

# Semiconductor Physics

## 绪论

集成芯片制造工艺简述

## 固体晶格结构

半导体材料

固体类型

空间晶格

原胞与晶胞

晶面与密勒指数

固体中的缺陷和杂质

固体中的缺陷

固体中的杂质

## 半导体中的电子状态

单电子近似思想

倒格子

$sp^3$ 杂化

前置量力基础

克龙尼科-潘纳模型

$k$ 空间能带图

电子有效质量

共有化运动

半导体、绝缘体和导体的区别

空穴

常见半导体的等能面和能量极值

杂质和杂质能级

知识点

## 热平衡载流子浓度

统计分布函数

状态密度函数

平衡载流子的浓度公式

本征半导体载流子浓度和费米能级

杂质半导体载流子浓度和费米能级

杂质补偿半导体的载流子浓度和费米能级

简并半导体

## 半导体的导电性

载流子的漂移运动

载流子的散射机制

迁移率电导率与平均自由时间的关系

迁移率电导率与掺杂浓度的关系

电阻率与掺杂浓度和温度的关系

霍尔效应

磁阻

电导霍尔效应的统计分布

扩展知识点

## 半导体中的非平衡过剩载流子

非平衡载流子的产生与复合

准费米能级

- 复合理论
  - 非平衡载流子少子的扩散运动
  - 爱因斯坦关系
  - 电流空间分布的连续性方程
    - 连续性方程推演
    - 连续性方程
  - 陷阱效应
- 扩展知识点
  - 双极运输
    - 双极运输方程
    - 掺杂及小注入下的双极输运方程
  - 介电弛豫时间
  - 肖克莱-里德-霍尔复合理论SRH
- PN结
  - PN结及其能带结构
  - PN*结的电流电压特性
  - 理想结的电流电压方程——肖克莱方程
  - PN*结小信号模型
  - 产生-复合电流
    - 反偏产生电流
    - 正偏复合电流
  - 结击穿
    - 再论击穿
  - 电荷存储与二极管瞬态
    - 开关瞬态
  - 隧道二极管
- 半导体异质结
  - 异质结的安德森能带模型
  - 异质结及其能带图
  - 异质结的内电场、内电势和宽度
  - 异质结的单位面积势垒电容
  - 异质结电流输运机构
- 半导体表面和MIS结构
  - 基本概念
  - 表面电场效应
  - MIS结构的电容电压特性
    - MIS结构的微分电容
    - 理想MIS结构的低频高频电容电压特性
    - 实际MIS结构的电容电压特性
- 金属半导体接触(MS结构)
  - 金属半导体接触和肖特基势垒
    - 理想M/S接触的平衡能带图
    - 费米钉扎效应
    - M/S接触的电势分布
    - 实际肖特基势垒
  - 理想肖特基势垒的整流特性
    - 热电子发射理论
    - 肖特基二极管的偏置
  - 欧姆接触
    - 欧姆接触
- 半导体的光学性质
  - 半导体的光学常数
  - 半导体中的光吸收
    - 本征吸收
    - 激子吸收
    - 自由载流子吸收

杂质吸收  
半导体的光电导  
光照附加光电导  
光电导的弛豫过程  
光生伏特效应  
*pn*结的光生伏特效应  
丹倍效应  
光磁电效应  
半导体激光器

THE END

---

## H2 绪论

### H3 集成芯片制造工艺简述

#### 1. 热氧化

硅表面天然的二氧化硅氧化层可以作为器件隔离的场氧化层，连接器件的金属互连线放置在氧化层顶部。通常氧化反应需要高温条件，在硅的氧化过程中，氧气通过扩散过程穿过直接与氧化层表面相邻的凝滞气体层和已有的氧化层到达硅表面，在这里与硅反应形成二氧化硅。整个过程，氧化消耗的硅占氧化层厚度的44%左右。

#### 2. 掩模和光刻

掩模版是器件的物理表示，掩模版上的不透明部分可以吸收紫外线。光敏层，即光刻胶，被预先喷到半导体表面。光刻胶是一种在紫外照射下会发生化学反应的有机聚合物。紫外线通过掩模版照射到光刻胶上，利用显影剂去除光刻胶的多余部分，被掩模版不透明部分遮蔽的光刻胶得以保留，以此在硅上形成需要产生的图形结构。

#### 3. 刻蚀

在光刻胶上形成图案后，余下的光刻胶作为掩蔽层，而没有被光刻胶覆盖的部分就会被刻蚀掉。标准的刻蚀工艺是等离子刻蚀，通过向低压舱中注入刻蚀性气体，例如氯氟烃，在阴阳极间加射频电压得到等离子体，硅片放置在阴极，等离子体中阳离子在电场加速下轰击到硅表面，最终的效果就是硅表面被选中的区域通过各向异性而刻蚀掉。

#### 4. 扩散

广泛应用的热工艺是扩散。将硅片放置在高温扩散炉中并掺入硼或磷等杂质，在浓度梯度作用下逐渐扩散到硅中，当硅片被取出并降到室温后，杂质原子的扩散系数基本将为零，从而使杂质原子固定在硅材料中。

#### 5. 离子注入

高温扩散工艺的替代方案是离子注入，将杂质离子束加速到高能后射向半导体表面。离子进入硅后与硅原子发生碰撞并损失能量，最后停留在晶体的某个深度上。碰撞是随机的，掺杂原子的透射深度也具有一定的分布。

与扩散工艺相比，离子注入的优点是低温、可以获得掺杂良好的掺杂层，它的缺陷是入射杂质原子和原位硅原子碰撞会造成晶格损伤，不过大部分的损伤可以通过硅高温退火消除，并且退火温度远低于扩散工艺温度。

#### 6. 金属化、键合与封装

经过前述步骤加工后，半导体器件需要互连形成电路。一般的方法是气相沉积法得到金属薄膜，用光刻和刻蚀技术得到实际的互连线。通常，在整个硅片上会沉积氮化硅作为保护层。

通过划片将硅片分成独立的集成电路芯片并固定在封装基座上，用导线键合机在芯片和封装引脚间连上金或铝线。

USTC-irresistible

---

## H2 固体晶格结构

**keywords** : 固体晶格 结构、半导体生长技术、半导体器件结构

### H3 半导体材料

- 半导体是导电性能介于金属和绝缘体之间的一种材料
- 半导体基本可以划分为两类：元素半导体和化合物半导体
- 常见半导体：锗、硅、砷化镓

### H3 固体类型

- 固体的三种基本类型是：**无定型**、**多晶**、**单晶**
- 有序化区域是指原子或分子有规则或周期性几何排布的空间范畴

### H3 空间晶格

- 晶体中原子的周期性排列称为晶格

### H4 原胞与晶胞

- 格点用于描述原子排列
- 原胞是重复形成晶格的最小重复单元
- 晶胞是晶体中具有结构对称性的最小重复单元

### H4 晶面与密勒指数

- 密勒指数是晶面在轴上截距的倒数
- 立方晶体有三种平面，即(1,0,0)平面，(1,1,0)平面和(1,1,1)平面
- 晶向是晶列在坐标轴上的三个分量

### H3 固体中的缺陷和杂质

实际晶体中，晶格不是完美的，它的几何周期性会被一些形式破坏，进而改变材料的特性。

## H4 固体中的缺陷

所有晶体都有的是一类缺陷是原子的热振动，引起原子在晶格平衡点处的随机振动，随机热运动引起原子间距离的随机波动，轻微破坏了原子的几何排列。

晶体中的另一种缺陷是**点缺陷**。实际晶体中特定晶格格点的原子可能缺失，这种缺陷称为空位。在其他位置，原子可能镶嵌于格点之间，这种缺陷称为填隙。靠得足够近的空位和填隙原子会在两个点缺陷之间发生相互作用，这种空位-填隙缺陷称为**弗兰克尔缺陷**。

在单晶体材料的形成中，当一整列原子从正常晶格位置缺失时，就会出现**线缺陷**。

除上述以外，还有更加复杂的位错。

特征位错：滑移面是原子密排面，滑移方向是原子密度最大的方向

## H4 固体中的杂质

晶格中可能出现外来原子或者杂质原子。杂质原子可以占据正常的晶格格点，这种情况称为**替位杂质**。杂质原子出现在格点之间称为**填隙杂质**。

为改变导电性而向半导体材料中加入杂质的技术称为掺杂，一般的方法是扩散和离子注入。

---

## H2 半导体中的电子状态

### H3 单电子近似思想

- 原子实不动的多电子体系
- 每个电子处在原子实和电子组成的平均势场中，即单电子问题
- 平均势场是周期性的，周期为晶体中电子的排列周期

紧束缚近似：以原子实对电子的束缚为主，其余视为微扰

准自由电子近似：以晶体中恒定势场为主，其余视为微扰，这一微扰是周期性的

自由电子近似：势场展开为傅里叶级数：

$$V(X) = V_0 + \sum_n V_n e^{iknx} \quad (1)$$

第一项反映均匀势场，第二项反映微扰，该方程的解是布洛赫波

布洛赫波：其中 $a$ 是晶格常数

$$\begin{aligned} \psi_k(x) &= U_k(x) e^{ikx} \\ U_k(x) &= U_k(x + na) \\ k &= \frac{2\pi}{a} \end{aligned} \quad (2)$$

特点：

- 振幅 $U(x)$ 是周期函数，反映周期势场对运动的影响
- $e^{ikx}$ 为平面波函数，反映电子共有化运动
- 布洛赫波是周期性振幅调幅的平面波，是自由粒子平面波函数计入微扰得到的
- 布洛赫定理说明电子的运动可以看作是很多行波的叠加，它们可以叠加为波包，波包由一个特定波矢 $\vec{k}$ 附近的诸波函数组成

### H3 倒格子

倒格子与晶格是傅里叶变换的关系，其量纲互为倒数， $k$ 就是一个倒格子

倒格子：倒影空间，倒格子空间里有布里渊区。由倒格子组成的空间理解为状态空间( $k$ 空间)

- 面心立方晶体的倒格子是体心立方
- $k$ 空间的密度为晶体的体积

### H3 $sp^3$ 杂化

- 杂化态，形成四个等价的轨道，含有s和p轨道成分

每个能带有 $2N$ 个能级，上下各一个能带，价电子填满 $2N$ 个轨道，能带间间隙形成禁带

- 金刚石、锗、硅、砷化镓形成 $sp^3$ 杂化

### H3 前置量力基础

#### 1. 一维非相对论薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = j\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (3)$$

利用分离变量法

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t) \quad (4)$$

得到时间部分函数的解形式为

$$\phi(t) = e^{-j\frac{E}{\hbar}t}, \text{ 分离常量 } E \text{ 是粒子的总能量} \quad (5)$$

空间部分的函数形式为

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0 \quad (6)$$

#### 2. 边界条件

如果粒子的能量和势函数在任何位置均为有限制，则波函数及其一阶导数需要满足以下条件

1.  $\psi(x)$ 必须有限、单值、连续
2.  $\psi(x)$ 的一阶导数必须有限、单值、连续

### H3 克龙尼科-潘纳模型

#### 1. 布洛赫数学定理

表述：所有周期性变化的势能函数的单电子波函数必须写为

$$\psi(x) = u(x)e^{jkx} \quad (7)$$

$u(x)$ 是周期函数，函数的周期就是势能变化的周期， $k$ 称为运动参量，也是波矢

#### 2. 薛定谔方程的一个有解条件

下式给出了参数 $k$ ，总能量 $E$ 和势垒 $bV_0$ 之间的关系

$$P \iota \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka \quad (8)$$

其中：

$$P\ell = \frac{mV_0ba}{\hbar^2}$$
$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad (9)$$

### H3 $\mathbf{k}$ 空间能带图

1. 没有势垒的情况下， $\alpha = k$ ，因此可以得到  $E = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$ ，显示了自由粒子的能量和动量之间的抛物线关系，也是自由粒子的能量和  $k$  之间的关系曲线

自由电子的 E-k 曲线图显然是抛物线状的， $E_k^0$  是自由电子势能

周期性势场中电子的 E-k 关系如下：

$$E = E_k^0 + \sum \frac{|V_n|^2}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2(k - \frac{n}{a})^2}{2m}} \quad (10)$$

- 求和项的分母不能为零，这要求  $k \neq -(k - \frac{n}{a})$ ，即  $k \neq \frac{n}{2a}$ ，在这些点处，就是布里渊区的边界附近，这些位置就是禁带
- 允带布里渊区内
- 能量是周期的偶函数，周期为  $\frac{1}{a}$ ，这意味着能带在不同的布里渊区是重复的

2. 单晶晶格中粒子的 E-k 关系，随着参数  $P\ell$  的增大，粒子受到势阱或原子的束缚更加强烈，根据克龙-潘纳模型的有解条件，考虑图像叠加，并注意到方程右侧的有界性，因此得到的 E-k 图就是不连续的  
由于能量是不连续的，因此就有了晶体中粒子的禁带和允带概念

假设参数  $P\ell = 10$ ，势场宽度  $a = 5\text{\AA}$ ，计算最低能量允带的宽度

允带解答分析：方程右侧的变化范围是  $[-1, 1]$ ，即需要得到  $ka$  从零变化到  $\pi$  时  $\alpha a$  的变化范围

- 当  $ka = 0$  时：

$$10 \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = 1 \Rightarrow \alpha a = 2.628 \text{ rad} \quad (11)$$

- 当  $ka = \pi$  时， $\alpha a = \pi$ ：

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (12)$$

- 由此计算得到能量允带

$$\Delta E = 0.447 \text{ eV} \quad (13)$$

随着能量的增长，克龙尼科-潘纳模型的允带宽度也随之增加

3. 在数学上，余弦函数是周期函数，因此，我们可以对 E-k 曲线图像进行周期性平移。 $ka \in [-\pi, \pi]$  的范围内的图像代表了简约  $\mathbf{k}$  空间曲线，或称简约布里渊区
4. 总结来说，克龙尼科-潘纳模型是通过一维周期性实函数建立起来的单晶晶格模型

### H3 电子有效质量

在晶格中运动的电子与在自由空间中不同。除了外力影响，晶体中的带电粒子产生的内部作用力会对电子在晶格中的运动产生影响，但是一考虑粒子所受的内力是不现实的，为此引入参数 $m^*$ ，称为有效质量，有效质量概括了粒子的质量以及内力的作用效果，这样牛顿第二定律的形式即为

$$F_{external} = m^* a \quad (14)$$

### H3 共有化运动

#### 1. 共有化运动速度 (k空间)

$$\bar{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(\vec{k}) \quad (15)$$

其中在一维中：

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar k}{m_n^*} \quad (16)$$
$$\vec{v}(\vec{k}) = -\vec{v}(\vec{k}), \quad \text{奇函数}$$

- 电子在周期性势场中的运动用平均速度，即群速度描述，就是共有化运动速度
- 群速度是介质中能量的传输速度

#### 2. 加速度

$$\vec{F}_{external} = \frac{d\vec{p}}{dt} \quad (17)$$
$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

其中一维为：

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{F}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (18)$$

这里的动量并不指的是电子的真实动量，而是电子的准动量

#### 3. 有效质量

曲率与二次微商成正比，能带越窄，曲率越小，二次微商数值越小，有效质量越大

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (19)$$

导电与导带底与价带顶的电子有关，因此实际问题研究极值附近，泰勒展开保留二阶，并注意极值存在时一阶导数为零

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (20)$$

数学回顾：价带顶二阶导数小于0，导带底二阶导数大于零(极值点)

带顶有效质量小于零，带底有效质量大于零

有效质量是张量，具有各向异性

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \sum_{x,y,z} \frac{(k_i - k_{i0})^2}{m_i^*} \right] \quad (21)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{bmatrix}$$

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{bmatrix} \frac{\partial x^2}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{bmatrix} \quad (22)$$

### H3 半导体、绝缘体和导体的区别

1. 略, 见课本

Tips

tip

满带电子不导电, 不满带电子导电

### H3 空穴

1. 本征激发: 电子挣脱束缚成为自由电子, 并留下一个空穴

2. 导电作用

3. 特征参数

1. 正电荷, 电量与电子电量一致

2. 速度与k点电子速度一致  $v_h = v_k$

3. 能量与k点电子能量相反  $E(k_h) = -E(k_e)$

空穴的能量最低点在价带顶, 电子的最低能量在导带底

稳态时, 电子从带底开始向上填充, 空穴从带顶向下填充

4. 有效质量: 价带内, 空穴的有效质量大于零; 导带内, 电子有效质量大于零

4. 意义:

1. 将价带内大量电子的运动转换为少量空穴的运动

2. 两类载流子, 为PN结理论奠定基础

### H3 常见半导体的等能面和能量极值

1. k空间等能面

$$E(k) - E(k_0) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k - k_0)^2}{m_x^*} + \frac{(k - k_0)^2}{m_y^*} + \frac{(k - k_0)^2}{m_z^*} \right] \quad (23)$$

实验表明常见半导体的等能面形状是旋转椭球面, 这意味这存在一个长轴和两个相等长度的短轴, 比如说  $m_y^* = m_z^*$

2. 多极值问题

锗、硅存在多极值问题

1. 导带极值点

对于锗：极值方向(长轴)为(1,1,1)方向，在布里渊区边界处，即L点，共有八个极值点。在第一布里渊区内存在四个旋转椭球

对于硅：极值方向(长轴)在(1,0,0)方向，距离边界四分之一处，，共有六个极值点，在第一布里渊区内有六个旋转椭球

对于砷化镓：极值点在k=0处，只有一个极值点，即没有多极值问题，是各向同性的，等能面是扭曲面，近似处理为球面

## 2. 价带极值点

锗、硅、砷化镓价带的极值点都在k=0处，均近似处理为球面，**价带的能级都是简并的，还有自选耦合作用形成的能级，该能级不参与导电**

价带中参与导电的有重空穴和轻空穴

## 3. 锗、硅的导带和价带极值点k不一样，称为间接带隙半导体；砷化镓的极值点k是一致的，称为直接带隙半导体

直接带隙半导体和间接带隙半导体：

### 1. 直接带隙晶体

直接带隙晶体的导带底和价带顶满足同一个k值，直接满足动量守恒。打进来的光子能量只需要不低于禁带宽度就能实现电子从价带到导带的跃迁

### 2. 间接带隙晶体

间接带隙晶体的导带底和价带顶不是同一个k值，需要声子参与保证动量守恒，即需要晶格热振动参与进来。打进来的光子能量需要高于禁带宽度，才有可能让电子跃迁到导带，因为光子的部分能量需要提供给声子

## 3. 禁带宽度及其与温度和压力的关系

### 1. 温度越高，禁带宽度将变小

### 2. 能带随压力变化有方向性(了解即可)

### 3. 实验测量禁带宽度的方法：

#### 1. 电导率—温度

#### 2. 霍尔效应

#### 3. 本征吸收谱

## H3 杂质和杂质能级

## H3 知识点

### 1. 共有化运动：

原子组成晶体后，由于电子壳层的交叠，电子不再完全局限在某一个原子上，可以由一个原子转移到相邻原子上去，因而电子可以在整个晶体中运动，这种运动称为电子的共有化运动，所运动的能级在能量上是相似的

### 2. 能带和能级：

当N个原子相互靠近结合成晶体后，每个电子都要收到周围原子势场的作用，其结果是每一个N度兼并的能级都分裂成N个彼此相邻很近的能级，这N个能级组成一个带，称为能带

### 3. 布里渊区与能带：

1. 布里渊区：倒易点阵中的维格纳-赛茨晶胞，对于一维和二维，是到周围各方向格点连线的中垂线围成的区域，对于三维，是由中垂面围成
2. 允带出现在布里渊区中，**每个布里渊区对应于一个能带**
3. 每个布里渊区中有N个k状态，布里渊区中的能级是**准连续的**
4. 第一布里渊区内允许的波矢总数等于晶胞中初级晶胞数N，每个初级晶胞刚好能贡献一个独立的k值，这也是3.中N个k状态的来源
5. 同一能量下的电子有两种自旋取向，因此每个能带中共有2N个轨道

**第一布里渊区：到距离原点最近倒格子点的平分线划出的区域， $-\frac{\pi}{a} \leq k \leq \frac{\pi}{a}$**

4. 锗、硅、砷化镓的第一布里渊区是十四面体(到8个顶点的垂直平分面&6个最近的体心围成的空间)

$\gamma$ 点：布里渊区中心：(0,0,0)

L点：布里渊区与(1,1,1)方向的交点：(1/2,1/2,1/2)

X点：布里渊区与(1,0,0)方向交点：(0,0,1)

### 5. 布里渊区边界方程：

$$2\vec{k} \cdot \vec{G} = |\vec{G}|^2 \Rightarrow \vec{k} \cdot \left(\frac{\vec{G}}{2}\right) = \left|\frac{\vec{G}}{2}\right|^2 \quad (24)$$

$\vec{G}$ 称为倒易点阵矢量，他与实际坐标空间有如下关系，T为晶体的平移操作：

$$\begin{aligned} \vec{T} &= u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c} \\ \vec{G} &= h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \\ \vec{A} &= 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \quad \vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}} \end{aligned} \quad (25)$$

■ 每个晶体结构都有两个点阵与之联系，一个是晶体点阵，一个是对应的倒易点阵

■ 晶体的衍射图像是晶体的倒易点阵的映像

■ 晶体的衍射：

当 $\vec{G} = \Delta\vec{k}$ 时，散射振幅达到最大

$\Delta\vec{k} = \vec{k}' - \vec{k}$ ，即散射后波矢与入射波矢的矢量差

### 4. 有效质量：

1. 意义：有效质量概括了半导体内部势场的作用，使得在解决半导体中电子在外力作用下的运动规律时，可以不涉及半导体内部势场的作用

2. 有效质量与能带的关系：

$$\frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right) |_{k=0} = \frac{1}{m^*} \quad (26)$$

### 5. 导带&价带&禁带&允带&满带

允带：体系中多个原子相互作用使得一条简并的能级分裂成一组邻近的能级，这组能级就是能带，也就是允带

k有N个值=N个接近的能级=N个共有化运动状态

禁带：能带是能级扩展而来的，能带间存在没有能级的间隔，这个间隔就是禁带，**电子无法取到禁带中的能量**

满带：处于基态的原子，其电子以此从最低能级向上填充。电子刚好填满某一个能带而下一个能带全空，这些被填满的能带就是满带，**满带中能量最高的一条称为价带**

我们知道电流的产生需要载流子的定向运动。夹带中电子已经占据了所有可能的能级，电子相邻位置上的态都已被占据而无法移动，所以可以认为**价带中的电子是不导电的**，或者说满带不导电

从能带在k空间的图形上是这么理解：由于能带在k空间是对称的，当每个状态下都有电子占据时，任意一个速度大小为v的电子都有一个大小为-v的电子与之对应。由于能带是满带，因此相对k空间的电子的分布不会因为外力的作用而改变。这样，对于完全满带来说，它的净漂移电流密度就是零

$$J = \frac{dI}{dS} = -ne\bar{v} = -e \sum_{i(total)} v_i \quad (27)$$

导带：对于半导体，能量最高的一个价带到能量更高的下一个能带之间存在禁带，但是这个禁带的宽度不是很大，因此电子有机会跃迁到下一个能带。由于这个能带几乎是空的，所以跃迁到这一能带的电子可以“自由奔跑”，这就是导带

对于绝缘体，这一禁带宽度较大，认为基本不可能发生电子的跃迁

对于金属，没有禁带，导带与价带直接重合，因此不需要跃迁就能导电

Tips      总结

- 完全被电子占据的能带称为满带
- 完全未被电子占据的能带称为空带
- 部分被电子占据的能带称为导带
- 价电子所占据的能带称为价带
- 允许电子存在的能带称为允带
- 导带和价带之间的空隙称为禁带

允带和禁带是相对的，允带包括满带、空带、导带、价带等

能量比价带低的能带一般为满带

价带可以是满带，也可以是导带

Tips      带宽

- 带宽由晶格常数a决定，晶格常数越小交叠程度越大，直观地，外层的带宽更大
- 带宽与原子密度无关

## 6. 能隙的起因

晶体中电子波的布拉格反射是产生能隙的起因，这是周期性势场作用的结果

## 7. 能谷

能谷是半导体导带的极小值

硅的极值分布在 $[1, 0, 0]$ 方向上，是六个旋转椭球面，可以视为六个能谷。载流子在这些能谷上具有相同的分布。硅也被称为多能谷半导体

电子从一个极值附近散射到另一个极值附近称为谷间散射

USTC-irresistible

---

## H2 热平衡载流子浓度

### H3 统计分布函数

#### 1. 费米分布函数

$$f_e = \frac{1}{1 + e^{\frac{E - E_F}{k_0 T}}}, \quad k_0 = Boltzmann\_const \quad (28)$$

能级离费米能级  $E_F$  远时简化为玻尔兹曼分布

#### 2. 玻尔兹曼分布函数

$$f_e = e^{-\frac{E - E_F}{k_0 T}} \quad (29)$$

- 1.  $E \geq E_F$ : 空
- 2.  $E = E_F$ : 占据能级概率为二分之一
- 3.  $E \leq E_F$ : 量子态被占满

#### 3. 费米能级

热平衡状态下，系统引入一个电子引发的系统自由能变化为系统的化学势，热平衡系统中电子的化学势就是费米能级

- 1. 平均填充水平：费米能级越高，填充水平高
- 2. 费米能级是参考能级，不是真实的能级
- 3. 费米能级与 **温度和掺杂情况** 有关
- 4. 热平衡系统有统一的费米能级
- 5.  $E_c - E_F \gg k_0 T$     $E_F - E_v \gg k_0 T$ : 费米能级在禁带  $E_g$  内，采用玻尔兹曼分布

#### 4. 空穴占据几率

$$f_h(E) = 1 - f_e(E) = f_e = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_F - E}{k_0 T}}} \approx e^{-\frac{E_F - E}{k_0 T}} \quad (30)$$

空穴占据的几率就是电子未占据能级的几率，尽管费米分布或玻尔兹曼分布是描述电子在导带的分布，但也适用于价带电子的描述

### H3 状态密度函数

状态数Z,  $E \sim E + dE$ 范围, 状态密度 $g(E) = \frac{dZ}{dE}$

#### 1. 极值附近的球形等能面

$$g_c(E) = 4\pi V \left(\frac{2m_n^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$$
$$g_v(E) = 4\pi V \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}}$$
(31)

#### 2. 椭球形等能面

$$dZ = S2Vd\tau_k \quad S\text{为多极值数目}$$
$$g_c(E) = \frac{4\pi V}{\hbar^3} S (8m_x^* m_y^* m_z^*)^{\frac{1}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$$
$$g_v(E) = \frac{4\pi V}{\hbar^3} S (8m_x^* m_y^* m_z^*)^{\frac{1}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}}$$
(32)

导带：对于硅，S=6；对于锗，S=4

#### 3. 导带底电子态密度有效质量

$$(2m_{dn}^*)^{\frac{3}{2}} = S(8m_x^* m_y^* m_z^*)^{\frac{1}{2}}$$
(33)

引入3后，1&2形式统一，便于记忆

#### 4. 价带球形等能面

价带的能级是简并的，存在轻重空穴，存在两个态密度函数，总态密度为两者的和

$$g_v(E) = 4\pi V \left(\frac{2m_{ph}^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}} + 4\pi V \left(\frac{2m_{pl}^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}}$$
(34)

#### 5. 价带顶态密度空穴的有效质量

包含上式中轻重空穴两部分之和，这样会让所有的态函数形式统一

$$(m_{dp}^*)^{\frac{3}{2}} = (m_{ph}^*)^{\frac{3}{2}} + (m_{pl}^*)^{\frac{3}{2}}$$
(35)

#### 6. 简述

导带考虑的是多极值和等能面形式，价带考虑的是轻重空穴

引入两种态密度有效质量的一个意义是：统一函数形式

$$g_c(E) = 4\pi V \left(\frac{2m_{eff}^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$$
$$g_v(E) = 4\pi V \left(\frac{2m_{eff}^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E_v - E)^{\frac{1}{2}}$$
(36)

### H3 平衡载流子的浓度公式

Warning

Tips

这里仅仅讨论非简并情况，不考虑泡利不相容原理

#### 1. 自由电子数浓度

$$N = \int_{E_c}^{\infty} f_B(E) g_c(E) dE \quad (37)$$
$$n_0 = \frac{N}{V}$$

带入相关公式得到结果：

$$n_0 = \frac{2}{\hbar^3} (2\pi m_{dn}^* k_0 T)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}} = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}} \quad (38)$$

定义导带底有效电子态密度

$$N_c = \frac{2}{\hbar^3} (2\pi m_{dn}^* k_0 T)^{\frac{3}{2}} \quad (39)$$

#### 2. 空穴浓度

类比得到：

$$p_0 = \frac{2}{\hbar^3} (2\pi m_{dp}^* k_0 T)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}} = N_v e^{-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}} \quad (40)$$

价带顶空穴有效态密度

$$N_v = \frac{2}{\hbar^3} (2\pi m_{dp}^* k_0 T)^{\frac{3}{2}} \quad (41)$$

有效态密度的含义理解为——将导带和价带各个能级分别等效到导带底或价带顶的数目

有效态密度受温度影响， $N_c, N_v \propto T^{\frac{3}{2}}$

#### 3. 浓度积np

$$n_0 p_0 = N_v N_p e^{-\frac{E_g}{k_0 T}} = K(T) \quad (42)$$

1. T与掺杂浓度、种类无关
2. 温度确定后，浓度积就是常数
3. 浓度积仅仅是温度的函数

### H3 本征半导体载流子浓度和费米能级

Warning tips

再次强调这里是~~非简并情况~~

思路：通过电中性条件，导出费米能级，进一步导出电子和空穴浓度

本征半导体中，电子浓度都等于空穴浓度，参考有关表达式得到等式

$$N_c e^{-\frac{E_c-E_F}{k_0T}} = N_v e^{-\frac{E_F-E_v}{k_0T}} \Rightarrow \\ E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}k_0T \ln \frac{m_{dp}^*}{m_{dn}^*} \approx \frac{1}{2}(E_c + E_v) = E_i \quad (43)$$

注意：并非所有的材料都能够做上式右侧的近似约化，比如InSb

本征半导体的费米能级在中线， $E_i$ 称本征费米能级

本征载流子浓度 $n_i$

$$n_i = n_0 = p_0 \\ n_0 p_0 = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{k_0T}} = n_i^2(T) \quad (44) \\ E_F = E_i$$

$$n_0 = n_i e^{\frac{E_F-E_i}{k_0T}} \\ p_0 = n_i e^{\frac{E_i-E_F}{k_0T}} \quad (45)$$

温度确定后，上式的乘积是个固定值，与掺杂无关

Tips 测量禁带宽度实验

可以利用本征载流子浓度与温度的关系测量禁带宽度

### H3 杂质半导体载流子浓度和费米能级

1. 浅能级，掺杂一种

1. 电子在杂质能级的分布

杂质能级与允带能级的不同：

形成共价键，只能有一个电子，该电子是任意自旋的

施主杂质能级电子占据概率：

$$f_D = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}e^{\frac{E_D-E_F}{k_0T}}} \quad (46)$$

受主杂质能级占据概率：

$$f_A = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_A - E_F}{k_0 T}}} \quad (47)$$

施主未电离电子浓度

$$f_D N_D = n_D \quad (48)$$

施主电离电子浓度(向导带提供电子)

$$(1 - f_D) N_D = n_D^+ \quad (49)$$

未电离受主

$$f_A N_A = n_A \quad (50)$$

电离受主(得到电子，或者说向价带打出空穴)

$$(1 - f_A) N_A = p_A^- \quad (51)$$

施主始终只跟导带联系，受主只跟价带联系

## 2. 不同温度区间的电子空穴浓度与费米能级

电中性->费米能级->浓度

下面以掺杂施主为例

1. 低温区：只有杂质能级激发，没有本征激发 (100K)

根据能带论的观点(或者电中性原理):  $n_0 = n_D^+ = (1 - f_D) N_D$

根据前面所学，导带电子浓度为:  $n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right)$

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_D - E_F}{k_0 T}}}\right) N_D = \frac{1}{1 + 2e^{\frac{E_F - E_D}{k_0 T}}} N_D \quad (52)$$

在低温温度时  $T \rightarrow 0$ , 此时上式右侧指数项远远大于1, 于是有

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{E_F - E_D}{k_0 T}\right) N_D \quad (53)$$

