

# PN Junction(PN 结)

## 半导体制造(Semiconductor Manufacturing Process)



Figure 1: 半导体制作过程

### 一些名词的解释

- Oxidation: 为了保护晶片(wafer)
- Photolithography(光刻):在晶片上画电路
- Etching(蚀刻):完成电路形状的刻画
- Deposition & Ion Implantation(离子注入与沉积):改变电学性质
- Metal Wiring:加用金属连接
- EDS:测试是否达到标准

## pn 结的形成

### 浓度梯度所造成的漂移

由于电子和空穴分别在 n 和 p 区域内浓度大, 因此向相反的类型区域飘逸, 与相反电荷的载流子结合(recombination), 形成了 Depletion Region, 或者叫做 Space Charge, 这两个术语是一个意思, 可以认为这个区域内没有载流子. 同是, 参杂的离子比如  $P^-$  或者  $B^+$  不能动的, 没有载流子了, 就单独在那里, n 区的  $P^-$  还有 p 区的  $B^+$ , 所以耗尽区又叫做空间电荷区(Space Charge region)

## Build-in voltage

由于漂移过去的载流子, 形成了内建电场.

$$V_{bi} = V_t \ln \left( \frac{N_A N_D}{n_i^2} \right) \quad 1.$$

$$V_t = \frac{kT}{q} (\text{热电压}) \quad 2.$$

- k:玻尔兹曼常数
- T:热力学温度
- q:元电荷
- $N_A$ :P 型半导体的参杂浓度

- $N_B$ : N 型半导体的参杂浓度
- Intrinsic Carrier Concentration: 本征载流子浓度(没有参杂的情况下载流子的浓度)

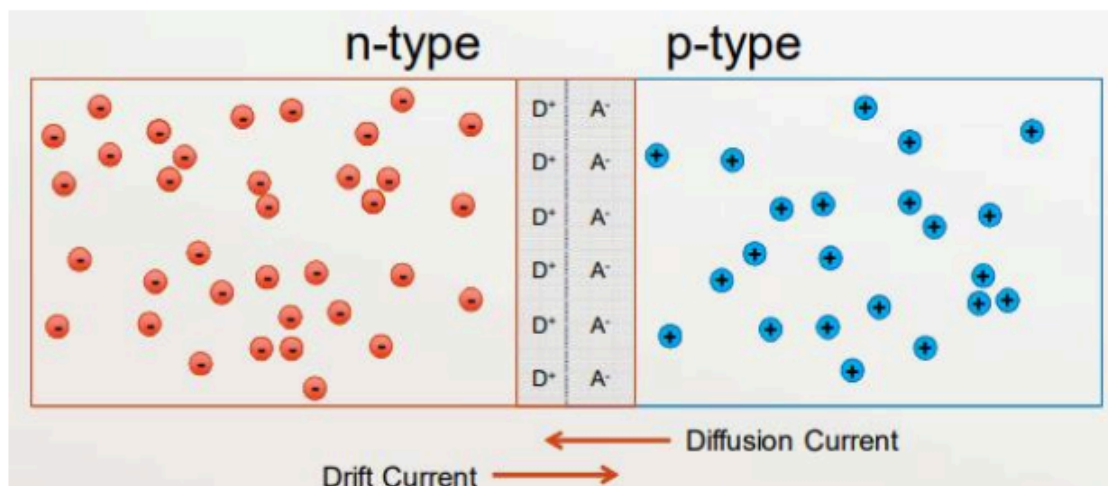


Figure 2: 内建电场

耗尽区的宽度

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r V_{bi}}{q} \left( \frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D} \right)} \quad 3.$$

$\epsilon_0\epsilon_r$  是主体材料的介电常数,  $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-14} F/m$ , 是真空中介电常数.

可以用两边的电荷平衡得到  $N_A W_p = N_D W_n$ , 也就是说浓度大的一边耗尽区的宽度比较小, 浓度更高的区域又叫做 heavily doped regions,  $p^+$  表示 p 型重掺杂区,  $n^+$  表示 n 型重掺杂区.

