将Equation 1.2.6代入Equation 1.2.1和Equation 1.2.2中，得：

$$\mathbf{v} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m_0} \quad (1.2.10)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (1.2.11)$$

对波矢为 \mathbf{k} 的运动状态，自由电子能量 E ，动量 \mathbf{p} 和速度 \mathbf{v} 均确定，故可以用波矢 \mathbf{k} 描述自由电子的运动状态。

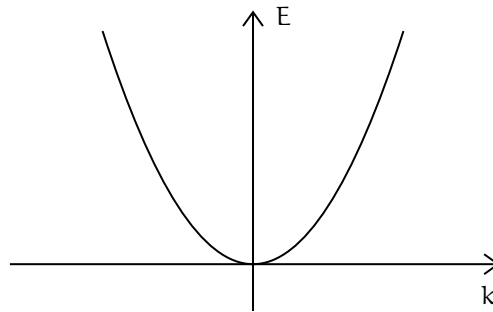


Figure 1.3: 自由电子 $E - k$ 曲线

1. 晶体中薛定谔方程及其解的形式

单电子近似认为晶体中的电子在与晶格同周期的周期势场中运动。对于一维晶格， x 处的电势为：

$$V(x) = V(x + na) \quad (1.2.12)$$

其中 n 为整数， a 为晶格常数。晶体中电子满足薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.2.13)$$

上式中 $V(x)$ 满足Equation 1.2.12。Equation 1.2.13是晶体电子的基本方程。

可以证明，满足Equation 1.2.13的波函数一定具有如下形式：

$$\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx} \quad (1.2.14)$$

式中 k 为波数， $u_k(x)$ 为与晶格同周期的周期函数：

$$u_k(x) = u_k(x + na) \quad n \text{ 为整数} \quad (1.2.15)$$

此结论称为布洛赫定理。具有Equation 1.2.14形式的波函数称为布洛赫函数。

2. 布里渊区与能带

晶体中电子处在不同 k 状态，具有不同能量 $E(k)$ 。求解Equation 1.2.13可以得到 $E(k) - k$ 关系曲线。当

$$k = \frac{n\pi}{a} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (1.2.16)$$

时，能量不连续，形成一系列禁带和允带。

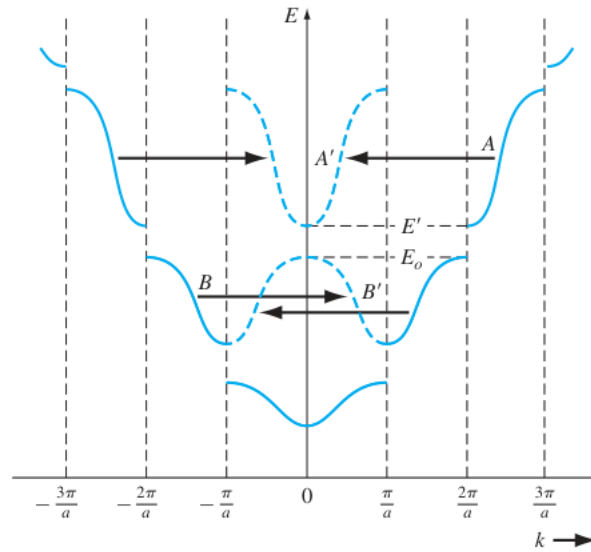


Figure 1.4: $E(k) - k$ 关系

可以看到，能量 $E(k)$ 也为 k 的周期函数，周期为 $\frac{2\pi}{a}$ ：

$$E(k) = E\left(k + n\frac{2\pi}{a}\right) \quad (1.2.17)$$

故 k 和 $k + n\frac{2\pi}{a}$ 表示相同的状态，可以只取第一布里渊区 $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ 中的 k 值描述电子的能量状态，将其他区域移动 $n\frac{2\pi}{a}$ 合并到第一区。这个区域内的 E 是 k 的多值函数，我们称此区域为**简约布里渊区**，区域内波矢为**简约波矢**。

对于有限晶体需要考虑边界条件。根据周期性边界条件，得到波矢 k 只能取分立值。对边长 L 的立方晶体，波矢 k 的各分量：

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi n_x}{L} \quad (n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \\ k_y &= \frac{2\pi n_y}{L} \quad (n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \\ k_z &= \frac{2\pi n_z}{L} \quad (n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \end{aligned} \quad (1.2.18)$$

1.2.2 导体，半导体，绝缘体

固体按其导电性分为导体，半导体，绝缘体。

1.3 半导体中电子的运动，有效质量

1.3.1 半导体中的 $E(k)$ 与 k 的关系

半导体中起作用的一般是带底或者带顶的电子，因此只要研究带顶和带底附近的 $E(k) - k$ 关系。

我们用泰勒展开近似地研究能带极值附近 $E(k)$ 与 k 的关系。一维情况下，设能带底位于 $k = 0$ 处。

将 $E(k)$ 在 $k = 0$ 附近泰勒展开，取到 k^2 项：

$$E(k) = E(0) + \left(\frac{dE}{dk}\right)_{k=0} k + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{k=0} k^2 + \mathcal{O}(k^3) \quad (1.3.1)$$

由于在 $k = 0$ 时， $\left(\frac{dE}{dk}\right)_{k=0} \propto (\hbar k)_{k=0} = 0$ ，从而：

$$E(k) - E(0) = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{k=0} k^2 \quad (1.3.2)$$

其中 $E(0)$ 为带底能量。令

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{k=0} \quad (1.3.3)$$

将Equation 1.3.3代入Equation 1.3.2，得到带底附近 $E(k)$ 为

$$E(k) - E(0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (1.3.4)$$

区别于Equation 1.2.11中的电子惯性质量 m_0 ， m_n^* 称为带底电子的有效质量。由于 $E(k) > E(0)$ ，故 m_n^* 是正值。

同样的，设带顶位于 $k = 0$ 处，则在带顶附近得到：

$$E(k) - E(0) = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0} k^2 \quad (1.3.5)$$

令

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0}$$

则带顶附近 $E(k)$ 为

$$E(k) - E(0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (1.3.6)$$

m_n^* 称为带顶电子的有效质量。由于 $E(k) < E(0)$ ， m_n^* 为负值。

Equation 1.3.4和Equation 1.3.6可见，只要能够确定出有效质量 m_n^* 大小，就能得到能带极值附近的 $E(k) - k$ 关系。

1.3.2 半导体中电子的平均速度

自由电子速度由Equation 1.2.10确定。由Equation 1.2.11可以求得 $\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m_0}$ ，代入 Equation 1.2.10，得自由电子速度 $v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$ 。

根据量子力学，电子的运动可以视为波包的运动，波包的群速度即电子的平均速度。设波包由若干角频率 ω 的波组成，则波包的群速度：

$$v = \frac{d\omega}{dk} \quad (1.3.7)$$

又由于角频率 ω 的波，其粒子能量为 $\hbar\omega$ ，代入Equation 1.3.7：

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\hbar\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (1.3.8)$$

再代入Equation 1.3.4或Equation 1.3.6，得：

$$\begin{aligned} v &= \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \left(E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \right) \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2 k}{m_n^*} \\ &= \frac{\hbar k}{m_n^*} \end{aligned} \quad (1.3.9)$$

带底 $m_n^* > 0$ ， k 为正值时， v 为正值；带顶 $m_n^* < 0$ ， k 为正值时， v 为负值

1.3.3 半导体中电子的加速度

在强度 \mathcal{E} 的外电场下，电子受到 $f = -q\mathcal{E}$ 的电场力， dt 时间内产生位移 ds 。外力做功产生的能量变化：

$$dE = f ds = f v dt \quad (1.3.10)$$

代入Equation 1.3.8，得：

$$dE = \frac{f}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt \quad (1.3.11)$$

$$\Rightarrow f = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (1.3.12)$$

上式说明了外力 f 作用下，波矢 k 会发生改变。

电子加速度：

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dk}{dt} \frac{d^2E}{dk^2} = \frac{f}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} \quad (1.3.13)$$

由

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} \quad \text{or} \quad m_n^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}} \quad (1.3.14)$$

得：

$$a = \frac{f}{m_n^*} = -\frac{q\mathcal{E}}{m_n^*} \quad (1.3.15)$$

可以看出，引入电子有效质量后，半导体电子的运动与牛顿第二定律类似。

1.4 本征半导体中的空穴

在 $K = 0$ 下，纯净半导体的价带被价电子填满，导带为空。一定温度下，价带顶部电子被激发到导带。被激发的电子参与导电。价带由于缺少电子，形成带正电的准粒子，即空穴。

空穴具有一个单位的正电荷 $+q$ ，有效质量 m_p^* 有：

$$m_p^* = -m_n^* \quad (1.4.1)$$

在外电场 \mathcal{E} 下，空穴的加速度

$$a = \frac{q\mathcal{E}}{m_p^*} = \frac{f}{m_p^*} \quad (1.4.2)$$

Chapter 2

回旋共振与导带和价带结构

2.1 回旋共振

2.1.1 \mathbf{k} 空间等能面

根据 1.3 节, $\mathbf{k} = 0$ 在导带底电子, 有:

$$E(\mathbf{k}) - E(0) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_n^*} \quad (2.1.1)$$

对于价带顶的空穴, 同样有:

$$E(\mathbf{k}) - E(0) = -\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_p^*} \quad (2.1.2)$$

对于三维晶体, \mathbf{k} 有 k_x, k_y, k_z 三个分量, 满足:

$$\mathbf{k}^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (2.1.3)$$

代入导带底位于 $\mathbf{k} = 0$, 能量为 $E(0)$ 的情况, 有:

$$E(\mathbf{k}) - E(0) = \frac{\hbar^2}{2m_n^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.1.4)$$

对于各向异性的晶体, $E(\mathbf{k})$ 和 \mathbf{k} 的关系在 \mathbf{k} 沿不同方向上并不完全一致。
根据

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} \quad (2.1.5)$$

可知, $\frac{1}{m_n^*}$ 是一个二阶张量:

$$\left(\frac{1}{m_n^*} \right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}, \quad (i, j \text{ 取遍 } 1, 2, 3) \quad (2.1.6)$$

我们对 $\left(\frac{1}{m_n^*}\right)_{ij}$ 作正交变换, 取 $\left(\frac{1}{m_n^*}\right)_{ij}$ 仅有对角元素时的基矢为 $\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y, \mathbf{k}_z$ 。此时记 m_x^*, m_y^*, m_z^* 分别为 $\mathbf{k}_x, \mathbf{k}_y, \mathbf{k}_z$ 方向上的电子有效质量:

$$\begin{cases} \frac{1}{m_x^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \right)_{\mathbf{k}_0} \\ \frac{1}{m_y^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \right)_{\mathbf{k}_0} \\ \frac{1}{m_z^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \right)_{\mathbf{k}_0} \end{cases} \quad (2.1.7)$$

设导带底位于 \mathbf{k}_0 , 能量为 $E(\mathbf{k}_0)$ 。在 \mathbf{k}_0 附近将 $E(\mathbf{k}_0)$ 泰勒展开, 取到二次项:

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right) \quad (2.1.8)$$

即:

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2}{\frac{2m_x^* (E - E_c)}{\hbar^2}} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{\frac{2m_y^* (E - E_c)}{\hbar^2}} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{\frac{2m_z^* (E - E_c)}{\hbar^2}} = 1 \quad (2.1.9)$$

Equation 2.1.9是个椭圆方程, 即等能面是围绕 \mathbf{k}_0 的一系列椭球面。

2.1.2 回旋共振

半导体置于磁感应强度 \mathbf{B} 的磁场中, 电子初速度为 \mathbf{v} , 磁场力 \mathbf{f} :

$$\mathbf{f} = -q\mathbf{v} \times \mathbf{B} \quad (2.1.10)$$

\mathbf{v} 和 \mathbf{B} 夹角为 θ :

$$\theta = \arccos \left(\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{B}}{|\mathbf{v}| |\mathbf{B}|} \right) \quad (2.1.11)$$

则 f 的大小为:

$$f = qvB \sin \theta = qv_{\perp} B, \quad v_{\perp} = v \sin \theta \quad (2.1.12)$$

电子的轨迹在沿磁场方向为速度 $v_{//} = v \cos \theta$ 的匀速运动, 在垂直于磁场的平面内作匀速圆周运动, 总体的运动轨迹为以螺旋线进动。

设圆周半径 r , 回旋频率为 ω_c , 则有

$$v_{\perp} = r\omega_c \quad (2.1.13)$$

向心加速度 a :

$$a = \frac{v_{\perp}^2}{r} \quad (2.1.14)$$

代入Equation 1.3.15, 得

$$\begin{aligned}\frac{v_{\perp}^2}{r} &= \frac{f}{m_n^*} = \frac{qv_{\perp}B}{m_n^*} \\ \Rightarrow v_{\perp} &= r\omega_c = \frac{qBr}{m_n^*} \\ \Rightarrow \omega_c &= \frac{qB}{m_n^*}\end{aligned}\quad (2.1.15)$$

将电磁波通过半导体样品, 当交变电磁场的角频率 ω 等于回旋频率 ω_c 时, 就会发生共振吸收。测出共振吸收时的电磁波角频率 ω 和磁感应强度 B , 便可以算出有效质量 m_n 。

若等能面是椭球面, 则有效质量也是各向异性的。设沿 k_x, k_y, k_z 轴方向分别是 m_x^*, m_y^*, m_z^* 。设 \mathbf{B} 沿 k_x, k_y, k_z 轴的方向余弦为 α, β, γ , 则电子受力:

$$\begin{cases} f_x = -qB(v_y\gamma - v_z\beta) \\ f_y = -qB(v_z\alpha - v_x\gamma) \\ f_z = -qB(v_x\beta - v_y\alpha) \end{cases}\quad (2.1.16)$$

得到运动方程:

$$\begin{cases} m_x^* \frac{dv_x}{dt} + qB(v_y\gamma - v_z\beta) = 0 \\ m_y^* \frac{dv_y}{dt} + qB(v_z\alpha - v_x\gamma) = 0 \\ m_z^* \frac{dv_z}{dt} + qB(v_x\beta - v_y\alpha) = 0 \end{cases}\quad (2.1.17)$$

电子作周期运动, 取解:

$$\begin{cases} v_x = v'_x e^{i\omega_c t} \\ v_y = v'_y e^{i\omega_c t} \\ v_z = v'_z e^{i\omega_c t} \end{cases}\quad (2.1.18)$$

代入, 得:

$$\begin{cases} i\omega_c v'_x + \frac{qB}{m_x^*} \gamma v'_y - \frac{qB}{m_x^*} \beta v'_z = 0 \\ -\frac{qB}{m_y^*} \gamma v'_x + i\omega_c v'_y + \frac{qB}{m_y^*} \alpha v'_z = 0 \\ \frac{qB}{m_z^*} \beta v'_x - \frac{qB}{m_z^*} \alpha v'_y + i\omega_c v'_z = 0 \end{cases}\quad (2.1.19)$$

要使 v'_x, v'_y, v'_z 有不全为零的解, 其系数行列式为零:

$$\begin{vmatrix} i\omega_c & \frac{qB}{m_x^*} \gamma & -\frac{qB}{m_x^*} \beta \\ -\frac{qB}{m_y^*} \gamma & i\omega_c & \frac{qB}{m_y^*} \alpha \\ \frac{qB}{m_z^*} \beta & -\frac{qB}{m_z^*} \alpha & i\omega_c \end{vmatrix} = 0\quad (2.1.20)$$