即

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{E_F - E_c - E_D + E_F}{k_0 T}\right) &= \frac{N_D}{2N_c} \\ \Rightarrow E_F &= \frac{1}{2}(E_c + E_D) + \frac{1}{2} k_0 T \ln \frac{N_D}{2N_c} \end{aligned} \quad (54)$$

带入费米能级的表达式回到导带电子浓度就能得到

$$n_0 = \sqrt{\frac{N_D N_c}{2}} \exp\left(-\frac{\Delta E_D}{2k_0 T}\right), \Delta E_D = E_c - E_D \quad (55)$$

1. 费米能级与掺杂浓度有关
2. 在  $N_c = 0.11 N_D$  时费米能级取得最大值
3. 在  $N_D = 2N_c$  时费米能级重新回到  $\frac{E_c + E_D}{2}$

## 2. 中等电离：依然只有杂质能级电离 (100-500K)

与低温区电离的区别是，中等电离时  $2 \exp(\frac{E_F - E_D}{k_0 T})$  不再满足远远大于1，因此不能近似处理，此时需要进行严格求解

$$\chi = \exp\left(\frac{E_F}{k_0 T}\right) \quad (56)$$

严格解的结果为

$$\chi = \frac{1}{4} \exp\left(\frac{E_D}{k_0 T}\right) \left[ \left(1 + \frac{8N_D}{N_c} \exp\left(\frac{E_D}{k_0 T}\right)\right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right] \quad (57)$$

1. 当施主杂质电离到导带的浓度  $N_D^+ = \frac{1}{3} N_D$  时， $E_F = E_D$

## 3. 中温区：饱和区，强电离区，此时施主杂质全部电离

$$n_0 = N_D \quad (58)$$

$$\begin{cases} n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_0 T}\right) \\ n_0 = N_D = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} E_F = E_i + k_0 T \ln \frac{n_0}{n_i} \\ E_F = E_c + k_0 T \ln \frac{N_D}{N_c} \end{cases} \quad (59)$$

费米能级在  $E_i$  之上，在  $E_c$  之下，准确地，在  $E_D$  之下

## 4. 高温区：杂质完全电离，并且存在本征激发 (500K)

$$\begin{aligned} n_0 &= N_D + p_0 \\ n_0 p_0 &= n_i^2 \\ \Rightarrow n_0^2 - n_0 N_D - n_i^2 &= 0 \end{aligned} \quad (60)$$

$$\begin{cases} n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_0 T}\right) \\ n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \end{cases} \quad (61)$$

$$n_0 = \frac{N_D \pm \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}}{2} \quad (62)$$

$$\begin{cases} E_F = E_i + k_0 T \ln \frac{n_0}{n_i} \\ E_F = E_c + k_0 T \ln \frac{n_0}{N_c} \end{cases} \quad (63)$$

- 1. 当温度升高，本征激发增强，温度一直增高最终的结果就是  $n_0 \approx n_p$ ，即本征状态， $E_F = E_i$
- 2. 费米能级始终不小于  $E_i$
- 3. 掺杂浓度  $N_D$  增大，则发生本征激发的温度要求就越高
- 4. 禁带宽度增大，浓度积就会下降，本征激发所要求的温度就要更高

### Tips 掺杂受主

如果掺杂的是受主，上面的各个分析过程是一致地，在各个公式中做如下替代就行：

$$\begin{aligned} E_c &\rightarrow E_v \\ n_0 &\rightarrow p_0 \\ E_D &\rightarrow E_A \\ E_c - E_F &\rightarrow E_F - E_v \end{aligned} \quad (64)$$

所得的费米能级图样与施主图样关于本征费米能级对称

### H3 杂质补偿半导体的载流子浓度和费米能级

思路：通过电中性条件，导出费米能级，进一步得到电子和空穴浓度

杂质补偿：掺杂至少两种杂质，同一区域内同时含有施主和受主原子

#### 1. 电中性条件

$$n_0 + P_A^- = p_0 + n_D^+ \quad (65)$$

#### 2. 当施主浓度大于受主浓度，N半导体

依然三个温度区间

##### 1. 低温区

$$\begin{aligned} n_0 + N_A &= n_D^+ = (1 - f_D)N_D \\ n_0 + N_A &= N_D - n_D = N_D - f_D N_D \\ \frac{n_0(n_0 + N_A)}{N_D - N_A - n_0} &= \frac{n_0(1 - f_D)}{f_D} = n_0 \left( \frac{1}{2} \exp \frac{(E_D - E_F)}{k_0 T} \right) \\ &= \frac{N_c}{2} \exp \frac{-(\Delta E_D)}{k_0 T} \end{aligned} \quad (66)$$

温度低时  $n_0 \ll N_A$

$$\begin{aligned} \frac{n_0(n_0 + N_A)}{N_D - N_A - n_0} &\approx \frac{n_0 N_A}{N_D - N_A} \\ n_0 &= \frac{N_c(N_D - N_A)}{N_A} \exp \frac{-(\Delta E_D)}{k_0 T} \\ n_0 &= N_c \exp \frac{-(E_c - E_F)}{k_0 T} \\ \Rightarrow E_F &= E_D + k_0 T \ln \frac{N_D - N_A}{2N_A} \end{aligned} \quad (67)$$

#### 2. 中等电离区 $N_A \ll n_0 \ll N_D$

$$\begin{aligned} \frac{n_0(n_0 + N_A)}{N_D - N_A - n_0} &\approx \frac{n_0^2}{N_D} \\ n_0 &= \sqrt{\frac{N_C N_D}{2}} \exp \frac{-\Delta E_D}{2k_0 T} \\ E_F &= \frac{E_c + E_D}{2} + \frac{k_0 T}{2} \ln \frac{N_D}{2N_c} \end{aligned} \quad (68)$$

#### 3. 中温区，杂质全电离

$$\begin{aligned} n_0 + N_A &= N_D \\ N_c \exp \frac{-(E_c - E_F)}{k_0 T} &= N_D - N_A \\ E_F &= E_c + k_0 T \ln \frac{N_D - N_A}{N_c} \end{aligned} \quad (69)$$

#### 4. 高温区，本征激发

$$\begin{aligned} n_0 + N_A &= N_D + p_0 \\ n_0 p_0 &= n_i^2 \\ E_F &= E_i + k_0 T \ln \frac{n_0}{n_i} \\ E_F &= E_c + k_0 T \ln \frac{n_0}{N_c} \end{aligned} \tag{70}$$

### H3 简并半导体

Tips 开始使用费米分布函数

前面我们的讨论的问题都是非简并情况，暗含的条件一般是掺杂浓度与晶体或半导体原子浓度相比是很小的。这些少量的杂质原子扩散速度足够快，因此不存在杂质原子间的相互作用

如果掺杂浓度高，杂质原子之间的距离逐渐缩小，达到杂质原子间出现相互作用的情况时，单一的分立的施主能级或受主能级就将分裂成一个能带。随着施主或受主浓度进一步增加，施主或受主能带变宽并可能与导带底或价带顶交叠，此时就形成简并半导体

上图的横坐标为  $\varepsilon = \frac{E_F - E_c}{2k_0 T}$ ，我们认为当  $E_c - E_F \geq 2k_0 T$  时，即在上图左侧部分，半导体是非简并的；在两者划线中间部分半导体处于弱简并状态；当  $E_F \geq E_c$  时，半导体是简并的

简并半导体不再服从玻尔兹曼分布而服从费米分布

#### 1. 简并半导体的载流子浓度

$$n_0 = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{\infty} f(E) g(E) dE = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c F_{0.5}(\varepsilon) \tag{71}$$

#### 2. 简并化条件

$$E_c - E_F \geq 2k_0 T \quad \text{非简并}$$

$$2k_0 T \geq E_c - E_F \geq 0 \quad \text{弱简并} \tag{72}$$

$$E_c - E_F \leq 0 \quad \text{简并}$$

#### 3. 简并半导体

电中性条件

$$\begin{aligned} n_0 &= n_D^+ = (1 - f_D) N_D \\ &= \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)}\right) N_D \\ &= \frac{1}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T}\right)} N_D \end{aligned} \tag{73}$$

考虑简并条件  $E_c = E_F$

$$E_D - E_F$$

$$\begin{aligned}
N_D &= [1 + 2 \exp(-\frac{\epsilon}{k_0 T})] n_0 \\
&= [1 + 2 \exp(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T})] \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c F_{0.5}(0) \\
&= [1 + 2 \exp(-\frac{E_D - E_c + E_c - E_F}{k_0 T})] \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c * 0.7 \\
&= [1 + 2 \exp(\frac{\Delta E_D}{k_0 T})] N_c * 0.79
\end{aligned} \tag{74}$$

1. 简并发生时,  $N_D > N_c$
2. 电离能越大, 则需要更高的杂质浓度才能发生简并。可以理解为电离能越大, 施主电离越困难, 相同情况下费米能级越低
3. 简并发生时有一个温度区间
4. 简并发生时杂质电离不充分

$$\begin{aligned}
\frac{n_D^+}{N_D} &= \frac{1}{1 + 2 \exp(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T})} \\
&= \frac{1}{1 + 2 \exp(\frac{\Delta E_D}{k_0 T})} \leq \frac{1}{3}
\end{aligned} \tag{75}$$

5. 简并发生时杂质带导电

简并重掺杂导致简并化, 杂质原子的近距离让相互作用不可忽略, 产生共有化运动, 杂志能级展宽为杂志能带, 会出现简并化效应, 杂质电离不充分

- 电离能 $\Delta E_D, \Delta E_A$ 下降
- 禁带宽度 $E_g$ 变窄
- 出现杂质带导电, 即杂质能带与价带连接上

## H2 半导体的导电性

本章在弱电场下讨论问题, 主要关注的内容有:

1. 迁移率 $\mu$
2. 导电率 $\sigma$
3. 漂移速度
4. 平均自由时间 $\tau$

### H3 载流子的漂移运动

#### 1. 迁移率

在电场作用下，晶体中的空穴获得加速度加速，当载流子同晶体中的原子碰撞后会损失能量，之后再次加速获得能量直到再次散射。在这样一个重复的过程中粒子将具有一个平均漂移速度，这个速度与外加电场强度大小成正比

$$\vec{v} = \mu \vec{E} \quad (76)$$

上式中的比例系数就称为空穴迁移率

迁移率的大小反映载流子在外电场作用下的运动能力

#### 2. 漂移电流密度

$$\vec{J} = nq\vec{v} = nq\mu\vec{E} = \sigma\vec{E} \quad (77)$$

电子漂移电流密度

$$J_e = nq\mu_n E \quad (78)$$

空穴漂移电流密度

$$J_p = pq\mu_p E \quad (79)$$

半导体总漂移电流密度为上述两式之和

半导体类型	电流密度	电导率
n型	$nq\mu_n E$	$nq\mu_n$
p型	$pq\mu_p E$	$pq\mu_p$
本征	$n_i q(\mu_n + \mu_p) E$	$n_i q(\mu_n + \mu_p)$

#### 3. 迁移率与平均自由时间的关系

$$\begin{aligned}\vec{F} &= m \frac{dv}{dt} = qE \\ v &= \frac{qEt}{m} = \mu E \\ \Rightarrow \mu &= \frac{qt}{m}\end{aligned} \quad (80)$$

在半导体物理中，我们存在电子和空穴的迁移率，他们的定义分别如下：

$$\begin{aligned}\mu_n &= \frac{q\tau_n}{m_n^*} \\ \mu_p &= \frac{q\tau_p}{m_p^*}\end{aligned} \quad (81)$$

### H3 载流子的散射机制

半导体物理中影响载流子迁移率的散射机制主要是两种：晶格散射和杂质散射

温度一定时，格点原子在平衡位置附近的振动对散射有贡献，格点原子的振动是由若干基本波动按照波的叠加原理组合而成，称为格波的叠加

载流子受到的散射包含内部和外部作用。在内部，载流子与极点原子、杂质原子等会发生碰撞，遭到散射；在外场作用下，载流子在漂移运动时会发生散射碰撞，使得运动方向和速度大小不断改变而不能无限积累。下面指出一些概念

自由载流子：指连续两次散射之间是自由的

平均自由程：连续两次散射之间自由运动的平均路程

平均自由时间：连续两次散射之间所经历的自由时间的平均值

固体物理学认为，载流子遭到散射的根本原因是晶格的周期性势场遭到破坏而产生了附加势场，下面的分析基于锗硅砷化镓

#### 1. 声学波与光学波

晶格格点原子的振动是由格波叠加而成，主要分为声学波和光学波两类

格波能量是不连续的，基本能量单元称为声子，分立值等效为线性谐振子的能量

格波能量的平均值为

$$\left[ \frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1} \right] h\nu + \frac{1}{2} h\nu \quad (82)$$

平均声子数为

$$\bar{n} = \left[ \frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1} \right] \quad (83)$$

#### 2. 主要散射机制

##### 1. 杂质电离

杂质电离散射概率如下：

$$P_i \propto N_i T^{-\frac{3}{2}} \quad (84)$$

杂质电离散射是普遍存在的，锗硅砷化镓等半导体都需要考虑电离散射

##### 2. 声学波散射

声子波散射概率如下：

$$P_s \propto T^{\frac{3}{2}} \quad (85)$$

对应锗硅砷化镓都需要考虑

##### 3. 光学波散射

光子波散射概率如下：

$$P_o \propto \frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1} \quad (86)$$

砷化镓需要考虑光学波散射

#### 4. 其它散射类型

等能谷间散射、中性杂质散射、位错散射、载流子间散射

1. 等能谷在高温下起到的散射作用显著
2. 中性杂质散射在低温、重掺杂条件下散射作用显著
3. 载流子间散射在重掺杂、强简并条件下散射作用显著

#### 3. 散射几率 $P$

我们用散射几率定量描述散射作用的强弱。散射几率的物理意义是单位时间内一个载流子遭到散射的次数

下面给出散射概率和平均自由时间的关系

设  $t$  时刻尚未被散射的粒子数为  $N(t)$ , 则在  $t + \Delta t - t$  时间内被散射的粒子数为:

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

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{N(t + \Delta t) - N(t)}{\Delta t} = \frac{dN}{dt} \quad (87)$$

$$\Rightarrow N(t) = N_0 \exp(-Pt)$$

平均自由时间:

$$\tau = \frac{\int_0^\infty t N(t) P dt}{N_0} = \frac{1}{P} \quad (88)$$

上式就是散射概率与平均自由时间的关系

### H3 迁移率电导率与平均自由时间的关系

#### 1. $\mu$ 与 $\tau$ 的关系

设外加电场沿  $x$  方向, 并且电子有效质量  $m_n^*$  各向同性

$$\begin{aligned} v_x &= v_0 - \frac{qE}{m_n^*} t \\ \langle v_x \rangle &= \langle v_0 \rangle - \frac{qE}{m_n^*} \langle t \rangle \\ \Rightarrow \langle v_x \rangle &= -\frac{qE}{m_n^*} \tau \\ \mu &= \left| \frac{\langle v_x \rangle}{E} \right| = \frac{q}{m_n^*} \tau \end{aligned} \quad (89)$$

电子迁移率

$$u_n = \frac{q}{m_n^*} \tau_n \quad (90)$$

空穴迁移率

$$\dots - q -$$

(81)

$$u_p = \frac{1}{m_p^*} \cdot p \quad (91)$$

## 2. $\sigma$ 与 $\tau$ 的关系

$$\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p = nq^2 \left( \frac{\tau_n}{m_{n^*}} + \frac{\tau_p}{m_p^*} \right) \quad (92)$$

## 3. 电导有效质量 $m_{cn}^*$ , $m_{cp}^*$

### 1. 硅导带

硅的等能面是六个旋转椭球面，电子在这些能谷上的分布是一致的，假设外场沿 $[1, 0, 0]$ 方向，并认为质量是各向异性的

$$\begin{aligned} J &= \sum_i nq\mu_i E = \frac{2}{6} nq\mu_l E + \frac{4}{6} nq\mu_t E \\ &= \frac{1}{3} nqE \left( \frac{q}{m_l^*} \tau + \frac{2q}{m_t^*} \tau \right) \end{aligned} \quad (93)$$

电导有效质量定义为

$$\frac{1}{m_{cn}^*} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*} \right) \quad (94)$$

电导有效质量将质量的张量性质和多极值(能谷)的特点考虑了进去

### 2. 锗导带

锗的极值在 $[1, 1, 1]$ 方向上，等效有四个旋转椭球面，电子在等能谷上具有一致的分布，假设外场沿 $[0, 0, 1]$ 方向，考虑质量的张量性，将外场(或电流密度)投射在极值方向和垂直于极值方向的分解，并设 $[0, 0, 1], [1, 1, 1]$ 向量角为 $\alpha$

$$\vec{J}_z = \vec{J}_l + \vec{J}_t = nq\mu_l \vec{E}_l + nq\mu_t \vec{E}_t \quad (95)$$

$$\begin{aligned} J_z &= J_l \cos \alpha + J_t \sin \alpha \\ &= nq\mu_l E_l \cos \alpha + nq\mu_t E_t \sin \alpha \\ &= nq\mu_l E \cos \alpha^2 + nq\mu_t E \sin \alpha^2 \\ &= \frac{1}{3} nq\mu_l E + \frac{2}{3} nq\mu_t E \end{aligned} \quad (96)$$

于是电导有效质量为

$$\frac{1}{m_{cn}^*} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{m_l^*} + \frac{2}{m_t^*} \right) \quad (97)$$

形式上与硅是一样的

### 3. 锗硅价带

空穴分为轻空穴和重空穴两类，重空穴所占据的比率约为80%

空穴电导有效质量为

$$\frac{1}{m_{cp}^*} = \frac{m_{pl}^{*\frac{1}{2}} + m_{ph}^{*\frac{1}{2}}}{m_{dp}^{*\frac{3}{2}}} \quad (98)$$

1. 锗、硅各个能谷上对迁移率、电导率的贡献不同，但是总的电导率和迁移率是各向同性的

2. 当我们关注的问题与运动有关时，考虑迁移率、电导率和电导有效质量

当我们关注的问题与浓度有关时，考虑态密度有效质量

### H3 迁移率电导率与掺杂浓度的关系

#### 1. 正比关系回顾

散射类型	散射几率	平均自由时间	迁移率
电离杂质	$N_i T^{-\frac{3}{2}}$	$N_i^{-1} T^{\frac{3}{2}}$	$N_i^{-1} T^{\frac{3}{2}}$
声学波	$T^{\frac{3}{2}}$	$T^{-\frac{3}{2}}$	$T^{-\frac{3}{2}}$
光学波	$\frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1}$	$\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1$	$\exp(\frac{h\nu}{kT}) - 1$

当多种散射机制存在时，这些散射机制彼此间是独立的，因此总的散射概率等于这些散射机制散射概率的直和。一般地只需要找出主要的散射机制，散射几率和迁移率受主要散射机制的影响程度更大

#### 2. 锗硅等元素半导体

主要散射机制是杂质电离散射和声学波散射

$$\begin{aligned} P &= P_i + P_s \\ \mu &= \frac{q}{m_n^*} \tau = \frac{q}{m_n^*} \frac{1}{P} \\ &= \frac{q}{m_n^*} \frac{1}{AT^{\frac{3}{2}} + BN_i T^{-\frac{3}{2}}} \end{aligned} \tag{99}$$

##### 1. 低掺杂( $10^{13} - 10^{16} cm^{-3}$ )

此时声学波散射占主导，随温度上升散射几率增大，迁移率和平均自由时间降低

##### 2. 中掺杂( $10^{18} cm^{-3}$ )

声学波和杂质电离同时作用，迁移率下降趋势减缓

##### 3. 高掺杂( $10^{17} - 10^{19} cm^{-3}$ )

在 $-100 \sim 0^\circ C$ ，此时杂质电离散射占主导，随温度上升散射几率降低，迁移率和平均自由时间增大；在 $0 \sim 200^\circ C$ 之间基本不变，此时杂质电离和声学波同时起作用；在 $250^\circ C$ 以上声学波主导，随温度上升迁移率降低

#### 3. 砷化镓等化合物半导体

主要散射机制是杂质电离、声学波和光学波散射

##### 1. 低温

杂质电离占主导，随温度上升散射几率降低，迁移率和平均自由时间增大

##### 2. 高温

光学波散射主导，随温度增大散射几率增大，迁移率和平均自由时间降低

3. 迁移率随温度的整体曲线趋势为先升高后下降
4. 对于同一种材料，电子的迁移率高于空穴的迁移率，电子的有效质量小于空穴的有效质量  
同一情况下，砷化镓的迁移率高于锗的迁移率高于硅的迁移率

## H3 电阻率与掺杂浓度和温度的关系

### 1. 描述

电阻率是电导率的倒数，表达式中的载流子浓度与迁移率均与掺杂浓度与温度有关，变化关系复杂

在低温时，杂质电离主导，随着温度升高，迁移率增大，载流子浓度也在增大，因此电阻率随温度增大降低  
温度逐渐升高而逐渐步入强电离区，此时声学波散射占主导，随温度增大，迁移率降低，而载流子浓度几乎等于掺杂浓度，因此随温度升高电阻率增大

温度进一步升高，本征激发出现并快速增强，载流子浓度急剧增大，电阻率降低

## H3 霍尔效应

### 1. 霍尔效应

#### 1. p型半导体

设磁场加载在 $z$ 轴正向，电流沿 $x$ 轴正向流动，受洛伦兹力作用，空穴将向 $y$ 轴负方向偏转，形成 $y$ 轴正向的电场，据此受力平衡时

$$qE_y = qV_x B_z$$

$$\Rightarrow E_y = V_x B_z$$

$$\therefore J_x = pqV_x$$

$$\therefore E_y = \frac{J_x B_z}{pq} \quad (100)$$

$$(R_H)_P = \frac{1}{pq}$$

$$\Rightarrow E_y = (R_H)_P J_x B_z$$

#### 2. n型半导体

$$(R_H)_n = -\frac{1}{nq} \quad (101)$$

$$E_y = (R_H)_n J_x B_z$$

#### 3. 两种载流子同时存在

在 $y$ 方向上存在四种电流密度，分别是：空穴在磁场偏转形成、电子在磁场偏转形成、空穴在附加电场作用形成、电子在附加电场作用形成，以 $+y$ 为正方向

$$\begin{aligned} J_{py} &= pq\mu_p E_y - pq\mu_p^2 E_x B_z \\ J_{ny} &= nq\mu_n E_y + nq\mu_n^2 E_x E_z \end{aligned} \quad (102)$$

稳定时 $y$ 向电流为零

$$0 = J_{py} + J_{ny}$$

$$E_y = \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{p\mu_p + n\mu_n} E_x B_z$$

$$\therefore J_x = (pq\mu_p + nq\mu_n) E_x$$

$$\therefore E_y = \frac{1}{q} \frac{p\mu_p^2 - n\mu_n^2}{(p\mu_p + n\mu_n)^2} J_x B_z \quad (103)$$

$$b = \frac{\mu_n}{\mu_p}$$

$$R_H = \frac{1}{q} \frac{p - nb^2}{(p + nb)^2}$$

对于本征半导体,  $R_H < 0$

对于 $n$ 型半导体,  $R_H < 0$

对于 $p$ 型半导体, 温度较低时电子数目少,  $R_H > 0$ ; 温度增加本征激发增强后 $R_H \leq 0$

#### 4. 电导率、霍尔系数与迁移率的关系

$$\begin{aligned} \sigma &= nq\mu_n \\ R_{Hn} &= -\frac{1}{nq} \\ \mu_n &= -R_{Hn}\sigma \\ \mu_p &= +R_{Hp}\sigma \end{aligned} \quad (104)$$

#### 5. 霍尔效应作用

**Tips**    **note**

1. 判断载流子类型,  $p$ 型半导体霍尔电压为正,  $n$ 型半导体霍尔电压为负
2. 在饱和区(强电离区), 可以确定载流子浓度
3. 与电导率同时测量可以得到载流子迁移率

#### 2. 霍尔角: 感生电场与源电场正切, 取小量近似

$$\theta = \frac{E_y}{E_x} = \frac{R_H J_x B_z}{J_x} \sigma = R_H \sigma B_z \quad (105)$$

对于 $n$ 型半导体

$$\theta = -\frac{1}{nq} nq\mu_n B_z = -\mu_n B_z = -\frac{q}{m_n^*} \tau B_z \quad (106)$$

对于 $p$ 型半导体

$$\theta = \mu_p B_z = \frac{q}{m_p^*} \tau B_z \quad (107)$$

### H3 磁阻

由于磁场存在引起电阻增加的效应称为磁阻效应。按照机理分类，分为物理磁阻效应和几何磁阻效应。物理磁阻效应是由于电阻率变化引起的；几何磁阻效应是由于几何尺寸变化引起的。

#### 1. 物理磁阻

稳定时，如果不考虑载流子的速度分布，那么全部的载流子都将沿电场方向运动而不表现出横向磁阻效应；如果考虑速度分布，则速度会产生横向分量，是的受到散射的概率变大，因此产生横向磁阻效应。

#### 2. 几何磁阻

当载流子电流密度与电场强度存在夹角时，并且满足在边界处电场方向垂直于边界的条件，那么载流子在导体中的运动就不再是直线而是一条曲线，这就改变了几何尺寸，从而产生几何磁阻。

### H3 电导霍尔效应的统计分布

存在外场(电场、磁场、温度梯度等)时，电子的分布函数 $f$ 将会成为倒格子空间、坐标空间和时间 $\vec{k}, \vec{r}, t$ 的函数。

$$f = f(\vec{k}, \vec{r}, t) \quad (108)$$

#### 1. 玻尔兹曼方程的建立

电子数目的改变是由分布函数随时间变化引起的，导致分布函数变化的两个主要原因是：外场引起的漂移变化和散射作用。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (\frac{\partial f}{\partial t})_d + (\frac{\partial f}{\partial t})_s \quad (109)$$

考虑波矢在 $\vec{k} \sim \vec{k} + d\vec{k}$ ，位矢 $\vec{r} \sim \vec{r} + d\vec{r}$ 的相空间体积元在 $dt$ 时间内的粒子数变化

$$dN(k, r, t + dt) - dN(k, r, t) = 2 \frac{\partial f}{\partial t} dt dk dr \quad (110)$$

由漂移作用引发的变化为

$$(\frac{\partial f}{\partial t})_d = -[\nabla_k f \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} + \nabla_r f \cdot \frac{d\vec{r}}{dt}] \quad (111)$$

由散射作用引发的变化为

$$(\frac{\partial f}{\partial t})_s = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (112)$$

定态时，或者说稳定时分布函数与时间无关

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (\frac{\partial f}{\partial t})_d + (\frac{\partial f}{\partial t})_s = 0 \quad (113)$$

$$[\nabla_k f \cdot \frac{d\vec{k}}{dt} + \nabla_r f \cdot \frac{d\vec{r}}{dt}] = -\frac{f - f_0}{\tau} = (\frac{\partial f}{\partial t})_s \quad (114)$$

式(114)称为玻尔兹曼方程

不存在温度梯度时( $f_0$ 为稳定分布函数)

$$[\nabla_k f \cdot \frac{d\vec{k}}{dt}] = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (115)$$

注意到

$$\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt} = \hbar \frac{d\vec{k}}{dt} \quad (116)$$

考虑为弱电磁场作用

$$\vec{F} = -q[\vec{\varepsilon} + (\vec{v} \times \vec{B})] \quad (117)$$

将分布函数进行泰勒展开( $\Delta f$ 统一表示各阶导数项)

$$f = f_0 + \Delta f \quad (118)$$

于是式(115)为

$$\frac{q\tau}{\hbar} [\vec{\varepsilon} + (\vec{v} \times \vec{B})] \cdot \nabla_k f = \Delta f \quad (119)$$

注意到

$$\nabla_k f_0 = \frac{\partial f}{\partial E} \nabla_k E$$

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E \quad (120)$$

$$\vec{v} \cdot (\vec{v} \times \vec{B}) = 0$$

于是式(119)为

$$\frac{q\tau}{\hbar} \vec{\varepsilon} \cdot \nabla_k f_0 + \frac{q\tau}{\hbar} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \nabla_k \Delta f = \Delta f \quad (121)$$

定义零级近似(外场为电场时使用)

$$\Delta f_0 = \frac{q\tau}{\hbar} \vec{\varepsilon} \cdot \frac{\partial f_0}{\partial E} \nabla_k E \quad (122)$$

定义一阶近似(外场包含磁场使用)

$$\Delta f_1 = \frac{q\tau}{\hbar} \vec{\varepsilon} \cdot \nabla_k f_0 + \frac{q\tau}{\hbar} (\vec{v} \times \vec{B}) \cdot \nabla_k \Delta f_0 \quad (123)$$

## 2. 无外场球形等能面的电导率

$dN$ 个速度为 $\vec{v}$ 的载流子形成的电流的电流密度矢量为，并且无外场作用

$$\vec{j} = -q\vec{v}dN$$

$$dN = 2f dk \quad (124)$$

$$\Rightarrow \vec{J} = \int -2q f v dk$$

带入式(118), (123), (125)

$$\vec{J} = -\frac{2q^2}{\hbar} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v} \cdot (\vec{v} \cdot \vec{\varepsilon}) dk \quad (125)$$

$$J_x = -\frac{2q^2}{\hbar} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} v_x^2 \varepsilon_x dk = \sigma_x \varepsilon_x \quad (126)$$

注意到

$$f_0 = \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_0 T}\right)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{f_0}{k_0 T}$$

(127)

$$\sigma = \sigma_{ii}$$

$$v_i^2 = \frac{1}{3} v^2$$

可以得到

$$\sigma = \frac{q^2}{3k_0 T} \int \tau v^2 dn$$

(128)

根据统计物理学

$$\langle \bar{T} \rangle = \frac{3}{2} k_0 T$$

$$\Rightarrow \frac{\int v^2 dn}{\int dn} = \frac{3k_0 T}{m^*}$$

(129)

可以得到

$$\sigma = \frac{q^2}{3k_0 T} \int \tau v^2 dn$$

$$= \frac{q^2}{m^*} \frac{\int \tau v^2 dn}{\int dn} \frac{\int dn}{\int v^2 dn} \int dn$$

$$= \frac{q^2 n}{m^*} \frac{\langle \tau v^2 \rangle}{\langle v^2 \rangle}$$

(130)

注意到

$$\sigma = n q \mu$$

$$\Rightarrow \mu = \frac{q}{m^*} \langle \tau \rangle$$

(131)

可以注意到迁移率的表达式与前面所学是一致的，区别在于平均自由时间是严格的统计平均值

### 3. 有外场球形等能面电导率

$$\vec{J} = \sigma \vec{\varepsilon} + \alpha (\vec{\varepsilon} \times \vec{B})$$

$$J_x = \sigma \varepsilon_x + \alpha \varepsilon_y B_z$$

(132)

$$J_y = \sigma \varepsilon_y - \alpha \varepsilon_x B_z$$

非简并时

$$\alpha = -\frac{nq^3}{m^*} \langle \tau^2 \rangle$$

$$R_H = -\frac{1}{nq} \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$$

霍尔迁移率

$$\mu_{Hn} = R_H \sigma = \frac{\langle \tau^2 v^2 \rangle \langle v^2 \rangle}{\langle \tau v^2 \rangle^2} \quad (134)$$

$$\gamma = \langle \tau v^2 \rangle^2, \quad \text{散射机构}$$

光学波散射比声学波散射具有更大的散射机构值

稳态时  $y$  向上无电流，于是有

$$E_y = \left[ \frac{\alpha}{\sigma^2 + \alpha^2 B_z^2} \right] J_x B_z \approx \frac{\alpha}{\sigma^2} J_x B_z \quad (135)$$

$$\Rightarrow R_H = \frac{\alpha^2}{\sigma^2}$$

### H3 扩展知识点

#### 1. 一维单原子链&色散关系

先回顾线性谐振子的推导，虽然在量力的文章已经写过

假设原子所在的位置为  $na$ ，偏离平衡位置的位移为  $r$ ， $u_n$  表示第  $n$  个原子的坐标  $na$

$$V(r) = V(na) + \sum_i \frac{1}{i!} \left( \frac{\partial^i V}{\partial u^i} \right) u_n^i \quad (136)$$