### pn 结的偏置(biasing)

偏置就是外加电压, 效果是改变了耗尽区的厚度

- zero bias: 没有外接电压
- Forward bias: 正电压接 p 区域, 负电压接 n 区域, 会使得耗尽区的厚度变小
- Reverse bias: 反接, 会使得耗尽区的厚度变大

偏置相当于在作用在内建电压上面, 所以

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r(V_{bi} - V_{bias})}{q} \left( \frac{1}{N_A} + \frac{1}{N_D} \right)} \quad 4.$$

电流公式

$$I = I_s \left( e^{\frac{qV}{nkT}} - 1 \right) = I_s \left( e^{\frac{V}{nT}} - 1 \right) \quad 5.$$

- $I_s$ :saturation current(饱和电流)
- $q$ :元电荷
- $V$ :加在两端的偏置电压
- $n$ 理想因子,理想的情况下是 1
- $k$ :玻尔兹曼常数
- $T$ :热力学温度

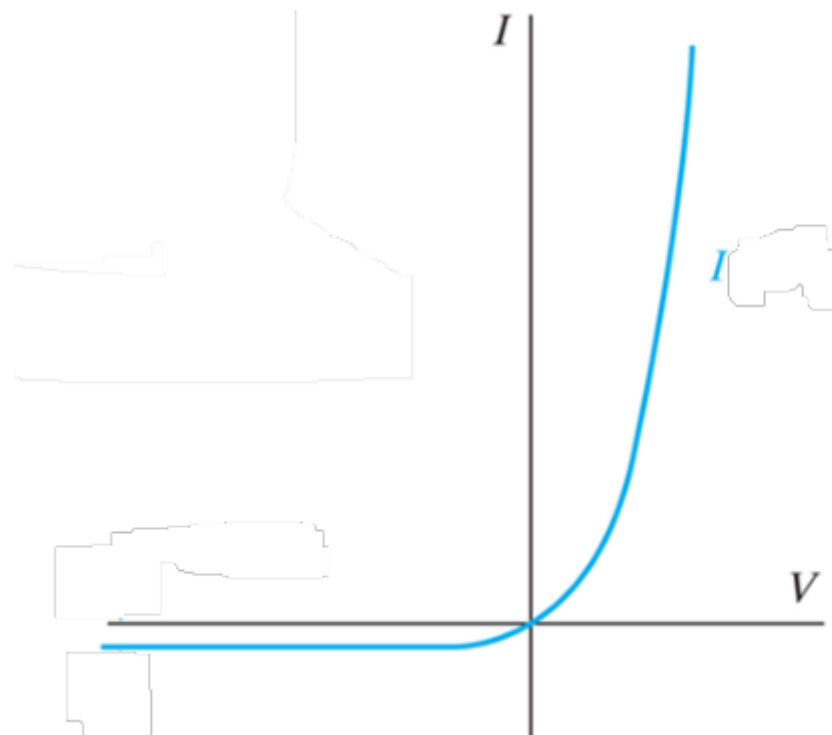


Figure 3: I\_V 图

**Junction Capacitance(结电容)**

$$C = \frac{\epsilon A}{W} \quad 6.$$

$W$ 是厚度, $A$ 是 p-n 结的有效面积, $\epsilon = \epsilon_0\epsilon_r$ ,是主体材料的介电常数.

## 载流子的迁移模式

- Drift: 由于电场导致的: 电场产生的速度和载流子自由移动的速度叠加, 在导体中可以认为又一个固定的速度  $V_d$
- Diffusion: 由于浓度梯度导致的/由于温度梯度导致的.

### Drift:

没有阻力的时候:

$$F = qE \quad 7.$$

$$F = ma \quad 8.$$

Drift 的速度:  $v_d = \mu E$ , 其中  $\mu$  叫做“载流子移动能力 (mobility of the charge carriers)”. 电子和空穴的分别表示为  $\mu_e, \mu_h$ . 由温度, 参杂浓度和其他因素所决定.

