半导体物理及固体物理基础

第三章：载流子的统计分布

孙斌
Email: sunbin@suda.edu.cn
http://web.suda.edu.cn/sb2

苏州大学|未来科学与工程学院

课程内容

- 半导体中的电子状态
  - 晶格结构
  - 能带
- 杂质和缺陷能级
  - 缺陷
  - 杂质能级
- 载流子的统计分布
  - 状态密度
  - 费米-狄拉克分布
  - 载流子浓度
- 半导体的导电性
  - 漂移
  - 扩散
- 非平衡载流子
  - 产生
  - 复合
- pn结和金属-半导体接触
  - 零偏
  - 反偏
  - 正偏

状态密度

（Density of States）

量子态密度

- 能带中能级间隔很小，可以近似认为是连续的；
- 在能带中E ~ E+dE之间无限小的能量间隔内有dZ个量子态，则量子态密度g(E)可以定义为：

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

状态密度

被三维无限深势阱束缚的电子：

$$V(x,y,z)=0 \quad \begin{cases} 0<x<a \\ 0<y<a \\ 0<z<a \end{cases}$$

$$V(x,y,z)=\infty \ \text{其它}$$

$$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2=k_x^2+k_y^2+k_z^2=\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

三维情况下的状态密度

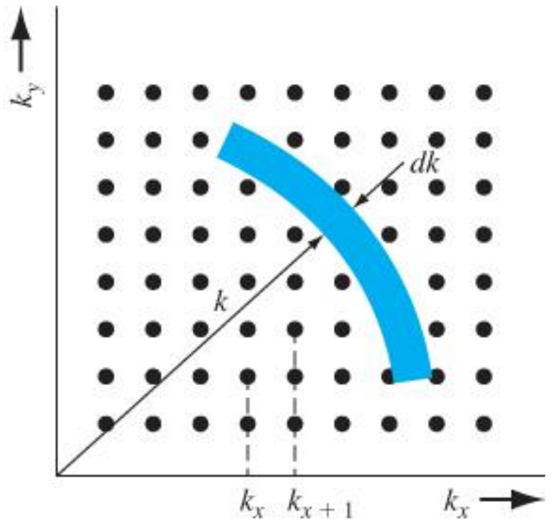
$$\frac{2mE}{\hbar^2}=k^2=k_x^2+k_y^2+k_z^2=\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right)\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

一维方向上，两个量子态的间距：

$$k_{x+1}-k_x=\frac{\pi}{a}$$

一个量子态所占的空间V_k为：

$$V_k=\left(\frac{\pi}{a}\right)^3$$



三维情况下的状态密度

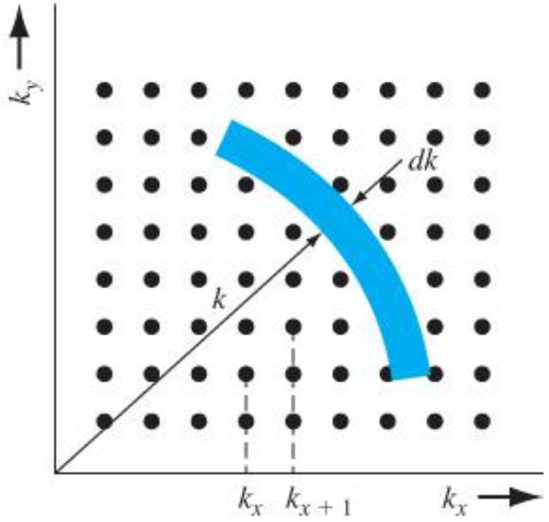
k空间体积微元为：

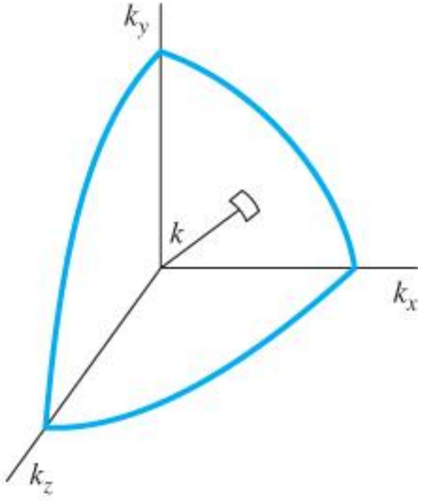
$$4\pi k^2 dk$$

k空间量子态的微元：

$$dZ = 2\left(\frac{1}{8}\right)\frac{4\pi k^2 dk}{\left(\frac{\pi}{a}\right)^3}$$

$$= \frac{a^3 k^2}{\pi^2} dk$$





三维情况下的状态密度

$$dZ = \frac{a^3}{\pi^2}\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)dk$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \Rightarrow dk = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}dE$$

$$dZ = \frac{4\pi a^3 (2m)^{3/2}}{h^3}\sqrt{E}dE$$

三维情况下的状态密度

体积为a^3的晶体中E和$E+dE$之间的量子态总数：

$$dZ=\frac{4\pi a^3(2m)^{3/2}}{h^3}\sqrt{E}dE$$

体积为a^3的晶体中单位能量之间的量子态总数：

$$g(E)=\frac{dZ}{dE}=\frac{4\pi a^3(2m)^{3/2}}{h^3}\sqrt{E}$$

单位体积单位能量之间的量子态密度：

$$g_c(E)=\frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3}\sqrt{E}$$

三维情况下的状态密度

导带态密度：

$$g_c(E)=\frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E-E_c}$$

价带态密度：

$$g_v(E)=\frac{4\pi(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E_v-E}$$

导带中某一能级上的电子数：

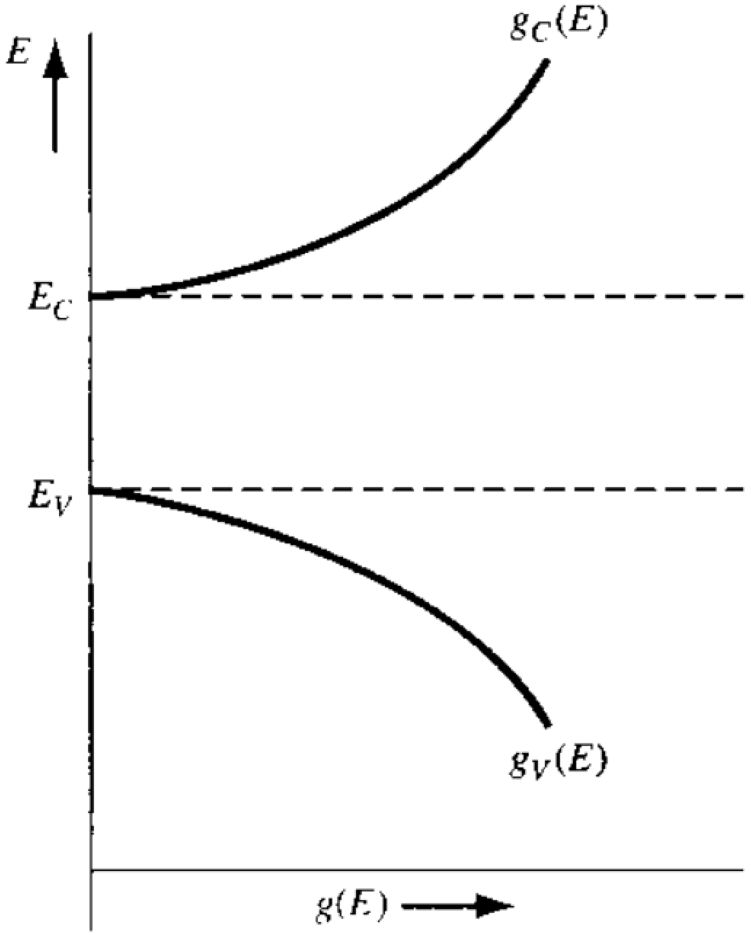
$$n(E)=g_c(E)f(E)$$

价带中某一能级上的空穴数：

$$p(E)=g_v(E)[1-f(E)]$$

状态密度小结

1） 态密度量纲
2） 原子密度，（量子）态密度典型值
3） 导带态密度、价带态密度
4） 二维半导体的态密度



费米-狄拉克分布函数

（Fermi-Dirac Distribution Function）

费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

一个电子占据能量E的能态的几率：

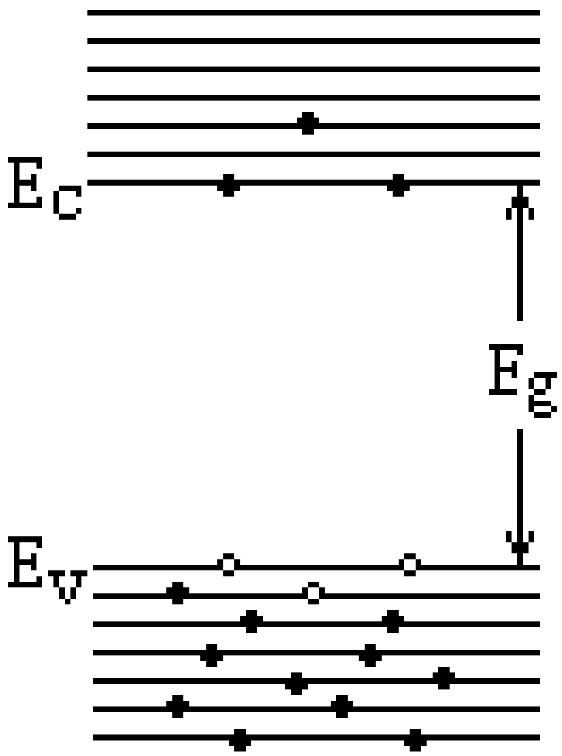
- 费米-狄拉克分布：

$$f_F(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}$$

k: 玻尔兹曼常数 [J/K]

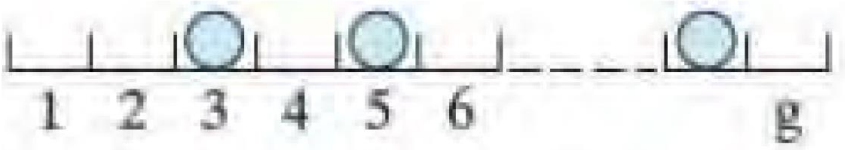
T: 绝对温度 [K]