极值位置处一阶导数为零，略去二阶以上分量，对势能求梯度的负值就得到相邻原子之间的相互作用力

$$F = -\nabla V(r) = -\beta u_n, \beta = \frac{\partial^2 V}{\partial u^2} |u=0 \quad (137)$$

最近邻假设：假设每个原子只受相邻原子的作用，而忽略非紧邻原子的影响，于是就能得到如下动力学方程

$$m\ddot{u}_n = \beta(u_{n+1} - u_n) - \beta(u_n - u_{n-1}) \quad (138)$$

设形式解为  $A \exp(ikx - i\omega t)$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} |\sin \frac{ka}{2}| \quad (139)$$

可以看到这是一个频带，带宽为  $2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$

#### 色散关系

1. 色散关系来源于牛顿棱镜散射实验，我们将频率与折射率的关系称为色散关系
2. 广义上说，频率与一切与折射率有关的物理量的关系都可以称为色散关系，比如折射率与相对介电常数有关，因此相对介电常数与频率的关系也成为色散关系；光入射介质后波矢发生变化，波矢与折射率有关，因此也是色散关系

基于玻恩-卡曼边界条件：将原子链环绕成环，环的长度必须为波长的整数倍

$$\begin{aligned} u(na + Na) &= u(na) \\ A \exp(i(k(N+n)a - \omega t)) &= A \exp(i(kna - \omega t)) \\ kNa &= 2m\pi \\ k &= m \frac{2\pi}{Na} \end{aligned} \tag{140}$$

从而 $k$ 的取值是分立的

## 2. 格波

上面的公式可以描述所有 $N$ 个原子的运动，即描述了 $N$ 个原子的集体行为

**晶体原子这种类似波动的集体运动称为格波**

格波的特点就是波矢只能取分立的数值，一个 $k$ 就会对应一个频率模式，因此可以把一种格波称为一种振动模式

由于 $\omega$ 是周期函数， $\omega(k) = \omega(k + G)$ ， $G$ 为倒格矢 $\frac{2\pi}{a}m$ 。这说明不同 $k$ 可能会对应同一个振动模式，因此不是所有的格波都是独立的

可以看到，一维单原子链的独立取值有 $N$ 个，也是独立格波数量

**总自由度数=独立格波数**

## 3. 一维双原子链

所谓双原子指的是一个原胞中含有两个原子

双原子链的独立取值依然是 $N$ 个，不同的一个 $k$ 对应两个振动模式 $\omega_-$ ,  $\omega_+$ ，因此独立格波数目为 $2N$ 个

## 4. 光学支和声学支

属于 $\omega_+$ 的 $N$ 个格波称为光学支，属于 $\omega_-$ 的 $N$ 个格波称为声学支

**同一个 $k$ 的光学支恒大于声学支，两支之间的差值称为带隙或者禁带，振动频率不会等于禁带中的频率**

对于光学支，一个原胞中两个原子的振动方向相反

对于声学支，一个原胞中两个原子的振动方向相同

光学支的两原子振动方向相反，在运动过程中电偶极矩会发生变化，进而影响电极化强度矢量，进而影响电位移矢量，因此会对光学性质造成影响<sup>1</sup>

$$\begin{aligned} \vec{P} &= Nq\vec{l} \\ \vec{D} &= \epsilon_0 E + \vec{P} = \epsilon\vec{E} \end{aligned} \tag{141}$$

声学支的两原子振动方向相同，原胞内原子的两原子可以视为整体运动，可以看成连续介质。对应的波看成是连续介质中的弹性波

	原胞数	晶格振动波矢数	原胞内原子数	总自由度数	独立格波数	分支数	分支情况
一维单原子链	N	N	1	N	N	1	1支声学波
一维双原子链	N	N	2	2N	2N	2	1支声学波 1支光学波
一维P原子链	N	N	P	PN	PN	P	1支声学波 P-1支光学波
三维单原子链 (三维单原子晶体)	N	N	1	3N	3N	3	3支声学波 (1纵2横)
三维P原子链 (三维晶体)	N	N	P	3PN	3PN	3P	3支声学波 <small>1纵2横</small> 3P-3支光学波

特别说明的是，对于三维晶体含有三支声学波，包含一支纵波和两支横波。  
一个常见误区是认为三个方向上各有  
一支声学波

## H2 半导体中的非平衡过剩载流子

前面我们的讨论是建立在热平衡状态上的，而如果半导体受到外部激励，那么在热平衡浓度之外，导带和价带分别会产生过剩的电子和空穴

过剩电子和空穴不是相互独立运动的，他们的扩散、漂移和复合具有相同的有效扩散系数、迁移率和寿命，这种现象称为双极运输

过剩电子和空穴的产生意味着半导体不在处于热平衡状态而对应为非平衡状态，据此将引入电子准费米能级和空穴准费米能级

产生非平衡载流子的方法主要是电注入和光注入；根据注入量大小分为大注入和小注入。我们主要关注小注入，小注入指的是过剩载流子数目远小于多子，远大于少子的情况

### H3 非平衡载流子的产生与复合

#### 1. 非简并热平衡态

具有统一的费米能级时半导体处于热平衡态的标志

$$n_0 p_0 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right) = n_i^2 \quad (142)$$

上式即热平衡态的判据

#### 2. 产生与复合

产生是电子和空穴的生成过程；复合时电子和空穴消失的过程

热平衡时电子和空穴的浓度与时间无关，通常也与位置无关；过剩电子空穴浓度与总电子空穴浓度可能是时间或位置的函数

符规范号说明如下：

符号	定义
$n_0, p_0$	热平衡电子、空穴浓度
$n, p$	非平衡电子、空穴浓度
$\Delta n, \Delta p$	过剩电子、空穴浓度
$R_n, R_p$	过剩电子、空穴复合率

## 符号

## 定义

 $g_n, g_p$ 

过剩电子、空穴产生率

 $\tau_n, \tau_p$ 

过剩少数载流子电子、空穴寿命

直接带间产生或复合的电子和空穴是成对存在的，即 $\Delta n = \Delta p$

## 3. 非平衡载流子寿命

直接带间复合是一种自发行为，电子和空穴的复合率相对时间是一个常数，复合的概率同时与电子和空穴的浓度成比例。电子浓度的变化比率为

$$\begin{aligned} \frac{dn(t)}{dt} &= a[n_i^2 - n(t)p(t)] \\ n(t) &= n_0 + \Delta n(t) \\ p(t) &= p_0 + \Delta p(t) \\ \frac{d\Delta n}{dt} &= -a\Delta n[(n_0 + p_0) + \Delta n] \end{aligned} \tag{143}$$

在p型半导体小注入条件下 $p_0 \gg n_0, p_0 \gg \Delta n$

$$\begin{aligned} \frac{d\Delta n(t)}{dt} &= -a\Delta n(t)p_0 \\ \Delta n &= \Delta n(0) \exp(-ap_0 t) = \Delta n(0) \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right), \tau_n = (ap_0)^{-1} \end{aligned} \tag{144}$$

上式描述过剩少数载流子电子的寿命

复合率都是正数，过剩少数载流子电子的复合率定义为

$$R_n = \frac{\Delta n(t)}{\tau_n} \tag{145}$$

直接带间复合的电子和空穴具有相同复合率，因此对于p型半导体有

$$R_n = R_p = \frac{\Delta n(t)}{\tau_n} \tag{146}$$

同理，对于直接带间复合小注入的n型半导体有

$$R_n = R_p = \frac{\Delta n(t)}{\tau_p} \tag{147}$$

过剩载流子的产生率不是电子或空穴浓度的函数，一般地，产生率和复合率时空间和时间的函数

小注入条件下，非平衡载流子的寿命可以视为常数

小注入情况下，过剩少子浓度比平衡少子浓度大得多，非平衡少子浓度近似等于过剩少子浓度

在小注入情况下，占主导地位的过剩载流子浓度是过剩少子浓度，考虑过剩载流子问题时一般只考虑过剩shao'zi

### H3 准费米能级

#### 1. 非平衡状态下载流子浓度

$$\begin{aligned} n &= n_0 + \Delta n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F^n}{k_0 T}\right) \\ &= N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F + E_F - E_F^n}{k_0 T}\right) \end{aligned} \tag{148}$$

$$\begin{aligned} &= n_0 \exp\left(-\frac{E_F - E_F^n}{k_0 T}\right) \\ &= n_i \exp\left(\frac{E_F^n - E_i}{k_0 T}\right) \\ p &= p_0 + \Delta p = N_v \exp\left(-\frac{E_F^p - E_v}{k_0 T}\right) \\ &= p_0 \exp\left(-\frac{E_F^p - E_F}{k_0 T}\right) \\ &= n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F^p}{k_0 T}\right) \end{aligned} \tag{149}$$

#### 2. 非平衡态浓度积

$$np = n_i^2 \exp\left(\frac{E_F^n - E_F^p}{k_0 T}\right) \tag{150}$$

$E_F^n - E_F^p$ 反映了偏离费米能级的程度

#### 3. 准费米能级位置

由前述公式可以得到

$$\begin{aligned} E_F^n - E_F &= k_0 T \ln\left(1 + \frac{\Delta n}{n_0}\right) > 0 \\ E_F - E_F^p &= k_0 T \ln\left(1 + \frac{\Delta p}{p_0}\right) > 0 \end{aligned} \tag{151}$$

即电子准费米能级高于费米能级，空穴准费米能级低于费米能级

电子与空穴准费米能级的差距反映样品偏离热平衡态的程度，偏离程度小表明注入弱，偏离程度大表明注入强

### H3 复合理论

#### 1. 复合机理

1. 直接复合：电子在导带和价带之间的直接跃迁，引起电子和空穴的复合，包括带间直接复合和带间俄歇复合
2. 间接复合：电子和空穴通过禁带中的能级，即复合中心，所进行的复合，包括直接俘获和俄歇俘获

非平衡载流子复合要将多余的能量释放出来，释放方式有：

1. 俄歇过程：将能量传递给其他载流子，增大其动能

- 2. 发射光子：伴随复合过程有发光的现象
- 3. 发射声子：载流子将多余的能量传递给晶格

## 2. 位置分类

- 1. 体内复合
- 2. 表面复合
- 3. 直接复合

本节考虑小注入情况， $\Delta p \approx p, \Delta n \ll n_0, \Delta p \ll n_0$

符号声明：

符号	含义
$n$	非平衡电子浓度
$p$	非平衡空穴浓度
$R$	复合率
$G$	产生率
$U_d$	直接净复合率

在温度一定时，复合率和产生率有如下关系

$$R = rnp \quad (r \text{ 为系数}) \quad G = \text{const} \quad (152)$$

在热平衡状态下，产生等于复合，因此

$$rn_0p_0 = G = rn_i^2 \quad (153)$$

在非平衡状态下的直接净复合率为

$$U_d = R - G = rnp - rn_i^2 = \frac{\Delta p}{\tau} \quad (154)$$

### 1. 直接复合所决定的寿命

直接带间复合时有 $\Delta n = \Delta p$

$$\tau = \frac{\Delta p}{rnp - rn_i^2} = \frac{\Delta p}{r[n_0\Delta p + p_0\Delta n + \Delta p\Delta n]} = \frac{1}{r[n_0 + p_0 + \Delta p]} \quad (155)$$

可见直接复合的寿命与热平衡态浓度、非平衡态过剩少子浓度和系数有关

在小注入情况下寿命视为常数， $\Delta p \ll n_0 + p_0, \Delta p \gg p_0$ ，所以有

$$\tau_n = \frac{1}{rn_0} \quad \tau_p = \frac{1}{rp_0} \quad (156)$$

在大注入情况下寿命显著地与非平衡载流子浓度有关，不再可以视为常数

## 4. 间接复合

杂质和缺陷在半导体禁带中引入能级，杂质和缺陷在影响其导电性能的同时还极大地影响载流子的寿命，半导体中的杂质和缺陷越多，寿命越短。我们称具有促进复合作用的杂质和缺陷能级为复合中心能级 $E_t$

下面介绍SRH理论，假设只有一个复合中心能级，该过程包含甲乙丙丁四个部分

参数列表：

符号	含义
$n$	导带电子浓度
$p$	价带空穴浓度
$N_t$	复合中心浓度
$n_t$	复合中心能级电子浓度
$N_t - n_t$	未被电子占据的复合中心浓度
$E_t$	复合中心能级
$n_1, p_1$	复合中心能级 $E_t$ 与费米能级 $E_F$ 重合时的载流子浓度

四过程列表

过程	含义
甲	复合中心能级从导带俘获电子
乙	复合中心能级向导带发射电子
丙	复合中心能级俘获空穴
丁	复合中心能级产生空穴

1. 甲过程：电子俘获率=单位时间单位体积复合中心能级俘获的电子数

$$r_n n (N_t - n_t) \quad (157)$$

2. 乙过程：电子产生率=单位时间单位体积内复合中心能级向导带发射的电子数

$$S_- \cdot n_t \quad S_- \text{ 为电子激发概率} \quad (158)$$

3. 热平衡时甲乙两过程相等

$$r_n n_0 (N_t - n_{t0}) = S_- \cdot n_{t0} \quad (159)$$

$$n_{t0} = \frac{N_t}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_t - E_F}{k_0 T}\right)} \underset{\text{SRH}}{\approx} \frac{N_t}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_F}{k_0 T}\right)} \quad (160)$$

$$\Rightarrow S_- = r_n N_t \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{k_0 T}\right) \quad (161)$$

定义n<sub>1</sub>

$$n_1 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{k_0 T}\right) \quad (162)$$

因此电子激发率为

$$S_- = r_n n_1 \quad (163)$$

4. 丙过程：空穴俘获率

$$r_p n_t p \quad (164)$$

5. 丁过程：空穴产生率

$$S_+ (N_t - n_t) \quad (165)$$

6. 热平衡时丙丁过程同样相等，类似的可以得到

$$S_+ = r_p p_1 \quad (166)$$

$$p_1 = N_v \exp\left(-\frac{E_t - E_v}{k_0 T}\right) \quad (167)$$

7. 在稳态下，甲+丁=乙+丙，即复合中心能级上的电子浓度不变，净复合率为零

$$r_n n (N_t - n_t) + r_p p_1 (N_t - n_t) = r_n n_t n_1 + r_p n_t p \quad (168)$$

$$\Rightarrow n_t = N_t \frac{n r_n + p_1 r_p}{r_n (n + n_1) + r_p (p + p_1)} \quad (169)$$

$$\text{甲} - \text{乙} = \text{丙} - \text{丁} = \text{间接复合净复合率} U \quad (170)$$

$$U = \frac{N_t r_p r_n (np - n_1 p_1)}{r_p (p + p_1) + r_n (n + n_1)} = \frac{\Delta p}{\tau} \quad \text{here } n_1 p_1 = n_i^2 \quad (171)$$

考虑小注入清醒，并且有r<sub>n</sub> ≈ r<sub>p</sub>

$$\Rightarrow \tau = \frac{r_p (p_0 + p_1) + r_n (n_0 + n_1)}{N_t r_p r_n (n_0 + p_0)} \quad (172)$$

**小注入间接复合所决定的非平衡载流子寿命与平衡载流子浓度有关，与过剩载流子无关**

定义E<sub>t'</sub>为E<sub>t</sub>关于本征费米能级的对称能级，以N型半导体为例

1. 如果费米能级比max(E<sub>t'</sub>, E<sub>t</sub>)更接近费米能级，则寿命主要取决于n<sub>0</sub>, p<sub>0</sub>, n<sub>1</sub>, p<sub>1</sub>可以忽略

$$\tau = \frac{1}{N_t r_p} = \tau_p \quad (173)$$

2. 如果费米能级位于本征费米能级与max(E<sub>t'</sub>, E<sub>t</sub>)之间，则此时p<sub>1</sub>起主导作用，余下可以忽略，但n<sub>0</sub>仍然大于p<sub>0</sub>

$$\tau = \frac{p_1}{N_t t_n n_0} \quad (174)$$

前者情况称为强N型，后者称为高阻区，对于P型半导体是类似的

$$\tau = \frac{1}{N_t r_n} = \tau_n \quad (175)$$

$$\tau = \frac{p_1}{N_t t_n p_0} \quad (176)$$

## 8. 晶体管原理的应用

将 $\tau_n, \tau_p$ 代入前面的净复合率公式得到

$$U = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (177)$$

$$n_1 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{k_0 T}\right) = n_i \exp\left(-\frac{E_i - E_t}{k_0 T}\right) \quad (178)$$

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

当复合中心能级趋于本征费米能级时将得到最大的净复合率

- 位于禁带中线附近的深能级时最有效的复合中心能级，而远离禁带中线的浅能级不能起到有效复合中心的作用

## H3 非平衡载流子少子的扩散运动

下面以 $n$ 型半导体为例，撰写正文之前先注意一件事情

$$\begin{aligned} dn &= d(n_0 + \Delta n) = d\Delta n \\ dp &= d(p_0 + \Delta p) = d\Delta p \end{aligned} \quad (179)$$

### 1. 扩散流与扩散电流密度

扩散流， $D_i$ 为电子扩散系数，量纲为 $cm^2 \cdot s^{-1}$ ，含义为单位时间内通过单位面积上的粒子数

$$\begin{aligned} S_p &= -D_p \frac{dp}{dx} \\ S_n &= -D_n \frac{dn}{dx} \end{aligned} \quad (180)$$

扩散电流密度

$$\begin{aligned} J_p &= -q D_p \frac{dp}{dx} \\ J_n &= q (D_n \frac{dn}{dx}) \end{aligned} \quad (181)$$

### 2. 稳态时扩散少子的空间分布函数

扩散过程时同时存在扩散和复合的

稳态时空间分布律与时间无关，并且扩散与复合是相等的，即

$$\begin{aligned} \frac{dS_p}{dx} &= -\frac{\Delta p}{\tau} \\ D_p \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} &= \frac{\Delta p}{\tau} \end{aligned} \quad (182)$$

这个二阶微分方程的通解是

$$\left\{ \Delta p = A \exp \frac{x}{L_p} + B \exp \frac{-x}{L_p}, \quad L_p = \sqrt{D_p \tau_p} \right. \quad (183)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta n = A \exp \frac{x}{L_n} + B \exp \frac{-x}{L_n}, \\ L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \end{array} \right.$$

$L_p, L_n$  称为扩散长度

确定方程的系数依靠边界条件，在半导体物理中，常用两种边界条件

1. 样品厚度远大于扩散长度  $W \gg L_p$ ，边界条件如下

$$\begin{cases} x = 0, & \Delta p = \Delta p_0 \\ x = \infty, & \Delta p = 0 \end{cases} \quad (184)$$

方程的解即为

$$\begin{cases} \Delta p = p_0 \exp \frac{-x}{L_p}, & L_p = \sqrt{D_p \tau_p} \\ \Delta n = n_0 \exp \frac{-x}{L_n}, & L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \end{cases} \quad (185)$$

2. 样品厚度远小于扩散长度，边界条件如下

$$\begin{cases} x = 0, & \Delta p = \Delta p_0 \\ x = W, & \Delta p = 0 \end{cases} \quad (186)$$

方程的解取近似后为

$$\begin{cases} \Delta p = \Delta p_0 \left(1 - \frac{x}{W}\right) \\ \Delta n = \Delta n_0 \left(1 - \frac{x}{W}\right) \end{cases} \quad (187)$$

3. 非平衡载流子的扩散流和漂移流

1. 漂移和扩散

存在外加电场时，空穴和电子的漂移电流密度为

$$\begin{cases} j_p = pq\mu_p \varepsilon \\ j_n = nq\mu_n \varepsilon \end{cases} \quad (188)$$

空穴和电子的扩散电流密度为

$$\begin{cases} J_p = -qD_p \frac{dp}{dx} \\ J_n = q(D_n \frac{dn}{dx}) \end{cases} \quad (189)$$

总的电流密度为

$$\begin{cases} J_p = pq\mu_p \varepsilon - qD_p \frac{dp}{dx} \\ J_n = nq\mu_n \varepsilon + qD_n \frac{dn}{dx} \end{cases} \quad (190)$$

### H3 爱因斯坦关系

扩散系数和迁移率不是两个互相独立的物理量，二者之间的关系称为爱因斯坦关系

处于电中性状态的平衡半导体，在一定温度条件下，电流密度为零。下面依然以  $n$  型半导体为例

1. 感生电场

非均匀掺杂施主杂质原子的半导体如果出于热平衡状态，那么整个晶体的费米能级是恒定的。多数载流子电子从高浓度向低浓度方向扩散，电子扩散走后就留下了带正电的施主杂质离子。分离开的正负电荷会形成电场，这个电场将抵抗扩散过程

平衡状态时，扩散载流子的浓度并不等于固定杂质的浓度，产生的感生电场，或者说内建电场，将阻止正负电荷的进一步分离。一般情况下，扩散过程感生出的空间电荷数量只占杂质浓度很小的部分扩散载流子浓度同掺杂浓度相比差别不大

内建电场的电势为

$$U = \frac{E_F - E_i}{q} \quad (191)$$

考虑一维，电场强度为

$$E_x = -\frac{dU}{dx} = \frac{1}{q} \frac{dE_i}{dx} \quad (192)$$

如果处于热平衡状态的半导体的本征费米能级随距离变化，那么半导体内就将产生一个电场，这也意味着导带底和价带顶会同步变化，但费米能级是不变的

根据扩散载流子浓度几乎等同于掺杂浓度，由电中性条件有

$$\begin{aligned} n_0 &= N_D = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{k_0 T}\right) \\ \Rightarrow E_F - E_i &= k_0 T \ln \frac{N_D}{n_i} \quad (193) \\ \dot{E}_i &= -\frac{k_0 T}{N_D(x)} \frac{dN_D(x)}{dx} \end{aligned}$$

很小的电场就能产生很大的漂移电流，因此非均匀掺杂感生出的电场会显著影响半导体器件的特性

## 2. 爱因斯坦关系

假设没有外加电场，非均匀掺杂的半导体处于热平衡状态，那么电子电流密度和空穴电流密度应分别为零，即

$$J_n = n q \mu_n \varepsilon + q D_n \frac{dn}{dx} = 0 \quad (194)$$

热平衡状态下费米能级是确定的，变化的是导带底和价带顶能级的位置

$$\begin{aligned} n &= N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \\ &= N_c \exp\left(-\frac{E_{c0} - qU - E_F}{k_0 T}\right) \\ &= n_0 \exp \frac{qU}{k_0 T} \quad (195) \end{aligned}$$

$$\frac{dn}{dx} = \frac{qn_0}{k_0 T} \exp \frac{qU}{k_0 T} \frac{dU}{dx} \quad (196)$$

$$\frac{D_n}{\mu_n} = -\frac{n\varepsilon}{\frac{dn}{dx}} \quad (197)$$

$$\varepsilon = -\frac{dU}{dx}$$

因此

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{n}{\frac{qn_0}{k_0T} \exp \frac{qU}{k_0T}} = \frac{k_0T}{q} \quad (198)$$

上式就是爱因斯坦关系

### H3 电流空间分布的连续性方程

包含扩散、漂移、产生、复合

### H4 连续性方程推演

#### 1. 扩散引起的积累

$$(J_p)_{diffuse} = qS_p = -qD_p \frac{dp}{dx} \quad (199)$$

$$-\nabla \cdot \frac{(J_p)_{diffuse}}{q} = \nabla \cdot D_p \frac{dp}{dx} = D_p \frac{d^2 p}{dx^2}$$

#### 2. 漂移引起的积累

$$(J_p)_{drift} = pq\mu_p E \quad (200)$$

$$-\nabla \cdot \frac{(J_p)_{drift}}{q} = -\nabla \cdot (p\mu_p E) = -\mu_p \left( \frac{dp}{dx} E + p \frac{dE}{dx} \right)$$

#### 3. 非平衡载流子复合引起的积累

$$-\frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (201)$$

#### 4. 其他因素引起的积累

$$g_p \quad (202)$$

#### 5. 由此得到P型半导体空穴浓度随时间演化的连续性方程

$$\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{d^2 p}{dx^2} - \mu_p \left[ \frac{dp}{dx} E + p \frac{dE}{dx} \right] - \frac{\Delta p}{\tau_p} + g_p \quad (203)$$

#### 6. 类似得到N型半导体电子浓度随时间的演化方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{d^2 n}{dx^2} + \mu_n \left[ \frac{dn}{dx} E + n \frac{dE}{dx} \right] - \frac{\Delta n}{\tau_n} + g_n \quad (204)$$

#### 7. 三维方程

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_p - \frac{\Delta p}{\tau_p} + g_p \quad (205)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n - \frac{\nabla n}{\tau_n} + g_n$$

## H4 连续性方程

### 1. 电子的三维连续性方程

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n + \delta G - U_n, \quad U_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (206)$$

### 2. 空穴的三维连续性方程

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p + \delta G - U_p, \quad U_p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (207)$$

### 3. 稳态方程的解

处于稳态时与时间无关，也不存在产生过程，关于方程的解做如下分类

$$\frac{1}{q} \nabla \cdot (n q \mu_n \vec{E} + q D_n \nabla (\Delta n)) - \frac{\Delta n}{\tau_n} = 0 \quad (208)$$

#### 1. 弱场时，忽略电场漂移部分

$$D_n \nabla^2 n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (209)$$

方程与前面纯粹扩散是一致的，解为，参量为扩散长度

$$\Delta n = n_0 \exp \frac{-x}{L_n}, \quad L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \quad (210)$$

#### 2. 恒定电场

老实解二阶常微分方程

$$D_n \nabla^2 n + \mu_n \vec{E} \nabla \cdot n - \frac{\Delta n}{\tau_n} = 0 \quad (211)$$

解为

$$\Delta n = \Delta n_0 \exp(\lambda x)$$

$$\lambda = \frac{-\mu_n E + \sqrt{(\mu_n E)^2 + \frac{4D_n}{\tau_n}}}{2D_n} \quad (212)$$

#### 3. 强场，即牵引长度远大于扩散长度， $L_n(\vec{E}) \gg L_n$ ，忽略扩散作用，方程为

$$\mu_n \nabla \cdot n \vec{E} = \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (213)$$

解为

$$\Delta n = \Delta n_0 \exp \frac{-x}{L_n(\vec{E})}, \quad L_n(\vec{E}) = \sqrt{\mu_n E \tau_n} \quad (214)$$

## H3 陷阱效应

### 1. 当半导体处于非平衡态，杂质能级上的电子或空穴数目就会发生改变。我们将杂质能级积累非平衡载流子的作用称为陷阱效应

2. 具有显著陷阱效应的杂质能级称为陷阱，相应的杂质或缺陷称为陷阱中心
3. 陷阱具有显著积累一种非平衡载流子(电子或空穴)的能力，陷阱所积累的非平衡载流子数目可以和导带或价带的非平衡载流子数目比拟
4. 陷阱的存在将显著影响少数载流子寿命的测量(但是导带或价带上少数载流子的寿命是不受影响的)，这里的理解是陷阱对载流子的积累束缚强烈，因此会延长处在陷阱能级上的少数载流子
5. 复合中心与陷阱中心的异同

1. 相同点：都是由杂质或缺陷在半导体的禁带中引入新的能级

2. 不同点

1. 复合中心对非平衡电子、空穴的俘获能力相近，可以促进非平衡载流子的复合，缩短非平衡载流子寿命
2. 陷阱中心对非平衡电子、空穴的俘获能力差异悬殊，会阻碍非平衡载流子的复合，延长非平衡载流子的寿命
3. 有效的复合中心能级靠近本征费米能级，或者说禁带中央；有效的陷阱中心能级靠近费米能级

## 6. 关于有效复合中心和有效陷阱中心的数学补充说明

1. 有效复合中心

由间接复合净复合率公式

$$U = N_t \frac{r_n r_p (np - n_i^2)}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)} \quad (215)$$

$$\begin{aligned} n_1 &= n_i \exp \frac{E_t - E_i}{k_0 T} \\ p_1 &= n_i \exp \frac{E_i - E_t}{k_0 T} \end{aligned} \quad (216)$$

考虑电子和空穴的俘获率相等， $r_n = r_p = r$

$$U = N_t \frac{r(np - n_i^2)}{(n + p) + 2n_i \operatorname{ch} \frac{E_t - E_i}{k_{0T}}} \quad (217)$$

根据双曲余弦函数的相关性质可知，当杂质能级贴近本征费米能级时，有最大的间接净复合率；而当杂质能级远离本征费米能级时，净复合率将不断趋向零

由此，当杂质能级接近本征费米能级时有最大净复合率，杂质能级为深能级，即有效复合中心一定是深能级

2. 有效陷阱中心

实际上，对应非平衡半导体，严格的电荷守恒方程除了考虑导带的电子和价带的空穴外，还应当考虑杂质能级上的载流子

但我们的考虑情形一般都是小注入情况，因此一般情况下杂质能级上的载流子量级与导带价带无可比拟，通常不考虑

根据前面小节的内容，稳定时，杂质能级上的载流子数目为

$$n_t = N_t \frac{r_n n + r_p p_1}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)} \quad (218)$$

可见杂质能级上的载流子数目与非平衡电子和空穴都有关

完整的电荷守恒方程可以考虑为

$$\Delta n + \Delta n_t = \Delta p \quad (219)$$

对 $n_t$ 按照全微分展开就能得到杂质能级载流子增量

如果 $r_n \gg r_p$ , 则 $\frac{\Delta n_t}{\Delta n} > 0$ , 表明有电子积累, 称为电子陷阱

$$\Delta n_t = N_t \frac{n_1}{(n_0 + n_1)^2} \quad (220)$$

可以看到当 $n_1 = n_0$ 是上式存在极大值, 这个条件就说明杂质能级与费米能级重合

由此, 当复合中心能级接近费米能级时将称为有效陷阱

### H3 扩展知识点

#### H4 双极运输

前面的内容都是基于小注入情况分析得到, 但是在大注入情形下情况就会有所不同

过剩电子和空穴都按照浓度梯度方向扩散、电子的扩散系数比空穴的大。在外加电场的作用下, 过剩电子和空穴沿相反方向漂移, 就会形成内建电场。漂移运动中的电场就包含内建电场和外电场两部分的作用

内建电场的效果将阻拦过剩电子和空穴的运动使其保持在各子的位置。我们将带负电和电子和带正电的空穴以同一个迁移率或扩散系数一起漂移或扩散的现象称为双极扩散或双极运输

#### H5 双极运输方程

先回顾一下空间连续性方程

$$D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p (E \frac{\partial p}{\partial x} + p \frac{\partial E}{\partial x}) - \frac{\Delta p}{\tau_p} + g_p = \frac{\partial p}{\partial t} \quad (221)$$

$$D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu_n (E \frac{\partial n}{\partial x} + n \frac{\partial E}{\partial x}) - \frac{\Delta n}{\tau_n} + g_n = \frac{\partial n}{\partial t}$$

上面的式子描述了过剩载流子的状态, 但仍然需要一个方程建立起过剩载流子浓度和内建电场的关系, 这个式子就是泊松方程

$$\nabla \cdot E_{int} = \frac{q(\Delta p - \Delta n)}{\epsilon_0 \epsilon_r} = \frac{q(\Delta p - \Delta n)}{\epsilon} \quad (222)$$

实际中, 相对较小的内建电场就可以保持过剩载流子电子和空穴的漂移和扩散运动, 因此我们假定内建电场远小于外部电场, 尽管如此, 需要指出的是内建电场的作用仍然不可忽略, 即 $\nabla \cdot E_{int}$ 项不可略去

$$E_{int} \ll E_{ext} \quad (223)$$

前面我们说, 对于直接带隙复合, 电子和空穴是成对产生、成对消失的, 即

$$G_p = G_n \quad R_p = R_n \quad (224)$$

在这里, 我们定义

$$g_p = g_n = g \quad R_n = \frac{\Delta n}{\tau_n} = \frac{\Delta p}{\tau_p} = R_p = R \quad (225)$$

考虑电中性条件有

$$\Delta p = \Delta n, dp = dn \quad (226)$$

对本节回顾的空间连续性方程做如下处理：用  $n\mu_n$  左乘关于空穴的连续性方程，用  $p\mu_p$  左乘关于电子的连续性方程，消去电场梯度项，得到

$$(n\mu_n D_p + p\mu_p D_n) \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu_p \mu_n (p - n) E \frac{\partial n}{\partial x} + (n\mu_n + p\mu_p)(g - R) = (n\mu_n + p\mu_p) \frac{\partial n}{\partial t}$$

$$\Rightarrow D' \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + \mu' E \frac{\partial n}{\partial x} + g - R = \frac{\partial n}{\partial t} \quad \begin{cases} D' = \frac{n\mu_n D_p + p\mu_p D_n}{n\mu_n + p\mu_p} \\ \mu' = \frac{\mu_p \mu_n (p - n)}{n\mu_n + p\mu_p} \end{cases} \quad (227)$$