Drift 电流的密度 ( $J$ :  $A/m^2$ )

$$J = qnv_d = qn\mu E \quad 9.$$

$n$  是载流子的体积密度, 如果是正载流子, 也可以记作  $p$ . p-n 结中, 两种载流子都有, 要分别算  $J$  然后相加:

$$J = J_n + J_p \quad 10.$$

$$\sigma(\text{conductivity}) = \frac{l}{s} \frac{I}{El} = q(n\mu_n + p\mu_p) \quad 11.$$

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \quad 12.$$

### Diffusion

$$J_n = -qD_n \frac{dn}{dx} \quad 13.$$

$$J_p = qD_p \frac{dp}{dx} \quad 14.$$

$D_n, D_p$ : diffusion coefficients

$\frac{dn}{dx}$  代表了浓度的梯度 (对距离微分)

$$D_n = \mu_n \frac{kT}{q} \quad 15.$$

$$D_p = \mu_p \frac{kT}{q} \quad 16.$$

$$J = J_n + J_p = J_{n,drift} + J_{n,diffusion} + J_{p,drift} + J_{p,diffusion}$$

Figure 4: 总体电流密度

## 电子和空穴的密度计算

要涉及到之前的 density of states, probability of a state being occupied, 对于 n 型, 在导带上积分, 对于 p 型, 在价带积分.

$$n_n = \int_{E_c}^{E_c+\chi} g_{cb}(E) f(E) dE \quad 17.$$

## 用能带理论解释 PN 结的性质

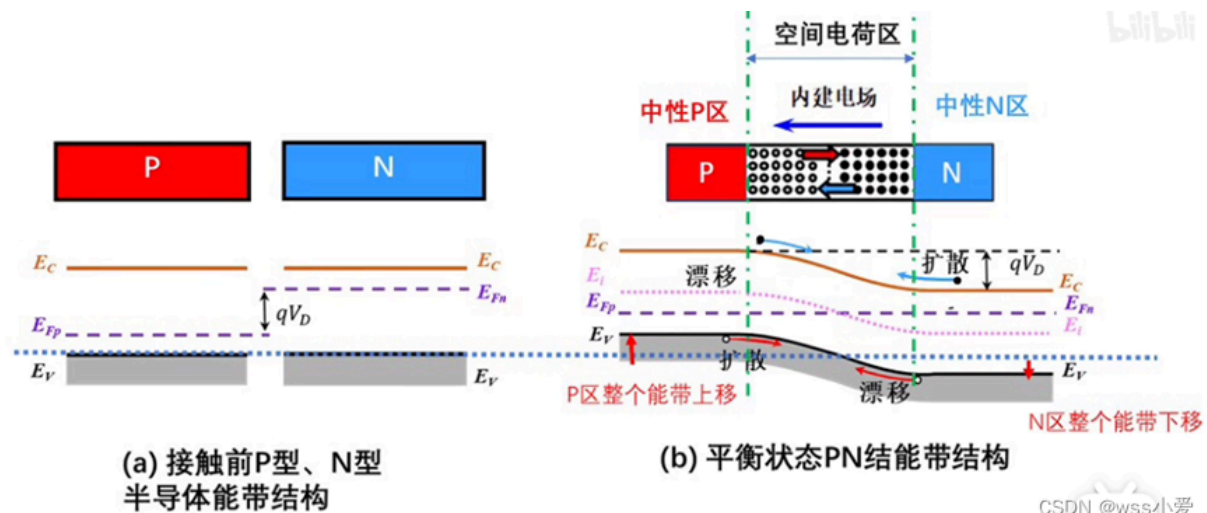


Figure 5: 能带理论

由于 n 型的费米能级更加靠近导带, 可以认为 n 区能量高, 在 n 区导带中的电子会流向 p 区的导带, 流过来的电子由于能量下降, 很快与价带上的空穴复合, 同时 P 区能带上移, N 区能带下降, 当两者的费米能级达到同一水平时, N 区和 P 区之间形成势垒, 势垒区内存在内建电场, N 区电子由于能量不足以跨过势垒, 停止移动。

在反向偏置的情况下, 结的厚度变大, 但是有少子还在移动, 产生了几乎为常数的 反向饱和电流.