E_F: Fermi能级



费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

数学推导 1



在某一能级有g个量子态（假设每个量子态目前只能放一个电子）

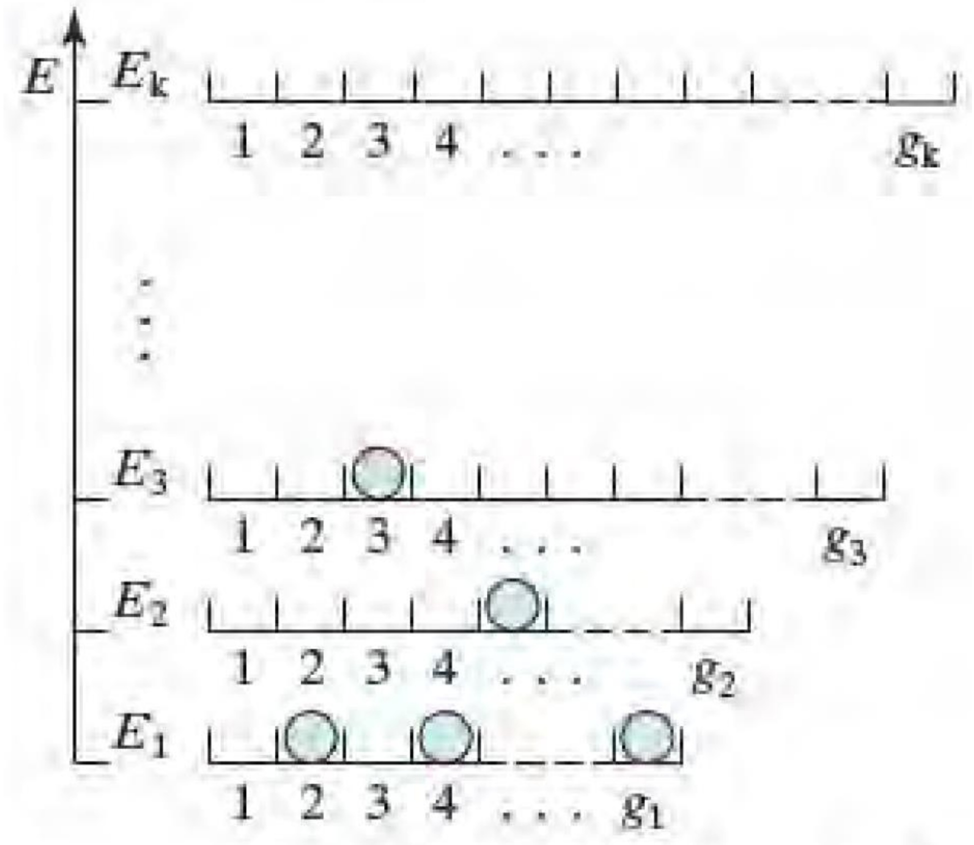
- 放第1个电子时有g种方法
- 放第2个电子时有g-1种方法
- 放第3个电子时有g-2种方法
- 放第n个电子时有g-(n-1)种方法

由于电子属于费米子（粒子和粒子之间不可分辨），粒子本身之间的n!种排列是相同的，所以放置n个球的方法共有

$$W = \frac{g(g-1)(g-2)...[g-(n-1)]}{n!} = \frac{g!}{(g-n)!n!}$$

费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

数学推导 2



所以在能级E_i中n_i个电子的排列方式有：

$$W_i = \frac{g_i!}{(g_i - n_i)!n_i!}$$

在一共 k 个能级中所有的排列方式为：

$$W_{\text{total}} = W_1 \times W_2 \times \ldots \times W_k$$

比值n_i/g_i是在能级E_i处某一量子态被占据的概率，费米-狄拉克分布就是这个概率关于能量的函数 $f(E)$ 。

目标为在系统中的总电子数和总能量保持不变的前提下寻找 W_{total} 的最大值（系统的熵最大）：

$$\Sigma_k n_i = \text{constant}$$

$$\Sigma_k n_i E_i = \text{constant}$$

$$\frac{d\ln W}{dn_i} = 0$$

费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

- 单个电子的能量是不断变化的；
- 从大量电子的整体来看，热平衡状态下，
  电子按能量的大小，具有一定的统计分布规律。

1938年Nobel

单位体积单位能量的电子数

$$\frac{N(E)}{g(E)} = f_F(E) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}$$

费米能级

单位体积单位能量的量子状态数

费米能级的定义：电子占据该能级的概率为50%

费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

将半导体中大量电子的整体看成一个热力学系统，根据统计理论，费米能级E_F就是系统的化学势，即

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

F是系统的自由能。

公式的意义：当系统处于热平衡状态，也不对外做功的情况下，系统中每增加一个电子所引起系统自由能的变化，等于系统的化学势，也就是系统的费米能级

处于热平衡状态的系统有统一的化学势，所以处于热平衡状态的电子系统有统一的费米能级。

费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

绝对零度下, $E > E_F$

$$f_F(E) = \frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E - E_F}{kT}\right)}$$

$T = 0K \quad kT = 0 \,,\, 1/kT = \infty$

$$E > E_F \quad , \quad E - E_F > 0; \quad \frac{E - E_F}{kT} = +\infty \,, \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) = +\infty$$

$$f_F(E) = \frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E - E_F}{kT}\right)} = 0$$

费米–狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

绝对零度下, $E < E_F$

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\dfrac{E - E_F}{kT}\right)}$$

$T = 0K \quad kT = 0\,,\ 1/kT = \infty$

$$E < E_F\,,\ E - E_F < 0\,,\ \frac{E - E_F}{kT} = -\infty\,,\ \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) = 0$$

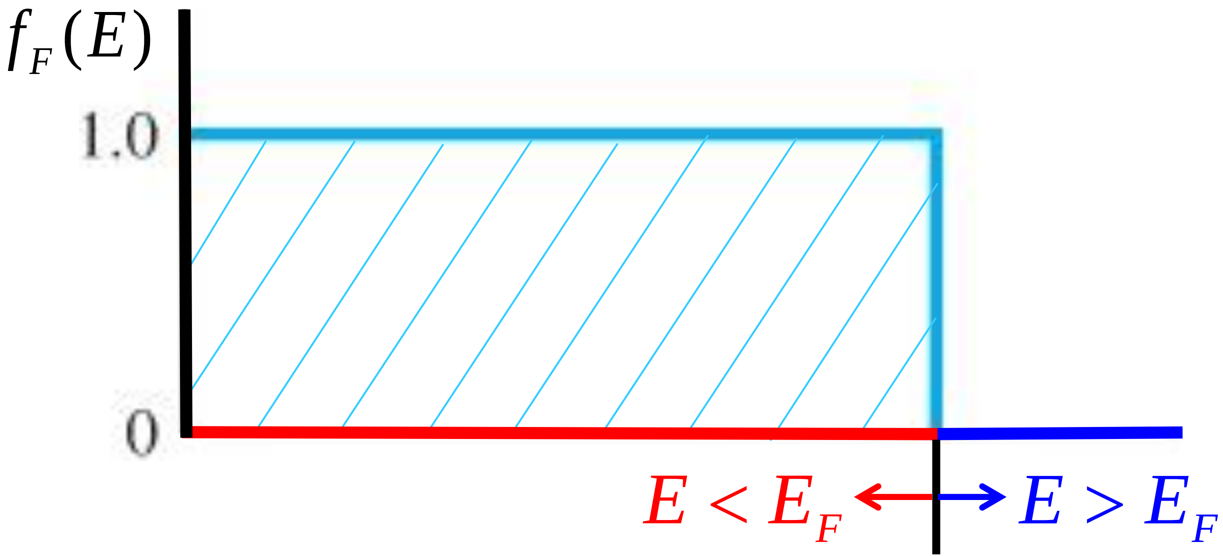
$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\dfrac{E - E_F}{kT}\right)} = 0$$

费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

$T = 0K$

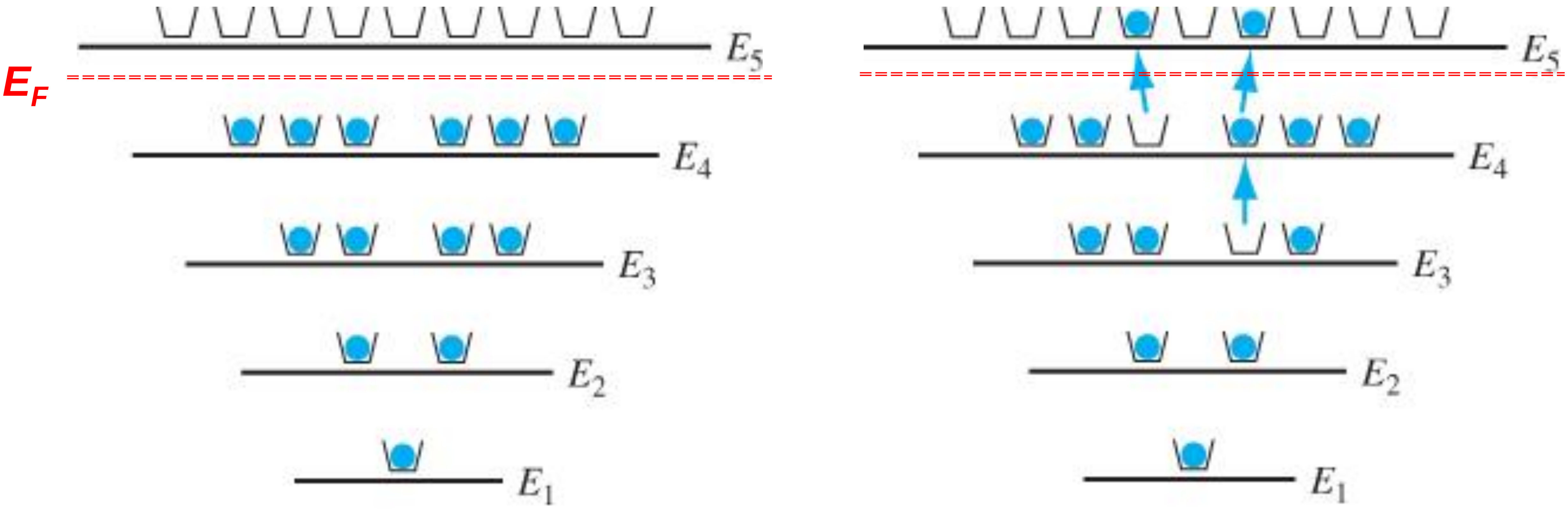
$E > E_F$, $\dfrac{E-E_F}{kT} = +\infty$, $f_F(E) = \dfrac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E-E_F}{kT}\right)} = 0$ → 量子态全空

$E < E_F$, $\dfrac{E-E_F}{kT} = -\infty$, $f_F(E) = \dfrac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E-E_F}{kT}\right)} = 1$ → 量子态全满