解得电子回旋频率 ω_c ：

$$\omega_c = \frac{qB}{m_n^*} \quad (2.1.21)$$

其中

$$\frac{1}{m_n^*} = \sqrt{\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*}} \quad (2.1.22)$$

交变电磁场的角频率 ω 等于 ω_c 时，发生共振吸收。

2.2 硅和锗的能带结构

2.2.1 硅和锗的导带结构

对于等能面为球面的晶体，由Equation 2.1.15，改变磁场方向仅有一个吸收峰。硅的回旋共振实验中：

- (1) **B** 沿 $[1\ 1\ 1]$ 方向，有一个吸收峰；
- (2) **B** 沿 $[1\ 1\ 0]$ 方向，有两个吸收峰；
- (3) **B** 沿 $[1\ 0\ 0]$ 方向，有两个吸收峰；
- (4) **B** 沿任意取向，有三个吸收峰。

显然不是各向同性的。我们认为硅导带底附近等能面是沿 $[1\ 0\ 0]$ 方向的旋转椭球面，且椭圆长轴沿此方向，则与实验事实吻合。此时的导带最小值不在 \mathbf{k} 空间原点，而在 $[1\ 0\ 0]$ 方向上，根据对称性，也出现在 $[\bar{1}\ 0\ 0]$, $[0\ 1\ 0]$, $[0\ \bar{1}\ 0]$, $[0\ 0\ 1]$, $[0\ 0\ \bar{1}]$ 方向上，如Figure 2.1。

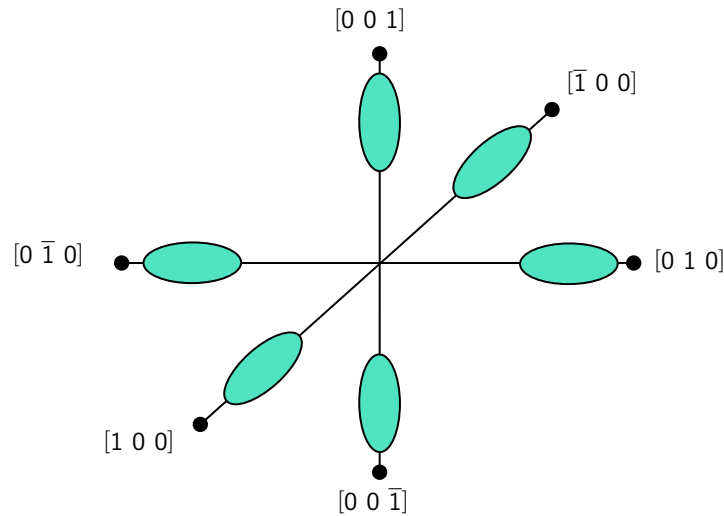


Figure 2.1: 硅导带等能面

由Equation 2.1.8, 极值附近能量 $E^s(\mathbf{k})$ 为:

$$E^s(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{(k_x - k_{0x}^s)^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y}^s)^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z}^s)^2}{m_z^*} \right) \quad (2.2.1)$$

取 E_c 为能量零点, \mathbf{k}_0^s 为坐标原点, 取 k_1, k_2, k_3 三个直角坐标轴分别沿椭球主轴方向, 其中 k_3 沿长轴方向 ($< 100 >$), 等能面为绕 k_3 的旋转椭球面。此时沿 k_1, k_2 轴的有效质量相同, 如Figure 2.2。

令 $m_x^* = m_y^* = m_t$ 为横向有效质量, $m_z^* = m_l$ 为纵向有效质量。等能面方程化为:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_1^2 + k_2^2}{m_t} + \frac{k_3^2}{m_l} \right] \quad (2.2.2)$$

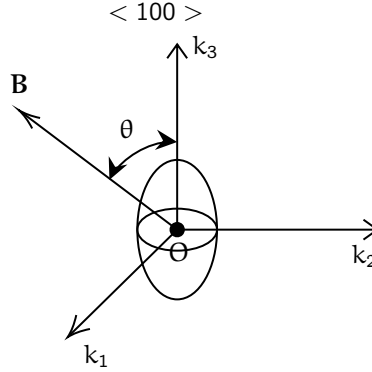


Figure 2.2: \mathbf{k} 空间取向

我们选取 k_1 使得 \mathbf{B} 位于 k_1 和 k_3 组成的平面内, 并与 k_3 成 θ 角。此时 \mathbf{B} 的方向余弦:

$$\alpha = \sin \theta, \quad \beta = 0, \quad \gamma = \cos \theta \quad (2.2.3)$$

代入Equation 2.1.22, 得:

$$m_n^* = m_t \sqrt{\frac{m_l}{m_t \sin^2 \theta + m_l \cos^2 \theta}} \quad (2.2.4)$$

(1) 当 \mathbf{B} 沿 $[1\ 1\ 1]$ 方向, 则与 6 个 $< 100 >$ 方向夹角均为 $\cos^2 \theta = \frac{1}{3}$, 因此 $\sin^2 \theta = \frac{2}{3}$, 代入Equation 2.2.4, 得:

$$m_n^* = m_t \sqrt{\frac{3m_l}{2m_t + m_l}} \quad (2.2.5)$$

由 $\omega = \omega_c = \frac{qB}{m_n^*}$ 可知, m_n^* 只有一个值, 只能观察到一个吸收峰。

- (2) **B** 沿 $[1\ 1\ 0]$ 方向, 此时 **B** 与 $[1\ 0\ 0]$, $[\bar{1}\ 0\ 0]$, $[0\ 1\ 0]$, $[0, \bar{1}, 0]$ 夹角 $\cos^2 \theta_1 = \frac{1}{2}$, $\sin^2 \theta_1 = \frac{1}{2}$, 与 $[0\ 0\ 1]$, $[0\ 0\ \bar{1}]$ 夹角有 $\cos^2 \theta_2 = 0$, $\sin^2 \theta_2 = 1$, 代入Equation 2.2.4, 相应的有效质量分别为:

$$m_{n1}^* = m_t \sqrt{\frac{2m_l}{m_t + m_l}} \quad (2.2.6)$$

$$m_{n2}^* = \sqrt{m_l m_t} \quad (2.2.7)$$

存在 2 个不同的 m_n^* 值, 故有两个吸收峰。

- (3) **B** 沿 $[1\ 0\ 0]$ 方向, 此时 **B** 与 $[1\ 0\ 0]$, $[\bar{1}\ 0\ 0]$ 夹角给出 $\cos^2 \theta_1 = 1$, $\sin^2 \theta_1 = 0$, 与 $[0\ 1\ 0]$, $[0, \bar{1}, 0]$, $[0\ 0\ 1]$, $[0\ 0\ \bar{1}]$ 夹角有 $\cos^2 \theta_2 = 0$, $\sin^2 \theta_2 = 1$ 。代入Equation 2.2.4, 相应的有效质量分别为:

$$m_n^* = m_t \quad (2.2.8)$$

$$m_n^* = \sqrt{m_l m_t} \quad (2.2.9)$$

存在 2 个不同的 m_n^* 值, 故也有两个吸收峰。

- (4) **B** 沿任意方向时, 与 $\langle 100 \rangle$ 夹角给出三种 $\cos^2 \theta$ 值, 因此有三种不同的 m_n^* , 可以观察到三个吸收峰。

上述讨论与实验结果相符, 因此硅导带底附近等能面是沿 $[1\ 0\ 0]$ 方向的旋转椭球面。

对于 n 型锗的实验结果显示, 锗的导带极值位于 $\langle 111 \rangle$ 方向。

Chapter 3

半导体中的杂质和缺陷能级

3.1 Si、Ge 晶体中的杂质能级

3.1.1 替位式杂质和间隙式杂质

杂质进入半导体后只能以两种方式存在，一种是杂质原子位于晶格原子间的间隙位置，称为**间隙式杂质**，另一种是杂质原子取代晶格原子位于晶格点处，称为**替位式杂质**。

间隙式杂质原子一般比较小，如 Li^+ 半径很小 (0.068 nm)，在 Si, Ge, AsGa 中是间隙式杂质。

形成替位式杂质时，要求杂质原子的大小与被取代的晶格原子大小相近，价电子壳层结构相近。如 III、V 族元素在 IV 族半导体元素晶体 (Si、Ge) 中形成替位式杂质。

单位体积杂质原子数称为**杂质浓度**，通常用于表示半导体晶体杂质含量。

3.1.2 施主杂质、施主能级

III、V 族元素在 Si、Ge 晶体中形成替位式杂质。

在如Figure 3.1所示的替位杂质中：

一个 As 原子占据了原本 Ge 原子的位置，此原子用去 4 个外层电子与周围的四个 Ge 原子形成 4 个共价键；但由于 As 外层有 5 个电子，在形成完 4 个共价键后余下一个电子。多余的电子与 As 的束缚较弱，需要较少的能量即可电离，成为自由电子，从而使 As 得到一个正电荷，形成**正电中心**。这种给半导体贡献自由电子，并形成正电中心的杂质即称为**施主杂质**或 **n 型杂质**。正电中心释放电子的过程叫作**施主电离**。施主杂质在未电离时是中性的，称为**束缚态**或**中性态**，电离后成为正电中心，称为**离化态**。

施主杂质中不成键的束缚电子得到一定的能量 ΔE_D 时，从束缚态跃迁到导带成为导电电子，故电子被正电中心束缚时的能量比导带底 E_c 低 ΔE_D 。我们将电子被施主杂质束缚的状态称为**施主能级**，记为 E_D 。 ΔE_D 为**杂质电离能**。这样主要依靠导带中电离产生的导带电子导电的半导体称为 **n 型半导体**。

V 族元素在 Si、Ge 晶体中是受主杂质。

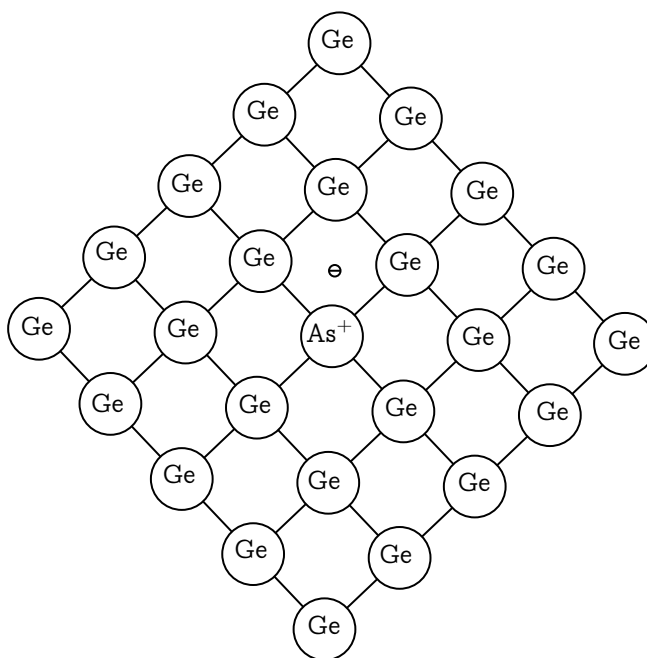


Figure 3.1: Ge 中的施主杂质 As

3.1.3 受主杂质、受主能级

在如Figure 3.2所示的替位杂质中：

一个 Ga 原子占据了原本 Ge 原子的位置，此原子需要用去 4 个外层电子与周围的四个 Ge 原子形成 4 个共价键；但由于 Ga 外层仅有 3 个电子，为了形成 4 个共价键需要向周围的原子取走一个电子。于是在晶体中形成一个带正电的空穴，而 As 得到一个负电荷，形成**负电中心**。这种给半导体贡献空穴，并形成负电中心的杂质即称为**受主杂质**或 **p 型杂质**。受主杂质中的空穴得到一定的能量 ΔE_A 后，价带中的电子进入空穴，事实上形成了脱离束缚的导电空穴， ΔE_A 为**受主杂质电离能**，这个电离过程就是**受主电离**。受主杂质未电离时是中性的，称为**束缚态**或**中性态**，电离后成为负电中心，称为**受主离子化态**。

空穴被受主杂质束缚时的能量比价带顶 E_v 低 ΔE_A 。空穴被受主杂质束缚的能量状态称为**受主能级**，记为 E_A 。这样主要依靠空穴导电的半导体称为 **p 型半导体**。

III 族元素在 Ge、Si 晶体中是**受主杂质**。

Si、Ge 中的 III、V 族杂质电离能较小，其受主能级接近价带顶，施主能级接近导带底。通常将这些杂质能级称为**浅能级**，产生浅能级的杂质称为**浅能级杂质**。

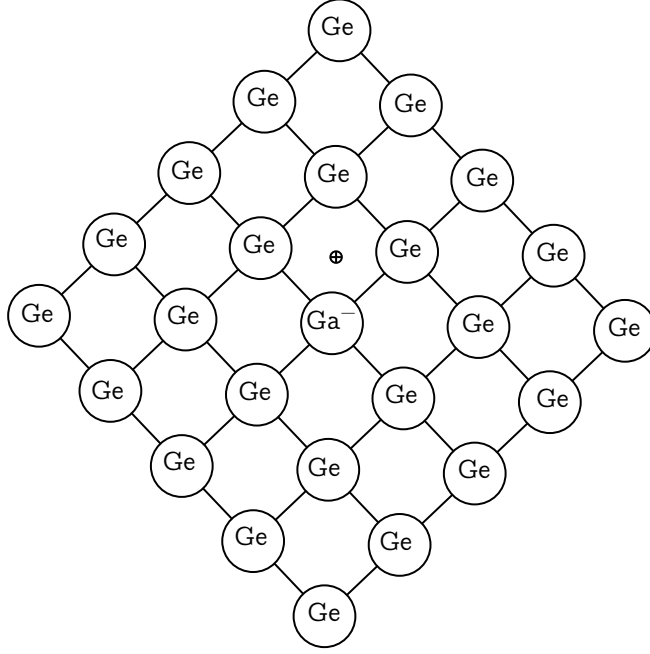


Figure 3.2: Ge 中的受主杂质 Ga

3.1.4 浅能级杂质电离能的简单计算

浅能级杂质电离能较小，电子或空穴受到的束缚很微弱，可以用类氢模型估算杂质电离能。氢原子中电子能量 E_n 为：

$$E_n = -\frac{m_0 q^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}, \quad \text{主量子数 } n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.1.1)$$

其中，基态能量 E_1 为：

$$E_1 = -\frac{m_0 q^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \quad (3.1.2)$$

氢原子电离态 $E_\infty = 0$ 。故氢原子基态电子电离能

$$E_0 = E_\infty - E_1 = \frac{m_0 q^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} = 13.6 \text{ eV} \quad (3.1.3)$$

考虑晶体中存在杂质原子，正负电荷处在介电常数 $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$ 的介质中，则束缚能量将减弱为原来的 $\frac{1}{\epsilon_r^2}$ 。此外电子在晶格周期势场中运动，电子惯性质量 m_0 用有效质量 m_n^* 代替。

修正后的施主杂质电离能表示为：

$$\Delta E_D = \frac{m_n^* q^4}{2(4\pi\epsilon_0 \epsilon_r)^2 \hbar^2} = \frac{m_n^*}{m_0} \frac{E_0}{\epsilon_r^2} \quad (3.1.4)$$