上式就是双极输运方程，两个参数分别称为双极扩散系数和双极迁移率

利用爱因斯坦关系可以改写形式便于记忆

$$\frac{D}{\mu} = \frac{k_0 T}{q} \quad (228)$$

$$D' = \frac{D_p D_n (p + n)}{n D_n + p D_p}$$

可以看到双极扩散系数和双极迁移率都与电子和空穴的浓度有关，因此双极输运方程中的系数不是常数，对应的双极输运方程就是非线性微分方程

### H5 掺杂及小注入下的双极输运方程

#### 1. 考虑N型半导体小注入条件

在此条件下，可以对双极扩散系数和迁移率进行近似约化

$$D' = \frac{D_n D_p (n_0 + p_0 + \Delta p + \Delta n)}{(n_0 + \Delta n) D_n + (p_0 + \Delta p) D_p} \xrightarrow{\Delta p \ll n_0, p_0 \ll n_0} D_p \quad (229)$$

$$\mu' = \frac{\mu_n \mu_p (p - n)}{(n_0 + \Delta n) \mu_n + (p_0 + \Delta p) \mu_p} \xrightarrow{\Delta p \ll n_0, p_0 \ll n_0} -\mu_p$$

#### 2. 考虑P型半导体，类似的有

$$D' = D_n \quad (230)$$

$$\mu' = \mu_n$$

3. 在小注入条件下，可以将双极参数简化为少数载流子的恒定参数。扩散系数就等于少数载流子对应的扩散系数，而迁移率与载流子的带电性有关，其数值大小等于少数载流子对应的迁移率，符号由少数载流子的带电性决定
4. 在非平衡状态下，前面我们讲的寿命，包括双极输运，指的都是过剩载流子的寿命，也可以说是少子的寿命。对于过剩载流子来说，多数载流子的浓度近乎是个常数，因此与多数载流子发生碰撞的概率是常数。我们知道发生碰撞的概率与寿命互为倒数，因此少数载流子的寿命是常数；但是对于多数载流子来说，过剩载流子的出现让少子浓度有了很大的变化，多子与少子发生碰撞的概率发生重大变化，因此多数载流子的寿命也会相应的改变

## 5. 回顾双极输运方程中关于产生和复合的项

对于电子来说，在热平衡时，产生和复合是相等的，于是有

$$g - R = (g_0 + g_n) - (R_0 + R_n) = g_n - R_n = g_n - \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (231)$$

对于空穴有类似的结论

过剩电子和过剩空穴的产生速率是相等的，即  $g_n = g_p = g'$

$$g - R = g' - \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (232)$$

这样，双极输运方程就完全可以由少子进行描述。电中性条件要求过剩少子浓度等于过剩多子浓度，多子和少子的扩散和漂移运动是同时进行的。双极输运方程描述了少子的漂移、扩散、复合运动，因此过剩少子的状态也就描述了过剩多子的状态。这一原理是半导体器件特性和状态的基础

### H4 介电弛豫时间

在前面有关非平衡状态的章节中，我们经常使用的条件是  $\Delta n = \Delta p$ ，即基于电中性原理认为过剩电子浓度和过剩空穴浓度相等

那么如果在某一瞬间向半导体注入一定浓度  $\delta p$  的空穴，这时过剩电子浓度就不再与过剩空穴浓度平衡，而是需要一定的时间重新回到电中性状态

这里我们引出一个概念：**介电弛豫时间**，它是净电荷密度衰减到  $\frac{1}{e}$  时所需要的时间

根据泊松方程

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (233)$$

根据欧姆定律

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (234)$$

忽略产生和复合作用，考虑连续性方程

$$\nabla \cdot \vec{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (235)$$

即

$$\sigma \nabla \cdot \vec{E} = \frac{\sigma \rho}{\epsilon} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (236)$$

$$\Rightarrow \rho(t) = \rho(0) \exp\left(-\frac{\sigma}{\epsilon} t\right) = \rho(0) \exp\left(-\frac{t}{t_d}\right)$$

**介电弛豫时间** 即为

$$t_d = \frac{\epsilon}{\sigma} \quad (237)$$

我们认为当  $t = 4t_d$  时，净电荷密度就为零，即达到电中性条件

考虑n型半导体，掺杂施主浓度为 $N_d = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ，迁移率考虑为 $1200 (\text{m} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{V}^{-1})$

$$\begin{aligned}\sigma &= nq\mu_n = N_d q \mu_n = 10^{16} * 1200 * 1.6 * 10^{-19} = 1.92 (\Omega \cdot \text{cm})^{-1} \\ t_d &= \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{\sigma} = \frac{11.7 * 8.85 * 10^{-14}}{1.92} = 0.539 \text{ ps}\end{aligned}\quad (238)$$

由此，达到电中性的时间大致为 $2 \text{ ps}$ ，远远小于载流子的寿命 $0.1 \mu\text{s}$ ，因此这一过程是非常迅速的，这也是为什么我们可以大胆使用电中性条件处理非平衡问题的原因

## H4 肖克莱-里德-霍尔复合理论SRH

其实与前面复合理论的章节是一个内容，这里再次加深一些理解

禁带中一个允许的能量状态(也称陷阱)充当复合中心的任务，它俘获电子和空穴的概率相等

肖克莱-里德-霍尔复合理论假设在带隙中能量为 $E_t$ 的位置存在一个独立的复合中心(即陷阱)，这个单一的陷阱存在四个基本过程，下面将对四个过程进行回顾。下面假设这种陷阱是受主类型的陷阱，这意味着如果包含电子，则陷阱带负电；如果不带电子，则呈现电中性

过程一：电子俘获，导带中的电子被一个最初的电中性空陷阱俘获

过程二：电子发射，最初占有陷阱能级的电子被发射回导带

过程三：空穴俘获，价带中的空穴被包含电子的陷阱俘获(也可以视为陷阱中的电子发射到价带的过程)

过程四：空穴发射，中性陷阱将空穴发射到价带中(也可以视为从价带中俘获电子的过程)

### 1. 过程一：capture negative

过程一中导带的电子被中性陷阱俘获的概率与导带中的电子浓度和空陷阱的密度成正比，即电子的俘获率为

$$R_{cn} = r_n n (N_t - n_t) = r_n n N_t (1 - f(E_t)) \quad (239)$$

陷阱的费米能级按照费米分布，则有

$$f(E_t) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E_t - E_F}{k_0 T})} \quad (240)$$

上式的物理意义为：一个电子占据该空陷阱能级的概率。如果是简并情况，我们也假定简并因子为1，因此对于简并和非简并情况，我们都假定分布是按照上式规律进行的

### 2. 过程二：emit negative

过程二是将占据空陷阱能级的电子重新打回导带的过程，发射概率与被占据的空陷阱能级浓度成正比

$$R_{en} = s_n n_t = s_n N_t f(E_t) \quad (241)$$

在热平衡状态下，发射和俘获的几率相等

$$r_n n_0 N_t (1 - f(E_t)) = s_n N_t f(E_t) \quad (242)$$

利用玻尔兹曼分布近似处理，得到两个系数之间的关系为

$$s_n = r_n \cdot N_c \exp \frac{E_t - E_c}{k_0 T} = r_n N_c \exp(-\frac{E_c - E_t}{k_0 T}) = r_n n_1 \quad (243)$$

可以看到，写成上面的第二种形式容易记忆，他与导带电子浓度的公式高度相似  
当复合中心能级，即陷阱能级，与费米能级相等，那么 $n_1$ 就与导带中的电子浓度等价  
在非平衡状态下，由于过剩载流子的存在，俘获和发射是不等的，导带中的电子被俘获的净俘获概率为

$$R_n = R_{cn} - R_{en} = r_n n N_t (1 - f(E_t)) - s_n n_t \quad (244)$$

需要注意的是，非平衡状态下的电子浓度包括过剩电子浓度，费米能级由准费米能级替代

利用系数间关系就得到非平衡状态下电子净俘获率(净复合率)

$$R_n = r_n N_t [n(1 - f(E_F)) - n_1 f(E_F)] \quad (245)$$

### 3. 过程三：capture positive

过程三是被电子占据的陷阱能级从价带俘获空穴的过程，空穴被俘获的概率与被占据的陷阱浓度和价带中空穴浓度成正比

$$R_{cp} = r_p p n_t = r_p p N_t f(E_t) \quad (246)$$

### 4. 过程四：emit positive

过程四是中性陷阱将空穴向价带发射的过程，其概率与未被电子占据的中性空陷阱浓度有关

$$R_{ep} = s_p (N_t - n_t) = s_p N_t (1 - f(E_t)) \quad (247)$$

同样地，热平衡时发射和俘获空穴是相等的

$$r_p p_0 N_t f(E_t) = s_p N_t (1 - f(E_t)) \quad (248)$$

利用玻尔兹曼近似处理

$$s_p = r_p N_v \exp\left(-\frac{E_t - E_v}{k_0 T}\right) = r_p p_1 \quad (249)$$

同样地，当复合中心能级与费米能级重合时， $p_1$ 就与价带中空穴浓度等价

利用系数间关系就得到非平衡状态下空穴净俘获率(净复合率)

$$R_p = R_{cp} - R_{ep} = r_p N_t [p f(E_t) - p_1 (1 - f(E_t))] \quad (250)$$

值得注意的是

$$n_1 p_1 = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_c - E_t}{k_0 T}\right) \exp\left(-\frac{E_t - E_v}{k_0 T}\right) = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_0 T}\right) = n_i^2 \quad (251)$$

### 5. 当陷阱密度不是很大时，过剩电子和过剩空穴浓度相等，电子和空穴的净复合率也相同，利用电子和空穴的净复合率相等可以得到费米分布函数的表达形式，将表达形式重新代回就能得到净俘获率，也即净复合率

$$R = R_n = R_p = \frac{r_n r_p N_t (np - n_i^2)}{r_n (n + n_1) + r_p (p + p_1)} = \frac{\Delta n}{\tau_n} = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (252)$$

### 6. 非本征小注入掺杂

前面我们说过只有深能级的复合中心才有意义，这里我们假定陷阱能级贴近禁带中央，即接近本征费米能级  
对于小注入掺杂的 $n$ 型半导体，约束条件为

$$n_0 \gg p_0 \quad n_0 \gg \Delta p \quad n_0 \gg n_1 \quad n_0 \gg p_1 \quad (253)$$

$$\Rightarrow R = \frac{r_n r_p N_t (np - n_i^2)}{r_n (n + n_1) + r_p (p + p_1)} \approx r_p N_t \Delta p = \frac{\Delta p}{\tau_p} \quad (254)$$

$$\Rightarrow \tau_p = \frac{1}{r_p N_t}$$

对于小注入的  $p$  型半导体，类似的有

$$\begin{aligned} \Rightarrow R &\approx r_n N_t \Delta n = \frac{\Delta n}{\tau_n} \\ \Rightarrow \tau_n &= \frac{1}{r_n N_t} \end{aligned} \quad (255)$$

由此可以认为，非本征材料的小注入过剩载流子寿命归纳为少子的寿命，即少子参数起作用，这一点与前面的双极输运类似

## 7. 包含过剩载流子的本征掺杂

$$p_1 = n_1 = n_i \quad (256)$$

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)} = \frac{2n_i \Delta n + \Delta n^2}{(\tau_p + \tau_n)(2n_i + \Delta n)} \approx \frac{\Delta n}{\tau_p + \tau_n} = \frac{\Delta n}{\tau} \quad (257)$$

这表明材料从非本征状态逐渐变为本征态的过程中，过剩载流子的寿命会增大。直观理解为，随着材料变为本征状态，能与过剩少子直接复合的有效多子浓度降低，因此发生复合的概率降低，从而平均寿命增加  
在本征材料中

$$\tau = \tau_p + \tau_n \quad (258)$$

## H2 PN结

上一章讨论的非平衡载流子的运动，实质上是讨论光注入对半导体器件的影响，而这一章将关注电学特性

将一块 $p$ 型半导体和一块 $n$ 型半导体结合在一起，在这两块半导体的交界面处就将形成一个具有特殊性质的薄层区域，这个区域就是 $PN$ 结。 $PN$ 结是大多数半导体器件的核心，它的性质决定了半导体器件的特性

## H3 PN结及其能带结构

### 1. $PN$ 结的分类

#### 1. 形成方法分类

1. 在同一块半导体上掺杂形成，主要工艺方法包括合金法、扩散法和离子注入法
2. 在 $p(n)$ 型半导体上外延生长 $n(p)$ 型半导体

#### 2. 同质结和异质结

1. 同质结：由导电类型相反的同一种半导体单晶材料组成
2. 异质结：由两种不同的半导体单晶材料组成

### 2. 工艺简介

1. 合金法：加热金属至熔融状态与硅形成熔融体，降温得到合金结，合金结的杂质分布往往具有突变性质，称为突变结
2. 扩散法：高温下热扩散，形成扩散结，扩散结的杂质分布由扩散条件和杂质补偿决定，通常是渐变的，称为缓变结
3. 离子注入法：将杂质离子轰击到半导体基片中，掺杂分布主要取决于离子剂量和离子能量，主要用于形成浅结

1. 一般认为：低表面浓度的深扩散结是线性缓变结；高表面浓度的浅扩散结和合金结是突变结
2. 突变结适用于粒子注入浅扩散和外延生长，结面位置 $x_j < 1\mu m$
3. 线性缓变结适用于深结扩散，界面位置 $x_j > 3\mu m$

### 3. 空间电荷区和内建电场

当一块 $n$ 型半导体和一块 $p$ 型半导体材料单独存在时，在无外场的情况下，半导体材料内部的净电荷密度为零，整体呈现电中性

形成结后，由于存在浓度梯度， $n$ 区的电子将向 $p$ 区扩散，留下带正电的电离施主，空穴正好相反

一般情况下，电子杂质在半导体中是不移动的，因此这些留下的电离施主和电离受主将在结面附近区域形成一个空间电荷区，并建立由 $n \rightarrow p$ 的电场，该电场称为内建电场

在无外电场的情况下，载流子的进一步扩散将受到内建电场的阻碍，最后载流子的扩散运动将与漂移运动平衡，流过结面的净电流为零。此时内建电场的宽度为定值，内建电动势稳定，形成平衡 $PN$ 结，具有统一的费米能级

## 总结：

1. 离子杂质将建立由  $n \rightarrow p$  的内建电场，内电场将造成能带弯曲，形成势垒
2. 结面附近将形成空间电荷区，也称势垒区，也称耗尽区
3. 无外场时结面附近的扩散将达平衡，净电流为零，具有稳定宽度的内电场和稳定大小的内建电动势
4. 无外场时的结具有统一的费米能级
5. 势垒区是高阻区

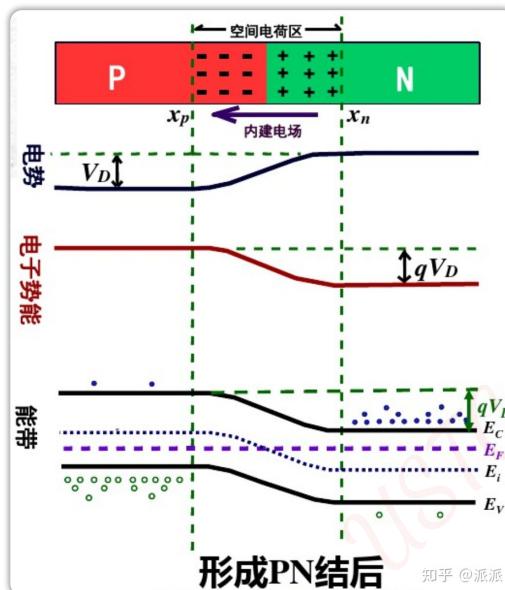
## 4. PN结能带图

根据前述章节知识，一般情况下， $n$ 型材料的费米能级位于禁带中接近导带底的位置，而 $p$ 型材料的费米能级位于禁带中接近价带顶的位置

费米能级表征电子对能级的填充水平，当两块导电类型不同的半导体形成结后，将会发生扩散。电子从高费米能级流向低费米能级，空穴则相反。在能带图中的表现就是  $E_{fn}$  不断下移而  $E_{fp}$  不断上移，最终的结果就是平衡时  $E_{fn} = E_{fp} = E_f$ ，达到统一的费米能级

费米能级移动的同时， $n$ 型区和 $p$ 型区的能带也会随着各自的费米能级移动，表现在能带图上就是能带弯曲

**能带的相对移动或者说完全时空间电荷区中存在内建电场的结果**



## 5. PN结接触电势差

$pn$ 结的势垒高度实际上是电子电势能的差，也就是能带的弯曲量

对于禁带宽度相同的材料，它是 $p$ 区和 $n$ 区本征费米能级之差

$E_{in}, E_{ip}$  分别表示相应的本征费米能级， $n_n^0, p_n^0, n_p^0, p_p^0$  分别表示平衡态下 $n, p$ 区的多子和少子浓度

$$qV_D = E_{ip} - E_{in} \quad (259)$$

$$n_n^0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) = n_i \exp \frac{E_F - E_{in}}{k_0 T}$$

$$p_p^0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right) = n_i \exp \frac{E_{ip} - E_F}{k_0 T} \quad (260)$$

$$\Rightarrow E_{ip} - E_{in} = k_0 T \ln\left(\frac{n_n^0 p_p^0}{n_i^2}\right) = qV_D \quad (261)$$

$$V_D = \frac{k_0 T}{q} \ln\left(\frac{N_D N_A}{n_i^2}\right)$$

$$V_D = \frac{q}{n_i^2} \exp\left(-\frac{E_F - E(x)}{k_B T}\right)$$

接触电势差与结两边的掺杂浓度、温度和材料的禁带宽度有关

## 6. PN结载流子分布

内建电场的存在将导致空间电荷区能带弯曲，在空间电荷区不同位置处的载流子能量不同。在前面的章节中，我们计算电子的浓度时，是对电子状态密度函数乘以分布函数后对能量进行积分，对PN来说，算法依然如此

$$\begin{aligned} n(x) &= \int_{E(x)}^{\infty} \frac{4\pi V}{h^3} (2m^*)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E(x) - E_c} \exp\left(-\frac{E - E_F}{k_B T}\right) dE \\ &\Rightarrow n(x) = N_c \exp\left(-\frac{E(x) - E_F}{k_B T}\right) \end{aligned} \quad (262)$$

以下公式电势零点取在  $x = x_n$  处

在空间电荷区  $x$  处电子的电势能为

$$E(x) = E_{cn} + qV(x) \quad (263)$$

这里的  $E_{cn}$  为空间电荷区  $n$  区边界  $x_n$  处的能级

注意到

$$n_n^0 = N_c \exp\left(-\frac{E_{cn} - E_F}{k_B T}\right) \quad (264)$$

由此得到

$$n(x) = n_n^0 \exp\left(-\frac{E(x) - E_{cn}}{k_B T}\right) = n_n^0 \exp\left(-\frac{qV(x)}{k_B T}\right) \quad (265)$$

当  $x = x_n$  时， $E(x) = E_{cn}$ ,  $n(x_n) = n_n^0$ , 这就是  $n$  区电子浓度，注意是平衡多子浓度

当  $x = x_p$  时， $E(x_p) = E_{cn} + qV_D$ ,  $n(x_p) = n_p^0$ , 这就是  $p$  区电子浓度，这是平衡少子浓度

$$\begin{aligned} n_n^0 &= N_c \exp\left(-\frac{E_{cn} - E_F}{k_B T}\right) \\ n_p^0 &= n_n^0 \exp\left(\frac{-qV_D}{k_B T}\right) \end{aligned} \quad (266)$$

同样地，计算空穴浓度可以得到相关内容

$$p(x) = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E(x)}{k_B T}\right) \quad (267)$$

$$p_p^0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_{vp}}{k_B T}\right) \quad (268)$$

$E_{vp}$  是空间电荷区  $p$  区边界  $x_p$  处的能级

$$\Rightarrow p(x) = p_p^0 \exp\left(-\frac{E_{vp} - E(x)}{k_B T}\right) \quad (269)$$

$$\Rightarrow p(x) = p_p^0 \exp\left(\frac{-q(V_D - V(x))}{k_B T}\right) \quad (270)$$

当  $x = x_p$  时， $E(x_p) = E_{vp}$ ,  $p(x_p) = p_p^0$ , 这就是  $p$  区空穴浓度，注意这是平衡多子

当  $x = x_n$  时， $E(x_n) = E_{vp} - qV_D$ ,  $p(x_n) = p_n^0$ , 这就是  $n$  区空穴浓度，注意这是平衡少子

$$n^0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E(x)}{k_B T}\right)$$

$$\mu_p = \nu v \exp\left(-\frac{qV_D}{k_0 T}\right) \quad (271)$$

$$p_n^0 = p_p^0 \exp\left(-\frac{qV_D}{k_0 T}\right)$$

再看浓度积

$$n(x)p(x) = n_n^0 p_p^0 \exp\left(\frac{-qV_D}{k_0 T}\right) = n_n^0 p_p^0 = n_i^2 = Const \quad (272)$$

也就是说在空间电荷区内部依然满足浓度积公式

### H3 PN结的电流电压特性

#### 1. 内建电场强度

##### 1. 突变结

根据泊松方程

$$\nabla^2 V = -\nabla \cdot \vec{E} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon} \quad (273)$$

我们认为在空间电荷区体电荷密度是均匀的，则

(由于扩散，下式的含义是，空间电荷区在p型区域内只剩下带负电的杂质，在n型区内只剩下带正电的杂质离子，由此得到源电荷密度)

$$\rho(x) = \begin{cases} -qN_A & x \in [-x_p, 0] \\ qN_D & x \in [0, x_n] \end{cases} \quad (274)$$

积分得到内建电场分布

$$E = \int \frac{\rho(x)}{\epsilon} dx = \frac{qN_D}{\epsilon} x + C \quad (275)$$

我们认为在空间电荷区外不存在电场分布，并且由于在分界面处不存在面电荷密度，因此电场强度连续，即在 $x = x_n, E = 0$ ，由此确定积分常数

$$E = \frac{qN_D}{\epsilon} (x - x_n) \quad (276)$$

同理的可以确定空间电荷区p型区域内的电场分布

$$E = \frac{-qN_A}{\epsilon} (x + x_p) \quad (277)$$

在 $x = 0$ 的“结边界处”由电场的连续性得到

$$-N_A x_p = -x_n N_D \quad (278)$$

下面是关于pn结的一个很重要的关系式

$$\frac{x_n}{x_p} = \frac{N_A}{N_D} \quad (279)$$

上式的含义是，p区内每单位面积的负电荷数与n区内每单位面积的正电荷数是相等的

根据电场分布函数，可以得到如下结论

- 对于均匀掺杂的结来说，结内的电场强度是距离的线性函数

2. 在冶金结( $x = 0$ )处的电场强度最大

## 2. 线性缓变结

线性缓变结的体电荷密度分布满足

$$\rho(x) = q \cdot \alpha x \quad x \in [-x_p, x_n] \quad (280)$$

根据泊松方程

$$\nabla^2 V = -\nabla \cdot \vec{E} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon} \quad (281)$$

积分得到电场分布

$$E = \int \frac{q\alpha x}{\epsilon} dx = \frac{q\alpha}{2\epsilon} x^2 + C \quad (282)$$

由边界条件可以确定积分常数

$$E = \int \frac{q\alpha x}{\epsilon} dx = \frac{q\alpha}{2\epsilon} [x^2 - x_p^2] = \frac{q\alpha}{2\epsilon} [x^2 - x_n^2] \quad (283)$$

定义 $x_D = x_n - x_p$ ,  $x_n + x_p = 0$ ,  $\frac{x_D}{2} = x_n$ ,  $-\frac{x_D}{2} = -x_p$

$$E = \frac{q\alpha}{2\epsilon} [x^2 - (\frac{x_D}{2})^2] \quad (284)$$

## 2. 内建电动势

### 1. 突变结

对于空间电荷区 $p$ 型区, 对泊松方程积分得到电动势

$$V(x) = - \int E(x) dx = \int \frac{qN_A}{\epsilon} (x + x_p) dx = \frac{qN_A}{\epsilon} (\frac{x^2}{2} + xx_p) + C \quad (285)$$

相比于绝对电势, 我们更关心结电势差, 因此假设 $x = -x_p$ 为电势零点, 由此确定积分常数

$$V(x) = \frac{qN_A}{\epsilon} (\frac{x^2}{2} + xx_p + \frac{x_p^2}{2}) = \frac{qN_A}{2\epsilon} (x + x_p)^2 \quad x \in [-x_p, 0] \quad (286)$$

同理

$$V(x) = \frac{-qN_D}{\epsilon} (\frac{x^2}{2} - xx_n) + C \quad (287)$$

在 $x = 0$ 处电势连续, 确定积分常数

$$\frac{qN_A}{2\epsilon} x_p^2 = C \quad (288)$$

由此

$$V(x) = \frac{-qN_D}{\epsilon} (\frac{x^2}{2} - xx_n) + \frac{qN_A}{2\epsilon} x_p^2 \quad x \in [0, x_n] \quad (289)$$

内建电动势的大小即为 $x = x_n$ 处的电势

$$V_D = \frac{q}{2\epsilon} (N_D x_n^2 + N_A x_p^2) \quad (290)$$

这就是空间电荷区能带弯曲的方式

### 2. 缓变结

对电场分布进行积分就得到电势分布

$$E = \frac{q\alpha}{2\varepsilon} [x^2 - (\frac{x_D}{2})^2] \quad (291)$$

$$V(x) = - \int E dx = - \frac{q\alpha}{2\varepsilon} (\frac{1}{3}x^3 - (\frac{x_D}{2})^2 x) + C \quad (292)$$

取在同样的边界条件可以得到积分常数，整理得到

$$V(x) = \frac{q\alpha}{6\varepsilon} \left[ -x^3 + 2(\frac{x_D}{2})^3 + 3(\frac{x_D}{2})^2 \right] \quad (293)$$

在  $x = x_n$  处就是电势差

$$V_D = \frac{q\alpha}{12\varepsilon} x_D^3 \quad (294)$$

### 3. 空间电荷区宽度

#### 1. 突变结

由电势差大小

$$V_D = \frac{q}{2\varepsilon} (x_n^2 N_D + x_p^2 N_A) \\ \Rightarrow V_D = \begin{cases} \frac{q}{2\varepsilon} (N_D x_n^2 + \frac{N_D^2}{N_A} x_n^2) \\ \frac{q}{2\varepsilon} (N_A x_p^2 + \frac{N_A^2}{N_D} x_p^2) \end{cases} \quad (295)$$

$$x_n^2 = \frac{2\varepsilon V_D}{q} \frac{N_A}{N_D} \frac{1}{N_D + N_A}$$

$$x_p^2 = \frac{2\varepsilon V_D}{q} \frac{N_D}{N_A} \frac{1}{N_D + N_A}$$

总的空间电荷区长度为

$$W = x_n + x_p = \sqrt{\left[ \frac{2\varepsilon V_D}{q} \frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right]} \quad (296)$$

#### 2. 线性缓变结

$$W = x_D = \left[ \frac{12\varepsilon V_D}{q\alpha} \right]^{\frac{1}{3}} \quad (297)$$

在非简并条件下，线性缓变结  $W_0$  为无外加电压时的耗尽层宽度

$$n(x_n) = p(-x_p) = \alpha \frac{W_0}{2} \quad (298)$$

$$V_D = \frac{k_0 T}{q} \ln \frac{N_A N_D}{n_i^2} \\ \Rightarrow V_D = \frac{2k_0 T}{q} \ln \frac{\alpha W_0}{2n_i} \quad (299)$$

$$\Rightarrow V_D = \frac{2k_0 T}{q} \ln \frac{\alpha W_0}{2n_i}$$

## 联合总结

### 1. 电势差

$$V_D = \frac{q}{2\epsilon} (N_D x_n^2 + N_A x_p^2) \quad (300)$$

$$V_D = \frac{q\alpha}{12\epsilon} x_D^3$$

### 2. 势垒区宽度

$$W = x_n + x_p = \sqrt{\left[ \frac{2\epsilon V_D}{q} \frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \right]} \quad (301)$$

$$W = x_D = \left[ \frac{12\epsilon V_D}{q\alpha} \right]^{\frac{1}{3}}$$

3. 突变结电势差是距离平方函数，势垒宽度是根号；线性缓变结电势差是距离三次方函数，势垒宽度是立方根

## 4. 理想突变结

前面的情形是无外场情况

我们可以对 $PN$ 结进行分区划分，划分为空间电荷区(耗尽区)和中性区，空间电荷区是高阻区。在 $PN$ 结两端加上电压，如果忽略中性区压降和欧姆接触压降，因此就可以等效认为全部的外电压加载在耗尽区上

Warning

tips

1. 这里忽略中性区压降是在低注入的条件下

### 1. 正向偏压，正偏，注入

势垒区内认为没有自由载流子，因此是高阻区；势垒区外载流子浓度很大，电阻很小，因此认为外加电压全部加载在势垒区上

如果正向电压加载在 $p$ 区，这样外加电场的方向就与内建电场方向相反，将抑制载流子的漂移运动，从而减小空间电荷区宽度，空间电荷减少。在能带图上的表现是接触电势差降低，即势垒高度下降

外加电压的存在破坏了载流子的扩散和漂移运动的平衡，将出现电子从 $n$ 区向 $p$ 区的净扩散流，成为 $p$ 区的非平衡少数载流子

在一定的正向偏压下，外电场源源不断地从 $n$ 区注入电子，电子扩散流保持为定值，同时一个净空穴扩散流从 $p$ 区向 $n$ 区流动，从而形成正向电流

用外加正向电场产生非平衡载流子的方法称为电注入

### 2. 反向偏压，反偏，抽取

反向电压的存在将使势垒区变宽，势垒高度增大，势垒区电场增强

势垒区电场增强将使得漂移强于扩散，这将使得 $n$ 区的少子空穴在电场驱动下流向 $p$ 区，电子反之，从而形成反向电流

这种驱动少子形成反向电流的现象称为少数载流子的抽取

因为少子浓度很小，因此反向电流很小，且基本不随电压变化

存在外加电压情况下的内建电动势和势垒区宽度问题

1. 从能带图上理解，外加电压实际上影响的是势垒高度，进一步说是在接触电压上加了一个“偏压”，对前述方程的影响体现在 $V_D$ 上

2. 突变结

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon}{q}(V_D - V_A) \frac{N_A + N_D}{N_A N_D}} \quad (302)$$

$$x_n = \sqrt{\frac{2\epsilon}{q}(V_D - V_A) \frac{N_A}{N_D} \frac{1}{N_A + N_D}} \quad (303)$$

$$x_p = \sqrt{\frac{2\epsilon}{q}(V_D - V_A) \frac{N_D}{N_A} \frac{1}{N_A + N_D}}$$

3. 线性缓变结

$$W = [\frac{12\epsilon}{q\alpha}(V_D - V_A)]^{\frac{1}{3}} \quad (304)$$

4. 准费米能级

前面我们看到，平衡结具有统一的费米能级，但是外场的存在将会影响接触电压，并破坏载流子的扩散和漂移运动，引入非平衡载流子

在前面关于非平衡载流子章节中我们看到，处于同一能带内的载流子由于热交换，在很短时间内就能达到平衡状态；但是，对于两个能带之间的载流子，由于存在高势垒，能带之间的热交换就会困难得多

基于此，我们认为即使在有外场存在的情况下，导带和价带的电子是各自处在平衡态，而两带之间处于非平衡状态，这样我们就可以分别采用导带费米能级和价带费米能级来描述电子的分布

对于非平衡载流子，这里的费米能级依然指准费米能级，与前面章节是一致的

## 5. 势垒电容(结电容)

耗尽区内正电荷与负电荷是不移动的，在空间上是分离的，因此pn结就具有电容的充放电效应。当存在外加电压 $V_R$ 时，外加电压的增量 $dV_R$ 会在n区内形成额外的带正电荷的电离施主，同时会在另一区内产生带负电荷的电离受主

势垒电容的定义为

$$C_T = \frac{dQ}{dV_D} \quad dQ = qN_D dx_n = qN_A dx_p \quad V_D = V_D + V_R \quad (305)$$