费米–狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

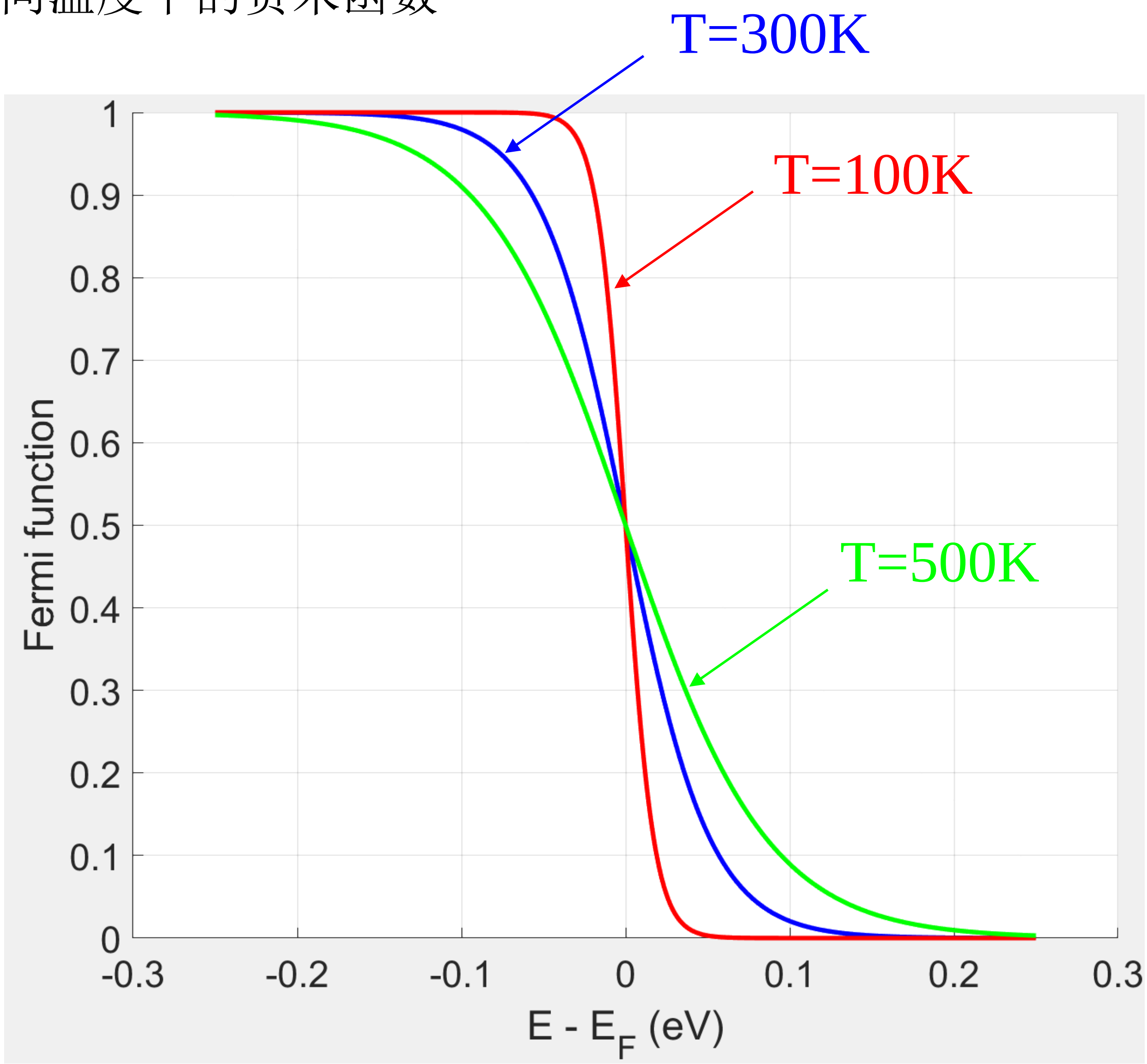
费米能级可以确定电子的统计学分布，但不一定对应一个允带中的能级



$T=0K$ $T>0K$

费米–狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

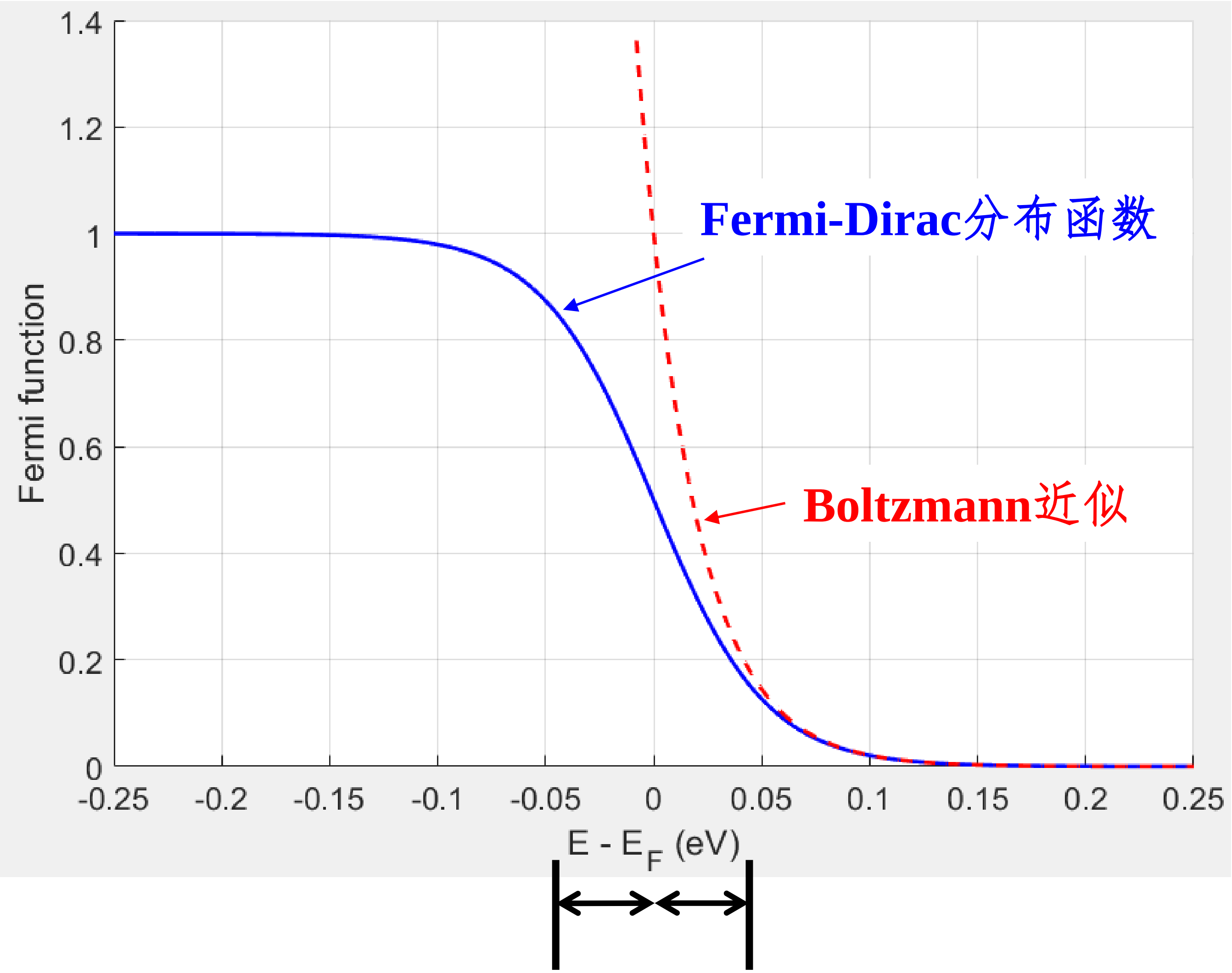
不同温度下的费米函数



$$f_F(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}$$

费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

T=300K时，电子的分布

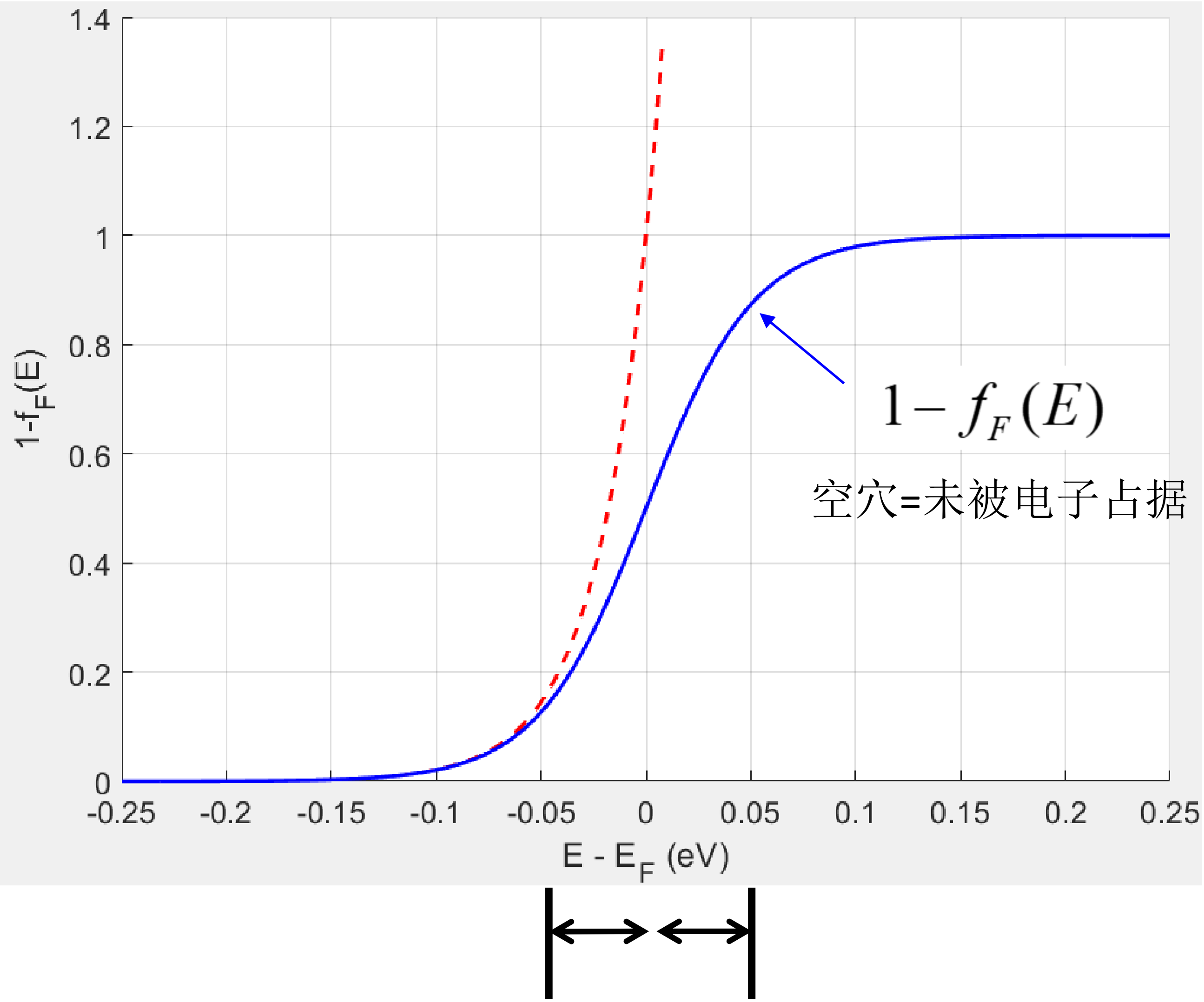


当 $E-E_F>3kT$ 时：$\exp\left(\dfrac{E-E_F}{kT}\right)>>1$

$$f_F(E)=\underbrace{\frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E-E_F}{kT}\right)}}_{\text{Fermi-Dirac分布}}\approx\underbrace{\exp\left(-\frac{E-E_F}{kT}\right)}_{\text{Boltzmann近似}}$$