受主杂质电离能为：

$$\Delta E_A = \frac{m_p^* q^4}{2(4\pi\epsilon_0\epsilon_r)^2 \hbar^2} = \frac{m_p^*}{m_0} \frac{E_0}{\epsilon_r^2} \quad (3.1.5)$$

3.1.5 杂质的补偿作用

半导体中同时存在施主杂质和受主杂质。此时施主杂质和受主杂质有互相抵消的作用，称为杂质的**补偿作用**。我们用 N_D 表示**施主杂质浓度**， N_A 表示**受主杂质浓度**， n 表示**导带电子浓度**， p 表示**价带空穴浓度**。

1. $N_D \gg N_A$ 时：

由于受主能级低于施主能级，施主杂质电子首先跃迁到 N_A 个受主能级上，剩下 $N_D - N_A$ 个电子在施主能级上，杂质电离时跃迁到导带成为导电电子。此时电子浓度 $n = N_D - N_A \approx N_D$ ，半导体为 **n 型**。

2. $N_A \gg N_D$ 时：

施主能级上的电子全部跃迁到受主能级后，受主能级还剩 $N_A - N_D$ 个空能级。价带电子跃迁到空能级上，在价带形成导电空穴，空穴浓度为 $p = N_A - N_D \approx N_A$ ，半导体为 **p 型**。

利用杂质补偿作用，可以根据需要用**扩散或离子注入**方法改变半导体的导电类型。若出现 $N_D \approx N_A$ ，此时施主电子刚好填充受主能级，虽然杂质很多，却无法向导带和价带提供电子和空穴，这种现象称为**杂质高度补偿**。

3.2 缺陷、位错能级

3.2.1 点缺陷

一定温度下，晶格原子会在平衡位置附近作振动运动，此时一部分原子获得足够的能量，克服周围原子对其束缚，挤入其他原子间隙，形成**间隙原子**，原来的位置便会成为**空位**。此时间隙原子与空位成对出现，成为**弗伦克尔缺陷**。而只在晶体内形成空位而无间隙原子，则称为**肖特基缺陷**。间隙原子与空位不断产生和复合，形成平衡浓度。上述两种由温度决定的点缺陷称为**热缺陷**。原子需较大的能量才能挤入间隙位置，然而其迁移的激活能很小，因此晶体中空位比间隙原子多得多。空位是常见的点缺陷。

3.2.2 位错

位错是半导体的一种缺陷。在晶体的棱位错周围，晶格会发生畸变。

Chapter 4

半导体中载流子的统计分布

4.1 状态密度

4.1.1 状态密度

半导体的状态密度 $g(E)$ 定义为：

$$g(E) = \frac{dZ}{dE} \quad (4.1.1)$$

其中 dZ 为 dE 能量区间下的量子态数。

通过 1.2 节的讨论，半导体中波矢 \mathbf{k} 的取值受到一定条件的限制。在线度 L 的半导体晶体中， \mathbf{k} 的取值只能是

$$\begin{cases} k_x = \frac{2\pi n_x}{L} & (n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \\ k_y = \frac{2\pi n_y}{L} & (n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \\ k_z = \frac{2\pi n_z}{L} & (n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \end{cases} \quad (4.1.2)$$

故 \mathbf{k} 空间的量子态密度为：

$$2 \times \left(\frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{2V}{8\pi^3} \quad (4.1.3)$$

其中 $V = L^3$ 为晶体体积。半导体的能带（导带）极值附近有：

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_n^*} \quad (4.1.4)$$

故有：

$$k = \frac{(2m_n^*)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}}{\hbar} \quad (4.1.5)$$

$$kdk = \frac{m_n^* dE}{\hbar^2} \quad (4.1.6)$$

在 \mathbf{k} 空间中, 以 $|\mathbf{k}|$ 为半径作球面, 即 $E(\mathbf{k})$ 的等能面; 再以 $|\mathbf{k}+d\mathbf{k}|$ 为半径作球面, 即 $E(\mathbf{k})+dE$ 的等能面。 dE 球壳体积 $4\pi k^2 dk$, 计算 dE 球壳的量子态数 dZ :

$$dZ = \frac{2V}{8\pi^3} \times 4\pi k^2 dk \quad (4.1.7)$$

代入Equation 4.1.5和Equation 4.1.6, 得:

$$dZ = \frac{V}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} dE \quad (4.1.8)$$

由Equation 4.1.1得到导带底部附近状态密度:

$$g_c(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} \quad (4.1.9)$$

4.1.2 状态密度有效质量

对于实际半导体 (如 Si、Ge), 它在导带附近的等能面是旋转椭球面。取极值能量 E_c , 有:

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_1^2 + k_2^2}{m_t} + \frac{k_3^2}{m_l} \right] \quad (4.1.10)$$

此时的状态密度

$$g_c(E) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}} \quad (4.1.11)$$

其中 m_n^* 为

$$m_n^* = m_{dn} = s^{\frac{2}{3}} (m_l m_t^2)^{\frac{1}{3}} \quad (4.1.12)$$

m_{dn} 为导带底状态密度有效质量。对 Si, $s = 6$; 对 Ge, $s = 4$ 。

4.2 费米能级和载流子统计分布

4.2.1 费米分布函数

对于能量为 E 的量子态, 它被一个电子占据的概率 $f(E)$ 为:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_0 T}\right)} \quad (4.2.1)$$

$f(E)$ 称为**费米分布函数**。它描述**热平衡**下, 电子在允许量子态上的分布情况。 k_0 是玻尔兹曼常数, T 是热力学温度。 E_F 是**费米能级**, 统计物理证明, 费米能级是系统的化学势:

$$E_F = \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N} \right)_T \quad (4.2.2)$$

4.2.2 玻尔兹曼分布函数

$E - E_F \gg k_0 T$ 时, 由于 $\exp \frac{E - E_F}{k_0 T} \gg 1$, 有:

$$1 + \exp \left(\frac{E - E_F}{k_0 T} \right) \approx \exp \left(\frac{E - E_F}{k_0 T} \right) \quad (4.2.3)$$

此时费米分布转化为玻尔兹曼分布:

$$f_B(E) = \exp \left(-\frac{E - E_F}{k_0 T} \right) = \exp \left(\frac{E_F}{k_0 T} \right) \exp \left(-\frac{E}{k_0 T} \right) \quad (4.2.4)$$

令 $A = \exp \left(\frac{E_F}{k_0 T} \right)$, 则

$$f_B(E) = A \exp \left(-\frac{E}{k_0 T} \right) \quad (4.2.5)$$

$f(E)$ 是能量 E 的电子态被电子占据的概率, 则 $1 - f(E)$ 是能量 E 的量子态不被电子占据的概率, 即空穴占据的概率:

$$1 - f(E) = \frac{1}{1 + \exp \left(\frac{E_F - E}{k_0 T} \right)} \quad (4.2.6)$$

$E_F - E \gg k_0 T$ 时, 设 $B = \exp \left(-\frac{E_F}{k_0 T} \right)$, 则:

$$1 - f(E) = B \exp \left(\frac{E}{k_0 T} \right) \quad (4.2.7)$$

上式即空穴的玻尔兹曼分布函数。

4.2.3 导带中电子浓度和价带中空穴浓度

非简并条件下, 能量在 $E \sim E + dE$ 间的电子数 dN 为:

$$dN = f_B(E) g_c(E) dE \quad (4.2.8)$$

代入Equation 4.1.9的 $g_c(E)$ 和Equation 4.2.5的 $f_B(E)$, 得:

$$dN = \frac{V}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \exp \left(-\frac{E - E_F}{k_0 T} \right) (E - E_c)^{\frac{1}{2}} dE \quad (4.2.9)$$

$E \sim E + dE$ 间单位体积的电子数为:

$$dn = \frac{dN}{V} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \exp \left(-\frac{E - E_F}{k_0 T} \right) (E - E_c)^{\frac{1}{2}} dE \quad (4.2.10)$$

积分计算热平衡下非简并半导体的**导带电子浓度** n_0 ：

$$n_0 = \int_{E_c}^{E'_c} \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_0 T}\right) (E - E_c)^{\frac{1}{2}} dE \quad (4.2.11)$$

E'_c 为导带顶能量, $E'_c \rightarrow +\infty$ 。取 $x = \frac{E - E_c}{k_0 T}$, 利用积分公式

$$\int_0^{\infty} x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (4.2.12)$$

求得导带电子浓度

$$n_0 = 2 \left(\frac{m_n^* k_0 T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.2.13)$$

令

$$N_c = 2 \left(\frac{m_n^* k_0 T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 2 \frac{(2\pi m_n^* k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \quad (4.2.14)$$

得

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.2.15)$$

N_c 为**导带有效状态密度**。显然有 $N_c \propto T^{\frac{3}{2}}$ 。 $\exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right)$ 是电子占据导带底 E_c 的概率。

同理, **价带空穴浓度** p_0 为:

$$p_0 = \int_{E'_v}^{E_v} [1 - f(E)] \frac{g_v(E)}{V} dE \quad (4.2.16)$$

$$= \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3} \int_{E'_v}^{E_v} \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_0 T}\right) (E - E_F)^{\frac{1}{2}} dE \quad (4.2.17)$$

$E'_v \rightarrow -\infty$, 利用积分公式, 得:

$$p_0 = 2 \left(\frac{m_p^* k_0 T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_v - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.2.18)$$

令

$$N_v = 2 \left(\frac{m_p^* k_0 T}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} = 2 \frac{(2\pi m_p^* k_0 T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \quad (4.2.19)$$

得

$$p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_v - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.2.20)$$

N_v 为**价带有效状态密度**。显然 $N_v \propto T^{\frac{3}{2}}$, $\exp\left(-\frac{E_v - E_F}{k_0 T}\right)$ 是空穴占据价带顶 E_v 的概率。

4.2.4 载流子浓度乘积 $n_0 p_0$

将Equation 4.2.15和Equation 4.2.20相乘，得到载流子浓度乘积：

$$n_0 p_0 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{k_0 T}\right) = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right) \quad (4.2.21)$$

E_g 为禁带宽度。代入 N_c 和 N_v 表达式，得：

$$n_0 p_0 = 4 \left(\frac{k_0}{2\pi\hbar^2}\right)^3 (m_n^* m_p^*)^{\frac{3}{2}} T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right) \quad (4.2.22)$$

$$= 2.33 \times 10^{31} \left(\frac{m_n^* m_p^*}{m_0^2}\right)^{\frac{3}{2}} T^3 \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right) \quad (4.2.23)$$

4.3 本征半导体的载流子浓度

本征载流子即没有杂质和缺陷的半导体。 $T = 0 \text{ K}$ 时价带中全部量子态被电子占据，导带量子态全空。 $T > 0 \text{ K}$ 时，电子从价带激发到导带，同时在价带中产生空穴，即本征激发。

本征半导体中，电子和空穴成对出现，电子浓度等于空穴浓度：

$$n_0 = p_0 \quad (4.3.1)$$

即本征激发的电中性条件。

将Equation 4.2.15和Equation 4.2.20代入上式，求得本征半导体的费米能级 E_F ，用 E_i 表示：

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right) \quad (4.3.2)$$

取对数：

$$E_i = E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} \quad (4.3.3)$$

代入 N_c 和 N_v 表达式：

$$E_i = E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3k_0 T}{4} \ln \frac{m_p^*}{m_n^*} \quad (4.3.4)$$

将Equation 4.3.4代入Equation 4.2.15和Equation 4.2.20，得到本征载流子浓度 n_i ：

$$n_i = n_0 = p_0 = (N_c N_v)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_0 T}\right) \quad (4.3.5)$$

比较Equation 4.2.21和Equation 4.3.5得：

$$n_0 p_0 = n_i^2 \quad (4.3.6)$$

上式表明：一定温度下，任何非简并半导体热平衡载流子浓度乘积 $n_0 p_0$ 等于该温度下本征载流子浓度 n_i 的平方。

代入 N_c 和 N_v 表达式：

$$n_i = \left[\frac{2 (2\pi k_0 T)^{\frac{3}{2}} (m_p^* m_n^*)^{\frac{3}{4}}}{h^3} \right] \exp \left(-\frac{E_g}{2k_0 T} \right) \quad (4.3.7)$$

$$= 4.82 \times 10^{15} \times \left(\frac{m_p^* m_n^*}{m_0^*} \right)^{\frac{3}{4}} T^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_g}{2k_0 T} \right) \quad (4.3.8)$$

4.4 杂质半导体的载流子浓度

4.4.1 杂质能级上的电子和空穴

含有杂质的半导体中，杂质部分电离。电子占据杂质能级的概率不能用费米分布函数决定，因为能带中的能级能容纳两个自旋相反的电子，而杂质能级要么只能被一个具有任一自旋方向的电子占据，要么完全不接受电子。记 E_D 为施主能级，电子占据施主能级的概率表达式

$$f_D(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} \exp \left(\frac{E_D - E_F}{k_0 T} \right)} \quad (4.4.1)$$

记 E_A 为受主能级，空穴占据受主能级概率

$$f_A(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{g_A} \exp \left(\frac{E_F - E_A}{k_0 T} \right)} \quad (4.4.2)$$

g_D 为施主能级基态简并度， g_A 为受主能级基态简并度，通常称为简并因子。对于 Ge、Si、GaAs 等材料， $g_D = 2$ ， $g_A = 4$ 。

记 N_D 为施主浓度， N_A 为受主浓度。则 N_D 和 N_A 记为杂质的量子态密度。电子和空穴占据杂质能级的概率分别为 $f_D(E)$ 和 $f_A(E)$ ，因此：

(1) 施主能级上的电子浓度 n_D 为：

$$n_D = N_D f_D(E) = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{g_D} \exp \left(\frac{E_D - E_F}{k_0 T} \right)} \quad (4.4.3)$$

这也是没有电离的施主浓度。

(2) 受主能级上的空穴浓度 p_A 为：

$$p_A = N_A f_A(E) = \frac{N_A}{1 + \frac{1}{g_A} \exp \left(\frac{E_F - E_A}{k_0 T} \right)} \quad (4.4.4)$$

这也是没有电离的受主浓度。

(3) 电离施主浓度 n_D^+ 为:

$$n_D^+ = N_D - n_D = N_D [1 - f_D(E)] = \frac{N_D}{1 + g_D \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)} \quad (4.4.5)$$

(4) 电接受主杂质浓度 p_A^+ 为:

$$p_A^+ = N_A - p_A = N_A [1 - f_A(E)] = \frac{N_A}{1 + g_A \exp\left(-\frac{E_F - E_A}{k_0 T}\right)} \quad (4.4.6)$$

4.4.2 n 型半导体的载流子浓度

n 型半导体单位体积的负电荷数, 即导带中电子浓度 n_0 , 等于单位体积的正电荷数, 即价带中空穴浓度 p_0 与电离施主浓度 n_D^+ 之和。即电中性条件:

$$n_0 = n_D^+ + p_0 \quad (4.4.7)$$

取 $g_D = 2$, 将Equation 4.2.15、Equation 4.2.20和Equation 4.4.5代入上式:

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right) + \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)} \quad (4.4.8)$$

上式直接求取 E_F 是困难的。我们分析在不同温度情况下的情况。

1. 低温弱电离区

温度很低时, 大部分施主杂质不发生电离, 少部分施主杂质发生电离, 少量电子进入导带, 称为**弱电离**。从价带跃迁到导带的电子则更少, 可以忽略不计。故 $p_0 = 0$, $n_0 = n_D^+$, 即:

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)} \quad (4.4.9)$$

由于 $n_D^+ \ll N_D$, 所以 $\exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right) \gg 1$, 上式继续简化为:

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = \frac{1}{2} N_D \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.4.10)$$

取对数化简:

$$E_F = \frac{E_c + E_D}{2} + \left(\frac{k_0 T}{2}\right) \ln\left(\frac{N_D}{2N_c}\right) \quad (4.4.11)$$

上式即低温弱电离区费米能级表达式。

由于 $N_c \propto T^{\frac{3}{2}}$ ，低温极限 $T \rightarrow 0 \text{ K}$ 时， $\lim_{T \rightarrow 0 \text{ K}} (T \ln T) = 0$ ，故

$$\lim_{T \rightarrow 0 \text{ K}} E_F = \frac{E_c + E_D}{2} \quad (4.4.12)$$

即低温极限下，费米能级在导带底和施主能级中线处。

2. 中间电离区

温度升高，在 $2N_c > N_D$ 后，Equation 4.4.11 第二项变为负值， E_F 降至 $\frac{E_c + E_D}{2}$ 以下。温度继续升高， $\exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_0 T}\right) = 1$ 时， $E_F = E_D$ ，施主杂质 $\frac{1}{3}$ 电离。

3. 强电离区

温度升高到大部分杂质均电离，称为**强电离区**。此时 $n_D^+ \approx N_D$ ，有 $\exp\left(\frac{E_F - E_D}{k_0 T}\right) \ll 1$ 或 $E_D - E_F \gg k_0 T$ 。费米能级 E_F 在施主能级 E_D 之下。Equation 4.4.8 简化为：

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = N_D \quad (4.4.13)$$

解得费米能级 E_F 为：

$$E_F = E_c + k_0 T \ln\left(\frac{N_D}{N_c}\right) \quad (4.4.14)$$

施主杂质全部电离时，电子浓度 n_0 为：

$$n_0 = N_D \quad (4.4.15)$$

载流子浓度与温度无关。载流子浓度等于杂质浓度的温度范围称为**饱和区**。

当 $(E_D - E_F) \gg k_0 T$ 时，施主能级上的电子浓度 n_D 表达式 Equation 4.4.3 简化为：

$$n_D \approx 2N_D \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.4.16)$$

代入 Equation 4.4.13，得：

$$n_D \approx 2N_D \left(\frac{N_D}{N_c}\right) \exp\left(\frac{E_c - E_D}{k_0 T}\right) = 2N_D \left(\frac{N_D}{N_c}\right) \exp\left(\frac{\Delta E_D}{k_0 T}\right) \quad (4.4.17)$$

令

$$D_- = \left(\frac{2N_D}{N_c}\right) \exp\left(\frac{\Delta E_D}{k_0 T}\right) \quad (4.4.18)$$

得到：

$$n_D \approx D_- N_D \quad (4.4.19)$$

由于 N_D 是施主杂质浓度， n_D 是未电离施主浓度，因此 D_- 的物理意义是**未电离施主占施主杂质的百分比**。

4. 过渡区

升高温度，使半导体处于饱和区和本征激发区（本征激发产生的本征载流子远多于杂质产生的载流子）之间，称为**过渡区**。此时导带中的电子一部分来源于全部电离的杂质，另一部分由本征激发提供。电中性条件为：

$$n_0 = N_D + p_0 \quad (4.4.20)$$

其中 n_0 为导带电子浓度， p_0 为价带中的空穴浓度， N_D 为全部电离的施主杂质浓度。

本征激发时，有：

$$n_0 = p_0 = n_i \quad (4.4.21)$$

$$E_F = E_i \quad (4.4.22)$$

得到

$$n_i = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_i}{k_0 T}\right) \quad (4.4.23)$$

$$\Rightarrow N_c = n_i \exp\left(\frac{E_c - E_i}{k_0 T}\right) \quad (4.4.24)$$

代入Equation 4.2.15，得：

$$n_0 = n_i \exp\left(-\frac{E_i - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.4.25)$$

同理有：

$$p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.4.26)$$

代入Equation 4.4.20，得：

$$N_D = n_0 - p_0 = n_i \left[\exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_0 T}\right) - \exp\left(-\frac{E_F - E_i}{k_0 T}\right) \right] = 2n_i \sinh\left(\frac{E_F - E_i}{k_0 T}\right) \quad (4.4.27)$$

解得

$$E_F = E_i + k_0 T \operatorname{asinh}\left(\frac{N_D}{2n_i}\right) \quad (4.4.28)$$

计算过渡区载流子浓度 n_0 和 p_0 ，可以联立方程Equation 4.3.6和Equation 4.4.20：

$$\begin{cases} p_0 = n_0 - N_D \\ n_0 p_0 = n_i^2 \end{cases} \quad (4.4.29)$$

消去 p_0 ：

$$n_0^2 - N_D n_0 - n_i^2 = 0 \quad (4.4.30)$$

取方程正根，解得：

$$n_0 = \frac{N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}}{2} = \frac{N_D}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2}} \right] \quad (4.4.31)$$

于是

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = \left(\frac{2n_i^2}{N_D} \right) \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2}} \right]^{-1} \quad (4.4.32)$$

当 $N_D \gg n_i$ 时, $\frac{4n_i^2}{N_D^2} \ll 1$, 将因子 $\sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2}}$ 级数展开到一次项:

$$\left(1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2} \right)^{\frac{1}{2}} = 1 + \frac{1}{2} \frac{4n_i^2}{N_D^2} + \mathcal{O} \left[\left(\frac{4n_i^2}{N_D^2} \right)^2 \right] \quad (4.4.33)$$

代入, 得:

$$n_0 = N_D + \frac{n_i^2}{N_D} \quad (4.4.34)$$

$$p_0 = n_0 - N_D \frac{n_i^2}{N_D} \quad (4.4.35)$$

当 $N_D \ll n_i$ 时

$$n_0 = \frac{N_D}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2}} \right] \quad (4.4.36)$$

$$= \frac{N_D}{2} + \left(\frac{N_D^2}{4} + n_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.4.37)$$

$$= \frac{N_D}{2} + n_i \left(1 + \frac{N_D^2}{4n_i^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.4.38)$$

此时由于 $N_D \ll n_i$, 有 $\frac{N_D^2}{4n_i^2} \ll 1$, 所以:

$$n_0 = \frac{N_D}{2} + n_i \quad (4.4.39)$$

$$p_0 = -\frac{N_D}{2} + n_i \quad (4.4.40)$$

n_0 和 p_0 数量相近, 均趋近于 n_i 。

5. 高温本征激发区

此时本征激发产生的本征载流子远多于杂质产生的载流子, 即 $n_0 \gg N_D$, $p_0 \gg N_D$ 。此时的电中性条件是:

$$n_0 = p_0 \quad (4.4.41)$$

与未掺杂的本征载流子情况一致。

6. p 型半导体的载流子浓度

受主浓度 N_A 的 p 型半导体, 取 $g_A = 4$, 与上面 n 型半导体的讨论相似, 可以得到以下结论:

1. 低温弱电离区：

$$E_F = \frac{E_v + E_A}{2} - \left(\frac{k_0 T}{2} \right) \ln \left(\frac{N_A}{4N_v} \right) \quad (4.4.42)$$

$$p_0 = \left(\frac{N_A N_v}{4} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left(-\frac{\Delta E_A}{2k_0 T} \right) \quad (4.4.43)$$

2. 强电离区：

$$E_F = E_v - k_0 T \ln \left(\frac{N_A}{N_v} \right) \quad (4.4.44)$$

$$p_0 = N_A \quad (4.4.45)$$

$$p_A = D_+ N_A \quad (4.4.46)$$

$$D_+ = \left(\frac{4N_A}{N_v} \right) \exp \left(\frac{\Delta E_A}{k_0 T} \right) \quad (4.4.47)$$

D_+ 是未电离受主杂质百分数。

3. 过渡区：

$$E_F = E_i - k_0 T \operatorname{asinh} \left(\frac{N_A}{2n_i} \right) \quad (4.4.48)$$

$$p_0 = \left(\frac{N_A}{2} \right) \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_A^2}} \right] \quad (4.4.49)$$

$$n_0 = \left(\frac{2n_i^2}{N_A} \right) \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4n_i^2}{N_A^2}} \right]^{-1} \quad (4.4.50)$$

7. 少数载流子浓度

n 型半导体中的电子和 p 型半导体中的空穴称为**多数载流子 (多子)**， n 型半导体中的空穴和 p 型半导体中的电子称为**少数载流子 (少子)**。

(1) n 型半导体：记 n_{n0} 为**热平衡下 n 型半导体电子 (多子) 浓度**， p_{n0} 为**热平衡下 n 型半导体空穴 (少子) 浓度**。多子浓度 $n_{n0} = N_D$ 。由 $n_{n0}p_{n0} = n_i^2$ 关系，得到少子浓度 p_{n0} ：

$$p_{n0} = \frac{n_i^2}{N_D} \quad (4.4.51)$$

(2) p 型半导体：记 p_{p0} 为**热平衡下 p 型半导体空穴 (多子) 浓度**， n_{p0} 为**热平衡下 p 型半导体电子 (少子) 浓度**。多子浓度 $p_{p0} = N_A$ ，由 $n_{p0}p_{p0} = n_i^2$ 关系，得到少子浓度 n_{p0} ：

$$n_{p0} = \frac{n_i^2}{N_A} \quad (4.4.52)$$

4.5 一般情况下的载流子分布

单位体积内有 n 个电子, p 个空穴, 电离施主浓度为 n_D^+ , 电离受主浓度为 p_A^- , 带电均为 q , 净空间电荷密度 ρ 为:

$$\rho = q(p + n_D^+ - n - p_A^-) \quad (4.5.1)$$

热平衡时:

$$\rho_0 = q(p_0 + n_D^+ - n_0 - p_A^-) \quad (4.5.2)$$

半导体电中性, 热平衡下有条件 $\rho_0 = 0$, 得:

$$p_0 + n_D^+ = n_0 + p_A^- \quad (4.5.3)$$

上式即含有一种受主杂质和一种受主杂质的半导体的电中性条件。半导体若存在若干受主杂质和施主杂质, 电中性条件改为:

$$p_0 + \sum_j n_{Dj}^+ = n_0 + \sum_i p_{Ai}^- \quad (4.5.4)$$

$\sum_j n_{Dj}^+$ 和 $\sum_i p_{Ai}^-$ 是对诸电离施主和受主杂质的求和。

由于 $n_D^+ = N_D - n_D$, $p_A^- = N_A - p_A$, 代入电中性条件Equation 4.5.3, 得:

$$p_0 + N_D + p_A = n_0 + N_A + n_D \quad (4.5.5)$$

将导带电子浓度 n_0 表达式Equation 4.2.15, 价带空穴浓度 p_0 表达式Equation 4.2.20, 施主能级上电子浓度 (未电离施主杂质)Equation 4.4.3, 受主能级上空穴浓度 (未电离受主浓度)Equation 4.4.4代入上式Equation 4.5.5, 并取 $g_D = 2$, $g_A = 4$, 得:

$$\begin{aligned} & N_D + N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{k_0 T}\right) + \frac{N_A}{1 + \frac{1}{4} \exp\left(-\frac{E_A - E_F}{k_0 T}\right)} \\ &= N_A + N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) + \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)} \end{aligned} \quad (4.5.6)$$

对于确定的半导体, N_A , N_D , E_c , E_v , E_A , E_D 已知, 一定温度下 N_c , N_v 也可计算得到, 即可通过这一关系确定 E_F 。

4.6 简并半导体

4.6.1 简并半导体的载流子浓度

对于前几节的讨论, 我们认为费米能级 E_F 在禁带中, 且 $E_c - E_F \gg k_0 T$ 或 $E_F - E_v \gg k_0 T$ 。此时导带电子和价带空穴服从玻尔兹曼分布, 浓度表达式:

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \quad (4.6.1)$$

$$p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right) \quad (4.6.2)$$

但当 E_F 接近或进入导带时, $E_c - E_F \gg k_0T$ 的条件不满足, 此时电子浓度需用费米分布函数计算。此时简并半导体电子浓度 n_0 为:

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} \frac{g_c(E)f(E)}{V} = \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2\hbar^3} \int_{E_c}^{\infty} \frac{(E - E_c)^{\frac{1}{2}}}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_0T}\right)} dE \quad (4.6.3)$$

我们仍设 $N_c = 2 \left(\frac{m_n^* k_0T}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{3}{2}} = 2 \frac{(2\pi m_n^* k_0T)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$, 并令

$$x = \frac{E - E_c}{k_0T}, \quad \xi = \frac{E_F - E_c}{k_0T} \quad (4.6.4)$$

则有:

$$n_0 = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}}}{1 + e^{x-\xi}} dx \quad (4.6.5)$$

其中积分

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{1}{2}}}{1 + e^{x-\xi}} dx = F_{\frac{1}{2}}(\xi) = F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_F - E_c}{k_0T}\right) \quad (4.6.6)$$

称为**费米积分**。 n_0 可写为:

$$n_0 = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{\frac{1}{2}}(\xi) = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_F - E_c}{k_0T}\right) \quad (4.6.7)$$

当 E_F 接近或进入价带时, 同理可得简并半导体价带空穴浓度为:

$$p_0 = N_v \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_v - E_F}{k_0T}\right) \quad (4.6.8)$$

4.6.2 简并化条件

经典统计中 $\frac{n_0}{N_c}$ 与 $\frac{E_F - E_c}{k_0T}$ 关系:

$$\frac{n_0}{N_c} = \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_0T}\right) \quad (4.6.9)$$

在费米统计中, 则是:

$$\frac{n_0}{N_c} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_F - E_c}{k_0T}\right) \quad (4.6.10)$$

取对数坐标系, **Figure 4.1**可以看出费米统计与经典统计曲线的差别。我们将 E_F 与 E_c 的相对位置作为区分简并与非简并的标准:

$$\begin{cases} E_c - E_F > 2k_0T & \text{非简并} \\ 0 < E_c - E_F \leq 2k_0T & \text{弱简并} \\ E_c - E_F \leq 0 & \text{简并} \end{cases} \quad (4.6.11)$$

