

半导体★まほう

SEMICONDUCTORS NO MAHOU

るりこ☆

mygo@soyor.in

Institute of Toho Project



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 |

PREFACE



本 note 纯属作者自娱自乐，仅适用于学过热力学、统计物理学、量子力学、固体物理学的读者，没学完的便乘猫娘.

るりこ☆
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。

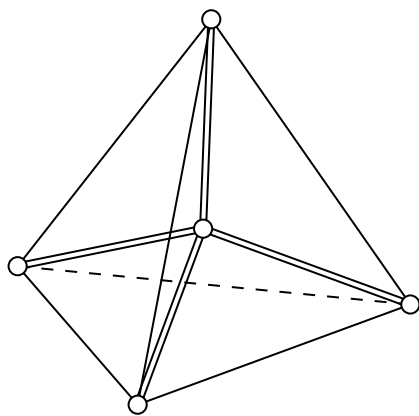


Figure 1.1: 正四面体结构

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

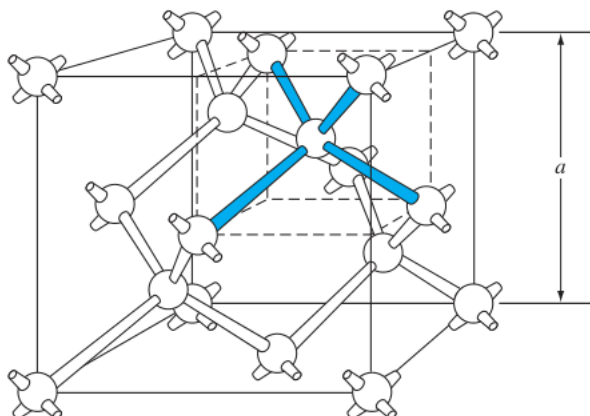


Figure 1.2: 金刚石晶胞

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。

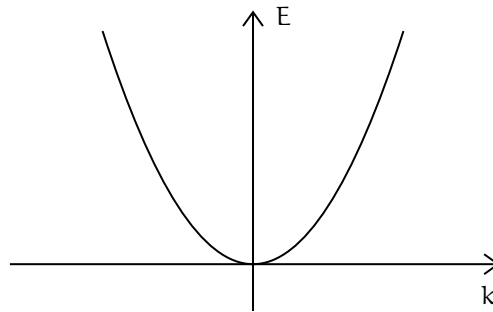


Figure 1.3: 自由电子 $E - k$ 曲线

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。

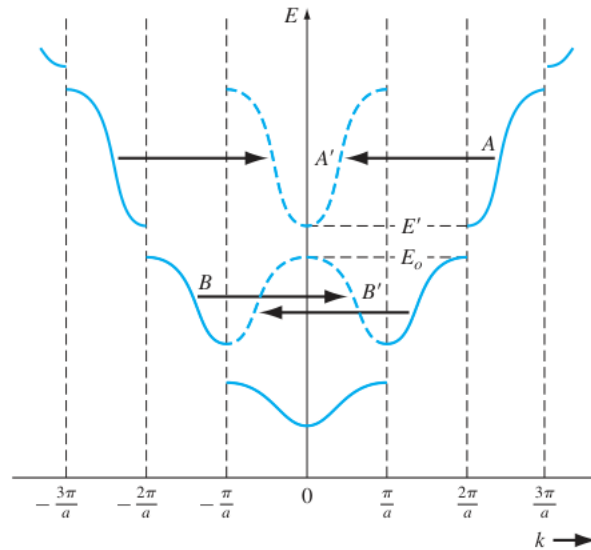


Figure 1.4: $E(k) - k$ 关系

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。

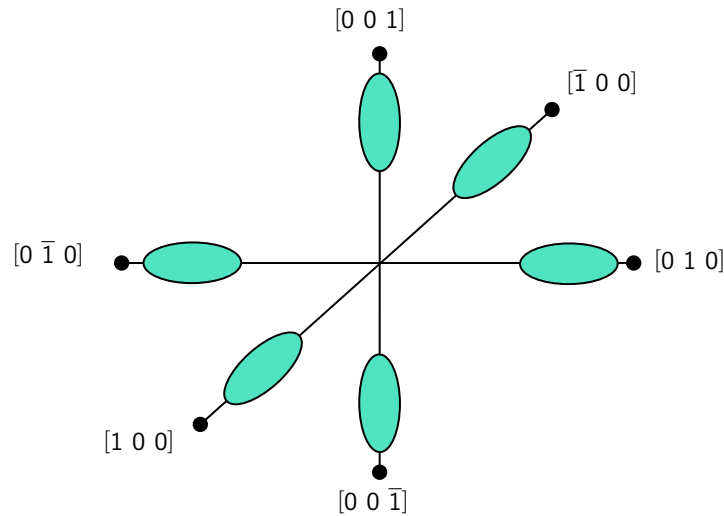


Figure 2.1: 硅导带等能面

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:

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

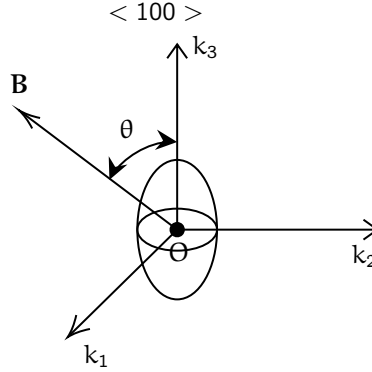


Figure 2.2: \mathbf{k} 空间取向

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:

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

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**。

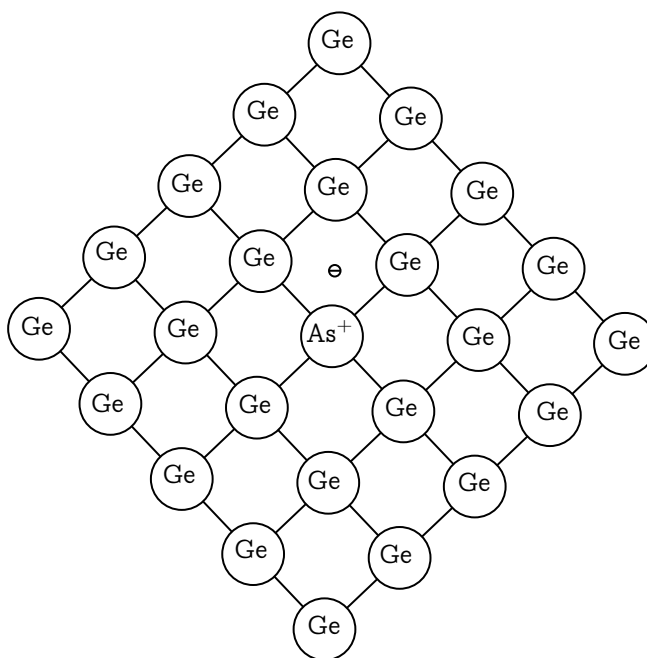


Figure 3.1: Ge 中的施主杂质 As

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**。

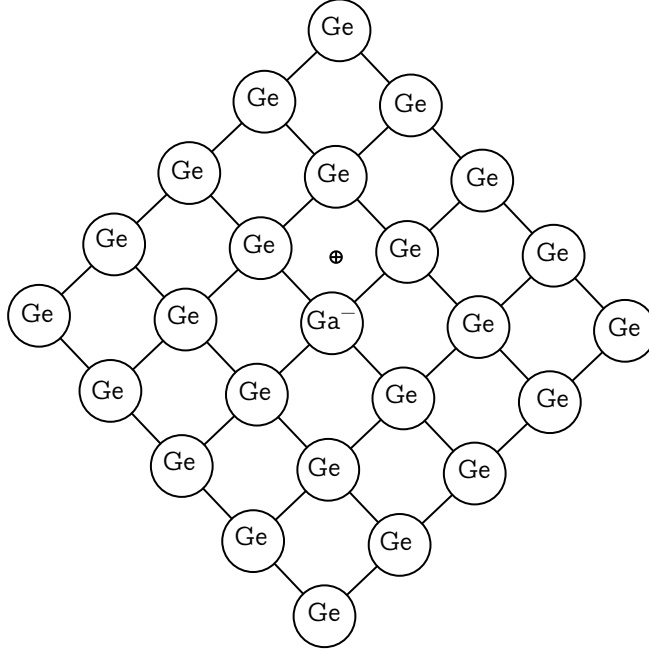


Figure 3.2: Ge 中的受主杂质 Ga

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：

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

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

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。 $T = 0$ K 时价带中全部量子态被电子占据，导带量子态全空。 $T > 0$ 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) 电离受主杂质浓度 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:

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

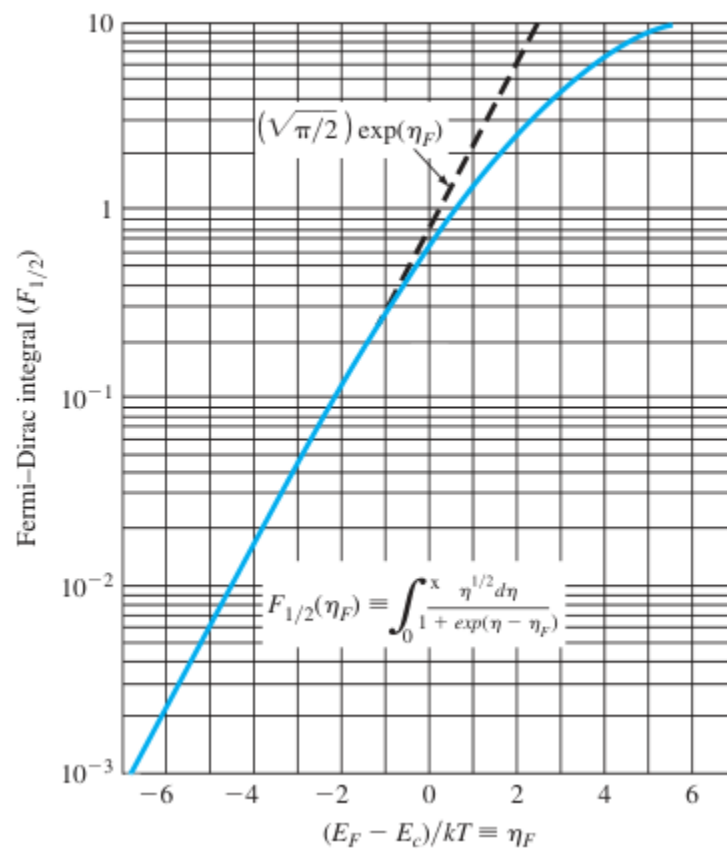


Figure 4.1: 费米统计与经典统计比较

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 $m^2/(V \cdot s)$ 或 $cm^2/(V \cdot s)$ 。 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：

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

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 $N_0 P e^{-Pt} t dt$ 。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：

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

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：

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

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

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：

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

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：

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

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 来着 ）。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：

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