费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布函数

T=300K时，空穴的分布



$$f_F(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}$$

当 $E-E_F<-3kT$ 时：$\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)>>1$

$$1-f_F(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E_F-E}{kT}\right)}$$

$$\approx\exp\left(-\frac{E_F-E}{kT}\right)$$

费米-狄拉克分布

什么条件下才算$E_F >> kT$？有效玻尔兹曼分布

$$T = 300K, E - E_F = 2kT$$

$$f_F(E) = \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}$$

$$= \frac{1}{1+\exp\left(\frac{2kT}{kT}\right)}$$

$$=11.9\%$$

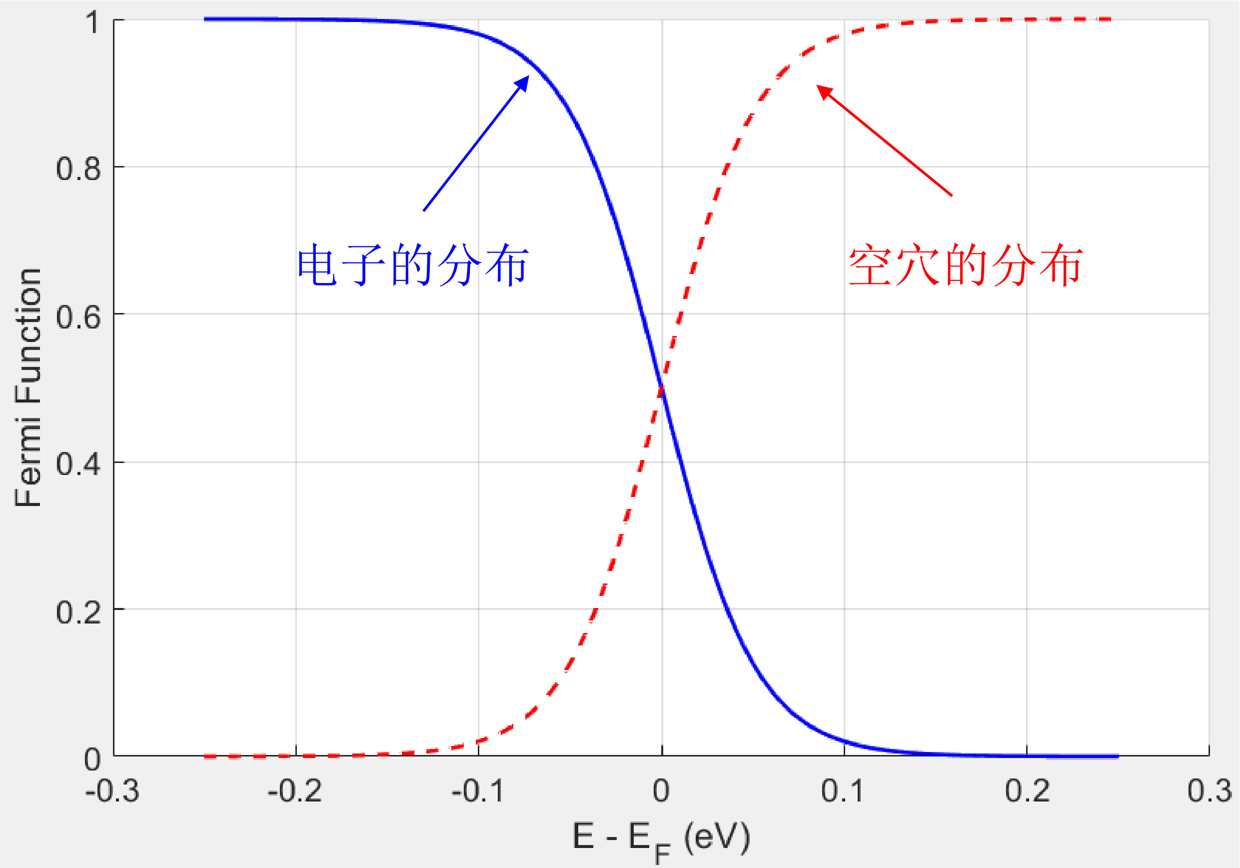
$$\frac{\exp\left(-\frac{E-E_F}{kT}\right) - \frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}}{\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}} = 5\%$$

$$\exp\left(-\frac{E-E_F}{kT}\right) = 5\%$$

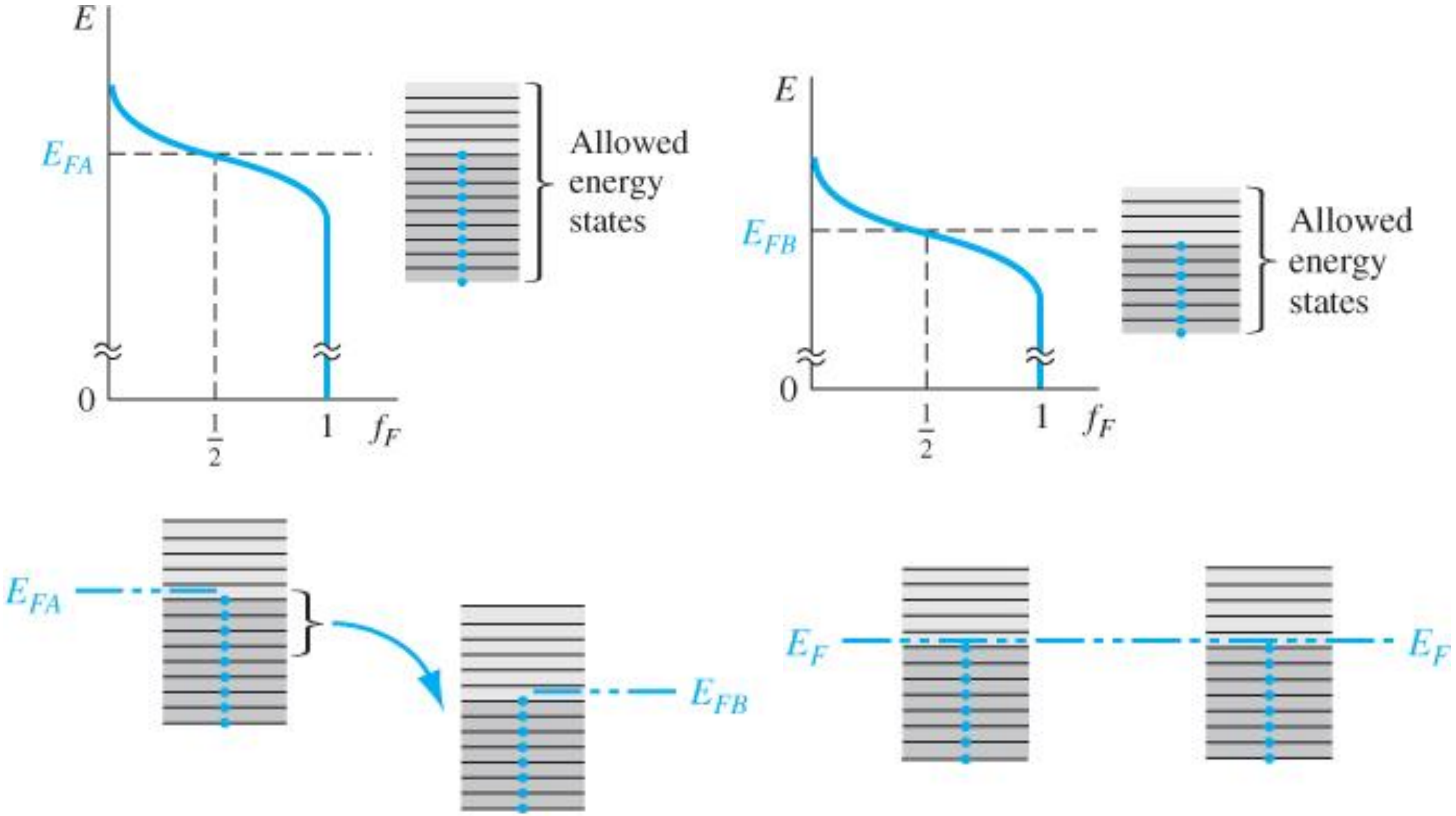
$$E - E_F = kT\ln\left(\frac{1}{0.05}\right) = 3kT$$

费米-狄拉克分布

电子的分布和空穴的分布是什么关系？



热平衡下两个系统



热平衡状态下整个系统的费米能级是一个常数

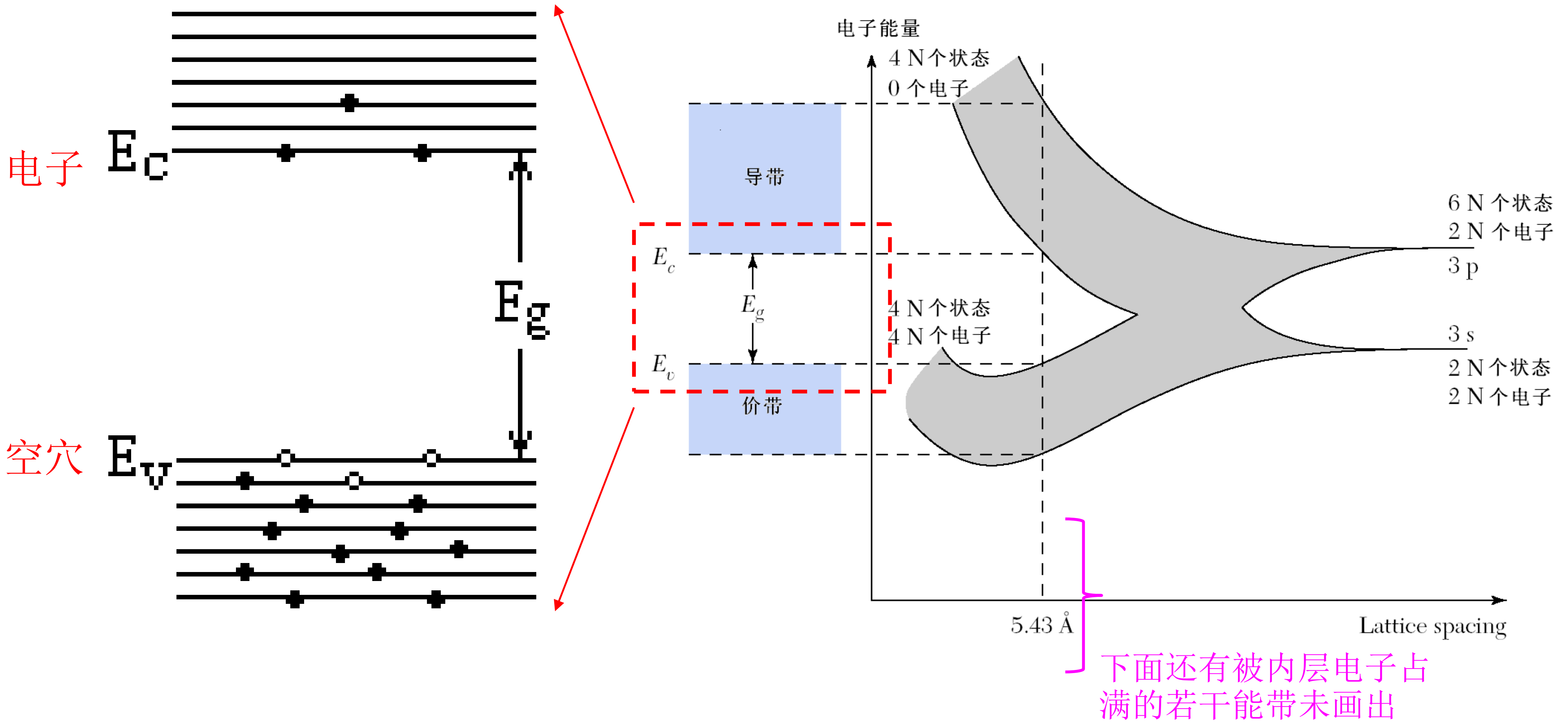
费米-狄拉克分布小结

1）费米能级E_F定义（化学势、占据概率50%）
2）费米-狄拉克分布（$T=0$、$T>0$时，$E<E_F$、$E>E_F$时概率情况）
3）电子的分布函数、空穴的分布函数
4）玻尔兹曼分布，有效玻尔兹曼近似
5）热平衡下的两个系统拥有共同的费米能级

平衡半导体的载流子浓度
(本征半导体)

载流子浓度

什么是平衡半导体？



导带中电子的热平衡浓度

导带态密度：

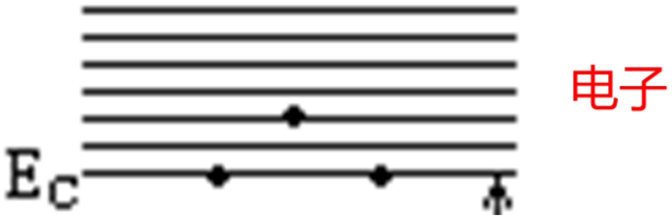
$$g_c(E)=\frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E-E_c}$$