从量纲上看势垒电容具有单位面积电容的含义

$$\begin{aligned} x_n &= \sqrt{\frac{2\epsilon V_D}{q} \frac{N_A}{N_D} \frac{1}{N_A + N_D}} \\ \Rightarrow \frac{dx_n}{dV_D} &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\epsilon}{q V_D} \frac{N_A}{N_D} \frac{1}{N_A + N_D}} \\ &\quad \sqrt{\frac{\epsilon a N_A N_D}{1}} \end{aligned} \quad (306)$$

$$\Rightarrow C_T = \sqrt{\frac{2\epsilon}{2V_D}} \frac{N_A + N_D}{W}$$

需要注意此时的接触电势差是包含外场偏压的

一般情况下，势垒电容大都是 $pF$ 或更小的量级

势垒电容和突变结空间电荷区宽度的方程可以看到如下关系

$$C_T = \frac{\epsilon}{W} \quad (307)$$

上式对突变结和缓变结都成立

因为这里的势垒电容是单位面积电容的含义，可以看到电容表达式与平行板电容器的电容表达式是一样的

因为空间电荷区宽度是反偏电压的函数，因此势垒电容也是反偏电压的函数

## 6. 单边突变结

如果 $N_A \gg N_D$ ，称为 $p^+n$ 结，如果 $N_D \gg N_A$ ，称为 $pn^+$ 结，这两种都是单边突变结

单边突变结 $p^+n$ 下空间电荷区的宽度可以简化

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon(V_D + V_R)}{q}} \frac{N_A + N_D}{N_A N_D} \xrightarrow{N_A \gg N_D} \sqrt{\frac{2\epsilon(V_D + V_R)}{q N_D}} \quad (308)$$

再考虑 $x_n, x_p$ 的表达式可以发现 $x_n \gg x_p$ ，即空间电荷区宽度几乎就是 $x_n$ 的宽度，这表明几乎所有的空间电荷区都扩展到 $pn$ 结轻掺杂的区域

单边突变结的空间电荷区几乎在轻掺杂的区域

同样地势垒电容也可以简化

$$C = \sqrt{\frac{q\epsilon N_A N_D}{2(V_D + V_R)}} \frac{1}{N_A + N_D} \xrightarrow{N_A \gg N_D} \sqrt{\frac{q\epsilon N_D}{2(V_D + V_R)}} \quad (309)$$

## 7. 线性缓变结

$$W^3 = \frac{12\epsilon}{q\alpha} V_D$$

$$Q = \int_0^{\frac{W}{2}} q\alpha x dx \quad (310)$$

$$C_T = \frac{dQ}{dV_D} = \left[ \frac{q\alpha\epsilon^2}{12V_D} \right]^{\frac{1}{3}} = \frac{\epsilon}{W}$$

## H3 理想结的电流电压方程——肖克莱方程

### 1. 本节符号声明

符号	含义
$N_A$	$pn$ 结内 $p$ 区受主浓度
$N_D$	$pn$ 结内 $n$ 区施主浓度

符号	含义
$n_{n0} = N_D$	热平衡下 $n$ 区多子电子浓度
$p_{p0} = N_A$	热平衡下 $p$ 区多子空穴浓度
$n_{p0} = \frac{n_i^2}{N_A}$	热平衡下 $p$ 区少子电子浓度
$p_{n0} = \frac{n_i^2}{N_D}$	热平衡下 $n$ 区少子空穴浓度
$n_p$	$p$ 区内总的少子电子浓度
$p_n$	$n$ 区内总的少子空穴浓度
$n_p(-x_p)$	空间电荷区边缘处 $p$ 区少子电子浓度
$p_n(x_n)$	空间电荷区边缘处 $n$ 区少子空穴浓度
$\delta n_p$	$p$ 区内过剩少数载流子电子浓度
$\delta p_n$	$n$ 区内过剩少数载流子空穴浓度

## 2. 理想结模型条件

- 小注入条件：注入半导体中的少数载流子远小于平衡多子，多子浓度基本不变
- 耗尽层突变近似条件：空间电荷区的边界存在突变，耗尽层中只存在不能移动的电离施主和电离受主，因此耗尽层呈现高阻状态，外加电压和接触电势差都落在耗尽层上，而耗尽层外半导体区域是电中性的。注入少子在  $p, n$  区是纯扩散运动
- 通过耗尽层的电子和空穴电流为常量， $pn$  结内电流处处相等且电子和空穴的电流均为连续函数，不考虑耗尽层中载流子的产生与复合
- 玻尔兹曼边界条件：在耗尽层的两端，载流子满足玻尔兹曼分布

### 3. 边界条件

先回顾两个将  $n, p$  区多子少子俩你起来的重要公式

$$n_{p0} = n_{n0} \exp \frac{-qV_D}{k_0 T} \quad (311)$$

$$p_{n0} = p_{p0} \exp \frac{-qV_D}{k_0 T}$$

正偏时，势垒高度降低。根据小注入假设，各区内多子载流子浓度不变，少子浓度变为非平衡少子浓度，因此有

$$\begin{aligned} n_p &= n_{n0} \exp \frac{-q(V_D - V_R)}{k_0 T} = n_{p0} \exp \frac{qV_R}{k_0 T} \\ p_n &= p_{p0} \exp \frac{-q(V_D - V_R)}{k_0 T} = p_{n0} \exp \frac{qV_R}{k_0 T} \end{aligned} \quad (312)$$

因此在外加正偏电压时将会在各区内产生过剩少数载流子

#### 4. 少数载流子的分布

回顾空间连续性方程，以 $n$ 区内少数载流子空穴为例

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J} + g - \frac{\delta p}{\tau_p}$$

$$\vec{J} = pq\mu_p \vec{E} - qD_p \nabla \delta p \quad (313)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial p}{\partial t} = D_p \nabla^2 \delta p - \mu_p E \nabla p + g - \frac{\delta p}{\tau_p}$$

我们不考虑载流子的产生，同时我们认为在结边界两侧的区域没有电场分布，当结处于稳态时，在 $x \geq x_n$ 区域内

$$D_p \nabla^2 \delta p - \frac{\delta p}{\tau_p} = 0 \quad (314)$$

同样在 $x \leq x_p$ 的区域内，少数载流子电子满足方程

$$D_n \nabla^2 \delta n - \frac{\delta n}{\tau_n} = 0 \quad (315)$$

少子浓度满足如下的边界条件，假设结区长度大于扩散长度

$$p_n(x_n) = p_{n0} \exp \frac{qV_R}{k_0 T}$$
$$n_p(-x_p) = n_{p0} \exp \frac{qV_R}{k_0 T} \quad (316)$$

$$p_n(x \rightarrow +\infty) = p_{n0}$$

$$n_p(x \rightarrow -\infty) = n_{p0}$$

根据边界条件可以得到过剩载流子满足空间分布方程

$$\delta p_n(x) = p_n - p_{n0} = p_{n0} \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \exp \frac{x_n - x}{L_p} \quad L_p = \sqrt{D_p \tau_p} \quad (317)$$

$$\delta n_p(x) = n_p - n_{p0} = n_{p0} \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \exp \frac{x_p + x}{L_n} \quad L_n = \sqrt{D_n \tau_n}$$

Tips

小结

前面小节中，正偏电压的存在抵消了内建电场的作用，从而抑制漂移运动，将空间电荷区长度缩短，表现在能带上就是降低势垒高度，这样，各区内的少子将更容易通过势垒区而发生电注入，并在穿过后与多子复合，这样，过剩少数载流子的浓度就距离增加而呈现指数衰减

#### 5. 理想结电流

根据理想结假设

1. 通过耗尽区内的电子电流和空穴电流是定值

2. 结内电子电流和空穴电流是连续函数，因此结内电流即为 $x_n, x_p$ 处的少子扩散电流之和
3. 流过结内的电流是电子电流和空穴电流之和
4. 空间电荷区外不存在电场分布，因此忽略少子漂移电流成分

基于此，结内的电流就是空穴和电子的扩散电流之和

少子空穴的扩散电流密度为

$$J_p(x_n) = -qD_p \nabla p_n = -qD_p \nabla \delta p_n$$

$$\delta p_n(x) = p_{n0} \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \exp \frac{x_n - x}{L_p} \quad (318)$$

$$\Rightarrow J_p(x_n) = \frac{qp_{n0} D_p}{L_p} \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right)$$

同样，少子电子的扩散电流密度为

$$J_n(-x_p) = \frac{qn_{p0} D_n}{L_n} \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \quad (319)$$

**总电流密度**为

$$J = \left( \frac{qp_{n0} D_p}{L_p} + \frac{qn_{p0} D_n}{L_n} \right) \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \quad (320)$$

定义参数 $J_s$

$$J_s = \frac{qp_{n0} D_p}{L_p} + \frac{qn_{p0} D_n}{L_n} \quad (321)$$

**理想二极管方程，或理想电压电流关系为**

$$J = J_s \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \quad (322)$$

当外加电压大于几个热电亚 $\frac{k_0 T}{q}$ 时可以将 $(-1)$ 项忽略

## 6. 温度效应

我们看到在理想结的电流电压方程中，平衡载流子浓度等参数是温度的函数，因此电流电压方程也是温度的函数，下面讨论与温度的关系

热平衡状态下，平衡载流子浓度始终满足浓度积公式，基于此，可以得到

$$J \propto \exp\left(\frac{-E_g}{k_0 T}\right) \exp \frac{qV_R}{k_0 T} \quad (323)$$

对于硅结来说，温度每升高 $10^{\circ}\text{C}$ ，理想反向饱和电流密度增大为原来的四倍，正偏电流随温度的变化不如反向饱和电流明显

## H3 PN结小信号模型

### 1. 扩散电阻

从理想二极管方程得到电流方程为

$$I_D = I_s \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \quad I_s = J_s A \quad J_s = \frac{qn_{p0} D_n}{L_n} + \frac{qp_{n0} D_p}{L_p} \quad (324)$$

我们将 $I_s$ 称为二极管的反向饱和电流

当二极管的外加正偏电压上叠加一个低频正弦电压，在直流电流上就会叠加一个小信号正弦电流。当正弦电压与电流无限小时，小信号增量电导就是直流电流—电压曲线的斜率

$$g_d = \frac{dI_D}{dV_R} = \frac{q}{k_0 T} I_{DQ} = \frac{I_{DQ}}{V_t} \quad (325)$$

这里是将 $(-1)$ 项忽略后的结果，电阻自然是电导的倒数，称为**增量电阻或扩散电阻**

## 2. 扩散电容

在前面章节中，空间电荷区中不可移动的正负电荷，等效于积聚电荷，因此具有电容的作用，称为势垒电容，**势垒电容是反偏电压的函数**

当外加正偏电压时，另一个电容，**扩散电容**，将在二极管的导纳中发挥作用

### 扩散电容的定性分析

在直流电压 $V_d$ 上叠加一个低频小信号交流电压 $V_c$ ，总的正偏电压就是 $V_R = V_d + V_c \sin \omega t$

随着时间的变化，穿过空间电荷区注入到另一区的少子数目也相应发生变化，在交流电压达到最大时会达到最大值，在交流电压达到最小时会达到最小值

假设交流电压的周期大于载流子穿越空间电荷区所用的时间，这样，少子浓度随距离的函数就可以视为稳态分布。不同时刻对应着不同的关于距离的分布曲线，从一个时刻到另一时刻的过程，就可以视为充放电的过程

这种在扩散过程中产生的电容称为扩散电容，正偏 $pn$ 结的扩散电容要比势垒电容大得多

### 扩散电容的数学分析

思路：给出叠加小信号正弦电压下的结内少子分布情况，进而确定扩散电流表达式

为方便起见，下面将原点设置在 $n$ 区的空间电荷区边缘，于是有 $p_n(0) = p_{n0} \exp \frac{qV_R}{k_0 T}$

$$V_R = V_0 + v(t) \quad (326)$$

$$p_n(0, t) = p_{n0} \exp \frac{qV_0 + qv(t)}{k_0 T} \quad (327)$$

假如我们认为交流小信号的电压值远小于一个热电势，将上式进行展开并只保留一阶项

$$p_n(0, t) = p_{n0} \exp \frac{qV_0}{k_0 T} \left(1 + \frac{v(t)}{V_t}\right) \quad (328)$$

假设正弦电压是正弦形式

$$p_n(0, t) = p_{n0} \exp \frac{qV_0}{k_0 T} \left(1 + \frac{v(t)}{V_t} e^{j\omega t}\right) \quad (329)$$

在 $n$ 区中少子空穴的空间连续性方程即为

$$D_p \nabla^2 \delta p - \frac{\delta p}{\tau_p} = \frac{\partial \delta p}{\partial t} \quad (330)$$

假设方程的解是由直流部分和交流部分构成

$$\delta p = \delta p_0(x) + p_1(x) e^{j\omega t} \quad (331)$$

由此得到

$$[D_p \nabla^2 \delta p_0 - \frac{\delta p_0}{\tau_p}] + [D_p \nabla^2 p_1 - \frac{p_1}{\tau_p} - j\omega p_1] e^{j\omega t} = 0 \quad (332)$$

直流成分的其次线性方程的解前面已经得到，下面关注交流解

$$D_p \nabla^2 p_1 - \frac{p_1}{\tau_p} - j\omega p_1 = 0$$

$$\nabla^2 p_1 - \frac{1 + j\omega\tau_p}{L_p^2} p_1 = \nabla^2 p_1 - C_p^2 p_1 = 0$$
(333)

方程的解形式为

$$p_1 = A \exp(C_p x) + B \exp(-C_p x)$$
(334)

根据在  $x = 0$  处的边界条件和在无穷远处的边界条件可以确定第一项系数为零，第二项系数如下

$$B = p_{n0} \exp \frac{qV_0}{k_0 T} \frac{v(t)}{V_t}$$
(335)

由此可以得到少子空穴扩散电流密度为

$$J_p = -q D_p \nabla \delta p = -q D_p \nabla \delta p_0 - q D_p \nabla p_1 e^{j\omega t} = J_{p0} + j_p(t)$$
(336)

$$J_{p0} = \frac{qp_{n0} D_p}{L_p} \left( \exp \frac{qV_0}{k_0 T} - 1 \right)$$
(337)

$$j_p(t) = q C_p D_p p_{n0} \exp \frac{qV_0}{k_0 T} \frac{v(t)}{V_t} \exp(-C_p x) e^{i\omega t} \quad C_p^2 = \frac{1 + j\omega\tau_p}{L_p^2}$$
(338)

定义交流电相量  $\hat{J}_p$  为

$$j_p(t) = \hat{J}_p e^{j\omega t} \Rightarrow \hat{J}_p = q C_p D_p p_{n0} \exp \frac{qV_0}{k_0 T} \frac{v(t)}{V_t} \exp(-C_p x)$$
(339)

带入  $C_p$

$$\hat{I}_p = A \hat{J}_p = I_{p0} \sqrt{1 + j\omega\tau_{p0}} \frac{v(t)}{V_t}$$
(340)

对于少子电子有

$$\hat{I}_n = I_{n0} \sqrt{1 + j\omega\tau_{n0}} \frac{v(t)}{V_t}$$
(341)

总的交流电相量是两者之和

$pn$  结导纳为总交流电相量与交流电压相量的比值

$$Y = \frac{1}{V_t} (I_{p0} \sqrt{1 + j\omega\tau_{p0}} + I_{n0} \sqrt{1 + j\omega\tau_{n0}})$$
(342)

通常取近似解

$$Y = \frac{1}{V_t} \left[ I_{p0} \left( 1 + \frac{j\omega\tau_{p0}}{2} \right) + I_{n0} \left( 1 + \frac{j\omega\tau_{n0}}{2} \right) \right]$$
(343)

将实部和虚部分别合并有如下形式

$$Y = g_d + j\omega C_d \quad g_d = \frac{I_{DQ}}{V_t}$$
(344)

第一部分就是扩散电阻的倒数，即扩散电导， $I_{DQ}$  称为直流偏置电流，参数  $C_d$  称为扩散电容

$$C_d = \frac{1}{2V_t} (I_{p0}\tau_{p0} + I_{n0}\tau_{n0})$$
(345)

### 3. 小结

*pn*结扩散电容的一般性表达式为

$$C_d = Aq^2 \frac{n_{p0}L_n + p_{n0}L_p}{k_0T} \exp \frac{qV_R}{k_0T} \quad (346)$$

*p<sup>+</sup>n*结的扩散电容表达式为

$$C_d = Aq^2 \frac{p_{n0}L_p}{k_0T} \exp \frac{qV_R}{k_0T} \quad (347)$$

一般情况下扩散电容并不明显，结电容主要是势垒电容，只有在大的正偏电压下，扩散电容才起主要作用。扩散电容实际上是在外加正偏电压下扩散区存储载流子的效应

### H3 产生-复合电流

在前面，我们定义理想结的其中一个条件就是结内电流处处相等且为连续函数，忽略载流子的产生和复合运动。这种忽略空间电荷区内一切效应的方法会影响实际结的特性，这是因为空间电荷区内含有其它电流成分，实际的电流电压特性会偏离理想特性，而这额外的电流成分就是由复合运动产生的

回顾SRH理论给出的过剩载流子的净复合率公式

$$U = \frac{N_t r_n r_p (np - n_i^2)}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)} \quad (348)$$

### H4 反偏产生电流

外加反偏电压时，我们认为空间电荷区不存在可移动的载流子，这样在空间电荷区内非平衡载流子浓度为零，净复合率变为

$$U = -\frac{N_t r_n r_p (n_i^2)}{r_n n_1 + r_p p_1} \quad (349)$$

复合率为负数实际上意味着产生率。实际上在反偏电压下，空间电荷区出现电子空穴对，这些空穴对一经产生便被电场扫出空间电荷区，电荷流动方向为反偏电流方向，产生反偏电流，叠加在理想反偏饱和电流上

根据前面的知识，最大的净复合率就是最有效的复合中心，而最有效的复合中心的复合中心能级与本征费米能级重合，即  $E_i = E_t$ ，此时  $n_1 = p_1 = n_i$

$$U = -\frac{n_i}{\tau_p + \tau_n} \quad \tau_p = \frac{1}{N_t r_p}, \tau_n = \frac{1}{N_t r_n} \quad (350)$$

进一步认为两个寿命相等，就得到了最大净复合率，其实是产生率

$$-G = U = U_{max} = -\frac{n_i}{2\tau} \quad (351)$$

产生电流密度为

$$J_G = \int_0^W qG dx = \frac{qn_i}{2\tau} W \quad (352)$$

总的反偏电流密度是产生电流密度与理想反向饱和电流密度之和

以 $P^+N$ 结为例

$$J = J_s + J_G = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{qn_i}{2\tau} W = \frac{qL_p p_{n0}}{\tau_p} + \frac{qn_i}{2\tau} W \quad (353)$$

一般情况下，产生电流密度远大于反向饱和电流密度，会高出数个数量级，即产生电流一般在反偏电流中占主导地位

#### H4 正偏复合电流

与反偏电压的效果不同，正偏电压的存在有利于扩散运动进行，载流子将穿过势垒区发生注入。载流子在穿越势垒区的过程中可能发生复合，复合掉的部分就不是少子分布的一部分

正偏电压下的净复合率为

$$U = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (354)$$

在非平衡载流子一章中，我们有如下公式

$$\begin{aligned} n &= n_i \exp \frac{E_F^n - E_i}{k_0 T} \\ p &= n_i \exp \frac{E_i - E_F^p}{k_0 T} \\ \Rightarrow np &= n_i^2 \exp \frac{E_F^n - E_F^p}{k_0 T} \end{aligned} \quad (355)$$

从能带的角度温习一下无外场 $PN$ 结的形成过程，实际上是 $n$ 和 $p$ 型取各自的费米能级 $E_F^n, E_F^p$ 一个下移一个上移最终形成统一的费米能级。外加电压的存在实际上是影响了 $E_F^n, E_F^p$ 的位置，二者的相对偏移量就是载流子势能的增量，即

$$E_F^n - E_F^p = qV_R \quad (356)$$

外加正电压将让电子费米能级靠近导带，让空穴费米能级靠近价带

在空间电荷区中心以外的位置有

$$E_F^n - E_i = E_i - E_F^p = \frac{1}{2}qV_R \quad (357)$$

带入非平衡载流子公式，由于最有效复合中心，我们同样认为 $n_1 = p_1 = n_i, \tau = \tau_p = \tau_n$ 并带入净复合率公式有(忽略-1项)

$$U = U_{max} = \frac{n_i}{2\tau} \left( \exp \frac{qV_R}{2k_0 T} \right) \quad (358)$$

正偏复合电流密度为

$$J_r = \int_0^W qU dx = \frac{qn_i}{2\tau} W \left( \exp \frac{qV_R}{2k_0 T} \right) \quad (359)$$

总的正偏电流密度是肖克莱方程和正偏复合电流密度之和

$$J = J_s(\exp \frac{qV_R}{k_0T} - 1) + \frac{qn_i}{2\tau} W(\exp \frac{qV_R}{2k_0T}) \quad (360)$$

在外加正电压较小时，正偏复合电流占主导，在外加正电压较大时，肖克莱方程占主导，因此存在一个转折电压使这两者相等，转折电压为( $P^+N$ 为例)

$$V = \frac{2k_0T}{q} \ln\left(\frac{N_D}{2n_i} \frac{W}{L_p}\right) \quad (361)$$

故一般来说，二极管的正向电流电压关系为

$$J = j_s(\exp \frac{qV_R}{nk_0T} - 1) \quad (362)$$

在外加电压较小时 $n = 2$ ，在外加电压较大时 $n = 1$

### H3 结击穿

对于理想结，反偏电压会在结内产生一股理想饱和电流，但是反偏电压不会无限制增大，在特定的反偏电压下，反偏电流会迅速增大，发生这种现象时的电压称为**击穿电压**

形成反偏结击穿的物理机制有两种：**齐纳效应**和**雪崩效应**

**重掺杂的结由于隧穿机制而发生齐纳击穿。**在重掺杂结内，反偏条件下结两侧的导带和价带离得很近，这样电子可以从 $p$ 区的价带直接隧穿到 $n$ 区的导带

当电子或空穴穿越空间电荷区内会受到电场的加速作用，动能会增大。当它们与耗尽区原子内的电子发生碰撞时就会产生新的电子-空穴对。新产生的电子和空穴又会继续撞击其它原子内的电子，这就发生了雪崩效应，产生雪崩击穿。下面讨论雪崩击穿的相关问题

#### 1. 雪崩击穿

电离率 $\alpha$ 的定义为：单位电子或空穴在单位长度内通过碰撞产生的电子-空穴对的数目

在 $x = 0$ 处的反偏电子电流大小为 $I_{n0}$ ，在 $x = W$ 处的电子电流大小为

$$I_n(W) = M_n I_{n0} \quad M_n : \text{倍增因子} \quad (363)$$

由于雪崩效应的存在，耗尽区内的反偏电子电流 $I_n$ 距离增大而增大，在某一位置处反偏电子电流的增量为新碰撞产生的电子和空穴的贡献和

$$dI_n = I_n(x)\alpha_n dx + I_p(x)\alpha_p dx \quad (364)$$

根据理想结假定，耗尽区内各处总电流为常量

$$I \equiv I_n + I_p \approx M_n I_{n0} \quad (365)$$

因此有如下公式成立

$$dI_n = (I_n\alpha_n + I\alpha_p - I_n\alpha_p)dx \quad (366)$$

如果认为电子和空穴的电离率是相等的，那么

$$\int^W_0 dI_n = \int^W_0 (I_n\alpha_n + I\alpha_p - I_n\alpha_p)dx$$

$$I_n(W) - I_{n0} \leq \int_0^W dI_n = \int_0^W I \alpha dx$$

(367)

$$\Rightarrow 1 - \frac{1}{M_n} = \int_0^W \alpha dx$$

电离率是电场的函数，而在空间电荷区内的场强不是稳恒的，因此不容易直接积分

对于一个单边突变结  $P^+N$ ，其最大的场强强度为

$$E_{max} = \frac{qN_d x_n}{\varepsilon}$$

(368)

空间电荷区的宽度为

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon(V_D + V_R)}{q} \frac{N_A}{N_D} \frac{1}{N_A + N_D}} \approx x_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon V_R}{q} \frac{1}{N_D}}$$

(369)

此时的外加反偏电压就称为击穿电压，相应的最大电场就是临界电场

$$V_R = \frac{\varepsilon E_{max}^2}{2qN_D}$$

(370)

击穿电压与掺杂浓度成反比，低掺杂对应高击穿电压

## H4 再论击穿

击穿是指当加载的反偏电压达到一定值时反向电流急剧增大的现象，除了前文提及的齐纳、雪崩击穿机构外，还有热电击穿。齐纳击穿又称隧道击穿，因为这种机制利用的原理是隧穿效应。齐纳击穿和雪崩击穿都不会破坏结的结构

### 1. 雪崩击穿

前文我们说过，载流子在穿越空间电荷区的过程中受到电场加速而获得很大的动能，在穿越过程中与晶格原子发生碰撞将产生电子和空穴，新产生的电子和空穴经过电场加速又将与晶格原子发生碰撞，这一过程不断进行，载流子数目不断倍增(所以叫倍增系数呢！)，因此反向电流迅速增大

从能带的角度看，由于高能电子和空穴的作用，把满带中的电子激发到导带，产生大量的电子-空穴对，使反向电流迅速增加

### 2. 隧道击穿

$pN$  结在高反向偏压下， $p$  区的能带可能上升到很高的位置，以至于  $p$  区的价带顶超过  $n$  区的导带底的高度，因此  $p$  区价带中的电子将可能通过隧道效应穿过禁带而直接达到  $n$  区的导带，使得  $n$  区载流子数大量增加，从而构成很大的反向电流，这就是齐纳击穿的机理

根据量子隧穿效应的结论，隧道(空间电荷区)长度越短越利于隧穿发生

外加反向电压越大，能带倾斜越厉害，隧道长度越短，不过过大的反向偏压将抬高势垒高度，并将使隧道长度增大，而高势垒有利于雪崩倍增效应，因此一般来说，对于一般掺杂浓度的结，主要击穿机构是雪崩击穿，只有在重掺杂情况下较小的反向偏压就能让隧道击穿发生

对于硅材料结，外加反向偏压小于4.5伏特主要是隧道击穿，大于7伏特主要是雪崩击穿

### 3. 热电击穿

对于禁带宽度小的半导体(比如锗)材料，其主要击穿机构是热电击穿。因为禁带宽度小，因此其本征载流子浓度很大，而反向电流与其平方成正比，因此反向电流会很大，这样在结上损耗的功率也比较大，发热量高。如果这些热量散热不及时将引起温度升高，温度上升将进一步增大本征载流子浓度，从而进一步增大反向电流，形成正反馈，直至将结击穿

因此，禁带宽度小而反向电流大的材料容易发生热电击穿，散热不好的器件也容易发生热电击穿

#### 4. 总结

通常雪崩击穿电压比隧道击穿电压高很多，研究表明：

1.  $V_R < 4 \frac{E_g}{q}$  主要是隧道击穿

2.  $V_R > 6 \frac{E_g}{q}$  主要是雪崩击穿

3. 两者之间是两种机构的混合

### H3 电荷存储与二极管瞬态

$pN$ 结常用作电开关，正偏状态也称开态，很小的外加正偏电压就能产生较大的电流；反偏状态也称关态，结内的电流很小

对于开关电流，最重要的参数就是开关速度，或者说开关时间，本节为定性描述

#### H4 开关瞬态

让二极管从开态变为关态的，只需要调整外加电压的让二极管正反偏，正偏情况下，外加电压的存在维持 $p, n$ 区内过剩少子的空间分布，电压反偏时这一分布就不再维持而快速衰减

空间电荷区边缘处少子浓度的快速衰减带来很大的浓度梯度，因此电流方向就会变为反偏反向。反偏二极管压降相对外加电压很小，因此整个开关电路模型等价为电源 $V_R$ 和二极管外周等效电阻 $R$ 的串联，这样通过二极管的反偏电流大小就是常量，电流密度的梯度也为常量

反向电流 $I_R$ 在开始一段时间 $t_1$ 内近似为常量，称为存储时间，是空间电荷区边缘处少子浓度达到热平衡所经历的时间，此后开始衰减，衰减时间为 $t_2$ ，总关断时间为两者之和

从关瞬态达到开瞬态的时间是非常短的，主要的时间贡献来自关瞬态。更快的开关速度，即更短的关断时间，需要大的反偏电流和小的少子寿命，一般在设计开关电路时，需要给瞬态反偏电流脉冲一个泄放路径以获取快的开关断

### H3 隧道二极管

$p, n$ 区都为简并掺杂的结称为隧道二极管

在前面章节中关于简并半导体的阐述中，我们说 $n$ 型简并材料的费米能级进入了导带， $p$ 型简并材料的费米能级进入了价带，因此在 $T = 0K$ 时 $n$ 型材料的导带内存在电子而 $p$ 型材料的价带内存在空穴(空量子态)

简并材料形成的结，在能带图上反映为，在 $n$ 区统一的费米能级在导带之上，在 $p$ 区费米能级在价带之下，结果就是空间电荷区的宽度将减小，宽度大概是100埃的量级。这时我们可以将结内的电势曲线用直线替代，我们将电势零点置于 $-x_p$ 处，这样形成的势能曲线就是一个直角三角形势垒，下面简要的定性描述不同外加偏压时的二极管电流-电压特性曲线

1. 零偏压下，在费米能级以下的能级全被填充完全，曲只有原点一个点

2. 小正偏压下， $n$ 区导带中的电子与 $p$ 区价带中的空量子态直接对应， $n$ 区导带中的电子依一定概率隧穿进入 $p$ 区，占据相同能量的空量子态，有隧穿电流的形成。随着正偏压增大，能量相同的量子态逐渐达到最多，形成峰值隧穿电流
3. 较大正偏压下， $p$ 区内对应 $n$ 区的相同能量的空量子态逐渐被全部占据，相同能量的量子态数逐渐减少为零，隧穿电流值随正偏压增大逐渐下降，但是扩散电流依然存在，电流值在到达一定正偏压后将继续增大
4. 总结：电流随电压的变化为：先逐渐达到峰值再下降，此后由于扩散电流加强将重新增大，曲线中电流值随着电压增大而减小的区域称为**负微分电阻区域**，不过这个区域很小
5. 外加反偏压，将是 $p$ 区价带的空穴与 $n$ 区导带中的空量子态直接对应，随着反偏电压增大，反偏电流会快速单调的增大