## Thermal generation

只要温度大于 0k, 就一定有价电子被激发到导带, 留下空穴在价带, 产生了电子-空穴对.

## 击穿(Reverse breakdown)

击穿有两种

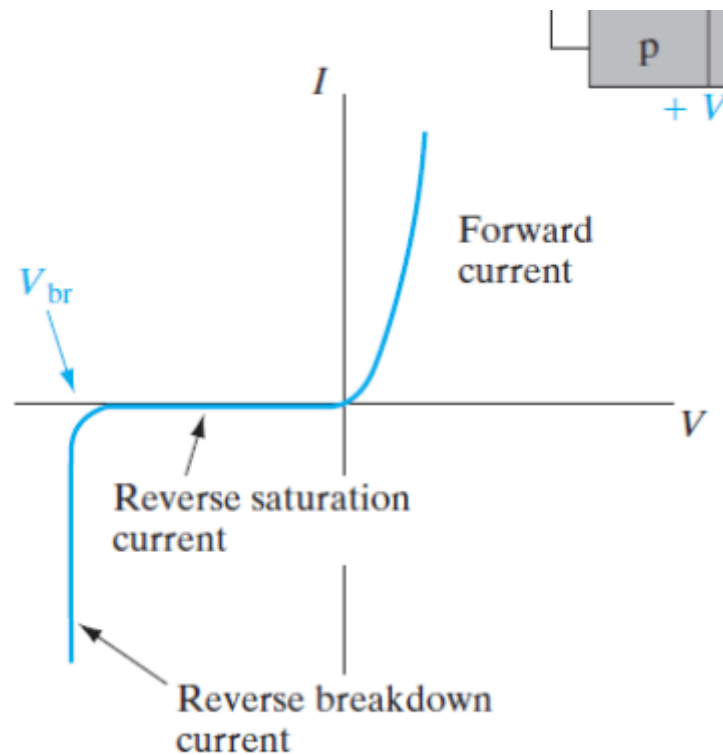


Figure 6: 完整的 i-v 图

- Avalanche(雪崩)

由于在耗尽区的电场特别大, 导致 Drift 电子得到足够的动能让硅原子离子化, 破坏 Si-Si 共价键, 是一种轰击(bombardment)的过程, 这种离子化又叫做: impact ionization(冲击离子化)

这句话描述的是**冲击电离 (Impact Ionization)** 过程中的**雪崩效应 (Avalanche Effect)**。

具体解释如下：

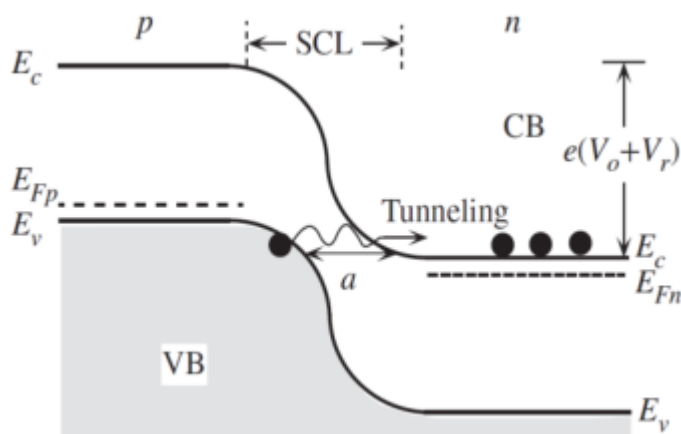
1. **EHPs (Electron-Hole Pairs, 电子-空穴对)**：电子-空穴对是半导体中由于外部激发（如光照、热激发或电场作用）产生的电子和空穴的配对。电子通常会逃离原来的位置，而空穴则是缺失的电子的位置。
2. **冲击电离 (Impact Ionization)**：当电子在电场中加速到足够高的能量时，它们可能会与晶格中的原子或分子发生碰撞，从而将这些原子的电子打出，形成新的电子-空穴对。这就是所谓的冲击电离。
3. **雪崩效应 (Avalanche Effect)**：在冲击电离过程中，产生的电子（EHPs）会被电场加速到更高的能量。这些高速电子与其他原子发生碰撞，进一步产生更多的电子-空穴对。这个过程是自增强的，也就是说，每次碰撞都会生成更多的EHPs，形成一个类似雪崩一样迅速扩展的过程。