某一能级的量子态被电子占据的概率：

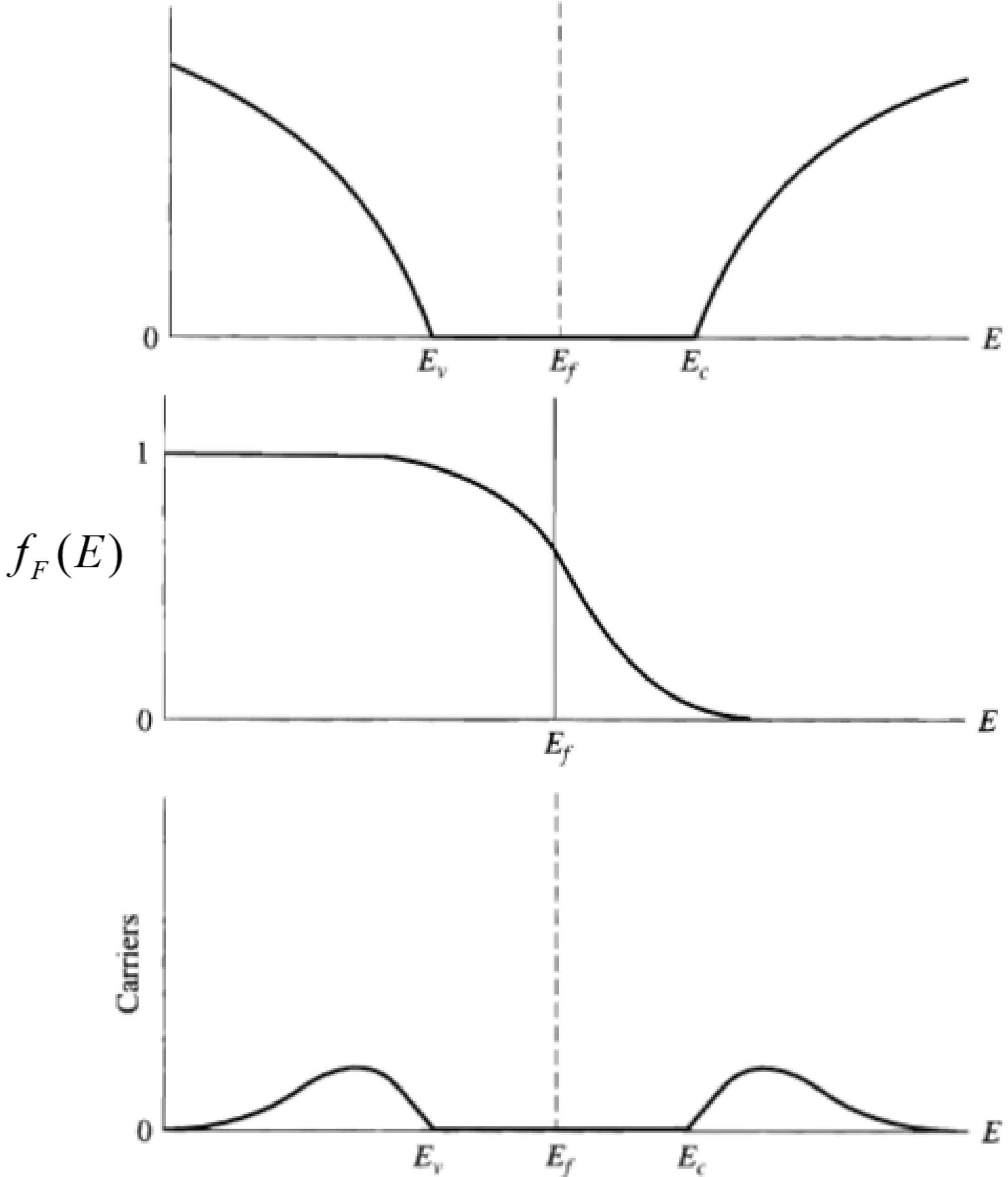
$$f_F(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}\approx\exp\left(-\frac{E-E_F}{kT}\right)$$

导带中某一能级上的电子数：

$$n(E)=g_c(E)f_F(E)$$



导带中电子的热平衡浓度



$$g_c(E) = \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E - E_c}$$

$$f_F(E) \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right)$$

$$\begin{aligned} n_0 &= \int_{E_c}^{E_{c-top}} n(E)\, dE \\ &= \int_{E_c}^{E_{c-top}} g_c(E)\, f_F(E)\, dE \\ &\approx \int_{E_c}^{\infty} g_c(E)\, f_F(E)\, dE \end{aligned}$$

导带中电子的热平衡浓度

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E)\, f_F(E)\, dE$$

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{E - E_c}\, \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right) dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{E - E_c}\, \exp\left(-\frac{E - E_c}{kT}\right) dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} (kT)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{\frac{E - E_c}{kT}}\, \exp\left(-\frac{E - E_c}{kT}\right) d\left(\frac{E - E_c}{kT}\right)$$

$$= \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} (kT)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \int_{0}^{\infty} \eta^{\frac{1}{2}} \exp(-\eta)\, d(\eta)$$

导带中电子的热平衡浓度

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{E - E_c} \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right) dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} (kT)^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \int_0^{\infty} \eta^{\frac{1}{2}} \exp(-\eta)\, d(\eta)$$

$$= \frac{4\pi(2m_n^* kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

$$= \frac{2(2\pi m_n^* kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$$

$$= \boxed{N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)} \qquad N_c = 2\left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \propto (m_n^*)^{\frac{3}{2}}, T^{\frac{3}{2}}$$

导带中电子的热平衡浓度

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} g_c(E)\, f_F(E)\, dE \quad \Rightarrow \quad n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right)$$

$$g_c(E) = \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E - E_c}$$

$$f_F(E) \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right)$$

$$N_c = 2\left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$$

导带的有效态密度：把导带电子等效的看作仅仅分布在导带底。

导带中电子的热平衡浓度-习题

例 4.1 求导带中某个状态被电子占据的概率，并计算 $T=300$ K 时硅中的热平衡电子浓度。设费米能级位于导带下方 0.25 eV 处。$T=300$ K 时硅中的 $N_c=2.8\times10^{19}\ \mathrm{cm}^{-3}$（见附录 B）。

■ **解**

$E=E_c+kT/2$ 的量子态被电子占据的概率为

$$f_F(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}\approx\exp\left[\frac{-(E-E_F)}{kT}\right]=\exp\left[\frac{-(E_c+(kT/2)-E_F)}{kT}\right]$$

或

$$f_F(E)=\exp\left[\frac{-(0.25+(0.0259/2))}{0.0259}\right]=3.90\times10^{-5}$$

得到电子浓度为

$$n_0=N_c\exp\left[\frac{-(E_c-E_F)}{kT}\right]=(2.8\times10^{19})\exp\left[\frac{-0.25}{0.0259}\right]$$

或

$$n_0=1.80\times10^{15}\ \mathrm{cm}^{-3}$$

价带中空穴的热平衡浓度

价带中态密度：

$$g_v(E)=\frac{4\pi(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E_v-E}$$

某一能级的量子态被空穴占据的概率：

$$1-f_F(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E_F-E}{kT}\right)}$$

$$\approx\exp\left(-\frac{E_F-E}{kT}\right)$$

价带中某一能级上的空穴浓度：

$$p(E)=g_v(E)[1-f_F(E)]$$

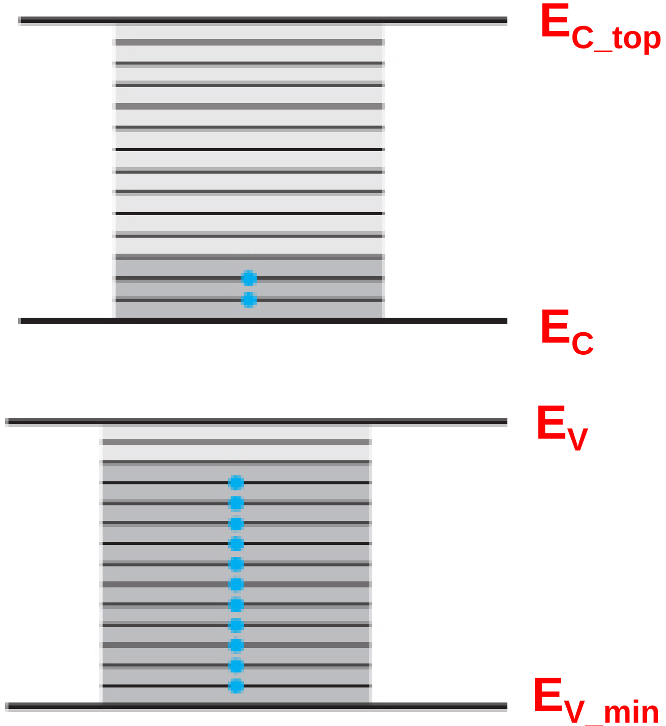
空穴

价带中空穴的热平衡浓度

$$p_0 = \int_{E_{\mathrm{v\_min}}}^{E_v} p\,(E)\,dE$$

$$= \int_{E_{\mathrm{v\_min}}}^{E_v} g_v(E)\,[1\text{-}f_F(E)]\,dE$$

$$\approx \int_{-\infty}^{E_v} g_v(E)\,[1\text{-}f_F(E)]\,dE$$



$$g_v(E) = \frac{4\pi(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E_v - E}$$

$$1 - f_F(E) \approx \exp\left(-\frac{E_F - E}{kT}\right)$$

价带中空穴的热平衡浓度

$$p_0=\int_{-\infty}^{E_v}\frac{4\pi(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E_v-E}\exp\left(-\frac{E_F-E}{kT}\right)dE$$

$$=\int_{-\infty}^{E_v}\frac{4\pi(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E_v-E}\exp\left(-\frac{E_F-E_v+E_v-E}{kT}\right)dE$$

$$=\frac{4\pi(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{kT}\right)\int_{-\infty}^{E_v}\sqrt{E_v-E}\exp\left(-\frac{E_v-E}{kT}\right)dE$$

$$=-\frac{4\pi(2m_p^*kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{kT}\right)\int_{+\infty}^{0}\eta'^{\frac{1}{2}}\exp(-\eta')d\eta'$$

$$=2\left(\frac{2\pi m_p^*kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{kT}\right)$$

价带中空穴的热平衡浓度

$$g_v(E)=\frac{4\pi(2m_p^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E_v-E}$$

$$1-f_F(E)\approx\exp\left(-\frac{E_F-E}{kT}\right)$$

$$p_0=\int_{-\infty}^{E_v}g_v(E)\left[1-f_F(E)\right]dE$$

$$p_0=N_v\exp\left(-\frac{E_F-E_v}{kT}\right)$$

$$N_v=\frac{2(2\pi m_p^*kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3}$$

价带有效状态密度:把价带空穴等效的看作仅仅分布在价带顶。

价带中空穴的热平衡浓度–习题

例 4.2 求 $T=400$ K 时硅的热平衡空穴浓度。

设费米能级处于价带能级上方 0.27 eV 处。$T=300$ K 时，硅中的 $N_v=1.04\times10^{19}\ \text{cm}^{-3}$（请参阅附录 B）。

■ **解**

$T=400$ K 时，参数值如下：

$$N_v=(1.04\times10^{19})\left(\frac{400}{300}\right)^{3/2}=1.60\times10^{19}\ \text{cm}^{-3}$$

和

$$kT=(0.0259)\left(\frac{400}{300}\right)=0.034\,53\ \text{eV}$$

得到空穴浓度为

$$p_0=N_v\exp\left[\frac{-(E_F-E_v)}{kT}\right]=(1.60\times10^{19})\exp\left(\frac{-0.27}{0.034\,53}\right)$$