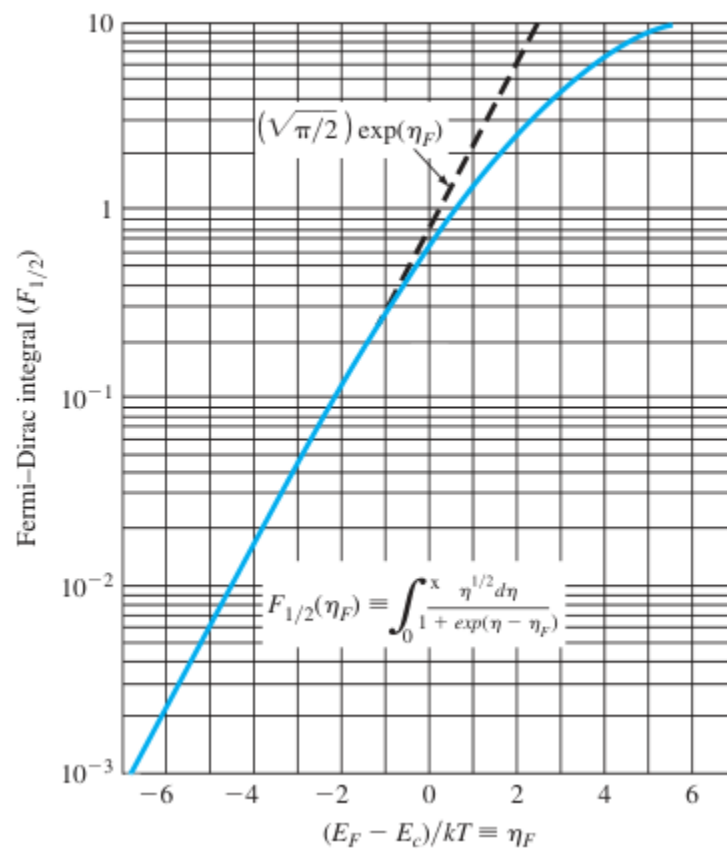


Figure 4.1: 费米统计与经典统计比较

Chapter 5

半导体的导电性

5.1 载流子的漂移运动和迁移率

5.1.1 欧姆定律

电阻为 R 的导体两端施加电压 V ，电流为

$$I = \frac{V}{R} \quad (5.1.1)$$

电阻 R 与导体的长度 l 成正比，与截面积 s 成反比：

$$R = \rho \frac{l}{s} \quad (5.1.2)$$

ρ 为导体的**电阻率**，国际单位 $[\rho] = \Omega \cdot \text{m}$ ，常用单位为 $\Omega \cdot \text{cm}$ 。电阻率的倒数为电导率 σ ：

$$\sigma = \frac{1}{\rho} \quad (5.1.3)$$

单位为 S/m 或 S/cm 。

电流密度 J 是通过垂直于电流方向的单位面积截面的电流：

$$J = \frac{\Delta I}{\Delta s} \quad (5.1.4)$$

J 是一个矢量，单位为 A/m^2 或 A/cm^2

一段长 l ，截面 s ，电阻率 ρ 的均匀导体，两端加电压 V ，导体内部电场 \mathcal{E} 大小

$$\mathcal{E} = \frac{V}{l} \quad (5.1.5)$$

对均匀导体，电流密度

$$J = \frac{I}{s} \quad (5.1.6)$$

将Equation 5.1.5, Equation 5.1.6和Equation 5.1.2代入Equation 5.1.1, 得:

$$sJ = \frac{\mathcal{E}l}{\rho_s^{-1}} \quad (5.1.7)$$

化简得:

$$J = \sigma \mathcal{E} \quad (5.1.8)$$

上式即欧姆定律微分形式。

5.1.2 漂移速度和迁移率

外加电压下, 导体电子受电场力作用, 沿电场反方向作定向运动形成电流。这种定向运动称为**漂移运动**, 定向运动的速度称为**漂移速度**。用 \bar{v}_d 表示漂移速度。

导体的任一截面 A, 设 n 为电子浓度, 则单位时间通过的电子数

$$nq\bar{v}_d dts$$

则电流为

$$I = -\frac{nq\bar{v}_d dts}{dt} = -nq\bar{v}_d s \quad (5.1.9)$$

电流密度为

$$J = \frac{I}{s} = -nq\bar{v}_d \quad (5.1.10)$$

恒定电场下, 漂移速度与电场强度成正比:

$$\bar{v}_d = \mu \mathcal{E} \quad (5.1.11)$$

μ 为电子的**迁移率**, 表示单位电场下电子平均漂移速度, 单位 $\text{m}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 或 $\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 。 μ 习惯上只取正值:

$$\mu = \left| \frac{\bar{v}_d}{\mathcal{E}} \right| \quad (5.1.12)$$

代入电流密度:

$$J = nq\mu \mathcal{E} \quad (5.1.13)$$

比较微分形式欧姆定律Equation 5.1.8, 得到电导率:

$$\sigma = nq\mu \quad (5.1.14)$$

上式即电导率和迁移率的关系。

5.1.3 半导体电导率和迁移率

半导体中同时存在着电子和空穴，记 J_n 为电子电流密度， J_p 为空穴电流密度， n , p 分别为电子和空穴浓度，则总电流密度：

$$J = J_n + J_p = (nq\mu_n + pq\mu_p) \mathcal{E} \quad (5.1.15)$$

电导率为

$$\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p \quad (5.1.16)$$

若两种载流子浓度悬殊，迁移率差别不大，则电导率主要取决于多数载流子：

1. 对 n 型半导体， $n \gg p$ ，空穴对电流的贡献可以忽略，电导率为：

$$\sigma = nq\mu_n \quad (5.1.17)$$

2. 对 p 型半导体， $p \gg n$ ，电导率为：

$$\sigma = pq\mu_p \quad (5.1.18)$$

对于本征半导体，有 $n = p = n_i$ ，电导率为

$$\sigma_i = n_i q (\mu_n + \mu_p) \quad (5.1.19)$$

5.2 载流子的散射

半导体内的载流子不断进行着**热运动**。热运动的载流子与晶格原子或电离杂质离子发生碰撞，其速度大小和方向会发生改变，即遭到**散射**。载流子在两次散射之间自由运动的平均路程称为**平均自由程**，平均时间称为**平均自由时间**。

5.3 迁移率与杂质浓度和温度的关系

5.3.1 平均自由时间与散射概率的关系

记载流子的平均自由时间为 τ 。设 0 时刻有 N_0 个电子以速度 v 沿某方向运动， $N(t)$ 为 t 时刻未散射的电子数。电子受到散射的概率为 P ， Δt 时间内被散射电子数为：

$$N(t)P\Delta t$$

故 t 时刻未散射电子数 $N(t)$ 比 $t + \Delta t$ 时刻未散射电子数 $N(t + \Delta t)$ 多 $N(t)P\Delta t$ ：

$$N(t) - N(t + \Delta t) = N(t)P\Delta t \quad (5.3.1)$$

当 $\Delta t \rightarrow dt$ 时：

$$\frac{dN}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{N(t) - N(t + \Delta t)}{\Delta t} = -PN(t) \quad (5.3.2)$$

解这个微分方程，得：

$$N(t) = N_0 e^{-Pt} \quad (5.3.3)$$

故 t 到 $t + dt$ 时刻内被散射的电子数为：

$$N_0 P e^{-P t} dt$$

在 t 到 $t + dt$ 时刻内散射的电子的自由时间均为 t ，这些电子自由时间的总和为 $N_0 P e^{-P t} t dt$ 。将它为全部时间积分再除以 N_0 即平均自由时间。故平均自由时间有：

$$\tau = \frac{1}{N_0} \int_0^{\infty} N_0 P e^{-P t} t dt = \int_0^{\infty} P e^{-P t} t dt = \frac{1}{P} \quad (5.3.4)$$

即平均自由时间等于散射概率的倒数。

5.3.2 电导率、迁移率和平均自由时间的关系

电子在 0 时刻受到散射后沿 x 方向速度为 v_{x0} ，经 t 时刻再受到散射，此时速度为：

$$v_x = v_{x0} + at = v_{x0} - \frac{q}{m_n^*} \mathcal{E} t \quad (5.3.5)$$

故按上节的分析， N_0 个电子的平均漂移速度 \bar{v}_x 为：

$$\bar{v}_x = \bar{v}_{x0} - \frac{1}{N_0} \int_0^{\infty} \frac{q}{m_n^*} \mathcal{E} t N_0 P e^{-P t} dt \quad (5.3.6)$$

$$= \bar{v}_{x0} - \int_0^{\infty} \frac{q}{m_n^*} \mathcal{E} t P e^{-P t} dt \quad (5.3.7)$$

由于 0 时刻速度 v_0 方向随机，故 v_0 在 x 方向上的平均值 $\bar{v}_{x0} = 0$ 。所以：

$$\bar{v}_x = - \int_0^{\infty} \frac{q}{m_n^*} \mathcal{E} t P e^{-P t} dt = - \frac{q \mathcal{E}}{m_n^*} \tau_n \quad (5.3.8)$$

τ_n 为电子平均自由时间。

根据迁移率定义：

$$\mu = \frac{|\bar{v}_x|}{\mathcal{E}} \quad (5.3.9)$$

得电子迁移率：

$$\mu_n = \frac{q \tau_n}{m_n^*} \quad (5.3.10)$$

同理，空穴迁移率：

$$\mu_p = \frac{q \tau_p}{m_p^*} \quad (5.3.11)$$

n 型材料的电导率：

$$\sigma_n = n q \mu_n = \frac{n q^2 \tau_n}{m_n^*} \quad (5.3.12)$$

p 型材料电导率：

$$\sigma_p = p q \mu_p = \frac{p q^2 \tau_p}{m_p^*} \quad (5.3.13)$$

混合型材料电导率：

$$\sigma = n q \mu_n + p q \mu_p = \frac{n q^2 \tau_n}{m_n^*} + \frac{p q^2 \tau_p}{m_p^*} \quad (5.3.14)$$

5.3.3 电导有效质量

对于等能面为旋转椭球面的多极值半导体，其晶体沿不同方向有效质量不同。

以 Si 为例，Si 的导带等能面如Figure 2.1所示。椭圆长轴沿 $\langle 1\ 0\ 0 \rangle$ 方向。横向有效质量为 m_t ，纵向有效质量为 m_l 。取 x 轴，y 轴，z 轴分别沿 $[1\ 0\ 0]$ ， $[0\ 1\ 0]$ ， $[0\ 0\ 1]$ 方向。设电场强度 \mathcal{E} 沿 x 轴方向，则电子沿 $[1\ 0\ 0]$ 方向的迁移率 $\mu_1 = \frac{q\tau_n}{m_l}$ ，其他方向电子迁移率为 $\mu_2 = \mu_3 = \frac{q\tau_n}{m_t}$ 。设电子浓度为 n ，平均每个能谷单位体积中有 $\frac{n}{6}$ 个电子，则电流密度 J_x 为：

$$J_x = \frac{1}{3}nq(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3)\mathcal{E} \quad (5.3.15)$$

令：

$$J_x = nq\mu_c\mathcal{E} \quad (5.3.16)$$

μ_c 为电导迁移率。比较上两式，得：

$$\mu_c = \frac{1}{3}(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3) \quad (5.3.17)$$

μ_c 可以写成

$$\mu_c = \frac{q\tau_n}{m_c} \quad (5.3.18)$$

即：

$$\frac{q\tau_n}{m_c} = \frac{1}{3}(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3) \quad (5.3.19)$$

$$= \frac{1}{3} \left(\frac{q\tau_n}{m_l} + \frac{2q\tau_n}{m_t} \right) \quad (5.3.20)$$

故有：

$$\frac{1}{m_c} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right) \quad (5.3.21)$$

m_c 即为电导有效质量。

5.3.4 电阻率

由Equation 5.1.3可知，电阻率是电导率的倒数：

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{nq\mu_n + pq\mu_p} \quad (5.3.22)$$

对于 n 型半导体：

$$\rho_n = \frac{1}{nq\mu_n} \quad (5.3.23)$$

p 型半导体：

$$\rho_p = \frac{1}{pq\mu_p} \quad (5.3.24)$$

本征半导体：

$$\rho_i = \frac{1}{n_i q(\mu_n + \mu_p)} \quad (5.3.25)$$

Chapter 6

非平衡载流子

6.1 非平衡载流子的注入和复合

处于热平衡下的载流子浓度称为**平衡载流子浓度**。一般用 n_0 和 p_0 分别表示平衡电子浓度和空穴浓度。非简并条件下，其乘积满足关系：

$$n_0 p_0 = N_v N_c \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right) = n_i^2 \quad (6.1.1)$$

对半导体施加外界作用，破坏热平衡条件，使半导体处于与热平衡偏离的状态，称为**非平衡状态**。处于非平衡状态的半导体，其载流子浓度不再为 n_0 和 p_0 ，而会多出一部分。比平衡状态多出的载流子称为**非平衡载流子**或**过剩载流子**。

一定温度下，**n** 型半导体中， $n_0 \gg p_0$ ，用适当波长的光照射半导体，且光子能量大于半导体的禁带宽度，则光子可以将价带电子激发到导带上，形成电子-空穴对，导带比平衡时多出 Δn 的电子，即**非平衡电子**，称为**非平衡多数载流子 (多子)**；价带多出 Δp 的空穴，即**非平衡空穴**，称为**非平衡少数载流子 (少子)**。这种通过光照产生非平衡载流子的方法，称为非平衡载流子的**光注入**。光注入时有：

$$\Delta n = \Delta p \quad (6.1.2)$$

一般情况下，注入的非平衡载流子浓度比平衡时的多数载流子浓度小得多。对上述情况，有：

$$\Delta n \ll n_0, \quad \Delta p \ll p_0 \quad (6.1.3)$$

满足此条件的注入称为**小注入**。在小注入条件下，非平衡少子的浓度也可以比平衡少子的浓度大得多，如上例中有 $\Delta p \gg p_0$ 。非平衡少子常常会起决定性作用。通常所说的非平衡载流子都指非平衡少子。

光注入导致半导体的电导率增大。附加电导率为：

$$\Delta\sigma = \Delta n q \mu_n + \Delta p q \mu_p = \Delta p q (\mu_n + \mu_p) \quad (6.1.4)$$

设半导体平衡电导率为 σ_0 ，光照引起附加电导率 $\Delta\sigma$ ，小注入条件下 $\sigma_0 + \Delta\sigma \approx \sigma_0$ ，电阻率改变：

$$\Delta\rho = \frac{1}{\sigma} - \frac{1}{\sigma_0} = \frac{1}{\sigma_0 + \Delta\sigma} - \frac{1}{\sigma_0} = -\frac{\Delta\sigma}{(\sigma_0 + \Delta\sigma)\sigma_0} \approx -\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0^2} \quad (6.1.5)$$


半导体电阻改变：

$$\Delta r = \Delta \rho \frac{l}{s} \approx -\frac{l}{s\sigma_0^2} \Delta \sigma \quad (6.1.6)$$

l, s 为半导体的长度和截面积。因此 $\Delta r \propto \Delta \sigma$ 。半导体通电时，由于电势差 $\Delta V = I\Delta r$ ，故 $\Delta V \propto \Delta \sigma$ ，因此 $\Delta V \propto \Delta p$ ：

$$\Delta V = -\frac{l}{s\sigma^2} Iq(\mu_n + \mu_p)\Delta p \quad (6.1.7)$$

6.2 非平衡载流子的寿命

小注入时， ΔV 的变化反映了 Δp 的变化。光照停止后， Δp 随时间按指数减小。非平衡载流子的平均生存时间称为载流子的**寿命**，用 τ 表示（上章有个叫平均自由时间的物理量也记成 τ ）。

由于非平衡少子相比多子更占主导地位，因此非平衡载流子的寿命常称为**少子的寿命**。显然 $\frac{1}{\tau}$ 是单位时间内非平衡载流子的复合概率。通常将单位时间单位体积内净复合消失的电子-空穴对数称为非平衡载流子的**复合率**。显然， $\frac{\Delta p}{\tau}$ 就是复合率。

一束光在一块 n 型半导体内均匀产生非平衡载流子 Δn 和 Δp 。 $t = 0$ 时光照停止， Δp 会随时间变化，单位时间内浓度减小 $-\frac{d\Delta p(t)}{dt}$ ，减小是由电子-空穴对的复合引起的，应当等于非平衡载流子的复合率：

$$\frac{d\Delta p(t)}{dt} = -\frac{\Delta p}{\tau} \quad (6.2.1)$$

寿命 τ 在小注入条件下是个恒量，与 $\Delta p(t)$ 无关。解这个微分方程：

$$\Delta p(t) = Ce^{-\frac{t}{\tau}} \quad (6.2.2)$$

设 $t = 0$ 时刻停止光照时少子浓度 $\Delta p(0) = \Delta p_0$ ，作为边界条件代入微分方程，解得系数为 $C = \Delta p_0$ ，故：

$$\Delta p(t) = \Delta p_0 e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (6.2.3)$$