所以，整句话的意思是：**冲击电离产生的电子-空穴对会在电场的作用下被加速，并通过碰撞产生更多的电子-空穴对，从而形成一个持续增长的雪崩效应。**

这种现象常见于半导体中的雪崩二极管 (Avalanche Diodes) 和某些光电探测器等器件中，通常会在强电场或高能量条件下发生。

#### • Zener(齐纳)

由于反向偏置电压, 肯会导致 n 区导带的能量界限比 p 区导带的能量界限低. 这样, p 区价带的电子可以快速的迁移到 n 区的导带. 这也是齐纳二极管的原理.



如何计算饱和电流  $I_s$

$$I_s = qA \left( \frac{D_p}{L_p} p_n \frac{D_n}{L_n} n_p \right) \quad 18.$$

$D_p, D_n$ : Equation 16, 指的是空穴和电子的扩散速度

$q$ : 元电荷

$A$ : PN 结的面积

$L_p, L_n$ : 空穴和电子的扩散长度

$p_n, n_p$ : N 区空穴浓度, P 区电子浓度(少子的浓度)

在半导体平衡状态下, 满足多子浓度  $\times$  少子浓度  $= n_i^2$  对于硅来说,

$n_i = 1.5 \times 10^{10}$

例子

An abrupt Si p-n junction ( $A = 10^{-4} \text{ cm}^2$ ) has the following properties at 300 K:

<i>p side</i>	<i>n side</i>
$N_a = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$	$N_d = 10^{15}$
$\tau_n = 0.1 \text{ } \mu\text{s}$	$\tau_p = 10 \text{ } \mu\text{s}$
$\mu_p = 200 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$	$\mu_n = 1300$
$\mu_n = 700$	$\mu_p = 450$

The junction is forward biased by 0.5 V. What is the forward current? What is the current at a reverse bias of -0.5 V?

Figure 7: Example 1

$$I_s = qA \left( \frac{D_p}{L_p} p_n + \frac{D_n}{L_n} n_p \right) \quad 19.$$

- 先算少子的浓度  $N_a, N_d$  是参杂浓度, 可以近似为多子的浓度
- $p_n = \frac{(1.5 \times 10^{10})^2}{10^{15}} = 2.25 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$
- $n_p = \frac{(1.5 \times 10^{10})^2}{10^{17}} = 2.25 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$
- $D_p = \frac{kT}{q} \mu_p = 11.66 \text{ cm}^2/\text{s}$
- $D_n = \frac{kT}{q} \mu_n = 18.13 \text{ cm}^2/\text{s}$
- $\tau_n$  指 p 区少子(电子)的寿命,  $\tau_p$  指 n 区少子(空穴)的寿命
- $L_p = \sqrt{D_p \tau_p} = 1.08 \times 10^{-2} \text{ cm}$
- $L_n = \sqrt{D_n \tau_n} = 1.35 \times 10^{-3} \text{ cm}$
- $I_0 = 4.370 \times 10^{-15} \text{ A}$
- $I_+ = I_0 \left( e^{\frac{V}{V_T}} - 1 \right) = 1.058 \times 10^{-6} \text{ A}$
- $I_- = -I_0 = -4.370 \times 10^{-15} \text{ A}$  (直接用饱和电流近似反向偏置电流)



An abrupt Si p-n junction has  $N_a = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  on one side and  $N_d = 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  on the other.