或

$$p_0=6.43\times10^{15}\ \text{cm}^{-3}$$

导带电子浓度：

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right)$$

价带空穴浓度：

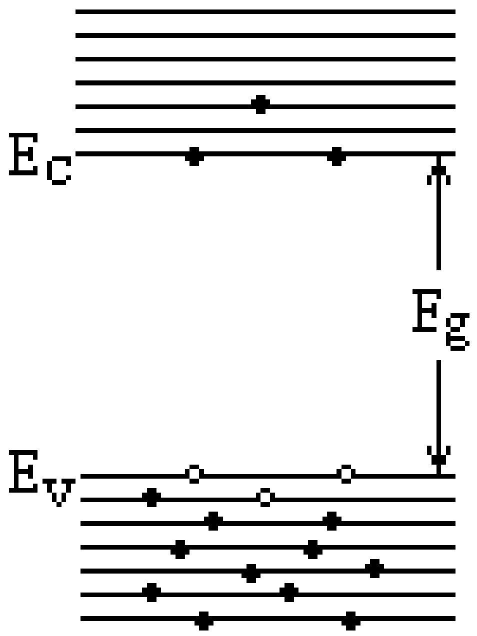
$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$$

本征半导体：

$$n = p = n_i$$

$$N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right) = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{kT}\right)$$

$$E_F = E_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \left(\frac{kT}{2}\right)\ln\left(\frac{N_V}{N_C}\right)$$



本征费米能级的位置

对本征半导体而言： $n_0 = p_0 = n_i$

$$n_0 = n_i = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{kT}\right), \quad p_0 = n_i = N_v \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_v}{kT}\right)$$

$$N_c \exp\left(-\frac{E_C - E_{Fi}}{KT}\right) = N_v \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_V}{KT}\right)$$

$$\boxed{E_{Fi} = \frac{E_c + E_v}{2} + \left(\frac{kT}{2}\right)\ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right)} \quad \begin{cases} N_c = \dfrac{2(2\pi m_n^* kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \\ N_v = \dfrac{2(2\pi m_p^* kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \end{cases}$$

$$E_{Fi} = \frac{E_c + E_v}{2} + \left(\frac{3}{4}kT\right)\ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)$$

本征费米能级的位置-习题

例4.4　$T=300$ K 时，计算硅中的本征费米能级相对于禁带中央的位置。

已知硅中载流子有效质量分别为 $m_n^*=1.08m_0$，$m_p^*=0.56m_0$。

■ 解

本征费米能级相对于禁带中央的位置为

$$E_{Fi}-E_{\text{midgap}}=\frac{3}{4}kT\ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right)=\frac{3}{4}(0.0259)\ln\left(\frac{0.56}{1.08}\right)$$

或

$$E_{Fi}-E_{\text{midgap}}=-0.0128\text{ eV}=-12.8\text{ meV}$$

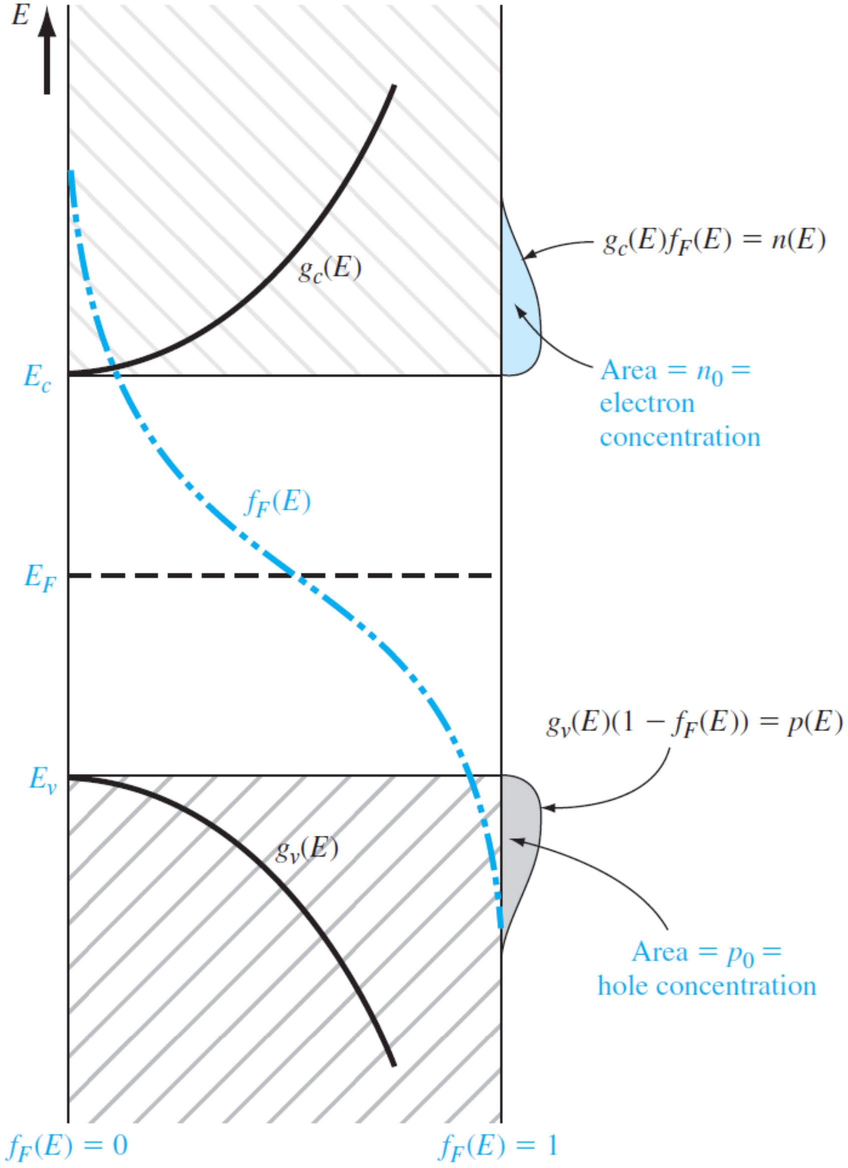
热平衡载流子浓度

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

N_c：导带有效态密度

$$p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{kT}\right)$$

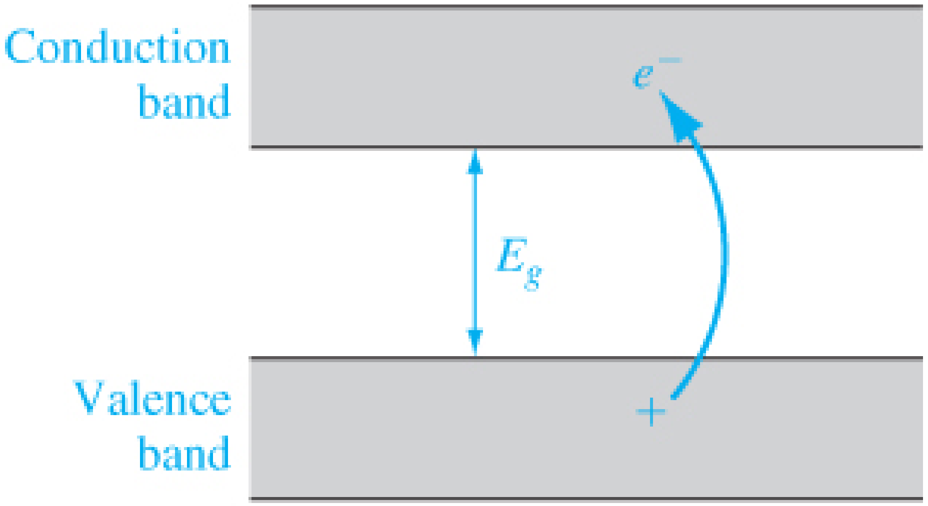
N_v：价带有效态密度

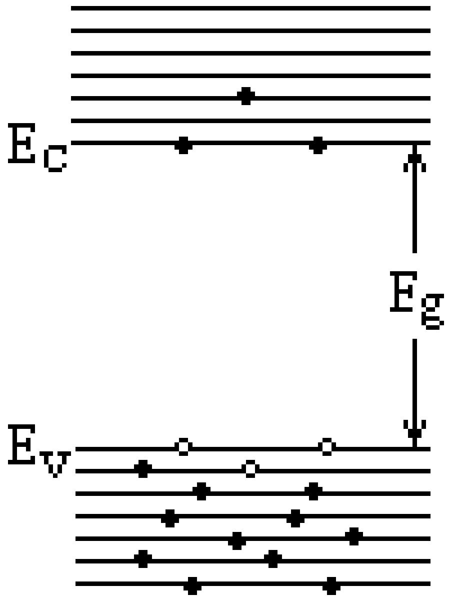


本征载流子浓度

◆ 在本征(intrinsic)半导体中，导带中的电子浓度等于价带中的空穴浓度；

分别用n_i、p_i来表示；





◆ 由于$n_i=p_i$，所以通常用n_i来表示本征载流子浓度；

本征载流子浓度

◆ 在本征(intrinsic)半导体中，导带中的电子浓度等于价带中的空穴浓度；

分别用n_i、p_i来表示；

◆ 由于$n_i=p_i$，所以通常用n_i来表示本征载流子浓度；

◆ 本征半导体的费米能级称为本征费米能级，$E_F=E_{Fi}$

本征电子浓度：

$$n_0 = n_i = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{kT}\right)$$

本征空穴浓度：

$$p_0 = n_i = N_v \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_v}{kT}\right)$$

本征载流子浓度

$$n_0 = n_i = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{kT}\right) \qquad p_0 = n_i = N_v \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_v}{kT}\right)$$

$$n_0 p_0 = n_i^2 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi}}{kT}\right) \cdot N_v \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_v}{kT}\right)$$

$$= N_c N_v \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fi} + E_{Fi} - E_v}{kT}\right)$$

$$= N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right)$$

$$\boxed{n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)}$$

对于给定的材料(E_g一定)，
当温度恒定时(T 固定)，n_i为定值。

300K温度下本征载流子浓度

$$n_i = \sqrt{N_c N_v}\exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$$

半导体Si:

$E_g = 1.12\text{eV}$

$N_c = 2.86\text{x}10^{19}\text{cm}^{-3}$;

$N_v = 1.04\text{x}10^{19}\text{cm}^{-3}$

半导体GaAs:

$E_g = 1.42\text{eV}$

$N_c = 4.7\text{x}10^{17}\text{cm}^{-3}$;

$N_v = 7.0\text{x}10^{18}\text{cm}^{-3}$

半导体Ge:

$E_g = 0.66\text{eV}$

$N_c = 1.04\text{x}10^{19}\text{cm}^{-3}$

$N_v = 6.0\text{x}10^{18}\text{cm}^{-3}$

Table 4.2 | Commonly accepted values of n_i at $T = 300$ K

Silicon	$n_i = 1.5 \times 10^{10}\ \text{cm}^{-3}$
Gallium arsenide	$n_i = 1.8 \times 10^{6}\ \text{cm}^{-3}$
Germanium	$n_i = 2.4 \times 10^{13}\ \text{cm}^{-3}$

本征载流子浓度-习题

例 4.3 分别计算 $T=250$ K 和 $T=400$ K 时砷化镓中的本征载流子浓度。

$T=300$ K 时，砷化镓中的 $N_c=2.8\times10^{19}$ cm^{-3}，$N_v=1.04\times10^{19}$ cm^{-3}，它们均与 $T^{3/2}$ 成正比。设砷化镓的禁带宽度为 1.12 eV，皆在此温度范围内不随温度变化。