所以说，正偏电压是 $n$ 区导带电子占据 $p$ 区价带空量子态，反偏电压是 $p$ 区价带空穴占据 $n$ 区导带的空量子态

---

## H2 半导体异质结

### H3 异质结的安德森能带模型

我们对异质结的能带做出如下假定：

1. 在异质结界面处不存在界面态和偶极态
2. 异质结界面两边的空间电荷区中电荷电性相反，数值相等
3. 异质结界面处的电位移矢量连续

### H3 异质结及其能带图

#### 1. 异质结

先回顾什么是**同质结**：由同一种半导体材料但不同导电类型的物质组成的 $pn$ 结就是同质结

**异质结**就是：由不同半导体材料组成的结

异质结按照结材料的导电类型不同又分为**反型异质结**和**同型异质结**两类

##### 1. 反型异质结

导电类型相反的两种不同半导体单晶材料形成的异质结

##### 2. 同型异质结

导电类型相同的两种不同半导体单晶材料形成的异质结

异质结的一般标记方法是：将禁带宽度小的半导体材料写在前面

同同质结一样，异质结按照材料结合区域的厚度可以分为：**突变异质结**和**缓变异质结**

#### 2. 异质结能带图

以反型突变异质结为例

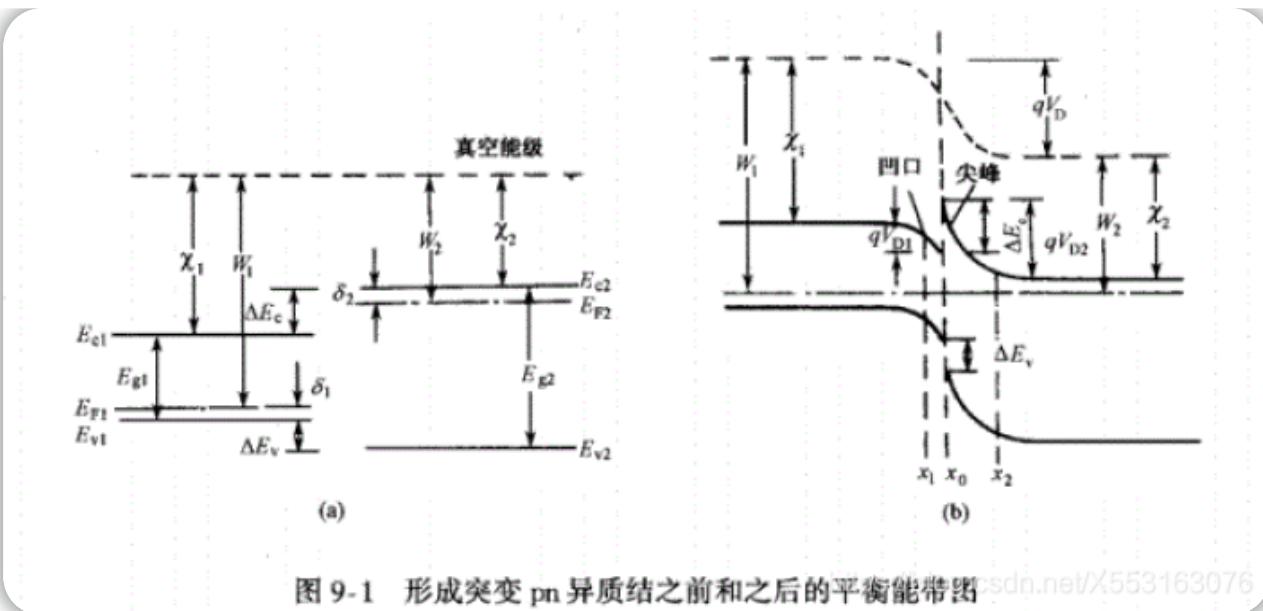


图 9-1 形成突变 pn 异质结之前和之后的平衡能带图

参见上图，对相关物理量含义做如下说明：

1.  $E_F$ : 费米能级
2.  $E_c$ : 导带底能级
3.  $E_v$ : 价带顶能级
4.  $W$ : 真空能级与费米能级之差，也称功函数
5.  $\chi$ : 真空能级与导带底能级之差，称电子亲和能

$$W = E_0 - E_F \quad (371)$$

$$\chi = E_0 - E_c$$

除了上述量以外，形成异质结后两种材料具有共同的费米能级，但是各自材料的功函数和电子亲合能应当不变，因此在界面处会形成势垒以维持各自材料的亲合能和功函数不变，这个势垒的高度就是两种材料各自费米能级的差

$$qV_D = |E_{F1} - E_{F2}| = |W_1 - W_2| \quad (372)$$

脚标1的物理量对应禁带宽度小的材料，脚标2的物理量对应禁带宽度大的材料

#### 一些概念：

1. 电子结合能：指电子进入原子核外电子轨道上所放出的能量，放出的能量越高，说明该电子与原子核结合的越紧密，越靠近内层，同时电子结合能也是电子所在能级与费米能级的能量差
2. 电子亲和能：将一个电子从半导体的导带底移至半导体表面真空能级所需要的最小能量
3. 真空能级：电子达到该能级时完全自由而不受核的作用，在半导体材料中所确定的能带位置都是基于真空能级作为能参考点得到的，该能级是恒定不变的
4. 费米能级定义：在无相互作用的费米子组成的费米系统中，费米能级表示系统中加入一个粒子后可能引起的基态能量的最小增量<sup>1</sup>；处于绝对零度时，处于基态的费米子系统的化学式<sup>2</sup>；严格来说，费米能级是指费米子系统在趋于绝对零度时的化学势<sup>3</sup>

与同质结一样，两块半导体材料结合在一起后形成的异质结，在热平衡状态时，也具有统一的费米能级，并在界面附近形成空间电荷区，产生内建电场，进而产生附加电势能让能带弯曲。费米能级是统一的，因此能带总的弯曲量也就是电子真空能级的弯曲量

$$W_2 - W_1 = E_{F1} - E_{F2} = qV_{D1} + qV_{D2} = qV_D \quad (373)$$

异质结的能带具有如下特点：

1. 结面附近区域的能带除了弯曲，导带底(或价带顶)还会形成尖峰或凹口，其产生原因是两种材料的禁带宽度不同所致
2. 两种材料的导带和价带能级在界面处是不连续的，即在交界面处电子(空穴)的能量会发生突变，导带底、价带顶的突变量为

$$\begin{aligned}\Delta E_c &= \chi_1 - \chi_2 \\ \Delta E_g &= \Delta E_c + \Delta E_v = E_{g2} - E_{g1} \\ \Rightarrow \Delta E_v &= E_{g2} + \chi_2 - E_{g1} - \chi_1\end{aligned}\quad (374)$$

### 3. 界面态对异质结能带的影响

由于构成异质结的两种材料的晶格常数通常不等，因此形成异质结时，他们的晶格将出现不匹配的现象，称为晶格失配，定义为

$$\gamma = \frac{2(a_2 - a_1)}{a_1 + a_2} \quad (375)$$

由于晶格失配，在晶格常数较小的材料的界面上就会出现一部分不饱和键，也称悬挂键。这些悬挂键也像杂质一样起施主或受主作用，相当于在异质结中引入了一些能级，称为界面态(因为悬挂键仅位于界面处)

对于n型半导体，悬挂键起受主作用，因此表面处的能带向上弯曲；对于p型材料，悬挂键起施主作用，因此表面处的能带向下弯曲；对于异质结，当悬挂键起受主作用时，能带向上弯曲，起施主作用时能带向下弯曲

## H3 异质结的内电场、内电势和宽度

形成结后体系具有统一的费米能级，但各部分材料需要位置自身的亲合能和功函数不变，因此会在界面处形成势垒，形成空间电荷区，产生内建电场，因此在材料两端存在内建电势(接触电压)，下面以反型异质结为例

与同质结一样，在结内存在载流子的扩散和漂移，各载流子的电流密度是扩散电流和漂移电流之和

$$\begin{aligned}J_n &= nq\mu_n E + qD_n \frac{dn}{dx} \\ J_p &= pq\mu_p E - qD_p \frac{dp}{dx}\end{aligned}\quad (376)$$

当结处于稳态且没有外加电压时，漂移运动与扩散运动平衡，载流子电流密度为零

$$\begin{aligned}nq\mu_n E + qD_n \frac{dn}{dx} &= 0 \\ pq\mu_p E - qD_p \frac{dp}{dx} &= 0\end{aligned}\quad (377)$$

考虑到

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \quad (378)$$

由此得到

$$E = \frac{1}{q} \frac{dE_c}{dx} \quad (379)$$

根据泊松方程

$$\nabla^2 V = -\nabla \cdot E = -\frac{\rho}{\epsilon} \quad (380)$$

对于突变结

$$\rho = \begin{cases} -qN_A & x \in [-x_p, 0] \\ qN_D & x \in [0, x_n] \end{cases} \quad (381)$$

对泊松方程进行积分得到电场分布

$$E(x) = -\frac{qN_A}{\epsilon_p}(x + x_p) \quad (382)$$

$$E(x) = \frac{qN_D}{\epsilon_n}(x - x_n)$$

边界条件依然是在势垒区两侧外无电场分布，需要注意的是，因为是异质结，因此材料的介电常数不定相同

对电场再次积分得到电势分布，规定边界条件为  $V(-x_p) = 0, V(x_n) = V_D$

$$V_p(x) = \frac{qN_A}{2\epsilon_p}(x + x_p)^2 \quad (383)$$

$$V_n(x) = V_D - \frac{qN_D}{2\epsilon_n}(x - x_n)^2$$

在界面交界处电势连续，由此可以得到接触电势差为

$$V_D = \frac{qN_D}{2\epsilon_n}x_n^2 + \frac{qN_A}{2\epsilon_p}x_p^2 \quad (384)$$

可以看到上面这些式子与同质结的差别在表达式上只体现为介电常数的差异

注意到在界面交界处电位移矢量连续，因此

$$D_n(0) = D_p(0)$$

$$\epsilon_n E_n(0) = \epsilon_p E_p(0) \quad (385)$$

$$\Rightarrow -qN_D x_n = -qN_A x_p$$

由此得到的一个很重要的关系式，这个式子与同质结一致

$$\frac{x_n}{x_p} = \frac{N_A}{N_D} \quad (386)$$

下面通过接触电势差导出空间电荷区宽度

$$V_D = \frac{qN_D}{2\epsilon_n}x_n^2 + \frac{qN_A}{2\epsilon_p} \frac{N_D^2}{N_A^2} x_n^2 \quad (387)$$

$$V_D = \frac{q\gamma_A}{2\varepsilon_p}x_p^2 + \frac{q\gamma_D}{2\varepsilon_n} \frac{\gamma_A}{N_D^2} x_p^2$$

$$\Rightarrow x_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon_n\varepsilon_p V_D}{q} \frac{N_A}{N_D} \frac{1}{\varepsilon_p N_A + \varepsilon_n N_D}}$$

$$\Rightarrow x_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon_n\varepsilon_p V_D}{q} \frac{N_D}{N_A} \frac{1}{\varepsilon_p N_p + \varepsilon_n N_D}}$$
(388)

可以看到与同质结的表达式区别也是由介电常数引起的，在分子坟墓上，相对于同质结的变化为

$$\varepsilon \rightarrow \varepsilon_n \varepsilon_p$$

$$N_A + N_D \rightarrow \varepsilon_p N_A + \varepsilon_n N_D$$
(389)

**总空间电荷区宽度为**

$$W = x_n + x_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon_n\varepsilon_p V_D}{q} \frac{(N_A + N_D)^2}{N_A N_D} \frac{1}{\varepsilon_p N_A + \varepsilon_n N_D}}$$
(390)

各个独立区域内的电势之比为

$$\frac{V_p(0)}{V_n(x_n) - V_n(0)} = \frac{\varepsilon_p N_A}{\varepsilon_n N_D}$$
(391)

可以看出在两种半导体材料中，内建电势的大小依赖于界面两侧是掺杂浓度和介电常数

### H3 异质结的单位面积势垒电容

与同质结一样，这里的势垒电容依然是单位面积势垒电容的含义，用 $C_T$ 表征

$$dQ = qN_A dx_p = qN_D dx_n$$
(392)

$$x_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon_n\varepsilon_p V_D}{q} \frac{N_D}{N_A} \frac{1}{\varepsilon_n N_D + \varepsilon_p N_p}}$$
(393)

$$C_T = \frac{dQ}{dV_D} = \sqrt{\frac{q\varepsilon_n\varepsilon_p}{2V_D} \frac{N_A N_D}{\varepsilon_n N_D + \varepsilon_p N_A}}$$
(394)

### H3 异质结电流运输机构

异质结的电流运输机构有如下模型：扩散模型，发射模型，发射-复合模型，隧道-复合模型，隧道模型，我们主要阐述扩散模型，将可以看到异质结的扩散模型的结果与同质结时类似的

#### 1. 扩散模型

以反型异质结为例

因为异质结的导带和价带在界面处是不连续的，存在尖峰或凹陷，因此，对于电子来说，实际上的势垒高度是小于接触电势差带来的电势能增量，实际势垒高度为

这就是电子实际上需要“爬坡”的高度

在平衡态时， $p$ 区和 $n$ 区内电子浓度关系为

$$n_{p0} = n_{n0} \exp\left(-\frac{qV_D - \Delta E_c}{k_0 T}\right) \quad (396)$$

如果存在外加正电压，相应的变化依然可以理解为对势垒高度的作用，即

$$n_p(-x_p) = n_{n0} \exp\left(-\frac{q(V_D - V_R) - \Delta E_c}{k_0 T}\right) \quad (397)$$

下面推到 $p$ 区内少子电子浓度的空间分布方程，根据空间连续性方程

$$D_n \frac{d^2 n}{dx^2} - \frac{\delta n}{\tau_n} = 0 \quad (398)$$

认为扩散深度远小于元件尺度，因此在无穷远处的边界条件为零，那么得到解的形式为

$$\delta n(x) = A \exp \frac{x}{L_n} \quad (399)$$

注意 $n(-x_p)$ 的值，由此确定参数 $A$ 为

$$A = (n_p - n_{p0}) \exp \frac{x_p}{L_n} = n_{p0} \exp\left(-\frac{qV_D - \Delta E_c}{k_0 T}\right) (\exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1) \exp \frac{x_p}{L_n} \quad (400)$$

这样就能得到少数载流子的空间分布方程

$$\delta n_p(x) = n_{p0} \exp\left(-\frac{qV_D - \Delta E_c}{k_0 T}\right) (\exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1) \exp \frac{x_p + x}{L_n} \quad (401)$$

于同质结类似，我们只考虑扩散运动，因此电流密度为扩散电流密度

$$J_n = qD_n \frac{dn}{dx} \Big|_{x=-x_p} = \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} \left[ \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right] \quad (402)$$

类似的可以得到空穴的电流密度为

$$J_p = \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} \left[ \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right] \quad (403)$$

总电流密度为二者之和，可以看到，形式上与同质结时完全一致的

## 2. 发射模型

发射模型认为：在任何温度下，由于热运动，将有一部分载流子具有足够的能量越过势垒，从交界面一侧以热电子发射方式通过势垒而进入另一侧

## 3. 发射-复合模型

发射-复合模型认为：在交界面处存在晶格被强烈扰乱的一个薄层，它产生许多界面态，使得以热发射方式克服了各自的势垒而达到交界面处的载流子迅速复合

## 4. 隧道-复合模型

隧道-复合模型认为：在交界面处存在界面态，既考虑到隧道效应又考虑到复合作用

## 5. 隧道模型

隧道模型认为：不考虑复合作用，载流子都以隧道效应的方式通过势垒

---

## H2 半导体表面和MIS结构

### H3 基本概念

1. 表面：固体与真空之间的分界面，不具有体内三维周期性的原子层
2. 界面：不同物质之间或者不同相之间的分界面
3. 理想界面：表面层中原子排列的对称性与体内原子完全相同，并且表面不附着任何原子或分子的半无限晶体表面，是理想晶体中假想的分别面
4. 实际表面
  - 清洁表面：没有杂质吸附和氧化层的实际表面
  - 真实表面：含有氧化物或其它杂质、化合物以及物理吸附的实际表面
5. 表面态：由于晶体自由表面的存在使周期性势场在表面处发生中断，从而在禁带中引入附加能级。这些附加能级上的电子将定域在表面层中，并沿照与表面相垂直的方向向体内指数衰减。这些附加的电子能态就是表面态
  1. 分类
    - 本征表面态：清洁表面的电子状态
    - 外诱表面态：存在杂质、吸附原子和其它不完整性时的表面电子状态
  2. 表面态
    - 晶界的表面态密度很高，如果忽略自旋影响，表面态的数目就等于表面原子的数目
    - 晶界的表面态密度是不稳定的，随表面处的缺陷和吸附状态而改变
    - 实际表面由于薄氧化层的存在，表面的悬挂键大部分被氧原子饱和，表面态密度大大降低

### H3 表面电场效应

1. 表面电场的成因
  - 表面态与体内电子态之间交换电子
  - 金属和半导体接触时，功函数不同，形成接触电势差
  - 半导体表面的氧化层或其它绝缘层中存在各种电荷、绝缘层外表面吸附某种离子
  - 在MOS或MIS结构中，在金属栅极和半导体间施加电压
2. 理想MIS结构的条件
  - 金属和半导体之间的功函数差为零
  - 在绝缘层内没有任何电荷且绝缘层完全不导电
  - 绝缘体和半导体界面处不存在任何界面态

### 3. 空间电荷区及表面势

MIS结构是金属栅极—绝缘层—半导体的分布，这样的结构相当于电容。在金属与半导体间施加电压后，在金属与半导体相对的两个面上就存在充放电过程

在金属中，自由电子密度很高，电荷基本上分布在很薄的一个原子层的厚度范围内；而在半导体中，相对于金属，自由载流子密度低很多，电荷分布在一定厚度的表层内，这个带电的表层就是空间电荷区

外加电势高电位接入金属栅极，在金属层的边界上积累正电荷，在 $p$ 型半导体表面形成一定宽度的带负电荷的空间电荷区，在空间电荷区内，电场指向半导体内部，电势分布随距离变化因而形成电势差，同时能带在空间电荷区内弯曲，称空间电荷区两端的电势差为表面势 $V_S$

表面势及空间电荷区内电荷的分布与金属与半导体之间所加电压 $V_G$ 有关，分为四种情况：多子堆积，多子耗尽，少子反型，平带。反型又可以进一步分为弱反型和强反型，因此我们常说结内电荷具有五种状态

先给出本节及之后节中内容出现的物理量的符号和含义

符号	含义
$V_G$	栅极电压，规定正电压加在栅极时 $V_G > 0$
$V_S$	表面势，是空间电荷区两端的电势差，描述本征费米能级的弯曲程度，是水平时的数值减去表面处数值的度量
$V_B$	描述绝缘层与半导体边界处本征费米能级和费米能级差的物理量， $qV_B = E_i - E_F$
$n_s, p_s$	指表面电荷浓度
$Q_G$ 或 $Q_n$	描述MIS结构中金属-绝缘层界面处的电荷带电性质， $Q_G < 0$ 意味电子积累
$Q_{sc}$	描述MIS结构中绝缘层-半导体界面处的电荷带电性质， $Q_{sc} > 0$ 意味空穴积累
$d_{sc}$	耗尽区宽度(不包括反型区)
$L_D$	德拜长度

下面以 $p$ 型半导体区域为例

#### 1. 多子堆积

对于 $p$ 型半导体，多子是空穴，想要空穴在绝缘层-半导体界面处堆积，就需要在半导体一侧加正电压，在金属栅极一侧加负电压，因此 $V_G < 0$

外加电场由半导体内部指向绝缘层-半导体层表面，由于空穴积累，因此表面处空穴的浓度要比平衡时浓度高，根据公式

$$p = N_A \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{k_0 T}\right) \quad (404)$$

可以看见价带需要向上弯曲以获得更高的空穴浓度，这意味着本征费米能级也想上弯曲，根据表面势的定义可知表面势 $V_S < 0$ ，表面电荷浓度 $p_s > p_0$ ， $Q_{sc} > 0$ ， $Q_n < 0$

#### 2. 平带

不存在外加栅极电压的情况对应平带，平带时没有能级的弯曲， $Q_n = Q_{sc} = 0$

### 3. 多子耗尽

栅极电压  $V_G > 0$ ，空穴耗尽意味表面处空穴浓度降低，因此价带能级向下弯曲，这样本征费米能级同样向下弯曲，表面势  $V_S > 0$ ,  $Q_n > 0, Q_{sc} < 0$

### 4. 少子反型

栅极电压  $V_G > 0$ ，本征费米能级同价带顶能级向下弯曲，当本征费米能级弯曲程度过大以至于存在一部分区域低于费米能级时，表面处就会出现一个与衬底导电类型相反的一层称为反型层，反型层出现在紧靠半导体表面处的位置，从反型层到半导体内部之间还夹着耗尽层，此时，表面空间电荷区由两部分组成，一部分是耗尽层中的电离受主，另一部分是反型层中的少子，少子堆积在近表面处

从公式

$$n_0 = n_i \exp \frac{E_F - E_i}{k_0 T} \quad (405)$$
$$p_0 = n_i \exp \frac{E_i - E_F}{k_0 T}$$

也能看到这种急剧弯曲带来少数载流子浓度的快速上升

#### 下面分析 $p$ 型半导体反型电子的来源

- 体内少子扩散区电子扩散到表面被外电场扫入反型区
- 耗尽区内产生电子-空穴对，产生的电子被外电场扫入反型区
- 实际上不可避免地存在界面态，界面态上存在电子

关于耗尽区内产生电子空穴对一事，在前面  $pn$  结一章中我们提到实际结中是存在产生和复合现象的，复合率由  $SRH$  理论给出

$$U = \frac{N_t r_n r_p (np - n_i^2)}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)} \quad (406)$$

空间电荷区内我们认为是不存在可移动的载流子，因此  $n = p = 0$ ，由此可以看到净复合率是负数，负的净复合率实际意味着产生率，因此将产生电子-空穴对

根据  $V_S, V_B$  的定义，可知反型的条件是：

$$qV_S \geq qV_B \quad (407)$$

根据  $V_S$  大于  $V_B$  的程度不同，反型分为 弱反型 和 强反型

#### 1. 弱反型

弱反型满足

$$V_S \geq V_B \quad n_S > p_S \quad (408)$$

#### 2. 强反型

强反型满足

$$V_S \geq 2V_B \quad n_S \geq p_0 \quad (409)$$

实际上强反型的边界条件就是  $n_S = p_0$

$$\therefore n_S p_0 = n_i^2 \exp \frac{qV_S}{k_0 T}$$

$$\therefore n_S = p_0$$

$$\therefore n_S = n_i \exp \frac{qV_S}{2k_0 T} \quad (410)$$

$$\therefore p_0 = n_i \exp \frac{E_i - E_F}{k_0 T} = n_i \exp \frac{qV_B}{k_0 T}$$

$$\therefore V_S = 2V_B$$

强反型时由于反型层中电子浓度很大，相当于绝缘层-反型层边界与金属-绝缘层及其间区域构成电容，而不再以耗尽区处为边界，相当于反型层对外电场的屏蔽。我们知道耗尽区的宽度与在加载耗尽区两端的电势有关，电场线终止于反型层，这样耗尽区的电势是稳定的，就存在最大耗尽层宽度

下面以一个表来总结一下相关内容

$V_G$	$V_S$	p半状态	p价带	n半状态	n导带
$\gg 0$	$> 0$	反型	下弯	电子积累	下弯
$> 0$	$> 0$	空穴耗尽	下弯	电子积累	下弯
0	0	平带	平带	平带	平带
$< 0$	$< 0$	空穴积累	上弯	电子耗尽	上弯
$\ll 0$	$\ll 0$	空穴积累	上弯	反型	上弯

#### 4. 表面空间电荷区的电场电势电容

规范：取绝缘层-半导体界面处为原点，同时由于空间电荷区外的半导体区域处于平衡态，即电中性状态(中性区)，定义中性区为零电势

下面依然以p型区为例

不做特殊说明，下面的介电常数均是指空间电荷区的介电常数

$$\epsilon = \epsilon_{rs} \epsilon_0 \quad (411)$$

空间电荷区内的电荷密度分布为

$$\rho(x) = q[n_D^+ - p_A^- + p_p(x) - n_p(x)] \quad (412)$$

中性区内电子和空穴的浓度分别为 $n_{p0}, p_{p0}$ ，电中性条件为

$$n_D^+ - p_A^- = n_{p0} - p_{p0}, \rho(x) = 0 \quad (413)$$

在金属栅极上施加正电压时，能带下弯，对于电子来说相当于下坡，对于空穴来说相当于上坡，因此在空间电荷区内的载流子浓度分布为

$$n_p(x) = n_{n0} \exp \frac{qV(x)}{k_0 T} \quad (414)$$

$$p_p(x) = p_{n0} \exp \frac{-qV(x)}{k_0 T}$$

$V(x)$ 为空间电荷区内的电势分布，是我们要求的量，根据泊松方程

$$\nabla^2 V = -\nabla \vec{E} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad (415)$$

进一步得到

$$\begin{aligned} \nabla^2 V &= -\frac{q}{\varepsilon} [p_p(x) - p_{p0} - n_p(x) + n_{p0}] \\ &= -\frac{q}{\varepsilon} \left[ p_{p0} \left[ \exp \frac{-qV(x)}{k_0 T} - 1 \right] - n_{p0} \left[ \exp \frac{qV(x)}{k_0 T} - 1 \right] \right] \end{aligned} \quad (416)$$

将上式两侧对dV积分得到

$$\begin{aligned} \int \frac{dV}{dx} d\left(\frac{dV}{dx}\right) &= -\frac{q}{\varepsilon} \int_0^V [p_{p0} \left( \exp \frac{-qV(x)}{k_0 T} - 1 \right) - n_{p0} \left( \exp \frac{qV(x)}{k_0 T} - 1 \right)] dV \\ &= -\frac{k_0 T}{\varepsilon} \left[ -p_{p0} \left( \exp \frac{-qV}{k_0 T} + \frac{qV}{k_0 T} \right) - n_{p0} \left( \exp \frac{qV}{k_0 T} - \frac{qV}{k_0 T} \right) \right] \Big|_{V=0}^{V=V} \\ &= \frac{k_0 T}{\varepsilon} \left[ p_{p0} \left( \exp \frac{-qV}{k_0 T} + \frac{qV}{k_0 T} - 1 \right) + n_{p0} \left( \exp \frac{qV}{k_0 T} - \frac{qV}{k_0 T} - 1 \right) \right] \\ &= \frac{1}{2} |\vec{E}|^2 \end{aligned} \quad (417)$$

由此得到空点电荷区的场强模方为

$$\Rightarrow |E|^2 = \left( \frac{2k_0 T}{q} \right)^2 \frac{q^2 p_{p0}}{2\varepsilon k_0 T} \left[ \left[ \exp \frac{-qV}{k_0 T} + \frac{qV}{k_0 T} - 1 \right] + \frac{n_{p0}}{p_{p0}} \left[ \exp \frac{qV}{k_0 T} - \frac{qV}{k_0 T} - 1 \right] \right] \quad (418)$$

定义德拜长度 $L_D$

$$L_D = \sqrt{\frac{2\varepsilon k_0 T}{q^2 p_{p0}}} \quad (419)$$

$$F\left(\frac{qV}{k_0 T}, \frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right) = \sqrt{\left[ \left[ \exp \frac{-qV}{k_0 T} + \frac{qV}{k_0 T} - 1 \right] + \frac{n_{p0}}{p_{p0}} \left[ \exp \frac{qV}{k_0 T} - \frac{qV}{k_0 T} - 1 \right] \right]} \quad (420)$$

这样表面空间电荷区的场强分布即为

$$|E| = \pm \frac{2k_0 T}{q L_D} F\left(\frac{qV}{k_0 T}, \frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right) \quad (421)$$

当 $V > 0$ 时取正号，否则取负号

在表面处的电势为表面势 $V = V_S$ ，半导体表面处的电场强度为

$$E_S = \pm \frac{2k_0 T}{q L_D} F\left(\frac{qV_S}{k_0 T}, \frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right) \quad (422)$$

根据高斯定理，表面处的电荷面密度为

$$Q_{sc} = -\varepsilon E_S = \mp \frac{2\varepsilon k_0 T}{q L_D} F\left(\frac{qV_S}{k_0 T}, \frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right) \quad (423)$$

可见当栅极电压为正时，表面势为正，积累负电荷，即表面电荷面密度随着表面势变化，体现出MIS结构的电容特性，下面就研究这种电容特性

考虑单位表面积的表面层中空穴数量的改变量

$$\begin{aligned}\Delta p &= \int_0^\infty (p_p(x) - p_{n0}) dx = \int_{V_S}^0 p_{n0} \left( \exp \frac{-qV}{k_0 T} - 1 \right) \frac{-dV}{|E|} \\ &= - \int_{V_S}^0 p_{p0} \left( \exp \frac{-qV}{k_0 T} - 1 \right) \frac{qL_D}{2k_0 T F} dV\end{aligned}\quad (424)$$

$$\begin{aligned}\Delta n &= \frac{qn_{p0}L_D}{2k_0 T} \int_{V_S}^0 \left( \exp \frac{qV}{k_0 T} - 1 \right) \frac{1}{F\left(\frac{qV}{k_0 T}, \frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right)} dV\end{aligned}\quad (425)$$

因此单位面积含义的(微分)电容即为

$$Q_S = q(-\Delta p + \Delta n) \quad L_D^2 = \frac{2\varepsilon k_0 T}{q^2 p_{p0}} \quad (426)$$

得到微分电容的表达式为

$$C_S = \frac{\partial Q_S}{\partial V_S} = \frac{\varepsilon}{L_D} \left[ \left( (-\exp \frac{-qV}{k_0 T} + 1) + \frac{n_{p0}}{p_{p0}} (\exp \frac{qV_S}{k_0 T} - 1) \right) \frac{1}{F\left(\frac{qV}{k_0 T}, \frac{n_{p0}}{p_{p0}}\right)} \right] \quad (427)$$

## 5. 各种表面层状态下的电容状态

以 $p$ 型区为例

### 1. 多子堆积

加载在金属栅极上的栅电压 $V_G < 0$ , 此时表面势为负值, 这样 $F$ 函数中只有负指数项起主要作用, 这样表面电场分布、表面电荷密度和微分电容分别为

$$\begin{aligned}F &= \exp\left(-\frac{qV_S}{2k_0 T}\right) \\ E_S &= \frac{2k_0 T}{qL_D} \exp\left(-\frac{qV_S}{2k_0 T}\right) \\ Q_S &= \varepsilon E_S\end{aligned}\quad (428)$$

$$C_S = \frac{\varepsilon}{L_D} \exp\left(-\frac{qV_S}{2k_0 T}\right)$$

### 2. 多子耗尽

加载在金属栅极上的电压为正电压, 表面势为正,  $F$ 函数项中正指数起主要作用

$$\begin{aligned}F &= \sqrt{\frac{qV_S}{k_0 T}} \\ E_S &= \frac{2k_0 T}{qL_D} F = \frac{2}{L_D} \sqrt{\frac{k_0 T}{q} V_S}\end{aligned}\quad (429)$$

$$\psi_S = -\varepsilon E$$

$$C_S = \frac{\varepsilon}{L_D} \frac{1}{F} = \sqrt{\frac{qN_A\varepsilon}{2V_S}}$$

如果采用耗尽层近似，回忆一下空间电荷区宽度  $W$

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon V}{q} \frac{N_A + N_D}{N_A N_D}} \quad (430)$$

在这里有

$$V_S = \frac{qN_A W^2}{2\varepsilon} \Rightarrow C_S = \frac{\varepsilon}{W} \quad (431)$$

可以与耗尽层近似是一样的结论

### 3. 平带

金属栅极不加电压时表面势为零， $F$ 函数为零，这样表面电场也为零，表面电荷密度为零，但是存在微分电容！这里微分电容描述表面电势趋于零时的极限性质

$$C_S = \frac{\sqrt{2}\varepsilon}{L_D} \quad (432)$$

### 4. 反型

- 弱反型

弱反型时的相关数值分布与多子耗尽是一致的

- 强反型

当半导体表面进入强反型时，我们将  $V_S = 2V_B$  时 MIS 结构两端上加载的电压称为开启电压  $V_T$ ，该电压一部分降落在绝缘层上，一部分降落在半导体表面空间电荷区上

$$V_T = V_i + V_S \quad (433)$$

$F$  函数为

$$F = \sqrt{\frac{n_{p0}}{p_{p0}}} \exp \frac{qV_S}{2k_0T}$$

$$E_S = \frac{2k_0T}{qL_D} F = \sqrt{\frac{2k_0T}{\varepsilon}} \sqrt{n_{p0} \exp \frac{qV_S}{k_0T}} = \sqrt{\frac{2k_0T}{\varepsilon} n_S} \quad (434)$$

$$Q_S = -\varepsilon E_S$$

$$C_S = \frac{\varepsilon}{L_D} \sqrt{\frac{n_{p0}}{p_{p0}}} \exp \frac{qV_S}{2k_0T} = \frac{\varepsilon}{L_D} \sqrt{\frac{n_S}{p_{p0}}} \quad (435)$$

最大耗尽区宽度为

$$V_S = \frac{qN_A W^2}{2\varepsilon} = 2V_B = \frac{2k_0T}{q} \ln \frac{N_A}{n_i} \Rightarrow d_{max} = \sqrt{\frac{4k_0T\varepsilon}{N_A} \ln \frac{N_A}{n_i}} \quad (435)$$

$$\nabla^{scm} \propto q^2 N_A \propto n_i$$

## 5. 深耗尽状态（瞬态）

前面几种情况都是在稳态下讨论的，相关的容压曲线称为稳态曲线，是在栅极电压缓慢变化的情况下讨论，深耗尽是一种瞬态过程，是非平衡的

深耗尽状态是一种非平衡状态，比如在MIS结构上加一高频正弦正电压。栅极电压的幅度满足强反型条件，但是空间电荷区中电子的产生速率慢于电压的变化速率，反型层建立不及时，但为了维持与金属-绝缘界面的电荷平衡，耗尽层将不得不向半导体内部继续深入推进以产生更多电离受主，此时空间电荷区的电荷全部由电离受主提供，耗尽层宽度可以超过 $d_{scm}$ ，并且随着栅极电压增大增大