- Calculate the Fermi level positions at 300 K in the p and n regions.
- Draw an equilibrium band diagram for the junction and determine the contact potential  $V_0$  from the diagram.
- Compare the results of part (b) with  $V_0$  as calculated from Eq. 20.1

Figure 8: Example 2

(a) 求 **Fermi level position**:指的是当前费米能级和没有参杂的(本征费米能级)的差

在 pn 结中, p 型的能量更高:

$$E_{Fp} - E_i = kT \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right) = 0.467 \text{ eV} \quad 20.$$

$$E_{Fn} - E_i = -kT \ln\left(\frac{N_d}{n_i}\right) = -0.329 \text{ eV} \quad 21.$$

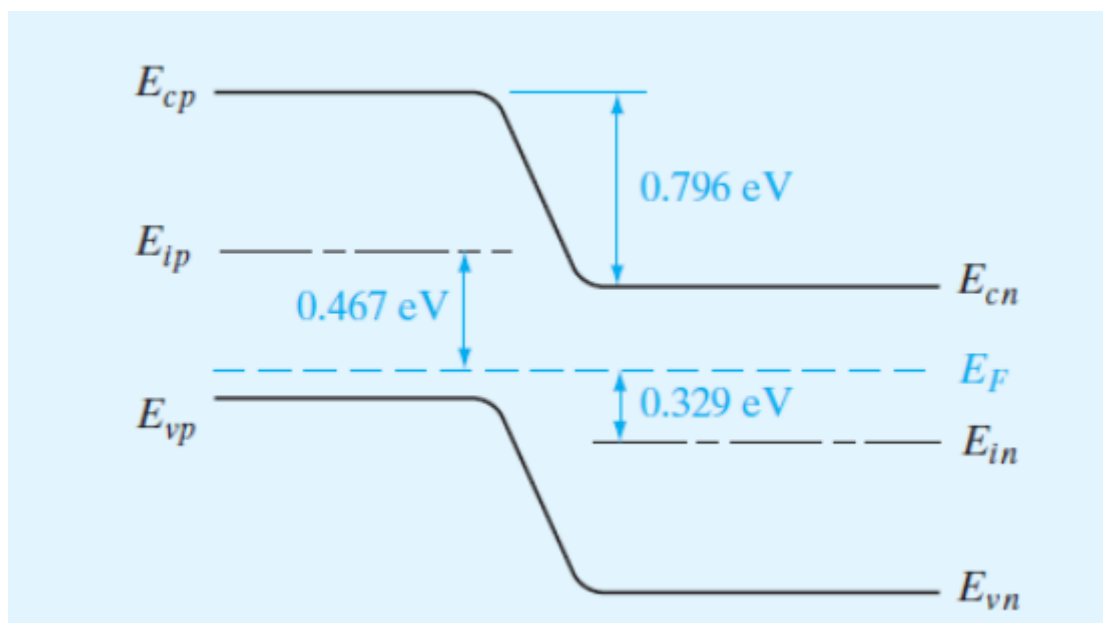


Figure 9: pn 结能级图

注意:带间隙  $E_c - E_v$  是由主体材料本身决定的, 和参杂浓度无关

$$0.329 = E_F - \left(\frac{E_{cn} + E_{vn}}{2}\right) \quad 22.$$

$$0.467 = \frac{E_{cp} + E_{vp}}{2} - E_F \quad 23.$$

$0.329 + 0.467 = \frac{E_{cp} - E_{cn} + E_{vp} - E_{vn}}{2} = E_{cp} - E_{cn} = 0.769\text{eV} = qV_0$ , 这个值又叫做接触电势(contact potential)

把两个式子加起来可以得到  $qV_0 = kT \frac{N_a N_d}{n_i^2} = 0.796 \text{ eV}$

A Si sample is doped with  $10^{17}$  As atoms/cm<sup>3</sup>. What is the equilibrium hole concentration  $p_0$  at 300 K? Where is  $E_F$  relative to  $E_i$ ?