■ **解**

由式(4.23)，$T=250$ K 时，有

$$n_i^2=(2.8\times10^{19})(1.04\times10^{19})\left(\frac{250}{300}\right)^3\exp\left[\frac{-1.12}{(0.0259)(250/300)}\right]$$

$$=4.90\times10^{15}$$

因此

$$n_i=7.0\times10^7\ \text{cm}^{-3}$$

$T=400$ K 时，有

$$n_i^2=(2.8\times10^{19})(1.04\times10^{19})\left(\frac{400}{300}\right)^3\exp\left[\frac{-1.12}{(0.0259)(400/300)}\right]$$

$$=5.67\times10^{24}$$

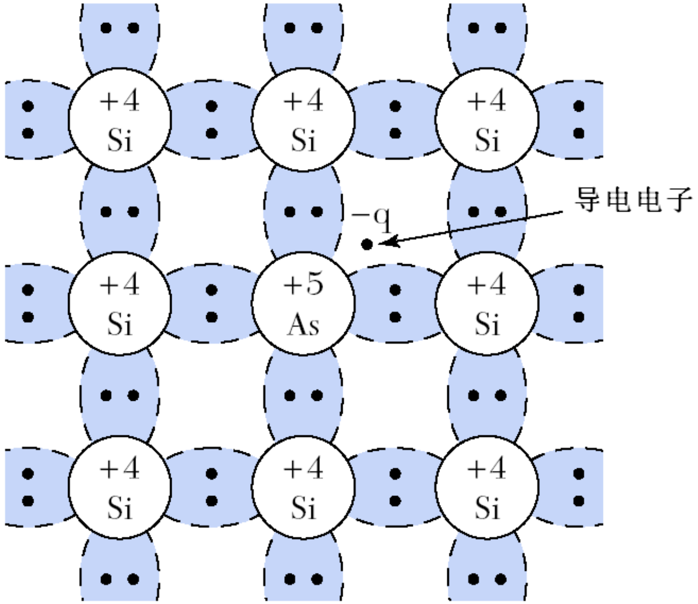
因此

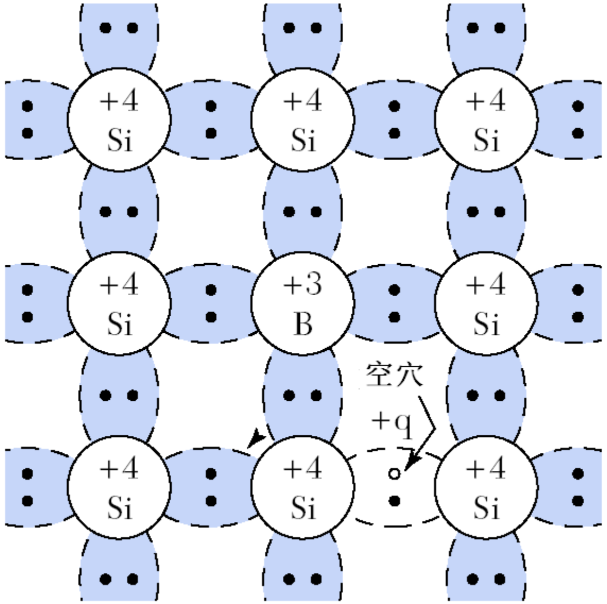
$$n_i=2.38\times10^{12}\ \text{cm}^{-3}$$

平衡半导体的载流子浓度
(非本征半导体)

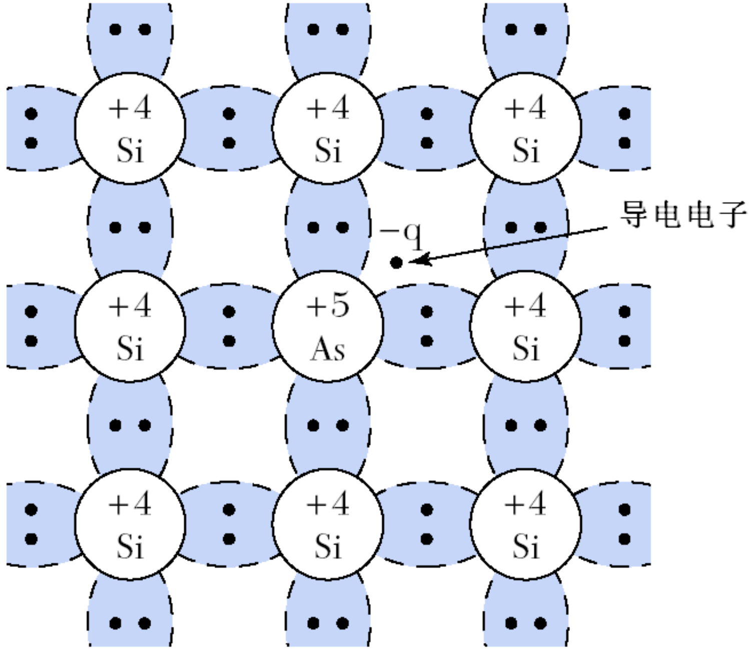
非本征(Extrinsic)半导体

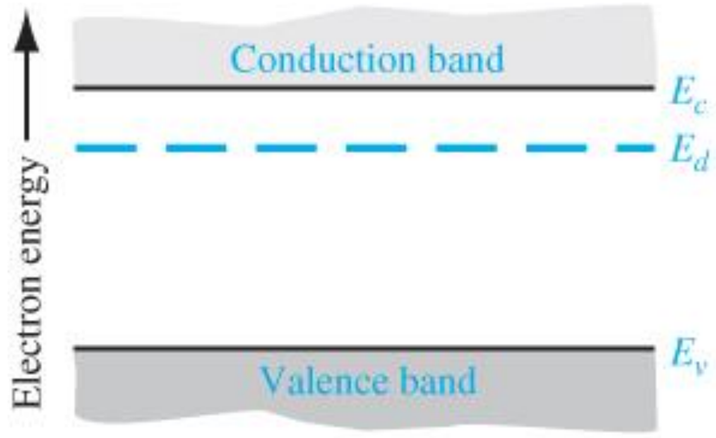
- 非本征半导体：掺入杂质原子的半导体；
- 掺入少量的的特定杂质原子，可以明显的改变半导体的电学特性；
- 制造各种半导体器件的基础；

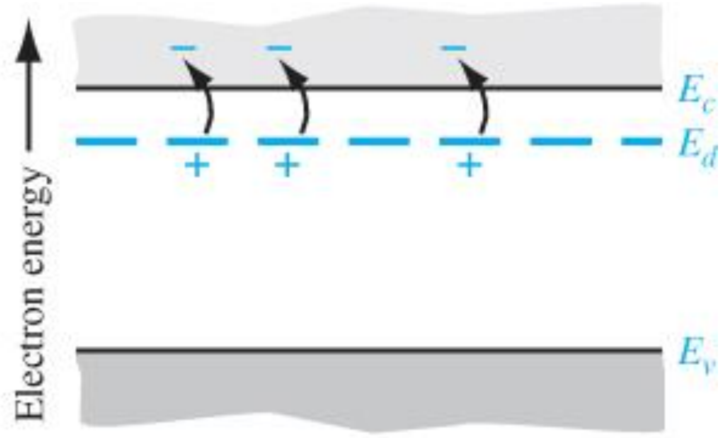




n型半导体

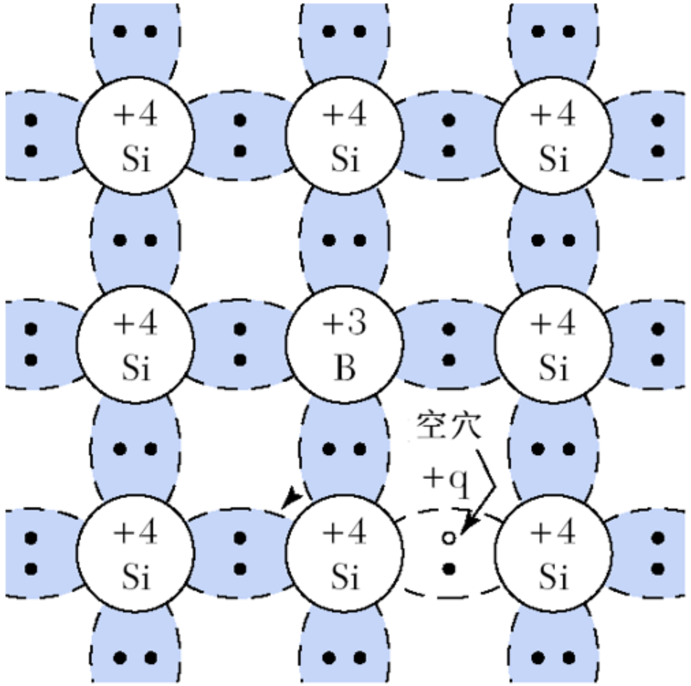


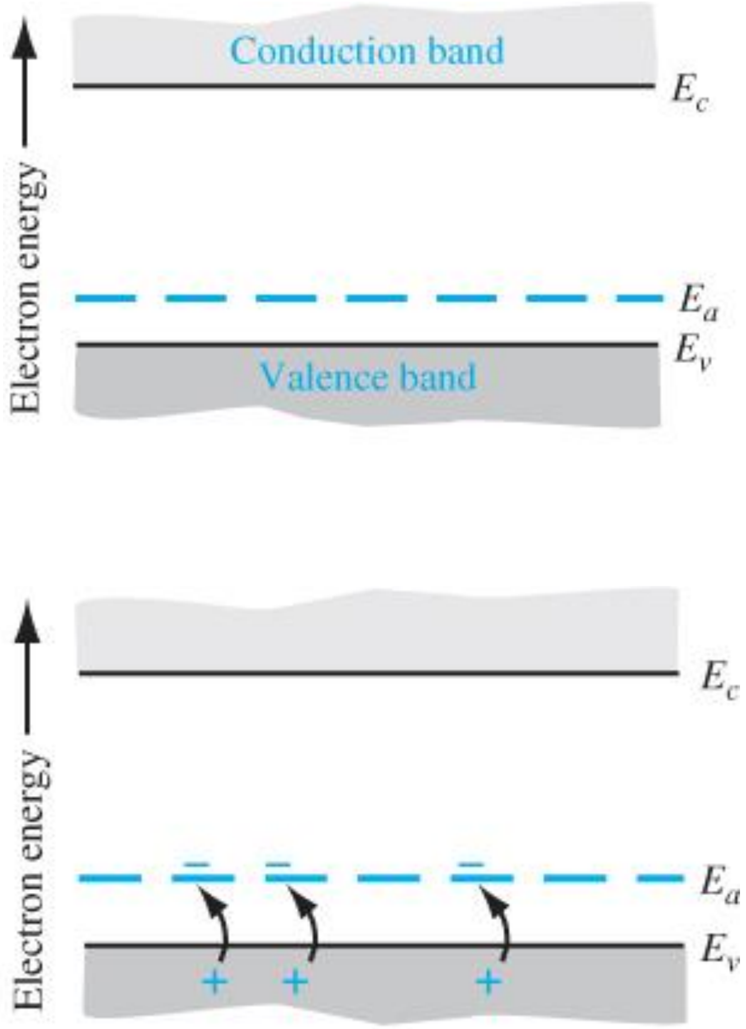




- 向导带贡献一个电子的杂质原子，所以称为施主(Donor)；
- 导带电子浓度高于价带空穴浓度，此时的半导体称为n型半导体。

p型半导体





- 从价带获得电子(向价带贡献一个空穴)的杂质，所以称为受主(Acceptor)；
- 价带空穴浓度高于导带电子浓度，此时的半导体称为p型半导体。

杂质离化能

波尔氢原子模型：

$$E_H = -\frac{m_0 q^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^2 n^2} = -\frac{13.6}{n^2}\mathrm{eV}$$