这一情况下仍然可以使用耗尽层近似的方法处理

需要说明的是，深耗尽状态并不能维持，经过一定弛豫时间后将回到稳态时的强反型状态，耗尽层宽度将回到最大耗尽层宽度

## H3 MIS结构的电容电压特性

### H4 MIS结构的微分电容

- 前面我们说，外加栅极电压降落在两部分上，一部分是绝缘层，另一部分时半导体的空间电荷区
- 如果不考虑表面态电荷的存在，MIS结构的总电荷面密度满足 $Q_{sc} = -Q_G$
- MIS结构的微分电容定义为 $C = \frac{dQ_G}{dV_G}$

$$\frac{1}{C} = \frac{dV_G}{dQ_G} = \frac{dV_i}{dQ_G} + \frac{dV_s}{dQ_G} = \frac{1}{C_i} + \frac{1}{C_s} \quad (436)$$

$$C_i = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{ri}}{d_i}$$

上式表明MIS结构电容相当于绝缘层电容和空间电荷层电容的串联

MIS结构微分电容的等价表述为

$$\frac{C}{C_i} = \frac{1}{1 + \frac{C_s}{C_i}} \quad (437)$$

### H4 理想MIS结构的低频高频电容电压特性

仍然以 $p$ 型区为例

- 回顾理想MIS结构的条件
  - 金属与半导体的功函数相同，不存在功函数差
  - 绝缘层内没有电荷且绝缘层完全不导电
  - 绝缘层-半导体界面不存在界面态
- MIS结构电容在各种电荷状态下的表征
  - 多子堆积

$$\frac{C}{C_i} = \frac{1}{1 + \frac{C_s L_D}{\epsilon} \exp \frac{qV_s}{2k_0 T}} \quad (438)$$

- 当金属栅极负偏压较大时，指数项远小于1，MIS结构电容几乎呈现为绝缘层电容
- 当负偏压较小时，随着负偏压的数值增大，MIS结构电容逐渐趋向绝缘层电容
- 多子耗尽&弱反型

$$V_G > 0, V_S > V_B$$

$$\frac{C}{C_i} = \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{ri}}{d_i} \sqrt{\frac{2V_S}{qN_A \varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}}} = \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_{ri}}{\varepsilon_{rs} d_i} \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs} V_S}{qN_A}}} \quad (439)$$

当金属栅极电压增大时，表面空间电荷区厚度也将增大，这样空间电荷区电容就将减小，因此比值将减小

- 强反型

$$V_G > V_T, V_S > 2V_B$$

$$\frac{C}{C_i} = \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{ri}}{d_i} \frac{L_D}{\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}} \sqrt{\frac{p_{p0}}{n_{p0}}} \exp \frac{-qV_S}{2k_0 T}} \quad (440)$$

- 在低频信号下，强反型的MIS结构中  $qV_S > 2qV_B \gg k_0 T$ ，这样分母上的第二项几乎没有，结构电容几乎就是绝缘层电容
- 在高频信号下，反型层中电子的产生与复合跟不上频率的变化，空间电荷区电容呈现的是耗尽层电容，在强反型下耗尽区是存在最大宽度的，此时耗尽层电容最小，因此这时MIS结构电容也是最小，并且不再跟随栅极电压变化

$$\frac{C_{min}}{C_i} = \frac{1}{1 + \frac{C_i}{C_S}} = \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_{ri} d_{scm}}{\varepsilon_{rs} d_i}} = \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_{ri}}{\varepsilon_{rs}} \frac{1}{d_i} \sqrt{\frac{4k_0 T \varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}{q^2 N_A} \ln \frac{N_A}{n_i}}} \quad (441)$$

- 平带

金属栅极电压为零时能带不发生弯曲，理论上半导体表面上应该没有表层电荷，不存在  $C_S$ ，应当有  $C = C_i$ ，但实际上栅极电压为零时  $C = C_{FB} < C_i$ ， $C_{FB}$  称为平带电容。我们将  $\frac{C_{FB}}{C_i}$  称为归一化电容，显然该数值小于1

$$C_{FB} = \frac{1}{\frac{d_i}{\varepsilon_0 \varepsilon_{ri}} + \frac{L_D}{\sqrt{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}}} = \frac{C_i}{1 + \frac{\varepsilon_{ri} L_D}{\varepsilon_{rs} \sqrt{2d_i}}} \quad (442)$$

$$L_D = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs} k_0 T}{q^2 p_{p0}}} \quad (443)$$

$$\Rightarrow \frac{C_{FB}}{C_i} = \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_{ri}}{\varepsilon_{rs} d_i} \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{rs} k_0 T}{q^2 N_A}}} \quad (444)$$

这样，只要知道MIS结构参数  $\varepsilon_{rs}, \varepsilon_{ri}, d_i, N_A$  就能得到平带电容的大小

- 深度耗尽(瞬态特性)

高频信号下，瞬态电压  $V > 2V_B$ ，理想MIS结构处于深耗尽状态，此时耗尽层宽度可以随着栅极电压变化，表面电容  $C_S$  不再是固定值，因此MIS结构电容不再呈现为最小值

$$C_S = \frac{\varepsilon_{rs} \varepsilon_0}{W} \quad \frac{C}{C_i} = \frac{1}{1 + \frac{\varepsilon_{ri}}{\varepsilon_{rs}} \frac{W}{d_i}} \quad (445)$$

## H4 实际MIS结构的电容电压特性

### 1. 金属与半导体功函数差异的影响

- 无外加栅极偏压能带图

如果金属与半导体存在功函数差异，当形成MIS系统时，为了使金属与半导体的费米能级保持一致水平，在半导体表面处会形成空间电荷区，表面能带发生弯曲，表面势不再为零

比如说，考虑金属的功函数比半导体功函数小的情况，即金属的费米能级比半导体费米能级高，为了形成统一的费米能级，我们可以认为半导体的能带要向上提，这样在绝缘层-半导体界面处能带将向下弯曲，水平本征费米能级比界面处高，根据表面势的定义可以知道表面势大于零

- 功函数差对CV曲线的影响

存在功函数差异的实际MIS结构与理想MIS结构的CV曲线形状一致，只是位置有一些变化

比如说在上面的例子中，零偏压时表面势大于零，为了使能带处于平带状态，在金属栅极一侧就需要加负电压，这个为了恢复平带状态所需要加的电压称为平带电压 $V_{FB}$

$$V_{FB} = -V_S = \frac{W_m - W_s}{q} \quad (446)$$

实际MIS结构的CV曲线相对于理想MIS结构的CV曲线是在电压轴上向左或向右平移一段距离 $|V_{FB}|$

### 2. 绝缘层电荷的影响

假设绝缘层中存在一薄层电荷，单位面积上的电荷量为 $Q$ ，离金属表面的距离为 $x$ ，带正电

- 无偏压时绝缘层电荷对半导体能带的影响

无偏压时，为了维持电中性，绝缘层薄层正电荷会在金属和半导体表面层中感生出负电荷，因此在半导体表面有带负电的空间电荷区，这样表面处能带就要向下弯曲(类似于形成反型层，这样能带就要下弯，只是类似，方便理解！)，表面势大于零

- 绝缘层电荷对CV曲线的影响

半导体表面感生出负电荷导致表面处能带的向下弯曲，表面势大于零，为了恢复平带，需要在栅极一侧施加负电压，使金属板上的负电荷量增加到等于绝缘层电荷 $Q$ ，这样半导体表面就不会产生感应电荷，施加的电压依然称为平带电压 $V_{FB}$

在平带电压作用下，电荷只出现在绝缘层和金属板中，电场只在金属板和绝缘层薄层电荷之间，根据高斯定理有

$$E = \frac{Q}{\epsilon_{ri}\epsilon_0} \quad (447)$$

场强方向有绝缘薄层指向金属板，这样在金属栅极一侧需要施加的平带电压就为

$$V_{FB} = -\frac{Qx}{\epsilon_0\epsilon_{ri}} = -\frac{xQ}{d_iC_i} \quad (448)$$

上式表明实际CV曲线也是在电压轴上向负方向平移，平移距离为平带电压的绝对数值大小

- 绝缘层电荷位置对CV曲线的影响

如果绝缘薄层贴近金属，这样可以认为平带电压为零

如果绝缘薄层贴近半导体一侧，平带电压的最大值为

$$V_{FBm} = -\frac{Qd_i}{\epsilon_0\epsilon_{ri}} = -\frac{Q}{C_i} \quad (449)$$

表明越靠近半导体表面，对曲线的影响程度越大

- 体分布的绝缘层电荷对平带电压的影响

如果绝缘层电荷不是薄层分布，而是广泛分布于绝缘层，即体分布，区金属-绝缘层界面为原点，体电荷密度为 $\rho(x)$ ，这样平带电压即为

$$V_{FB} = -\frac{1}{C_i} \int_0^{d_i} \frac{x\rho(x)}{d_i} dx \quad (450)$$

当功函数差异和绝缘层电荷同时存在时，需要施加的平带电压就为

$$V_{FB} = \frac{W_m - W_S}{q} - \frac{1}{C_i} \int_0^{d_i} \frac{x\rho(x)}{d_i} dx \quad (451)$$

## H2 金属半导体接触(MS结构)

本章讲述金属与半导体接触的能带特征和载流子在MS结构中的输运特性

金属与半导体接触主要分为两类：一类是具有和 $PN$ 结相似 $IV$ 特性的肖特基接触，具有整流特性；另一类是不具备整流特性的欧姆接触

## H3 金属半导体接触和肖特基势垒

M/S接触为金属与半导体接触形成的基本结构，一般是在干净的半导体表面淀积金属形成，通常形成肖特基势垒(Shottky Barrier)，其中肖特基势垒是M/S肖特基接触的主要特征。在特定的条件下，M/S接触可以形成欧姆型接触

影响肖特基势垒的因素有：金属和半导体的功函数、金属感应的镜像电荷产生的镜像势、界面的陷阱态能级和其密度等。M/S接触的主要应用是：

- 在金属和半导体之间实现低电阻的欧姆接触，可为半导体器件之间的链接提供低阻互连
- 作为整流结器件(肖特基二极管)使用

## H4 理想M/S接触的平衡能带图

考虑金属与半导体接触形成MS结构，设金属和半导体的费米能级分别为 $E_{FM}$ ,  $E_{FS}$ ，金属和半导体的功函数分别为 $W_M$ ,  $W_S$ ，半导体的亲和势为 $\chi$

### 1. 热平衡时形成共同的费米能级

热平衡时，电子从金属侧向半导体侧和电子从半导体侧向金属侧的流量应当相等

$$\begin{aligned} F_{M \rightarrow S} &= f_{D1}g_1(1 - f_{D2})g_2 \\ F_{S \rightarrow M} &= f_{D2}g_2(1 - f_{D1})g_1 \end{aligned} \quad (452)$$

$f_{D1}, f_{D2}$ 表示金属和电子的费米分布函数， $g_1, g_2$ 表示金属和电子的态密度

上两式的含义分别可以理解为，占据金属侧能级的电子流向半导体并填充半导体上的空能级；占据半导体侧能级的电子流向金属去占据金属的空能级。平衡时两者相等

$$F_{M \rightarrow S} = F_{S \rightarrow M} \Rightarrow f_{D1} = f_{D2} \quad (453)$$

根据费米分布函数的形式

$$f_D = \frac{1}{1 + \exp \frac{E - E_F}{k_B T}} \quad (454)$$

可知平衡时金属与半导体具有共同的费米能级

### 2. 理想热平衡时M/S接触的能带图和肖特基势垒

一般情况下金属和半导体的功函数是不等的，存在功函数差

当金属与半导体形成接触时，功函数不同(即费米能级不相等)，会发生载流子浓度和电势的再分布，**形成肖特基势垒**

通常，电子会从功函数小的材料流向功函数大的材料，即从费米能级高的材料流向费米能级低的材料，从能量最低原理也能很好地理解这一点，这种流动将持续直到形成共同的费米能级

半导体内载流子的再分布会形成载流子的耗尽或积累，并在耗尽区或积累区发生能带弯曲(指半导体一侧！)，而金属体内的载流子浓度和能级基本没有变化

理想的M/S结构在接触界面不存在陷阱态，势垒高度由金属功函数和半导体功函数和亲和势决定

下面根据功函数的情况分析讨论

- **N型半导体**

我们说过，对于N型半导体，我们只看多子电子，同样对于P型半导体我们只看多子空穴

- 金属功函数大于半导体的功函数， $W_M > W_S$

这种情况下，电子将从半导体一侧流向金属。半导体的费米能级高于金属的费米能级，因此为达到统一的费米能级时，半导体的能带将向上弯曲

能带向上弯曲相当于耗尽，表面处电子远小于半导体内电子( $n_S \ll n_0$ )，相当于高阻区，也称阻挡层

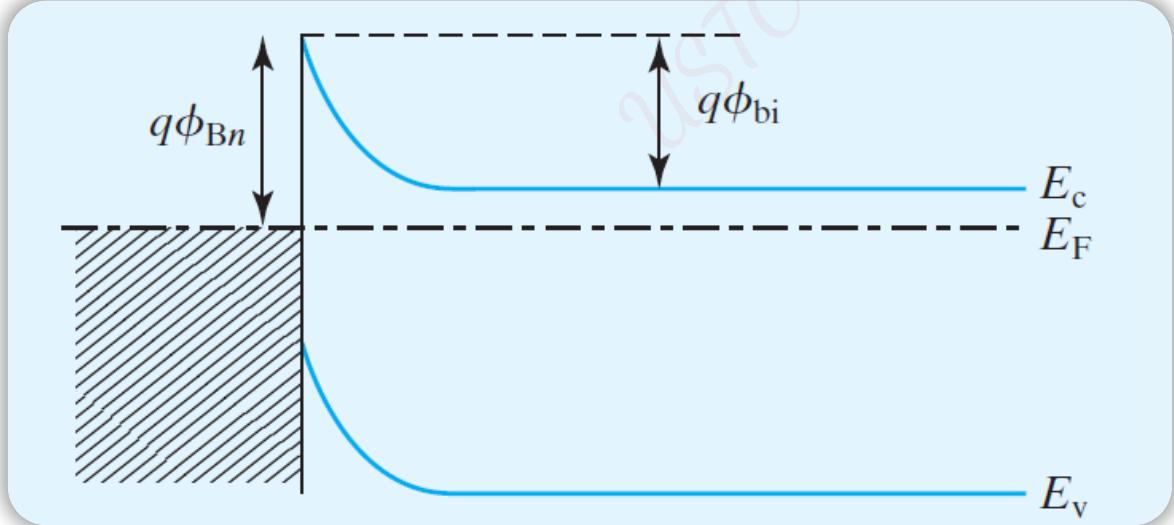
从半导体一侧看，导带向上弯曲实际上形成了势垒，阻挡电子进一步流向金属，接触电势差为

$$qV_D = E_{FS} - E_{FM} = W_M - W_S \quad (455)$$

从金属一侧看，我们将金属侧电子到达半导体侧需要跨过的势垒称为**肖特基势垒**，这一势垒高度就是金属费米能级与半导体导带能级的差

$$q\varphi_m = E_{FM} - E_c = W_M - \chi \quad (456)$$

因为金属功函数和半导体亲和势都是确定的，因此肖特基势垒也是确定的



- 金属功函数小于半导体功函数， $W_M < W_S$

这种情况下能带向下弯曲，对电子来说更容易流向金属侧，表面处电子浓度远远高于半导体内部电子浓度( $n_S \gg n_0$ )，相当于高电导区，也称反阻挡层

- **P型半导体**

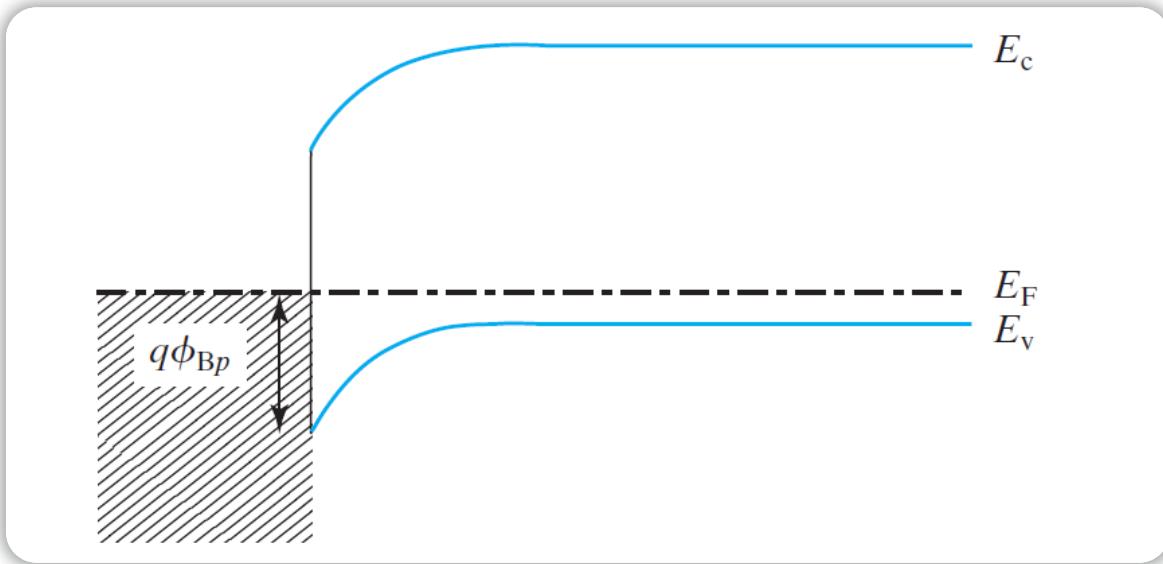
- 金属功函数小于半导体功函数， $W_M < W_S$

从半导体一侧看，接触电势差依然是两种材料的功函数之间的差异

$$qV_D = W_M - W_S \quad (457)$$

从金属侧看，空穴流向需要跨过的势垒高度是半导体价带和金属费米能级之间的差异，这就是肖特基势垒

$$q\varphi_m = E_g - W_M + \chi \quad (458)$$



- 金属功函数大于半导体功函数， $W_M > W_S$

这种情况下能带向上弯曲，对于空穴来说更容易导带金属侧，这意味着界面处的空穴浓度远远高于半导体体内的空穴浓度，相当于高电导区

#### H4 费米钉扎效应

基于肖特基势垒的表达式，势垒高度理论上应当随金属功函数线性变化，但在实际生活中却不符合理论，这个现象产生的原因就是费米钉扎效应

在半导体中，费米能级在能带中很容易移动(因为是温度、掺杂浓度等的函数)，但是，如果掺杂等因素不能使费米能级的位置发生变化，这意味着即便掺杂大量的施主或受主，这些杂质也不能提供载流子，从而不能改变费米能级的位置，这种现象就是费米钉扎效应

产生费米钉扎效应的一个重要原因就是存在界面陷阱电荷，也称界面态。此时，当电子在金属和半导体之间运动时，这些界面态就会吸收一部分电子，从而使费米能级偏离理想情况

#### H4 M/S接触的电势分布

为简单起见，做如下假设(耗尽近似)

- 忽略空穴浓度
- 在耗尽区内不存在自由移动载流子(耗尽层近似)，即 $n = 0$
- 在半导体耗尽区外完全电离，即 $x > x_d, n = N_D$
- 空间电荷区内的总电荷为 $Q = qN_Dx_dA$

空间电荷区的电荷密度分布为 $\rho(x) = qN_D$

根据泊松方程

$$\nabla^2 V = -\nabla \cdot \vec{E} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon} \quad (459)$$

在边界 $x = x_d$ 处不存在电场分布，积分得到电场分布为

$$\vec{E}(x) = \frac{qN_D}{\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}(x - x_d) \quad (460)$$

再次积分得到电势分布，我们认为在 $x = x_d$ 处电势为零

$$V(x) = -\frac{qN_D}{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}}(x - x_d)^2 \quad (461)$$

金属和半导体在半导体表面形成的表面势为

$$qV_D = W_M - W_S = q \frac{qN_D}{2\varepsilon_0 \varepsilon_{rs}} x_d^2 \quad (462)$$

由此得到耗尽区宽度为

$$x_d = \sqrt{\frac{2\varepsilon V_D}{qN_D}} = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{qN_D} \frac{W_M - W_S}{q}} \quad (463)$$

耗尽区积累的电荷量为

$$Q = qAN_D x_d = A\sqrt{2qN_D \varepsilon V_D} \quad (464)$$

#### H4 实际肖特基势垒

世界测量的M/S肖特基势垒与理论结果是存在偏差的，重要的影响因素包括

- 镜像力
- 界面态

##### 1. M/S结构中的镜像力和镜像力引起的势垒降低

如果金属和半导体的功函数不同，在形成M/S接触并达到热平衡时就会发生载流子的再分布，并且在半导体表面区域产生净电荷。净电荷会在金属侧感应形成镜像电荷，形成镜像力，这种镜像力的作用势会引起肖特基势垒高度的降低

镜像力的大小为

$$F_{im} = -\frac{q^2}{4\pi\varepsilon_0 \varepsilon_{ri}(2x)^2} = -\frac{q^2}{16\pi\varepsilon_0 \varepsilon_{ri}x^2} \quad (465)$$

由静电力存在引起的势能增量为

$$E_{im} = -\frac{q^2}{16\pi\varepsilon_0 \varepsilon_{ri}x} \quad (466)$$

因此从能带角度看电子的能量降落(导带能级下降)，这样肖特基势垒的高度就降落下来

##### 2. M/S接触中表面态对势垒的调制作用

表面态的存在使得接触面处产生界面电荷陷阱作用，这将影响表面势和势垒高度，并让费米能级偏离理想情况。界面陷阱态可以分为施主和受主型两类：

- 施主型：有电子填充时中性，无电子填充时带正电

- 受主型：有电子填充时带负电，五电子填充时中性

界面态的存在会在禁带中引入新的能级  $E_t$

- 如果  $E_t > E_F$ ，即杂质能级高于费米能级，这时界面态就起施主作用，可以提供电子而带正电，这样在形成热平衡稳态过程中界面态也会贡献电子并提供正电荷，这样，当系统达到平衡时耗尽区宽度和势垒高度都会降低

■ 耗尽区宽度降低的理解：

因为界面态可以提供电子并留下正电荷，因此在与金属侧达到热平衡的过程中，不需要半导体中杂质电离提供太多的电子就能实现电子流量平衡，因此耗尽区宽度降低

■ 势垒高度降低的理解：

个人认为可以这么理解：杂质能级上的电子向导带发射，这样导带电子浓度增大，从电子浓度公式看就要求导带下降，而亲和势不能变，因此真空费米能级下降，功函数也不能，因此费米能级下降，从而使得费米能级差减小，一次你势垒高度降低

更简单的理解就是基于前面推导的公式，因为耗尽区宽度降低，因此势垒高度降低

- 如果界面态足够大，这样表面电子和耗尽区内固定正电荷都由界面态提供，在表面处的费米能级将被钉扎在  $E_t$  附近(因为费米能级在界面陷阱能级附近很小的变化将使得电子和正电荷浓度产生很大变化)
- 实际生活中，势垒高度和内建电动势不仅与材料有关，并且与工艺有关，实验表明表面态在  $E_t = E_v + \frac{1}{3}E_g$  处有一个显著的峰，我们将高于价带  $\frac{1}{3}E_g$  的能级位置称为巴丁极限  
在界面态很高的情况下，费米能级被完全钉扎在  $E_t$  附近，共同的费米能级也在  $E_t$  附近，这时  $n, p$  型半导体材料对应的肖特基势垒高度分别为

$$q\varphi_{mn} = \frac{2}{3}E_g \quad q\varphi_{mp} = \frac{1}{3}E_g \quad (467)$$

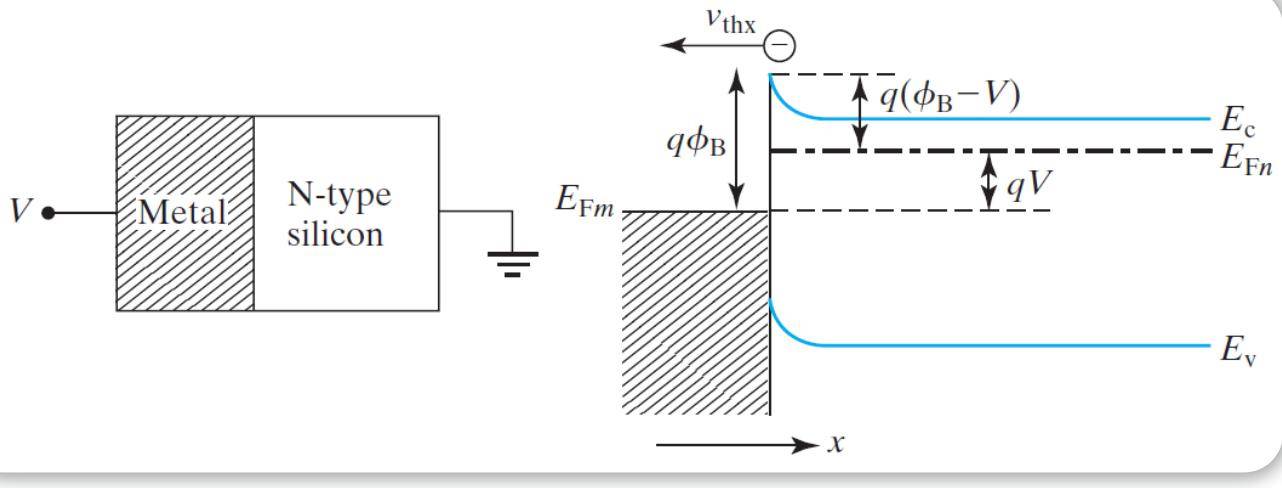
由于费米钉扎效应，肖特基势垒的高度与金属的功函数是无关的

### H3 理想肖特基势垒的整流特性

#### H4 热电子发射理论

热电子发射理论的核心思想是：假设电子具有一个向金属方向的平均运动速度，其只受温度影响而不受外界电压影响<sup>2</sup>

外加电压后，半导体一侧的势垒高度发生变化，表面电子浓度改变，因此半导体侧的电流密度会发生变化，而金属侧的势垒与外界电压无关，因此其电流密度与无外加电压时一致，基于此就能得到总的电流密度



- 无外加电压的平衡态时

$$n_s = n_0 \exp \frac{-qV_D}{k_0 T} \quad (468)$$

- 存在外加正电压时

$$\begin{aligned} n_s &= n_0 \exp \frac{-q(V_D - V_R)}{k_0 T} \\ &= N_c \exp \frac{-(E_c - E_F)}{k_0 T} \exp \frac{-q(V_D - V_R)}{k_0 T} \\ &= N_c \exp \left( -\frac{1}{k_0 T} (E_c - E_F + qV_D - qV_R) \right) \\ &= N_c \exp \left( -\frac{1}{k_0 T} [q\varphi_m - qV_R] \right) \end{aligned} \quad (469)$$

根据热力学与统计物理学知识，粒子的平均速度为

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad (470)$$

从小体元的角度看，能流向金属侧的电子只有全部电子数的一半，并且粒子向金属侧运动的平均速度为总平均速度的一半，据此可以得到从半导体流向金属的电子电流密度为

$$J_{S \rightarrow M} = \frac{1}{4} q n_s \bar{v} = \sqrt{\frac{kT}{2\pi m}} q N_c \exp \left( -\frac{q\varphi_m}{k_0 T} \right) \exp \frac{qV_R}{k_0 T} = J_0 \exp \frac{qV_R}{k_0 T} \quad (471)$$

可以看到形式上与pn结的电流电压特性曲线是一致的

将导带底有效态密度表达式带入

$$N_c = \frac{2}{\hbar^3} (2\pi m_{dn}^* k_0 T)^{\frac{3}{2}} \quad (472)$$

得到 $J_0$ 的表达式为

$$J_0 = \frac{4\pi q m_{dn}^* k^2}{h^3} T^2 \exp \left( -\frac{q\varphi_m}{k_0 T} \right) = A T^2 \exp \left( -\frac{q\varphi_m}{k_0 T} \right) \quad (473)$$

系数A称为理查森(Eichardson)常数

在没有外加电压时处于平衡态， $J_{S \rightarrow M} = J_{M \rightarrow S} \Big|_{V_R=0}$

$$J_{M \rightarrow S} = J_0 \quad (474)$$

这样，**总的电子电流密度**为

$$J = J_0 \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \quad (475)$$

#### H4 肖特基二极管的偏置

- 肖特基二极管的电容特性

外加偏置为  $V_R$  时，耗尽区上积累的电荷量为

$$Q = A \sqrt{2qN_D \varepsilon (V_D - V_R)} \quad (476)$$

根据电容定义有

$$C = \frac{dQ}{dV_R} = A \sqrt{\frac{qN_D \varepsilon}{2(V_D - V_R)}} = \frac{\varepsilon}{x_d} \quad (477)$$

这与  $pn$  结结构也是一致的

- 肖特基二极管的电流电压特性

这一部分我们在热电子发射理论部分顺手写了，直接搬运过来

$$J = J_0 \left( \exp \frac{qV_R}{k_0 T} - 1 \right) \quad (478)$$

$$J_0 = \frac{4\pi q m_{dn}^* k^2}{h^3} T^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_m}{k_0 T}\right) = AT^2 \exp\left(-\frac{q\varphi_m}{k_0 T}\right) \quad (479)$$

- 肖特基二极管与  $pn$  结二极管的电流电压特性比较

- 相同

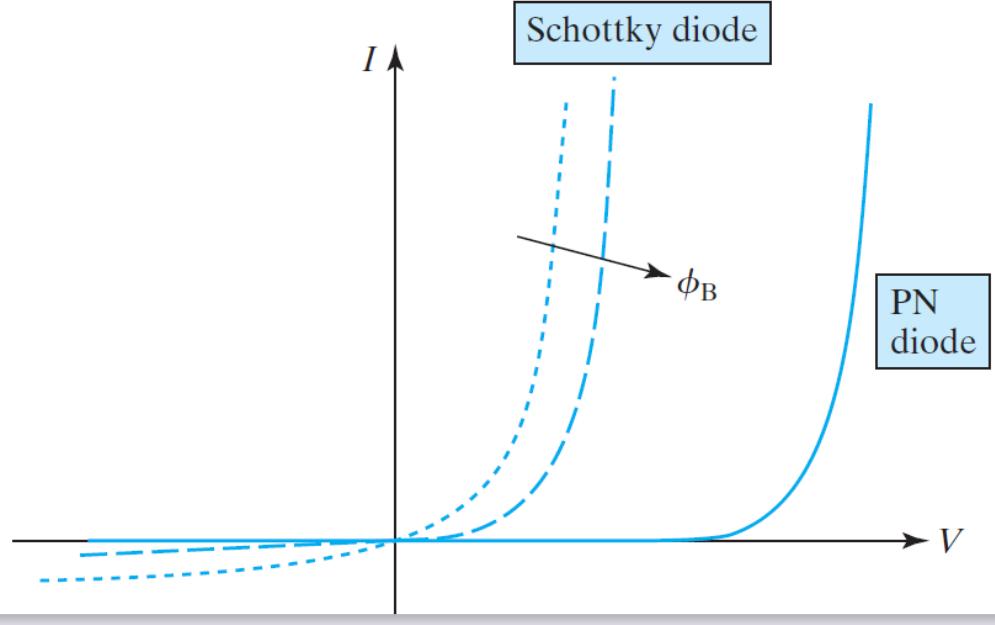
施加正向偏置电压时，电流与外加电压呈指数关系；施加反向偏置电压时，电流密度  $J = J_0 \rightarrow I = I_0$  为常数。在这一点上，肖特基二极管与  $pn$  结是一致的