即非平衡载流子浓度随时间按指数衰减。

6.3 准费米能级

热平衡下的半导体中电子和空穴具有统一的费米能级。非简并条件下：

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right), \quad p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right) \quad (6.3.1)$$

外界影响下破坏了热平衡，非平衡态的半导体不再具有统一的费米能级。我们认为价带和导带中的电子与空穴各自处于平衡状态，但价带与导带之间不处于平衡态。因此可以分别引入**导带费米能级**和**价带费米能级**，均为**局部费米能级**，称为**准费米能级**。导带费米能级也称为**电子准费米能级**，用 E_{Fn} 表示，价带准费米能级也称为**空穴准费米能级**，用 E_{Fp} 表示。

非平衡下的载流子浓度可以用与平衡载流子浓度类似公式表达：

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fn}}{k_0 T}\right), \quad p = N_v \exp\left(-\frac{E_{Fp} - E_v}{k_0 T}\right) \quad (6.3.2)$$

上式适用的条件与平衡态载流子相同，即 E_{Fn} 和 E_{Fp} 不能进入导带或价带。参考Equation 6.3.1，可以推导出 n 与 n_0 ， p 与 p_0 的关系：

$$\begin{aligned} n &= N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fn}}{k_0 T}\right) \\ &= N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_F}{k_0 T}\right) \end{aligned} \quad (6.3.3)$$

$$\begin{aligned} &= n_0 \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_F}{k_0 T}\right) \\ p &= N_v \exp\left(-\frac{E_{Fp} - E_v}{k_0 T}\right) \\ &= N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right) \exp\left(\frac{E_F - E_{Fp}}{k_0 T}\right) \\ &= p_0 \exp\left(\frac{E_F - E_{Fp}}{k_0 T}\right) \end{aligned} \quad (6.3.4)$$

由

$$n_0 = n_i \exp\left(-\frac{E_i - E_F}{k_0 T}\right), \quad p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_0 T}\right) \quad (6.3.5)$$

进一步推导：

$$\begin{aligned} n &= n_0 \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_F}{k_0 T}\right) \\ &= n_i \exp\left(-\frac{E_i - E_F}{k_0 T}\right) \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_F}{k_0 T}\right) \\ &= n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_i}{k_0 T}\right) \end{aligned} \quad (6.3.6)$$

$$\begin{aligned} p &= p_0 \exp\left(\frac{E_F - E_{Fp}}{k_0 T}\right) \\ &= n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{k_0 T}\right) \exp\left(\frac{E_F - E_{Fp}}{k_0 T}\right) \\ &= n_i \exp\left(\frac{E_i - E_{Fp}}{k_0 T}\right) \end{aligned} \quad (6.3.7)$$

电子与空穴浓度的乘积：

$$np = n_0 p_0 \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{k_0 T}\right) \quad (6.3.8)$$

6.4 复合理论

6.4.1 载流子复合的分类

半导体复合的过程即半导体由非平衡态向平衡态过渡的过程。半导体的复合过程大致可分为：

1. 直接复合：电子在导带与价带间直接跃迁，实现电子与空穴的复合。
2. 间接复合：电子与空穴通过禁带能级复合。简介复合按照发生位置可以分为体内复合和表面复合。

载流子复合时会放出多余能量，放出能量的方法有：

1. 发射光子：伴随复合，伴有发光现象，称为发光复合或辐射复合。
2. 发射声子：载流子将多余能量传递给晶格，加强晶格振动。
3. 能量给予其他载流子，增大动能，称为俄歇 (Auger) 复合。

6.4.2 直接复合

半导体中同时存在着载流子的产生和复合两个过程。单位时间内产生的电子-空穴对数称为产生率，记为 G ，复合的电子-空穴对数称为复合率，记为 R 。

n, p 分别为电子和空穴浓度。单位体积，单位时间里，每个电子都有概率和空穴复合，复合概率与空穴浓度成正比，即每个电子复合的概率为 rp ， r 是比例系数。每个电子复合概率再乘以电子浓度就是全部电子的复合率，即：

$$R = rnp \quad (6.4.1)$$

比例系数 r 称为电子-空穴复合概率，它代表着所有电子和空穴复合概率的平均值。

载流子受激发的概率不受载流子浓度的影响，产生率在所有非简并情况下是相同的，即 G 仅与温度有关，和 n, p 无关。

热平衡时，产生率等于复合率： $P = G$ ，此时 $n = n_0, p = p_0$ ，因此得到 G 与 r 的关系：

$$G = P = rn_0p_0 = rn_i^2 \quad (6.4.2)$$

复合率减产生率即非平衡载流子的净复合率，得到净复合率 U_d 为：

$$U_d = R - G = rnp - rn_i^2 = r(np - n_i^2) \quad (6.4.3)$$

代入关系 $n = n_0 + \Delta n, p = p_0 + \Delta p, \Delta n = \Delta p$ ，得：

$$\begin{aligned} U_d &= r[(n_0 + \Delta n)(p_0 + \Delta p) - n_0p_0] \\ &= r(n_0\Delta p + p_0\Delta n + \Delta n\Delta p) \\ &= r(n_0 + p_0)\Delta p + r\Delta p^2 \end{aligned} \quad (6.4.4)$$

由于净复合率和载流子寿命存在关系：

$$U_d = \frac{\Delta p}{\tau} \quad (6.4.5)$$

得载流子寿命：

$$\tau = \frac{\Delta p}{U_d} = \frac{1}{r[(n_0 + p_0) + \Delta p]} \quad (6.4.6)$$

可见寿命 τ 不仅与平衡载流子浓度有关，也与非平衡载流子浓度有关。

在小注入条件下， $\Delta p \ll (n_0 + p_0)$ ，Equation 6.4.6 近似为：

$$\tau \approx \frac{1}{r(n_0 + p_0)} \quad (6.4.7)$$

对 n 型材料， $n_0 \gg p_0$ ，上式近似有

$$\tau \approx \frac{1}{rn_0} \quad (6.4.8)$$

寿命与非平衡载流子无关，与多数载流子成反比。

当 $\Delta p \gg n_0 + p_0$ 时，Equation 6.4.6 近似有：

$$\tau \approx \frac{1}{r\Delta p} \quad (6.4.9)$$

此时寿命与非平衡载流子成反比。

6.4.3 间接复合

半导体中的杂质和缺陷会促进非平衡载流子的复合过程，这些促进复合的杂质和缺陷称为**复合中心**。间接复合即非平衡载流子通过复合中心的复合。

记复合中心能级 E_t ，如Figure 6.1，能级 E_t 上的间接复合具有四个过程：

- (1) 俘获电子：复合中心能级 E_t 从导带俘获电子。
- (2) 发射电子：复合中心能级 E_t 上的电子被激发到导带。
- (3) 俘获空穴：电子由复合中心能级 E_t 落入价带，与空穴复合，可以看成复合中心能级 E_t 从价带俘获一个电子。
- (4) 发射空穴：价带电子激发到复合中心能级 E_t ，可以看出复合中心能级 E_t 向价带发射一个空穴。

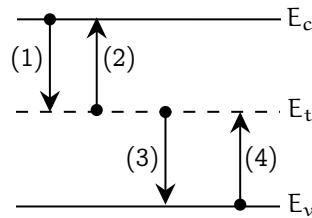


Figure 6.1: 复合中心能级 E_t 的四个间接复合过程

n 和 p 分别为导带电子和价带空穴浓度，设复合中心浓度为 N_t ，复合中心能级上的电子浓度为 n_t ，则未被电子占据的复合中心浓度为 $N_t - n_t$ 。

(1) 过程中，我们把单位体积、单位时间内内复合中心俘获的电子数称为**电子俘获率**。电子俘获率与导带电子浓度 n 和未被占据的复合中心浓度 $(N_t - n_t)$ 成正比：

$$\text{电子俘获率} = r_n n (N_t - n_t) \quad (6.4.10)$$

比例系数 r_n 是**电子俘获系数**，反映了复合中心平均俘获电子能力的大小。

(2) 过程是 (1) 过程的逆过程。我们用电子产生率表示单位时间、单位体积向导带发射的电子数。只有已被占据的复合中心才能向导带发射电子，导带近似认为是空的，因此电子产生率与 n_t 成正比，和 n 无关：

$$\text{电子产生率} = s_- n_t \quad (6.4.11)$$

s_- 称为**电子激发概率**，仅与温度有关。

平衡时，(1) 过程和 (2) 过程相互抵消，电子产生率等于电子俘获率：

$$r_n n_0 (N_t - n_{t0}) = s_- n_{t0} \quad (6.4.12)$$

n_0 和 n_{t0} 分别为平衡时导带和复合中心能级上的电子浓度。计算 n_{t0} 时，我们忽略分布函数中的简并因子：

$$n_{t0} = N_t f(E_t) = N_t \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_F}{k_0 T}\right)} \quad (6.4.13)$$

非简并条件下：

$$n_0 = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_0 T}\right) \quad (6.4.14)$$

将 n_0 和 n_{t0} 表达式代入Equation 6.4.12：

$$\begin{aligned} s_- N_t \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_F}{k_0 T}\right)} &= r_n N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_0 T}\right) N_t \left[1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_F}{k_0 T}\right)} \right] \\ \Rightarrow s_- &= r_n N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_0 T}\right) \exp\left(\frac{E_t - E_F}{k_0 T}\right) \\ \Rightarrow s_- &= r_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{k_0 T}\right) \end{aligned} \quad (6.4.15)$$

记：

$$n_1 = N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{k_0 T}\right) \quad (6.4.16)$$

n_1 等于费米能级与复合中心能级重合时导带电子平均浓度。代入：

$$s_- = r_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{k_0 T}\right) = r_n n_1 \quad (6.4.17)$$

将上式代入电子产生率中：

$$\text{电子产生率} = r_n n_1 n_t \quad (6.4.18)$$

(3) 过程中，空穴俘获率与 n_t 和 p 成正比：

$$\text{空穴俘获率} = r_p p n_t \quad (6.4.19)$$

r_p 称为**空穴俘获系数**，反映复合中心平均俘获空穴的能力。

(4) 过程是 (3) 的逆过程类似上文讨论，有：

$$\text{空穴产生率} = s_+ (N_t - n_t) \quad (6.4.20)$$

s_+ 为**空穴激发概率**。

平衡时，(3) 和 (4) 过程相互抵消：

$$s_+ (N_t - n_{t0}) = r_p p_0 n_{t0} \quad (6.4.21)$$

代入平衡时 p_0 和 n_{t0} 值，得：

$$s_+ = r_p p_1 \quad (6.4.22)$$

其中

$$p_1 = N_v \exp\left(-\frac{E_t - E_v}{k_0 T}\right) \quad (6.4.23)$$

p_1 等于费米能级和复合中心能级重合时价带的平衡空穴浓度。

将 s_+ 表达式代入空穴产生率，得：

$$\text{空穴产生率} = r_p p_1 (N_t - n_t) \quad (6.4.24)$$

在稳定情况下，(1) 到 (4) 过程满足复合中心上电子数不变，即 n_t 为常数。由于 (1) (4) 两个过程造成复合中心上电子累积，(2) (3) 两个过程造成复合中心上电子的减少，为保持 n_t 不变，满足：

$$(1) + (4) = (2) + (3) \quad (6.4.25)$$

代入Equation 6.4.10、Equation 6.4.18、Equation 6.4.19、Equation 6.4.24：

$$r_n n (N_t - n_t) + r_p p_1 (N_t - n_t) = r_n n_1 n_t + r_p p n_t \quad (6.4.26)$$

求解 n_t ，得：

$$n_t = N_t \frac{r_n n + r_p p_1}{r_n (n + n_1) + r_p (p + p_1)} \quad (6.4.27)$$

半导体的电子复合率为 (1) - (2)，空穴复合率为 (3) - (4) 由于电子和空穴成对出现，二者应相等，等于半导体的净复合率 U_d ：

$$U = (1) - (2) = (3) - (4) \quad (6.4.28)$$

将Equation 6.4.26代入上式：

$$U = N_t \frac{r_n r_p (np - n_1 p_1)}{r_n (n + n_1) + r_p (p + p_1)} \quad (6.4.29)$$

由于：

$$n_1 = N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{k_0 T}\right), \quad p_1 = N_v \exp\left(-\frac{E_t - E_v}{k_0 T}\right) \quad (6.4.30)$$

得到：

$$n_1 p_1 = N_c N_v \exp\left(\frac{E_v - E_c}{k_0 T}\right) = n_i^2 \quad (6.4.31)$$

代入Equation 6.4.29，得到非平衡载流子复合率：

$$U = N_t \frac{r_n r_p (np - n_i^2)}{r_n (n + n_1) + r_p (p + p_1)} \quad (6.4.32)$$

上式即通过复合中心复合的净复合率一般公式。

热平衡条件下， $np = n_0 p_0 = n_i^2$ ，代入Equation 6.4.32，显然有 $U = 0$ 。

对半导体注入非平衡载流子，有 $np > n_i^2$ ， $U > 0$ 。代入关系 $n = n_0 + \Delta n$ ， $p = p_0 + \Delta p$ ， $\Delta n = \Delta p$ ：

$$U = N_t \frac{r_n r_p (n_0 \Delta p + p_0 \Delta p + \Delta p^2)}{r_n (n_0 + n_1 + \Delta p) + r_p (p_0 + p_1 + \Delta p)} \quad (6.4.33)$$

非平衡载流子的寿命为：

$$\tau = \frac{\Delta p}{U} = \frac{r_n (n_0 + n_1 + \Delta p) + r_p (p_0 + p_1 + \Delta p)}{N_t r_n r_p (n_0 + p_0 + \Delta p)} \quad (6.4.34)$$

寿命 τ 和复合中心浓度 N_t 成反比。

在小注入条件下 $\Delta p \ll (n_0 + p_0)$ ，对于一般的复合中心， r_n 和 r_p 相差不大，分子和分母上的 Δp 可以忽略：

$$\tau = \frac{r_n (n_0 + n_1) + r_p (p_0 + p_1)}{N_t r_n r_p (n_0 + p_0)} \quad (6.4.35)$$