Figure 10: Example 3

近似认为多子浓度就是参杂浓度:

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = 2.25 \times 10^3 \quad 24.$$

$$E_F - E_i = kT \ln \frac{n_0}{n_i} = 0.407V \quad 25.$$

## Appendix

首先要澄清一个可能存在的误会：在半导体能带结构中，导带顶(Conduction band minimum,  $E_c$ )通常在高能量处，而价带顶(Valence band maximum,  $E_v$ )则在较低的能量处。能量轴一般是往上为能量增加的方向，换句话说， $E_c$  在上， $E_v$  在下，中间是禁带。费米能级( $E_F$ )的位置决定了载流子(电子和空穴)的分布特性。

**\*\*对于未掺杂(本征)半导体：\*\***

费米能级  $E_F$  接近能隙中点( $E_i$ )，即在  $E_c$  与  $E_v$  之间的中间位置。

**\*\*当对半导体进行 p 型掺杂(掺入受主杂质)：\*\***

1. p 型掺杂会引入受主能级(接近价带顶  $E_v$  附近)，这些受主能级容易捕获电子，从而留下空穴(正电荷载流子)在价带中。结果就是半导体中空穴浓度大幅上升。

2. 空穴是价带中缺失的电子，因此费米能级会向价带方向移动，以反映价带上态被部分填满、空穴浓度增多的状况。

由于价带在能量坐标中比导带更低 ( $E_v < E_c$ )，费米能级向价带移动意味着费米能级在能量图中实际上是“下降”了(即更接近较低能量的  $E_v$ ，而不是  $E_c$ )。所以正确的说法应该是：**\*\*p 型掺杂会使费米能级向较低能量处移动，更接近价带顶  $E_v$ ，而非导带\*\***。这通常被描述为“费米能级下移”。从本征态  $E_i$  出发， $E_F$  会从中间位置向下靠

近  $E_v$ 。

**\*\*为何有时会产生“费米能级提高”的误解？\*\***

可能出现误解的原因有以下几种：

**1. \*\*参考能量基准不同：\*\***

有时某些图表或文献可能以价带顶  $E_v$  作为参考零点。当你以  $E_v$  为参照点(将  $E_v$  设为 0 eV)，本征费米能级  $E_i$  可能是在某个负的相对值(因为  $E_c > E_v$  而  $E_i$  在中间)，此时如果掺入 p 型杂质使  $E_F$  进一步“接近” $E_v$ ，那么相对于  $E_v$  参考来说， $E_F$  数值从“更负”变得“接近零”或略高(若极重 p 型使  $E_F$  进入价带)，表面上看是“提高”了数值，但本质上  $E_F$  是从高能量的  $E_c$  方向往下移到接近  $E_v$ 。

简而言之：**\*\*如果参考点是  $E_v$ ，那么  $E_F$  接近  $E_v$  意味着数值上从负值提升到接近零或成为正数。这在数值上看似  $E_F$  提高，但在实际的绝对能量标尺中， $E_F$  是向更低的绝对能量移动。\*\***

**2. \*\*情境描述不当或曲解：\*\***

或者在阅读教材或论文时，对应图中某些文字描述有歧义，或者作者在比较两种不同的情况(如与 n 型情形比较，p 型的  $E_F$  自然比 n 型时要低)。有时候描述中提到“费米能级离导带更近或更远”需要谨慎理解上下文，如果材料或参照物不同而混淆，就可能产生误解。

**\*\*总结：\*\***

- p 型掺杂会使费米能级更接近价带顶  $E_v$ ，这在绝对能量坐标下是  $E_F$  降低(往低能量方向走)的过程。
- 如果你以价带顶  $E_v$  为参考零点，并将  $E_c$  设为更高的正能量，那么从负值的  $E_F$  移到接近 0 或正值在数值上好像是“上升”，但实际上是因为改变了参考点导致的错觉。
- 正确理解：p 型掺杂使半导体中的空穴增多， $E_F$  向  $E_v$  移动，即费米能级在能量上“下降”到更接近价带的水平。