- 不同

肖特基二极管的电流输运由热电子发射或者多数载流子扩散而来，产生复合电流所占的比例很小； $pn$  结二极管中电流输运与少子扩散和复合电流有关

肖特基二极管中的反向电流密度与肖特基势垒和温度有关，而  $pn$  结的反向电流只与少子浓度和少子寿命有关

肖特基二极管的反向电流比  $pn$  结的反向电流大<sup>4</sup>



### H3 欧姆接触

金属半导体接触中，电子运动除了热发射之外，另一个重要的方式就是隧道效应。利用隧道效应可以制作另一类金属半导体接触，即**欧姆接触**

- 热电子发射→肖特基接触
- 隧穿→欧姆接触

### H4 欧姆接触

在半导体器件中，我们需要用金属将半导体器件连接在一起，这时我们要求半导体于金属的接触电阻要足够低。**这种低电阻的接触称为欧姆接触**

如果多数载流子通过M/S接触时，能够不受肖特基势垒的阻挡，从一种材料输运到另一种材料，那么这种接触就称欧姆接触

既然载流子通过时**不受肖特基势垒阻挡**，因此电流通过欧姆接触时，正反偏置的电流输运特征时没有差别的

这样，我们也可以说明，M/S结构的I-V曲线满足欧姆定律的形式的是欧姆接触

我们可以通过两种途径得到欧姆接触

- 半导体重掺杂→提高隧穿几率
- 选择合适功函数的半导体和金属→使得电流流经M/S接触时不存在势垒

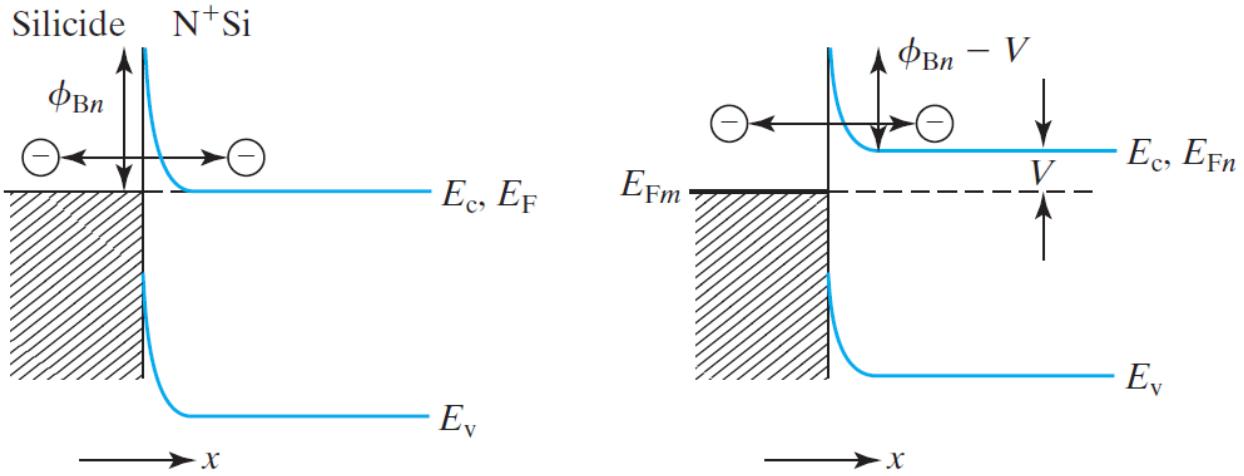
**通常我们采用重掺杂的方式形成隧穿型欧姆接触**

下面我们寻求接触电阻的表达式。为了得到电阻的表达式，我们需要得到外加偏压下的电流，而隧穿电流与隧穿载流子数有关，等价于寻求隧穿概率，基于量子力学，隧穿概率与势垒高度和厚度有关，我们一般认为厚度是耗尽区宽度的一半

$$= \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon V_D}}$$

$$T = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{q\varphi_m}{qN_D}} \quad (480)$$

因为是重掺杂，费米能级与导带底几乎重合，这样接触势垒高度与肖特基势垒几乎相同，这样 $V_D \approx \varphi_m$ ，下图给出外加电压后的变化



根据量子力学的结论，隧穿概率可以表示为

$$P \approx \exp \left( -2T \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{h^2} (V_H - E)} \right) \quad (481)$$

$$\Rightarrow P \approx \exp \left( - \sqrt{\frac{2\varepsilon\varphi_m}{qN_D} \frac{8\pi^2 m}{h^2} (\varphi_m)} \right) = \exp \left( \frac{-H\varphi_m}{\sqrt{N_D}} \right) \quad (482)$$

这样隧穿载流子浓度即为 $N_D P$ ，同样地，从小体元的角度看，能流向金属侧的电子只有全部电子数的一半，并且粒子向金属侧运动的平均速度为总平均速度的一半，得到电流密度为

$$J_{S \rightarrow M} = \frac{1}{4} q N_D P \bar{v} = -J_{M \rightarrow S} \quad (483)$$

施加外加电压，将 $\varphi_m \rightarrow \varphi_m - V_R$ ，由此可以得到接触电阻

$$J = \frac{dJ_{S \rightarrow M}}{dV} \Big|_{V=0} \cdot V$$

$$R_c = \frac{V}{J} = \frac{4 \exp(\frac{H\varphi_m}{\sqrt{N_D}})}{q\bar{v}H\sqrt{N_D}} \propto \exp(\frac{H\varphi_m}{\sqrt{N_D}}) \quad (484)$$

$R_c$ 称特征接触电阻( $\Omega \cdot cm^2$ )，指的是单位面积的接触电阻

理想欧姆接触两端的电压为 0(电阻为 0)，意味着费米能级不会偏离其平衡态位置，因此，理想欧姆接触的 $n = p = 0$

---

## H2 半导体的光学性质

### H3 半导体的光学常数

- 半导体的光学常数主要指

- 折射率 $n$ 与消光系数 $k$
- 吸收系数 $\alpha$
- 反射系数 $R$
- 透射系数 $T$

- 折射率与消光系数

介质中电磁波的传播速度与真空光速之间的关系为

$$v = \frac{c}{N} \quad v, N \in \mathbb{C} \quad (485)$$

速度 $v$ 与介质折射率 $N$ 均为复数

$$N = n - ik \quad n, k \in \mathbb{R} \quad (486)$$

$n$ 是我们常说的折射率， $k$ 是一个表征光衰减量的参数，称为消光系数

折射率 $n$ 与消光系数 $k$ 之间满足如下关系：

$$\begin{cases} n^2 - k^2 = \mu_r \epsilon_r \\ 2nk = \frac{\mu_r \sigma}{\omega \epsilon_0} \end{cases} \quad (487)$$

$\mu_r, \epsilon_r, \sigma, \omega$ 分别为相对磁化率、相对介电常数、电导率和电磁波频率

$$n = \sqrt{\frac{1}{2} \mu_r \epsilon_r \left[ \sqrt{1 + \frac{\sigma^2}{\omega^2 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2}} + 1 \right]} \quad (488)$$

$$k = \sqrt{\frac{1}{2} \mu_r \epsilon_r \left[ \sqrt{1 + \frac{\sigma^2}{\omega^2 \epsilon_r^2 \epsilon_0^2}} - 1 \right]}$$

- 吸收系数 $\alpha$

基于光学理论，光强的空间分布满足

$$I = I_0 \exp(-\alpha x) \quad \alpha = \frac{2\omega k}{C} \quad (489)$$

参数 $\alpha$ 称为介质对光的吸收系数，表征光透射入介质的平均深度，是光强衰减为 $\frac{1}{e}$ 时的距离

- 绝缘体电导率为零，将消光系数表达式带入光强空间分布可以看到吸收系数为零，这意味着绝缘体对光是透明的 5

- 对于半导体，吸收系数几乎与电导率成正比

- 同一物体对不同波长光吸收系数

- 反射系数  $R$

$$R = \frac{\text{反射光强度}}{\text{入射光强度}} \quad (490)$$

反射系数的大小与入射角有关

垂直入射时反射系数的表达式为

$$R = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2} \quad (491)$$

- 对于绝缘体，电导率为零，因此消光系数为零
- 对于半导体，电导率也较小，可以认为消光系数为零

- 透射系数  $T$ (略)

$$T = \frac{\text{透射光强度}}{\text{入射光强度}} \quad (492)$$

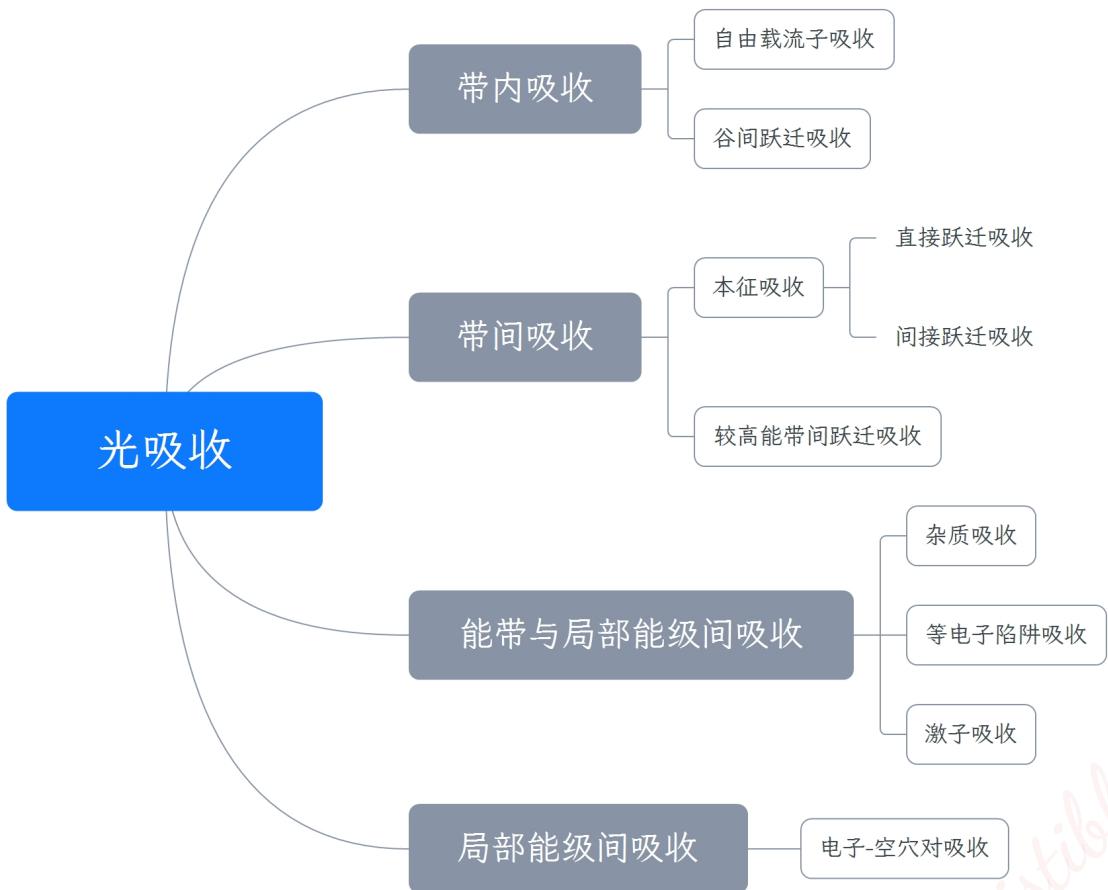
### H3 半导体中的光吸收

光在半导体材料中传播会产生衰减，称为光吸收

产生光吸收的机理是：入射光子与半导体材料中的载流子相互作用

下面的有些内容我们在半导体导电性一章中讲过，出于结构完整性考量，这里我们再写一遍

在半导体中，根据能带结构特征对光吸收做如下分类



创作于 Effie (试用版)

## H4 本征吸收

电子在价带与导带之间的跃迁所形成的吸收过程称为本征吸收，电子从价带跃迁到导带的过程将产生电子-空穴对。本征吸收的条件是，入射光子能量不小于禁带宽度

$$h\nu > E_g \quad (493)$$

### 1. 选择定则

当一定频率的光照射半导体材料发生光吸收时，必须遵从能量守恒和动量守恒，也称选择定则

需要注意的是，选择定则所描述的守恒律要求所针对的系统是只由光子、跃迁电子组成

- 我们把遵从选择定则的跃迁称为直接跃迁
- 我们把不遵从选择定则的跃迁称为间接跃迁，需要声子参与

### 2. 直接跃迁

跃迁过程中，电子只与电磁波相互作用，不与晶格发生相互作用

直接跃迁的能量、动量关系为

$$\begin{aligned} E' - E &= \hbar\omega \\ \hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k} &= \hbar\vec{k}_l \approx \vec{0} \end{aligned} \quad (494)$$

### 3. 间接跃迁

电子与电磁波作用吸收光子，同时与晶格交换一定的振动能量(发射或吸收一个声子)

间接跃迁的能量、动量关系为

$$\begin{aligned} E' - E \pm E_q &= \hbar\omega \\ \hbar\vec{k}' - \hbar\vec{k} \pm \hbar\vec{q} &= \hbar\vec{k}_l \approx \vec{0} \end{aligned} \quad (495)$$

4. 实际发生间接跃迁的概率远小于直接跃迁，并且间接跃迁的光吸收系数要比直接跃迁小得多

我们说过砷化镓是直接带隙半导体，砷化镓几乎只发生直接跃迁，吸收系数随光子能量增大而陡增；硅、锗是间接带隙半导体，在满足本征吸收能量条件时，随着光子能量增大，先发生间接吸收，此后发生直接吸收，吸收系数随光子能量上升后趋于平缓，进入直接吸收后陡增

#### H4 激子吸收

由光激发产生的电子，一部分发生带间跃迁成为自由电子，一部分无法到达导带而与留在价带中的空穴通过库仑力绑定在一起，形成一种处于激发状态的新系统，新系统呈电中性，但系统中的电子和空穴都不能单独移动，这种状态的电子-空穴对称为 **激子**，相应的光吸收称为**激子吸收**

激子中电子与空穴的关系类似于氢原子中电子与质子的关系，因此激子具有和氢原子相同的量子化能级，激子的束缚能级为

$$E_n = -\frac{q^4}{8\varepsilon^2 h^2 n^2} m_{eff} \quad n = 1, 2, \dots \quad m_{eff} = \frac{m_n^* m_p^*}{m_n^* + m_p^*} \quad (496)$$

无穷远处对应导带底能级， $n = 1$  对应基态能级

根据激子中电子和空穴之间平均距离的大小，可以将激子分为两种：

- 弗兰克尔(Frenkel)激子

电子空穴对的存在范围与晶格常数相近，激子与所属晶格结合强烈，激子很难在晶体中运动

- 汪尼尔(Wannier)激子

电子空穴对的存在范围大幅度高于晶格常数，激子和所属晶格间束缚弱，激子容易在晶体中运动

激子在运动过程中有两种途径消失：

- 通过热激发或其它能量激发使激子分离为自由载流子
- 激子中的电子、空穴复合消失，同时释放能量

应当注意的是，虽然激子有可能在晶体中运动，但因为呈现电中性，因此不形成电流

#### H4 自由载流子吸收

如果入射光能量低于禁带宽度并且也不足以形成激子时，仍然有光吸收存在，并且吸收强度随入射光波长增大而增大

这种吸收发生在同一能带，是同能带中电子受电磁波加速运动中发生散射引起的，它是自由载流子在同一能带中的跃迁，称为自由载流子吸收

自由载流子吸收满足动量和能量守恒，自由载流子的吸收类似于间接跃迁吸收，过程需要借助声子发生。并且由于光子频率低于阈值，因而自由载流子吸收是红外吸收

#### H4 杂质吸收

杂质能级上的电子或空穴吸收光子跃迁到导带或价带，称杂质吸收

由于杂质能级的束缚态没有一定的准动量，因此越前过程不受动量守恒的约束，这样，杂质能级上的电子或空穴就可以跃迁到任意的导带或价带能级上，吸收谱为连续谱。杂质吸收需要满足能量守恒，杂质能级越深，吸收峰越接近本征吸收限

大多是半导体材料的施主和受主杂质能级都靠近导带或价带，因此电离能很小，相应的杂质吸收通常在远红外区，不易观测

### H3 半导体的光电导

#### H4 光照附加光电导

由光照引起的半导体电导率增加的现象称为光电导，通常光电导分如下两种：

- 本征光电导：由带间跃迁产生电子空穴对
- 杂质光电导：由杂质能级向导带激发电子形成自由电子，或由价带向杂质能级激发电子而在价带中产生自由空穴

当一束光照射在半导体上，会发生光注入，产生过剩载流子，此时的非平衡载流子浓度为

$$\begin{aligned} n &= n_0 + \Delta n \\ p &= p_0 + \Delta p \end{aligned} \tag{497}$$

根据前面章节的知识，知道电导率为

$$\sigma = pq\mu_p + nq\mu_n = \sigma_0 + \Delta\sigma \tag{498}$$

$\Delta\sigma$ 称为附加光电导，由于光注入产生的是成对的电子空穴对，因此 $\Delta n = \Delta p$

$$\Delta\sigma = q\Delta n(\mu_p + \mu_n) \tag{499}$$

实际半导体材料中存在大量缺陷，光注入的过剩少数载流子基本上全被陷阱俘获，因此只有光注入的过剩多数载流子才对光电导有贡献

- $p$ 型半导体， $\Delta\sigma = \Delta pq\mu_p$
- $n$ 型半导体， $\Delta\sigma = \Delta nq\mu_n$

我们将光电导与平衡电导 $\sigma_0$ 的比值称为相对光电导

除了本征光电导外，光照也能使得束缚在杂质能级上的电子或空穴受激电离产生杂质光电导

杂质光电导比本征光电导小得多，但是一种研究杂质能级结构的重要方式

## H4 光电导的弛豫过程

当光照射到半导体时，电子空穴对的产生率为

$$Q = \beta\alpha I \quad (500)$$

$\alpha$ 为吸收系数， $\beta$ 为吸收一个光子产生的电子空穴对数， $I$ 为光强

光电导的弛豫过程分为两个阶段：一个是存在光照时的上升过程，一个是停止光照后的下降过程

### 1. 上升过程

#### 1. 小注入

非平衡载流子的净产生率为

$$\frac{d\Delta n}{dt} = Q - R = \beta\alpha I - \frac{\Delta n}{\tau} \quad (501)$$

初始条件为 $\Delta n = 0$ ，解为

$$\Delta n(t) = \beta\alpha I \tau \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right) \quad (502)$$

稳定时 $\Delta n(\infty) = Q\tau = \beta\alpha I \tau$

这时的非平衡载流子浓度为稳定值，附加光电导也稳定下来，陈定态光电导率 $\Delta\sigma_s$ ，定态广生载流子浓度为

$$\begin{aligned} \Delta n_s &= \beta\alpha I \tau_n \\ \Delta p_s &= \beta\alpha I \tau_p \end{aligned} \quad (503)$$

定态附加光电导为，与光强成正比，称线性光电导

$$\Delta\sigma_s = q\beta\alpha I (\mu_n \tau_n + \mu_p \tau_p) \quad (504)$$

这样，非平衡载流子产生的附加光电导就为

$$\Delta\sigma = \Delta\sigma_s \left(1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right) \quad (505)$$

#### 2. 大注入

大注入条件是 $\Delta n \gg n_0, p_0$ ，根据前面章节内容，此时载流子的寿命不能再视为定值

$$\tau = \frac{\Delta p}{rnp - rn_i^2} = \frac{1}{r[n_0 + p_0 + \Delta p]} \quad (506)$$

大注入时

$$\tau \approx \frac{1}{r\Delta p} = \frac{1}{r\Delta n} \quad (507)$$

复合率为

$$R = \frac{\Delta n}{\tau} = r(\Delta n)^2 \quad (508)$$

净产生率满足方程

$$\frac{d\Delta n}{dt} = Q - R = Q - r(\Delta n)^2 \quad (509)$$

初始条件依然为 $\Delta n = 0$ , 用Matlab解微分方程得到

$$\Delta n(t) = \sqrt{\frac{Q}{r}} \tanh \left[ \sqrt{Qr} \times t \right] \quad (510)$$

稳定时有

$$\Delta n_s = \Delta n(\infty) = \sqrt{\frac{Q}{r}} = \sqrt{\frac{\beta\alpha I}{r}} \quad (511)$$

定态附加光电导为

$$\Delta\sigma_s = \Delta n_s q\mu_n \quad (512)$$

附加光电导为

$$\Delta\sigma = \Delta\sigma_s \tanh \left[ \sqrt{\beta\alpha Ir} \times t \right] \quad (513)$$

$\Delta\sigma_s \propto \sqrt{I}$ , 称大注入时光电导为抛物型光电导

## 2. 下降过程

### 1. 小注入

净产生率为

$$\frac{d\Delta n}{dt} = Q - R = -\frac{\Delta n}{\tau} \quad (514)$$

初始条件为 $\Delta n = \Delta n_s$ , 方程解为

$$\Delta n(t) = \Delta n_s \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (515)$$

附加光电导为

$$\Delta\sigma = \Delta\sigma_s \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (516)$$

$\Delta\sigma_s \propto I$ , 称小注入下降过程的光电导为线性光电导

### 2. 大注入

净产生率为

$$\frac{d\Delta n}{dt} = Q - R = -r(\Delta n)^2 \quad (517)$$

初始条件为 $\Delta n = \Delta n_s = \sqrt{\frac{Q}{r}}$ , 方程解为

$$\Delta n(t) = \Delta n_s \frac{1}{1 + \sqrt{Qr} \times t} \quad (518)$$

附加光电导为

$$\Delta\sigma = \Delta\sigma_s \frac{1}{1 + \sqrt{Qr} \times t} \quad (519)$$

$\Delta\sigma_s \propto \sqrt{I}$ , 称大注入下降过程光电导为抛物型光电导

## 3. 弛豫时间

### 1. 小注入

小注入时非平衡载流子的寿命是定值，通常把非平衡载流子的寿命称为弛豫时间

## 2. 大注入

大注入时非平衡载流子寿命不再是定值，我们将  $T = \frac{1}{\sqrt{Q_r}} = \frac{1}{\sqrt{\beta\alpha It}}$  定义为弛豫时间

## 4. 光电导的灵敏度

光电导的灵敏度定义为：单位光照度所引起的光电导  $\Delta\sigma$

小注入情况下是线性光电导，光电导与非平衡载流子寿命成正比，也就与弛豫时间成正比，这就存在一个矛盾：  
**不可能同时要求灵敏度高且弛豫时间短(反应快)**

实际半导体中陷阱能级的存在将大幅影响光电导，在有光时，陷阱对光生载流子的俘获作用将拖慢复合过程，增大弛豫时间；无光时被陷阱俘获的载流子逐步释放并发生复合，这一过程也将增大光电导的衰减时间

## H3 光生伏特效应

用适当波长的光照射无外加偏压的报道提，由于光激发和内建电场的作用使得半导体两端存在电动势，这种现象称为光生伏特效应

- $pN$ 结的光生伏特效应
- 丹倍效应(体内光生伏特)
- 光磁电效应

## H4 $pN$ 结的光生伏特效应

### 1. 无光照

根据前面章节我们知道，各区内的多子发生扩散而留下不可移动的固定电荷，这将产生内建电场，带来内建电动势。在内建电场作用下少数载流子发生漂移，平衡时漂移与扩散运动达到稳定，形成具有一定宽度的空间电荷区，结具有统一的费米能级

### 2. 有光照

当照射光的能量大于禁带宽度而满足跃迁条件时，本征吸收将产生电子空穴对

在小注入情况下，多子浓度视为不变，少子将在内建电场作用下漂移。 $p$ 区的电子穿过势垒区进入 $n$ 区使得电势降落， $n$ 区空穴漂移到 $p$ 区使得电势升高，因此结两端产生光生电动势

这种情况下 $p, n$ 区是没有统一的费米能级的，半导体两端产生  $p \rightarrow n$  向的电动势，这一电动势相当于外加正偏压，也是两区费米能级的落差

$$\Delta E_F = qV \quad (520)$$

根据前面的知识，外加正偏压相当于降低势垒高度，这样将有更多载流子穿越势垒区而形成正向电流  $I_F$ ，但此时是开路的，因此结内没有净电流，这要求结内存在一个等大反向的电流  $I_L$ ，抵消产生的正电流

$$I = I_F + I_L \equiv 0 \quad (521)$$

$I_L$  称为光生电流，结两端的电势差称为开路电压  $V_{OC}$

光生电流的来源其实是少子漂移，在内建电场作用下，**两区内能够移动到扩散距离  $L_n, L_p$  的少数载流子将被电场抽取**， $n$  区的少子空穴在内建电场作用下向  $p$  区移动， $p$  区电子向  $n$  区移动，形成光生电流

若结两端接入外电路且持续存在合适的光照，外电路中就会有电流通过，这就是光电池的基本原理

### 3. 光电池的伏安特性

接入外电路形成回环，光电池工作，工作时有三种电流存在

- 光生电流  $I_L$
- 正向电流  $I_F$
- 外电路电流  $I$

光生电动势  $V$  引起的正向电流满足肖克莱方程

$$I_F = I_S \left( \exp\left(\frac{qV}{k_0 T}\right) - 1 \right) \quad (522)$$

对于外电路负载来说， $p$ 区是高电位，因此外部电流流向与  $I_L$  相同，电流方程满足

$$I = I_L - I_F \quad (523)$$

外电路开路时光生电流与正向电流大小相等，光生电动势  $V = V_{OC}$

$$\begin{aligned} I_L &= I_F = I_S \left( \exp\left(\frac{qV_{OC}}{k_0 T}\right) - 1 \right) \\ \Rightarrow V_{OC} &= \frac{k_0 T}{q} \ln\left(\frac{I_L}{I_S} + 1\right) \end{aligned} \quad (524)$$

短路电流为  $V = 0$  时

$$I_{SC} = I_L - I_S = I_L \quad (525)$$

**影响光电池开路电压和短路电流的因素是**

- 光照产生光生载流子数
- 各区内能扩散到空间电荷区并被电场扫入的少数载流子数

设结面积为  $A$ ，前面我们知道光强的空间分布是指数衰减的，因此不同位置处产生率不同，为此我们取平均产生率，那么光生载流子数即为

$$N = \overline{Q} A (L_p + L_n + x_d) \xrightarrow{L_p, L_n \gg x_d} \overline{Q} A (L_p + L_n) \quad (526)$$

这样光生电流的大小即为

$$I_L = qN = q\overline{Q}A(L_p + L_n) \quad (527)$$

产生率是光强的线性函数，因此光生电流也是，并且可以看到开路电压将随光生电流增大而增大。**但是开路电压存在上限，最大开路电压只能等于结势垒电压  $V_D$**

$$V_{OC} \leq V_D \quad (528)$$

#### H4 丹倍效应

当与光照射方向的样品尺度小于光的透射深度时，在样品表面与内部之间就会出现电势差，称为丹倍效应。产生的电动势约为

$$\Delta V < \frac{k_0 T}{q} \quad (529)$$

#### H4 光磁电效应

在引起丹倍效应的样品上，沿着与光垂直的方向施加磁场，由丹倍效应引起的扩散电流在洛伦兹力作用下偏转并积累，进而产生附加电场，这将产生霍尔电动势，称为光磁电效应

光磁电效应产生的光生电动势比丹倍效应带来的电动势还要小得多

### H3 半导体激光器

半导体激光器是向半导体 $pn$ 结注入电流，实现粒子数分布反转，产生受激辐射，再利用谐振腔的正反馈，实现光放大而产生激光振荡的器件

受激辐射发出激光需要满足三个要素：

- 激活介质经过激活后能实现能级之间的跃迁
- 粒子数分布反转
- 谐振腔，光增益大于总损耗

电子从低能级向高能级跃迁有三种基本方式：本征吸收(受激吸收)、自发辐射、受激辐射

- 自发辐射

处于高能级上的电子会自发地跃迁到低能级上与空穴复合，以发出光子的形式释放能量，自发辐射产生的是\*8非相干光\*\*

- 受激辐射

高能级上的电子受到入射光的作用，被迫跃迁到低能级上与空穴复合，释放能量产生光辐射，受激辐射产生的是相干光

- 本征吸收

讲过啦，不讲啦，还是讲一点点叭

- 受激辐射是受激吸收(本征吸收)的逆过程，吸收的光子和辐射的能量需要严格满足两个能级的能量差
- 受激辐射与受激吸收的速率正比于能级上粒子数，假设低能级、高能级上的粒子数分别为 $N_1, N_2$ 
  - $N_1 > N_2$ ，受激吸收大于受激辐射，光通过这一物质时将被吸收，光强按照指数衰减，称为吸收物质
  - $N_2 > N_1$ ，受激辐射大于受激吸收，光通过这一物质后会被放大，称为激活物质，这种分布被称为粒子数反转分布

实现粒子数分布反转的一种方法是在 $pn$ 结两端施加正向电压，基于前面的知识。 $n$ 区电子向 $p$ 区扩散增强， $p$ 区空穴向 $n$ 区扩散增强，这将在 $pn$ 结内形成一个特殊的增益区

在电子和空穴的扩散过程中是可能发生复合的，这是自发辐射，产生的光子将引起处于反转分布状态的非平衡载流子产生受激复合，出现受激辐射

实现反转的条件是导带的占据概率大于价带的占据概率

$$\frac{1}{1 + \exp(\frac{E_c - E_F^n}{k_0 T})} > 1 - \frac{1}{1 + \exp(\frac{E_F^p - E_v}{k_0 T})} \quad (530)$$

$$\Rightarrow E_F^n - E_F^p > E_c - E_v = E_g = h\nu$$

上式就是粒子数反转分布的条件

第三个条件是需要谐振腔，基本的光学谐振腔由两个反射率分别为 $R_1, R_2$ 的平行反射镜组成，称为法布里-珀罗(FP)谐振腔

谐振腔内的激活物质满足粒子数分布发转，物质产生的自发辐射光刚好可用作入射光。发生稳定谐振需要满足驻波条件，设反射镜间距离为 $L$ ，则

$$L = m \frac{\lambda}{2n}, \quad m \in \mathbb{N}^+ \quad (531)$$

解释一下，因为是反射，所以光波看起来周期压缩， $n$ 为介质折射率， $\lambda$ 是光真空波长， $m$ 是模数(纵模模数)。在谐振腔内沿腔轴向形成的各种驻波称为纵模

光在传播和反射过程中存在损耗，因此需要施加增益补偿，只有当增益不小于总损耗时才能建立起稳定振荡，相应的增益称为**阈值增益**，为达到阈值施加的注入电流称为**阈值电流**，阈值增益条件是

$$\gamma = \alpha - \frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2) \quad (532)$$

参数 $\alpha$ 为谐振腔内激活物质的损耗系数

只有一个纵模(激振模式)的激光器称为单纵模激光器，具有多个纵模的称为多纵模激光器，通过施加色散元件等方法可以将多纵模变为单纵模

# THE END

---

## Contact

Primary\_Email: lfy@starysky.top Secondary\_Email: ustc\_nku@163.com

Official\_Email: 2303473229@qq.com Google\_Email: wsylfymrzh@gmail.com

Website: [blog.starysky.top](http://blog.starysky.top) Addr.: Tianjin, China P.C.: 300000

*USTC-irresistible*  
*Chief-founder of the USTC-茶糜花开™*

1. 更详尽的内容请参考洛伦兹模型 ↵

2. 这实际上是要求电子的平均自由程<sup>3</sup>远大于势垒宽度，使得电子在势垒区内发生的碰撞可以忽略，因此不受势垒区宽度影响 ↵

3. 平均自由程指的是粒子在连续两次碰撞间运动的平均距离，对于直径为 $d$ 的粒子，平均自由程为 $\lambda = \frac{1}{n\pi d^2} = \frac{k_b T}{P\pi d^2}$ ，更详细的内容可以参考(理解真空系统—平均自由程 - 涓滴之量(yanjunma.com)) ↵

4. 肖特基二极管的反向电流比 $pn$ 结二极管的反向电流大 $10^3 \sim 10^8$ 倍，与肖特基势垒高度有关，小的肖特基势垒会导致较大的反向电流。这意味着，当需要提供的电流一定时，所需要的外加正电压会更小，因此肖特基二极管更适合于低电压大电流整流应用<sup>1</sup>；但是肖特基势垒也不能太小，因为大的反向电流在反偏时会带来高功耗<sup>2</sup>；另外，肖特基二极管的工作主要是多数载流子的参与，少数载流子可以忽略，而这就意味着可以忽略少数载流子的存储。因此，肖特基二极管可以工作在比 $PN$ 结二极管更高的频率<sup>3</sup> ↵

5. 这里的吸收系数是指自由载流子对光的吸收系数，可能存在其他因素对光的吸收 ↵