可见小注入条件下，寿命与非平衡载流子浓度无关。

对于 **n** 型半导体，假定复合中心能级 E_t 接近价带，并令 E_t 关于禁带中心对称的能级位置为 E'_t ， E_F 比 E'_t 更接近 E_c ，此时称为**强 n 型区**，满足 $n_0 \gg p_0$ ， $n_0 \gg n_1$ ， $n_0 \gg p_1$ ，寿命化为：

$$\tau = \tau_p \approx \frac{1}{N_t \tau_p} \quad (6.4.36)$$

因此在重掺杂的 **n** 型半导体中，对寿命起决定性作用的是复合中心对少数载流子（空穴）的俘获系数 r_p ，与电子俘获系数 r_n 无关。

若 E_F 在 E_i 和 E'_t 之间，称为**高阻区**。此时 $p_1 \gg n_0$ ， $p_1 \gg p_0$ ， $p_1 \gg n_1$ ，同时 $n_0 \gg p_0$ ，寿命：

$$\tau \approx \frac{p_1}{N_t r_n} \frac{1}{n_0} \quad (6.4.37)$$

高阻区中的寿命与多子浓度成反比，即与电导率成反比。

对于 **p** 型材料，仍假定 E_t 接近价带，当 E_F 比 E_t 更接近 E_v 时，称为**强 p 型区**，寿命为：

$$\tau = \tau_n \approx \frac{1}{N_t r_n} \quad (6.4.38)$$

可见复合中心对少子的俘获决定寿命。对**高阻区**，有：

$$\tau \approx \frac{p_1}{N_t r_n} \frac{1}{p_0} \quad (6.4.39)$$

若复合中心更接近导带，则高阻区的寿命公式中 $\frac{p_1}{r_n}$ 应当用 $\frac{n_1}{r_p}$ 代替。

将强 n 区寿命 Equation 6.4.36 和强 p 区寿命 Equation 6.4.38 代入非平衡载流子复合率 Equation 6.4.32，得：

$$\begin{aligned} U &= \frac{np - n_i^2}{\frac{1}{N_t r_p}(n + n_1) + \frac{1}{N_t r_n}(p + p_1)} \\ &= \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \end{aligned} \quad (6.4.40)$$

由于

$$n_1 = n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{k_0 T}\right), \quad p_1 = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_t}{k_0 T}\right) \quad (6.4.41)$$

代入：

$$U = \frac{np - n_i^2}{\tau_p \left[n + n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{k_0 T}\right) \right] + \tau_n \left[p + n_i \exp\left(\frac{E_i - E_t}{k_0 T}\right) \right]} \quad (6.4.42)$$

假定 $r = r_n = r_p$ ，则 $\tau_n = \tau_p = \frac{1}{N_t r}$ ，化简，得：

$$\begin{aligned} U &= \frac{N_t r (np - n_i^2)}{n + p + n_i \left[\exp\left(\frac{E_t - E_i}{k_0 T}\right) + \exp\left(-\frac{E_t - E_i}{k_0 T}\right) \right]} \\ &= \frac{N_t r (np - n_i^2)}{n + p + 2n_i \cosh\left(\frac{E_t - E_i}{k_0 T}\right)} \end{aligned} \quad (6.4.43)$$

可以看出， $E_t \approx E_i$ 时， $\cosh\left(\frac{E_t - E_i}{k_0 T}\right) \rightarrow \cosh(0) = 1$ 极小， U 趋于极大。如 Cu, Fe, Au 等杂质在 Si 中形成深能级，是有效的复合中心。远离禁带中央的浅能级不能起到有效的复合中心作用。

我们假设复合中心是具有一定半径的球体，其截面为 σ 。截面积越大，载流子运动中被复合中心俘获概率越大。因此可以用 σ 表示复合中心俘获载流子的本领，称为**俘获截面**。复合中心俘获电子和空穴的本领不同，因此分别用**电子俘获截面** σ_+ 和**空穴俘获截面** σ_- 来表示。

载流子热运动速度 v_T 越大，它被复合中心俘获的概率也就越大。按照统计力学计算，得到 $v_T = \sqrt{\frac{3k_0 T}{m^*}}$ 。若不区分电子和空穴有效质量，300 K 时，有 $v_T = 10^7$ cm/s。

俘获截面与俘获系数的关系有：

$$r_n = \sigma_- v_T, \quad r_p = \sigma_+ v_T \quad (6.4.44)$$

利用此关系，可将 Equation 6.4.42 重写为：

$$U = \frac{\sigma_+ \sigma_- v_T N_t (np - n_i^2)}{\sigma_- \left[n + n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{k_0 T}\right) \right] + \sigma_+ \left[p + n_i \exp\left(\frac{E_i - E_t}{k_0 T}\right) \right]} \quad (6.4.45)$$

实验表明, Mn, Fe, Co, Au, Cu, Ni 可以在 Ge 中形成复合中心; Au, Cu, Fe, Mn, In 可以在 Si 中形成复合中心。

6.4.4 表面复合

少子寿命很大程度上受半导体样品的形状和表面状态影响。**表面复合**指在半导体表面发生的复合过程。表面的杂质和缺陷在禁带形成复合中心能级, 因此表面复合仍是间接复合。

实际测得的寿命是体内复合和表面复合的综合结果。设这两种复合同时地单独平行发生, 记体内复合寿命为 τ_v , 则 $\frac{1}{\tau_v}$ 就是体内复合概率。记表面复合寿命为 τ_s , 则 $\frac{1}{\tau_s}$ 就是表面复合概率。总概率为:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_v} + \frac{1}{\tau_s} \quad (6.4.46)$$

τ 称为**有效寿命**。

把单位时间内通过单位表面积复合的电子-空穴对数称为**表面复合率**, 记 U_s 。表面复合率 U_s 与表面处非平衡载流子浓度 Δp_s 成正比:

$$U_s = s\Delta p_s \quad (6.4.47)$$

比例系数 s 表示表面复合的强弱, 量纲为速度, 称为**表面复合速度**。

6.5 陷阱效应

能级上的电子通过载流子的俘获和产生过程和载流子保持平衡。对于非平衡态的载流子, 这种平衡会受到破坏。电子增加, 说明能级有收容非平衡载流子的作用; 电子减少, 说明能级有收容空穴的作用。杂质能级积累非平衡载流子的作用称为**陷阱效应**。所有的杂质能级都有陷阱效应, 我们只考虑能够显著积累非平衡载流子的杂质能级。我们把具有显著陷阱效应的杂质能级称为**陷阱**, 相应的杂质和缺陷称为**陷阱中心**。

杂质能级上电子数如Equation 6.4.27。 n_t 与 Δn 和 Δp 有关, 小注入条件下, 杂质能级电子积累有:

$$\Delta n_t = \left(\frac{\partial n_t}{\partial n} \right)_0 \Delta n + \left(\frac{\partial n_t}{\partial p} \right)_0 \Delta p \quad (6.5.1)$$

下标 0 指取平衡情况的值。由于 Δn 和 Δp 是对称的, 我们只考虑其中任一项 (Δn) 的情况:

$$\Delta n_t = \frac{N_t r_n (r_n n_1 + r_p p_0)}{[r_n (n_0 + n_1) + r_p (p_0 + p_1)]^2} \Delta n \quad (6.5.2)$$

杂质能级俘获电子和空穴的能力区别不大, 令 $r_p = r_n$, 化简上式:

$$\Delta n_t = \left(\frac{N_t}{n_0 + n_1 + p_0 + p_1} \right) \left(\frac{n_1 + p_0}{n_0 + n_1 + p_0 + p_1} \right) \Delta n \quad (6.5.3)$$

第二项因子恒小于 1。因此, 要有显著的陷阱效应, 复合中心浓度 N_t 需要比平衡载流子浓度和 $n_0 + p_0$ 相当或者更大。在实际中吗, r_n 和 r_p 差别往往很大。当 $r_n \gg r_p$ 时, 陷阱俘获电子, 很

难俘获空穴，被俘后的电子往往在被复合前就会被热激发回到导带，这样的陷阱即**电子陷阱**。同理，如果 $r_p \gg r_n$ ，就是**空穴陷阱**。

对于电子陷阱，式Equation 6.5.2略去 r_p ，得：

$$\Delta n_t = \frac{N_t n_1}{(n_0 + n_1)^2} \Delta n \quad (6.5.4)$$

当 Δn 最大时的 n_1 为

$$n_1 = n_0 \quad (6.5.5)$$

此时 Δn_t 为：

$$\Delta n_t = \frac{N_t}{4n_0^2} \Delta n \quad (6.5.6)$$

上式说明，当杂质能级与费米能级重合时，最有利于陷阱作用。

6.6 载流子的扩散运动

对于一块均匀掺杂的载流子，载流子分布均匀，不会发生载流子的扩散运动。用光照射半导体，在材料表层会出现非平衡载流子。此时材料表层的非平衡载流子浓度比内部要高，从而引起载流子从表层向内部扩散。我们具体考虑空穴的扩散运动。

在一维情况下，非平衡载流子浓度仅随 x 变化，浓度变化为 $\Delta p(x)$ ，在 x 方向上，有：

$$\text{浓度梯度} = \frac{d\Delta p(x)}{dx} \quad (6.6.1)$$

单位时间通过单位面积的电子数称为**扩散流密度**，记作 S 。扩散流密度与浓度梯度成正比。记 S_p 为空穴扩散流密度，有：

$$S_p = -D_p \frac{d\Delta p(x)}{dx} \quad (6.6.2)$$

比例系数 D_p 为**空穴扩散系数**，单位 cm^2/s ，反映了非平衡少子扩散本领的大小。式中的负号指空穴由浓度高的地方向浓度低的地方扩散。上式即空穴的扩散定律。

若用恒定光照半导体，表面处的非平衡载流子浓度是恒定值 Δp_0 。这种情况称为**稳定扩散**。

一般情况下，扩散流密度 S_p 也会随位置 x 而变化。因此，单位时间在单位体积内积累的空穴数为：

$$-\frac{dS_p(x)}{dx} = D_p \frac{d^2\Delta p(x)}{dx^2} \quad (6.6.3)$$

稳定情况下，它等于单位时间单位体积内复合空穴数 $\frac{\Delta p}{\tau}$ ：

$$D_p \frac{d^2\Delta p(x)}{dx^2} = \frac{\Delta p(x)}{\tau} \quad (6.6.4)$$

上式即一维稳定扩散下非平衡少子扩散方程，即**稳态扩散方程**。方程的通解：

$$\Delta p(x) = A \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right) + B \exp\left(\frac{x}{L_p}\right) \quad (6.6.5)$$

其中

$$L_p = \sqrt{D_p \tau} \quad (6.6.6)$$

我们讨论在不同条件下解的具体形式：

1. 样品足够厚

此时载流子未到达样品另一端，已基本消失。此时， $x \rightarrow \infty$ 时， $\Delta p \rightarrow 0$ 。代入边界条件，易得 $B = 0$ 。此时有：

$$\Delta p(x) = A \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right) \quad (6.6.7)$$

$x = 0$ 时， $\Delta p(0) = \Delta p_0$ ，代入得到 $A = \Delta p_0$ ，故有：

$$\Delta p(x) = \Delta p_0 \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right) \quad (6.6.8)$$

这表明，非平衡少数浓度从表面浓度 Δp_0 开始，到内部按指数衰减。 L_p 是空穴复合直到浓度减少到原浓度的 $\frac{1}{e}$ 的扩散距离。载流子平均扩散距离：

$$\bar{x} = \frac{\int_0^\infty x \Delta p(x) dx}{\int_0^\infty \Delta p(x) dx} = \frac{\int_0^\infty x \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right) dx}{\int_0^\infty \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right) dx} = L_p \quad (6.6.9)$$

即 L_p 是载流子深入半导体的平均距离，称**扩散长度**。扩散长度由扩散系数和材料寿命决定。将 **Equation 6.6.8** 代入 **Equation 6.6.2**，得：

$$S_p = \frac{D_p}{L_p} \Delta p_0 \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right) = \frac{D_p}{L_p} \Delta p(x) \quad (6.6.10)$$

材料表面处的空穴扩散流密度为 $\Delta p_0 \left(\frac{D_p}{L_p}\right)$ 。

2. 样品厚度一定

样品厚度为 W ，在样品的另一端非平衡少数全部引出。边界条件有：

$$x = 0 \text{ 处, } \Delta p(x) = \Delta p_0 \quad (6.6.11)$$

$$x = W \text{ 处, } \Delta p(x) = 0 \quad (6.6.12)$$

代入边界条件，得：

$$\begin{cases} A + B = \Delta p_0 \\ A \exp\left(-\frac{W}{L_p}\right) + B \exp\left(\frac{W}{L_p}\right) = 0 \end{cases} \quad (6.6.13)$$

解方程组，得：

$$\begin{cases} A = \Delta p_0 \frac{\exp\left(\frac{W}{L_p}\right)}{\exp\left(\frac{W}{L_p}\right) - \exp\left(-\frac{W}{L_p}\right)} = \Delta p_0 \frac{\exp\left(\frac{W}{L_p}\right)}{\sinh\left(\frac{W}{L_p}\right)} \\ B = -\Delta p_0 \frac{\exp\left(-\frac{W}{L_p}\right)}{\exp\left(\frac{W}{L_p}\right) - \exp\left(-\frac{W}{L_p}\right)} = -\Delta p_0 \frac{\exp\left(-\frac{W}{L_p}\right)}{\sinh\left(\frac{W}{L_p}\right)} \end{cases} \quad (6.6.14)$$

故有：

$$\Delta p(x) = \Delta p_0 \frac{\sinh\left(\frac{W-x}{L_p}\right)}{\sinh\left(\frac{W}{L_p}\right)} \quad (6.6.15)$$

$W \ll L_p$ 时，上式化为：

$$\Delta p(x) = \Delta p_0 \frac{\frac{W-x}{L_p}}{\frac{W}{L_p}} = \Delta p_0 \left(1 - \frac{x}{W}\right) \quad (6.6.16)$$

此时，非平衡载流子浓度在样品内线性分布，浓度梯度：

$$\frac{d\Delta p(x)}{dx} = -\frac{\Delta p_0}{W} \quad (6.6.17)$$

扩散流密度：

$$S_p = -D_p \frac{d\Delta p}{dx} = \frac{\Delta p_0 D_p}{W} \quad (6.6.18)$$

扩散流密度是个常数，也就是说非平衡载流子在材料中没有复合。

对于电子，扩散定律为：

$$S_n = -D_n \frac{d\Delta n(x)}{dx} \quad (6.6.19)$$

S_n 为电子扩散流密度， D_n 为电子扩散系数。稳态扩散方程为：

$$D_n \frac{d^2 \Delta n(x)}{dx^2} = \frac{\Delta n(x)}{\tau} \quad (6.6.20)$$

载流子的扩散运动会形成电流，即**扩散电流**。空穴扩散电流密度为：

$$(J_p)_{\text{Diffusion}} = -q D_p \frac{d\Delta p(x)}{dx} \quad (6.6.21)$$

电子扩散电流密度为：

$$(J_n)_{\text{Diffusion}} = q D_n \frac{d\Delta n(x)}{dx} \quad (6.6.22)$$

对于高维情况，非平衡载流子浓度与 x, y, z 三个维度有关。此时的浓度梯度矢量为 $\nabla(\Delta p)$ 。载流子 (空穴) 的扩散定律为：

$$\mathbf{S}_p = -D_p \nabla(\Delta p) \quad (6.6.23)$$

稳态扩散方程为：

$$D_p \nabla^2(\Delta p) = \frac{\Delta p}{\tau} \quad (6.6.24)$$

此时的空穴扩散电流密度为：

$$(J_p)_{\text{Diffusion}} = -q D_p \nabla(\Delta p) \quad (6.6.25)$$

类似地，电子扩散电流密度为：

$$(J_p)_{\text{Diffusion}} = q D_n \nabla(\Delta n) \quad (6.6.26)$$

6.7 载流子的漂移扩散 爱因斯坦关系式

外加电场时，如果存在非平衡载流子，在外加电场下也会做漂移运动，产生漂移电流。若外加电场为 \mathcal{E} ，则电子漂移电流为：

$$(J_n)_{\text{Drift}} = q(n_0 + \Delta n)\mu_n \mathcal{E} = qn\mu_n \mathcal{E} \quad (6.7.1)$$