当讨论 p-n 结能带图时，需要将整个半导体区域从一个较为宏观且统一的角度来考量。在你看到的 p-n 结能带示意图中，常常会注意到 p 区的能带(包括导带与价带)相对于 n 区而言“上下错位”或能量更高/更低。这种能带阶梯式变化是由于内建电场(内建电势)的存在所导致的。

**\*\*关键原因在于费米能级对齐及内建电势：\*\***

当 p 型半导体和 n 型半导体紧密接触形成 p-n 结后，两边材料各自原来的费米能级( $E_F$ )不一样。对于 n 型区， $E_F$  更接近导带；对于 p 型区， $E_F$  更接近价带。将这两种半导体接触后，为了达到热平衡(不考虑外加电压的情况下)，电子会从一边扩散到另一边，最终整个 p-n 结系统需要形成一个统一的费米能级(全结处于热平衡时费米能级是平的，即统一的)。在此过程中，将形成一个内建电场，使能带发生弯

曲和相对升降。

**\*\*为什么 p 区看上去能量更高？\*\***

**1. \*\*能带弯曲与电势差：\*\***

原先在单独存在时，p 区和 n 区有各自的费米能级和能带结构。当它们接触后，电子从 n 区(相对电子较多一侧)向 p 区扩散，同时由于空穴的扩散也会发生(相反方向)，最终导致在界面附近形成一个空间电荷区(耗尽区)，这个空间电荷区内存在电场。该电场的存在使得能带在空间上发生弯曲，为满足整个结的费米能级统一，p 区和 n 区的能带边缘( $E_c$  和  $E_v$ )相对于彼此的“参照值”会错开。

**2. \*\*参考点与电势分布：\*\***

在能带图中，通常是将电子能量增加方向向上画，因此电势的上升会使能带图在该区域“向上抬”。p 区侧由于掺杂类型和浓度不同以及形成内建电势，造成 p 区一侧的绝对电势(空间电势)相对于 n 区更高。能带边缘( $E_c$ ,  $E_v$ )在能量图中会对应这种电势变化而整体抬高或压低。

简而言之，当将两个区域连接起来统一费米能级，p-n 结会在平衡下形成一个内建势垒，这个势垒在图中体现为从 n 区朝 p 区方向的  $E_c$  与  $E_v$  整体上升(或说 p 区侧相对于 n 区侧的能量参考值更高)。这种升高是相对于 n 区来说的，因为要让费米能级线对齐，p 区必须在能带图上产生一定的势垒关系。

**3. \*\*统一费米能级的结果：\*\***

在平衡状态下，费米能级贯穿整个 p-n 结应当是连续且统一的。为了达到这一点，如果以 n 区为参考，那么 p 区的能带需要上下移动(主要是通过空间电荷层内建电场所引起的“弯曲”)以使得 EF 对齐。这就导致在能量图中，你会看到 p 区看起来像是“被抬高”了，即 p 区的价带与导带在图中位置比 n 区的相应带稍微上移。在实际物理中，这代表 p 区具有较高的电势(对电子而言是一个势垒)，电子从 n 区流向 p 区会遇到潜在障碍，这有助于维持平衡状态下的载流子分布。

**\*\*总结：\*\***

- p 型与 n 型单独存在时各有自己的费米能级位置。
- 接触形成 p-n 结后，为了达到热平衡，费米能级在整个结处统一。
- 内建电势的存在导致能带弯曲，使得在能带图上 p 区的能带相对于 n 区出现“位能升高”的情况。
- 这并不是说 p 区掺杂本身就提高了能带，而是由于结的整体平衡与内建电场的存在，使得从 n 区看向 p 区时，p 区的能带相对于 n 区“显得更高”。