空穴漂移电流为：

$$(J_p)_{\text{Drift}} = q(p_0 + \Delta p)\mu_p \mathcal{E} = qp\mu_p \mathcal{E} \quad (6.7.2)$$

如果半导体中非平衡载流子的浓度分布不均匀，同时存在外加电场的作用，会同时存在扩散电流和漂移电流。此时的总电流是扩散电流和漂移电流的叠加。对于一块 n 型半导体，沿 x 方向外加电场，同时在表面光注入非平衡载流子，少数空穴的电流密度为：

$$J_p = (J_p)_{\text{Diffusion}} + (J_p)_{\text{Drift}} = qp\mu_p \mathcal{E} - qD_p \frac{d\Delta p}{dx} \quad (6.7.3)$$

电子电流密度：

$$J_n = (J_n)_{\text{Diffusion}} + (J_n)_{\text{Drift}} = qn\mu_n \mathcal{E} + qD_n \frac{d\Delta n}{dx} \quad (6.7.4)$$

显然，迁移率反映了载流子在电场下运动的难易，扩散系数反映了浓度梯度下载流子扩散运动的难易。

考虑一块热平衡下的非均匀 n 型半导体，施主杂质浓度随 x 增大而下降，电子和空穴浓度都是 x 的函数，记 $n_0(x)$ 和 $p_0(x)$ 。由于浓度梯度存在，载流子沿 x 方向扩散，产生扩散电流。电子扩散电流密度为：

$$(J_n)_{\text{Diffusion}} = qD_n \frac{dn_0(x)}{dx} \quad (6.7.5)$$

空穴扩散电流密度为：

$$(J_p)_{\text{Diffusion}} = -qD_p \frac{dp_0(x)}{dx} \quad (6.7.6)$$

由于电离杂质不能移动，载流子扩散运动使载流子有均匀分布的趋势，使得半导体内部不再处处保持电中性，体内会存在电场 \mathcal{E} 。电场使载流子产生漂移电流：

$$(J_n)_{\text{Drift}} = n_0(x)q\mu_n \mathcal{E} \quad (6.7.7)$$

$$(J_p)_{\text{Drift}} = p_0(x)q\mu_p \mathcal{E} \quad (6.7.8)$$

然而热平衡下不存在宏观电流，因而总电流为 0：

$$J_n = (J_n)_{\text{Diffusion}} + (J_n)_{\text{Drift}} = 0 \quad (6.7.9)$$

$$J_p = (J_p)_{\text{Diffusion}} + (J_p)_{\text{Drift}} = 0 \quad (6.7.10)$$

将电子扩散电流密度 Equation 6.7.5 和电子漂移电流密度 Equation 6.7.7 代入 Equation 6.7.9，得：

$$n_0(x)\mu_n\mathcal{E} = -D_n \frac{dn_0(x)}{dx} \quad (6.7.11)$$

半导体内部有电场时，各处电势不相等，为 x 的函数，记 $V(x)$ ，有：

$$\mathcal{E} = -\frac{dV(x)}{dx} \quad (6.7.12)$$

考虑电子能量时，需计入电场产生的电势能 $-qV(x)$ ，故导带底能量为 $E_c - qV(x)$ ，也会随 x 变化。非简并情况下，电子浓度为：

$$n_0(x) = N_c \exp \left[\frac{E_F + qV(x) - E_c}{k_0T} \right] \quad (6.7.13)$$

对 x 求导，得：

$$\frac{dn_0(x)}{dx} = \frac{q}{k_0T} N_c \exp \left[\frac{E_F + qV(x) - E_c}{k_0T} \right] \frac{dV(x)}{dx} = n_0(x) \frac{q}{k_0T} \frac{dV(x)}{dx} \quad (6.7.14)$$

将 Equation 6.7.12 和 Equation 6.7.14 代入 Equation 6.7.11，得：

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_0T}{q} \quad (6.7.15)$$

同理，对于空穴有：

$$\frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_0T}{q} \quad (6.7.16)$$

Equation 6.7.15 和 Equation 6.7.16 称为**爱因斯坦关系**。它反映了非简并情况下载流子**迁移率**和**扩散系数**间的关系。通过爱因斯坦关系，可以由已知的迁移率得到扩散系数。

由 Equation 6.7.3 和 Equation 6.7.4，代入爱因斯坦关系 Equation 6.7.15 和 Equation 6.7.16，得到半导体总电流密度：

$$J = J_n + J_p = q\mu_p \left(p\mathcal{E} - \frac{k_0T}{q} \frac{dp}{dx} \right) + q\mu_n \left(n\mathcal{E} + \frac{k_0T}{q} \frac{dn}{dx} \right) \quad (6.7.17)$$

对于非均匀半导体，平衡半导体浓度是 x 的函数，扩散电流由载流子的总浓度梯度决定：

$$J = q\mu_p \left(p\mathcal{E} - \frac{k_0T}{q} \frac{dp}{dx} \right) + q\mu_n \left(n\mathcal{E} + \frac{k_0T}{q} \frac{dn}{dx} \right) \quad (6.7.18)$$

上式即半导体中同时存在扩散与漂移运动时的电流密度方程。

6.8 连续性方程

电动力学中，有电流连续性方程：

$$-\nabla \cdot \mathbf{J} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (6.8.1)$$

\mathbf{J} 为电流密度矢量， ρ 为导体内电荷密度。对于一维情况，有：

$$-\frac{\partial J}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (6.8.2)$$

两边同时除以电荷 q ：

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial J}{\partial x} = \frac{1}{q} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (6.8.3)$$

上式左边为单位时间在单位体积内积累的净载流子浓度，右边为单位体积内载流子浓度随时间的变化。对于半导体，如 n 型半导体的少子空穴，有：

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (6.8.4)$$

在一块 n 型半导体表面光注入非平衡载流子，同时存在 x 方向的电场 \mathcal{E} ，则少子空穴将同时做扩散和漂移运动。此时空穴浓度不仅是位置 x 的函数，也是时间 t 的函数。对于扩散运动，单位时间单位体积内积累的电荷数 $(N_p)_{\text{Diffusion}}$ 是：

$$(N_p)_{\text{Diffusion}} = -\frac{1}{q} \frac{\partial (J_p)_{\text{Diffusion}}}{\partial x} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} \quad (6.8.5)$$

漂移运动引起的单位时间单位体积内积累空穴数 $(N_p)_{\text{Drift}}$ 为：

$$(N_p)_{\text{Drift}} = -\frac{1}{q} \frac{\partial (J_p)_{\text{Drift}}}{\partial x} = -\mu_p \mathcal{E} \frac{\partial p}{\partial x} - \mu_p p \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} \quad (6.8.6)$$

在小注入条件下，单位时间单位体积内复合消失的空穴数为 $\frac{\Delta p}{\tau}$ 。 g_p 为外界因素导致的单位时间单位体积内的空穴变化，则单位体积内空穴随时间的变化率为：

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p \mathcal{E} \frac{\partial p}{\partial x} - \mu_p p \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} - \frac{\Delta p}{\tau} + g_p \quad (6.8.7)$$

上式即在漂移和扩散运动下少子运动方程，即**连续性方程**。

若光照稳定，有 $g_p = 0$ ， p 不随时间变化，即 $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$ ，此时连续性方程称为**稳态连续性方程**。

假设材料均匀，则平衡空穴浓度 p_0 与 x 无关，电场均匀， $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial x} = 0$ ，连续性方程变为：

$$D_p \frac{d^2 p}{dx^2} - \mu_p \mathcal{E} \frac{\partial \Delta p}{\partial x} - \frac{\Delta p}{\tau} = 0 \quad (6.8.8)$$

通解为：

$$\Delta p = A e^{\lambda_1 x} + B e^{\lambda_2 x} \quad (6.8.9)$$

λ_1 和 λ_2 为下面特征方程的两个根：

$$D_p \lambda^2 - \mu_p \mathcal{E} \lambda - \frac{1}{\tau} = 0 \quad (6.8.10)$$

令

$$L_p(\mathcal{E}) = \mathcal{E} \mu_p \tau \quad (6.8.11)$$

表示空穴在电场 \mathcal{E} 作用下在寿命 τ 时间内的漂移距离，称为空穴的**牵引长度**。根据 section 6.6 关于半导体扩散的讨论，半导体的扩散长度为：

$$L_p = \sqrt{D_p \tau} \quad (6.8.12)$$

则特征方程化为：

$$L_p^2 \lambda^2 - L_p(\mathcal{E}) \lambda - 1 = 0 \quad (6.8.13)$$

解得：

$$\lambda_1 = \frac{L_p(\mathcal{E}) + \sqrt{L_p^2(\mathcal{E}) + 4L_p^2}}{2L_p^2}, \quad \lambda_2 = \frac{L_p(\mathcal{E}) - \sqrt{L_p^2(\mathcal{E}) + 4L_p^2}}{2L_p^2} \quad (6.8.14)$$

显然， $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 < 0$ 。对于上文的注入情况，少子浓度随 x 衰减，故第一项为 0，即 $A = 0$ ，解化为：

$$\Delta p = B e^{\lambda_2 x} \quad (6.8.15)$$

$x = 0$ 时， $\Delta p = \Delta p_0$ ，解得 $B = \Delta p_0$ ，故：

$$\Delta p = \Delta p_0 e^{\lambda_2 x} = \Delta p_0 \exp \left(\frac{L_p(\mathcal{E}) - \sqrt{L_p^2(\mathcal{E}) + 4L_p^2}}{2L_p^2} x \right) \quad (6.8.16)$$

电场很强时，有 $L_p(\mathcal{E}) \gg L_p$ ，有：

$$\lambda_2 = \frac{L_p(\mathcal{E}) - L_p(\mathcal{E}) \left[1 + \frac{4L_p^2}{L_p^2(\mathcal{E})} \right]^{\frac{1}{2}}}{2L_p^2} = \frac{L_p(\mathcal{E}) - L_p(\mathcal{E}) \left[1 + \frac{2L_p^2}{L_p^2(\mathcal{E})} + \dots \right]}{2L_p^2} \approx -\frac{1}{L_p(\mathcal{E})} \quad (6.8.17)$$

代入 Δp ，得：

$$\Delta p = \Delta p_0 \exp \left(-\frac{x}{L_p(\mathcal{E})} \right) \quad (6.8.18)$$

上式说明，当电场很强，扩散运动可以忽略时，表面注入的非平衡浓度深入样本的平均距离为牵引长度 $L_p(\mathcal{E})$ 而不是扩散长度 L_p 。若电场很弱，有 $L_p(\mathcal{E}) \ll L_p$ ，有：

$$\lambda_2 \approx -\frac{1}{L_p}, \quad \Delta p = \Delta p_0 \exp \left(-\frac{x}{L_p} \right) \quad (6.8.19)$$

即扩散运动的衰减规律。

以下是几个关于连续性方程应用的例子：

1. 光激发载流子衰减

若光照在均匀半导体，内部均匀产生非平衡载流子，则 $\frac{\partial p}{\partial x} = 0$ 。假定没有电场，且 $g_p = 0$ 。
 $t = 0$ 时刻，光照停止，非平衡载流子复合消失，此时连续性方程变为：

$$\frac{\partial \Delta p}{\partial t} = -\frac{\Delta p}{\tau} \quad (6.8.20)$$

上式即非平衡载流子衰减时遵守的微分方程 **Equation 6.2.1**。

2. 少子脉冲在电场中的漂移

一块均匀的 n 型半导体，用局部光脉冲照射产生非平衡载流子。假定没有外加电场，脉冲停止后，连续性方程变为：

$$\frac{\partial \Delta p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x^2} - \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (6.8.21)$$

假定方程的解具有如下形式：

$$\Delta p = f(x, t) e^{-\frac{t}{\tau_p}} \quad (6.8.22)$$

反代入方程，得：

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 f(x, t)}{\partial x^2} \quad (6.8.23)$$

这是一维热传导方程。若 $t = 0$ 时过剩空穴只分布于 $x = 0$ 附近的窄区间内，则上面的热传导方程的解为：

$$f(x, t) = \frac{B}{\sqrt{t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4D_p t}\right) \quad (6.8.24)$$

B 为常数。代入 Δp 中，得：

$$\Delta p = \frac{B}{\sqrt{t}} \exp\left[-\left(\frac{x^2}{4D_p t} + \frac{t}{\tau}\right)\right] \quad (6.8.25)$$

对 x 在整个 x 轴上积分，再令 $t = 0$ 得到单位面积空穴数 N_p ：

$$B\sqrt{4\pi} = N_p \quad (6.8.26)$$

解得：

$$B = \frac{N_p}{\sqrt{4\pi D_p}} \quad (6.8.27)$$

最后有：

$$\Delta p = \frac{N_p}{\sqrt{4\pi D_p t}} \exp\left[-\left(\frac{x^2}{4D_p t} + \frac{t}{\tau}\right)\right] \quad (6.8.28)$$

加上均匀电场，连续性方程变为：

$$\frac{\partial \Delta p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x^2} - \mu_p \mathcal{E} \frac{\partial \Delta p}{\partial t} - \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (6.8.29)$$

类似地，可以解得：

$$\Delta p = \frac{N_p}{\sqrt{4\pi D_p t}} \exp\left[-\frac{(x - \mu_p \mathcal{E} t)^2}{4D_p t} - \frac{t}{\tau}\right] \quad (6.8.30)$$

3. 稳态下的表面复合

稳定光照一块均匀掺杂的 n 型半导体，均匀产生非平衡载流子，产生率为 g_p 。达到稳态时，有 $\Delta p = p - p_0 = \tau_p g_p$ 。在另一端存在表面复合，面上的过剩空穴浓度比体内低，空穴趋向于向此面扩散。此时空穴连续性方程为：

$$D_p \frac{\partial^2 \Delta p(x)}{\partial x^2} - \frac{\Delta p}{\tau_p} + g_p = 0 \quad (6.8.31)$$

设表面复合的面在 $x = 0$ 处，则边界条件满足：

$$\Delta p(\infty) = \tau_p g_p \quad (6.8.32)$$

$$D_p \left. \frac{\partial \Delta p(x)}{\partial x} \right|_{x=0} = s_p [p(0) - p_0] \quad (6.8.33)$$

s_p 为表面复合速度， p_0 为平衡空穴浓度。解得：

$$p(x) = p_0 + \tau_p g_p \left[1 - \frac{s_p \tau_p}{L_p + s_p \tau_p} \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right) \right] \quad (6.8.34)$$

$s_p \rightarrow 0$ 时, $p(x) = p_0 + \tau_p g_p$, 空穴均匀分布。 $s_p \rightarrow \infty$ 时, $p(x) = p_0 + \tau_p g_p \left[1 - \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right) \right]$, 表面空穴浓度趋近于平衡浓度 p_0 。

在三维情况下，载流子在单位体积内的累积由电流密度的散度决定，即：

$$-\frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J} \quad (6.8.35)$$

故空穴连续性方程为：

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_p - \frac{\Delta p}{\tau_p} + g_p \quad (6.8.36)$$

电子连续性方程为：

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \mathbf{J}_n - \frac{\Delta n}{\tau_n} + g_n \quad (6.8.37)$$

以上即是本篇半导体笔记的全部内容。此外还有一章 **pn** 节的内容来不及整理 (期末考试也基本不考)，以后或许会补全。

riku☆0w0
二〇二三・ホーリーナイト



ありがとうございました！