氢原子外只有一个电子且在第一轨道：

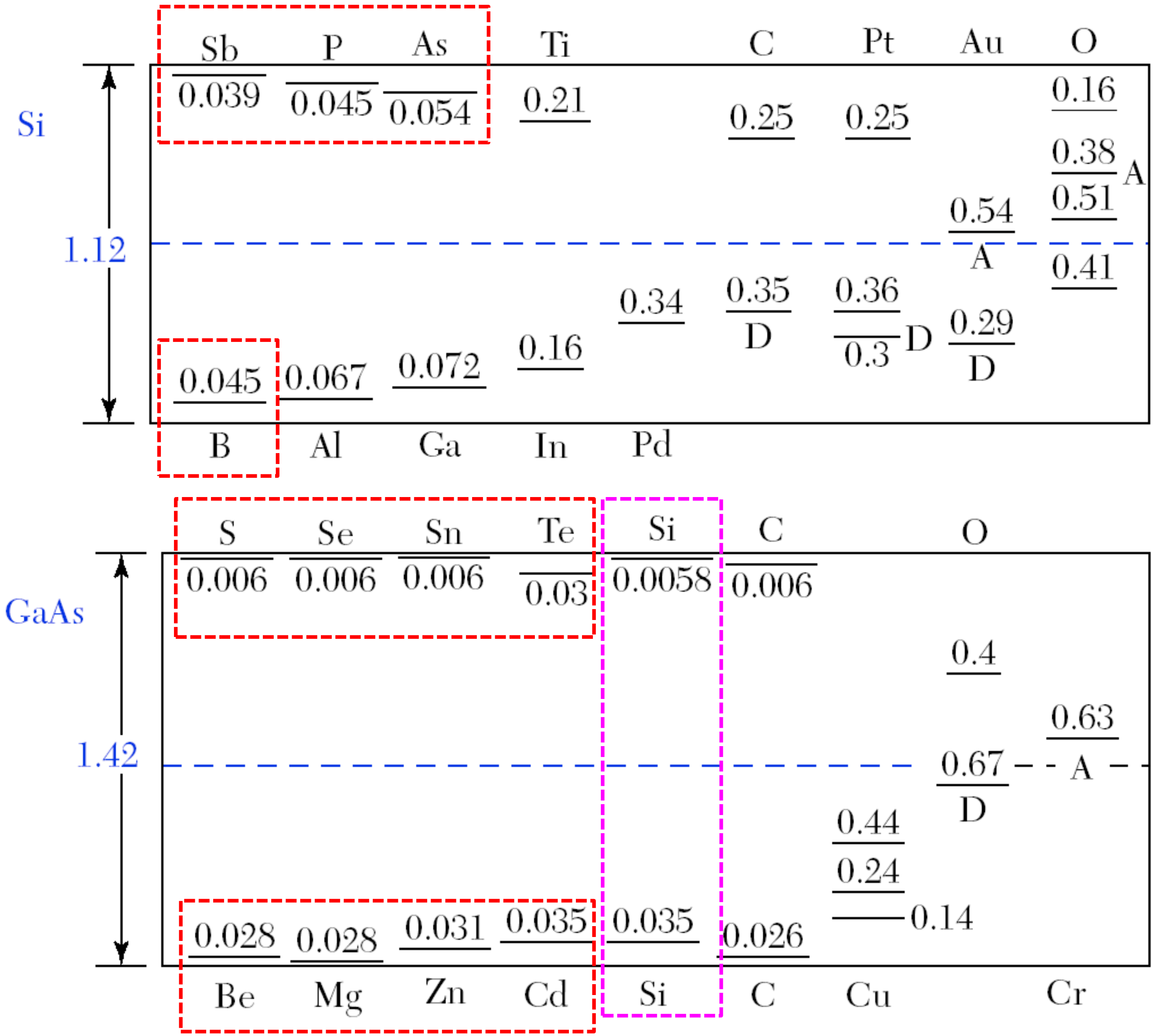
$$E_H = 0 - \left(-\frac{m_0 q^4}{8\varepsilon_0{}^2 h^2 n^2}\right) = \frac{13.6}{1}\mathrm{eV{=}13.6eV}$$

施主杂质最外层一个电子在硅中电离，
相当于在晶体中附加了一个氢原子：

$$E_D = \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_S}\right)^2 \left(\frac{m_n^*}{m_0}\right) E_H \begin{cases} \text{硅中为0.0258eV} \\ \text{GaAs中为0.007eV} \end{cases}$$

（估算）

杂质离化能



GaAs:

- II族元素为受主杂质
- VI族元素为施主杂质

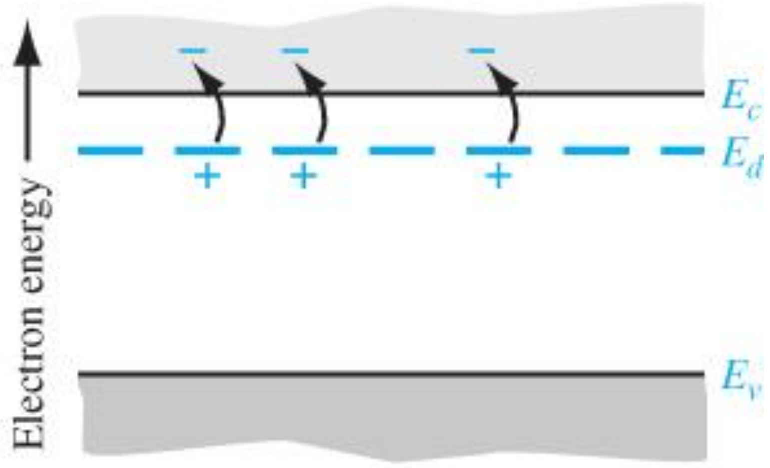
课堂问题：硅在砷化镓中是施主还是受主杂质？

施主杂质电离

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)}$$

施主能级简并因子
（一个能级能接受两个自旋态）

$$n_d = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)} N_d$$



$$n_d = N_d - N_d^+$$

占据施主能级的电子浓度

受主杂质电离

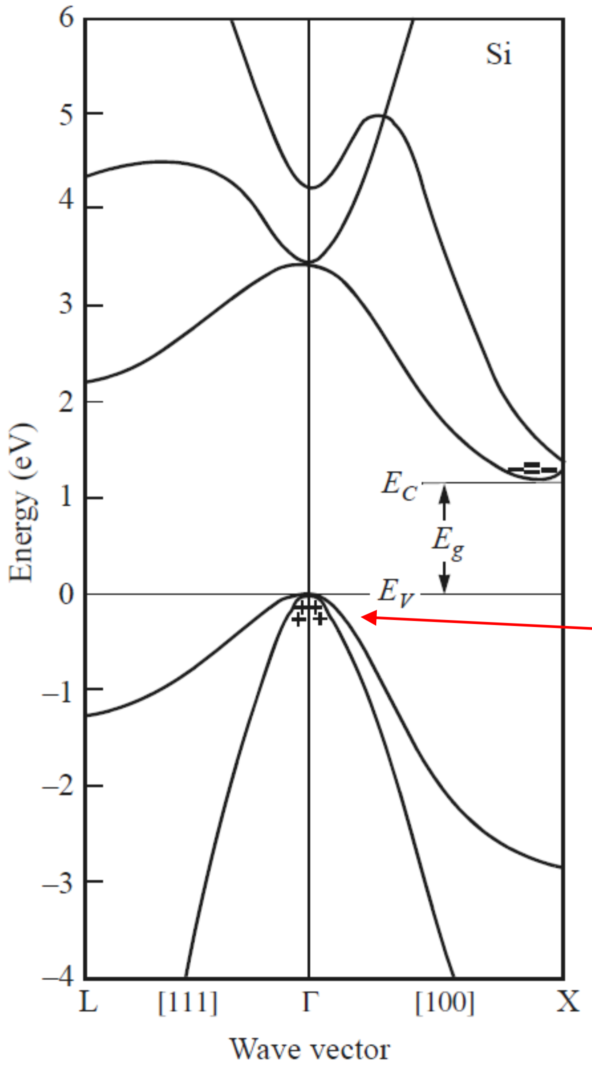
$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\exp\left(\frac{E_F - E_a}{kT}\right)}$$

受主能级简并因子

$$p_a = \frac{1}{1 + \frac{1}{4}\exp\left(\frac{E_F - E_a}{kT}\right)} N_a$$

$$p_a = N_a - N_a^-$$

占据受主能级的空穴浓度



尼曼书62页图不完全，请参考刘恩科书23页

硅的能带结构，k=0处存在两个简并的价带，杂质能级也两重简并（g=2*2=4）

未电离率

$$n_d = \frac{1}{1+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)} N_d$$

$$\approx 2\exp\left(\frac{E_F - E_d}{kT}\right) N_d$$

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

$$\frac{n_d}{n_d + n_0} = \frac{1}{1+\boxed{\frac{N_c}{2N_d}}\exp\left(-\frac{E_c - E_d}{kT}\right)}$$

未电离率-习题

例 4.7 试计算 $T=300$ K 时施主能级中的电子数占据电子总数的比例。硅中的掺杂浓度为 $N_d=10^{16}$ cm^{-3}。

■ **解**

利用式(4.55)，得

$$\frac{n_d}{n_0+n_d}=\frac{1}{1+\dfrac{2.8\times10^{19}}{2(10^{16})}\exp\left(\dfrac{-0.045}{0.0259}\right)}=0.0041=0.41\%$$

■ **说明**

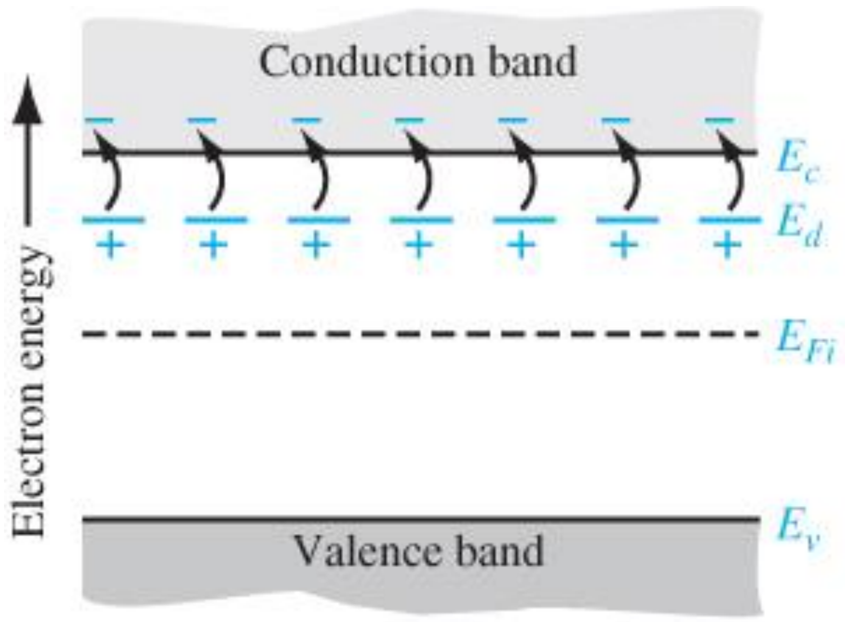
这个例题说明，与导带相比，施主能级中只有非常少的电子。施主能级中的电子基本上都进入了导带，仅有约 0.4% 的施主能级包含电子，因此施主状态称为完全电离。

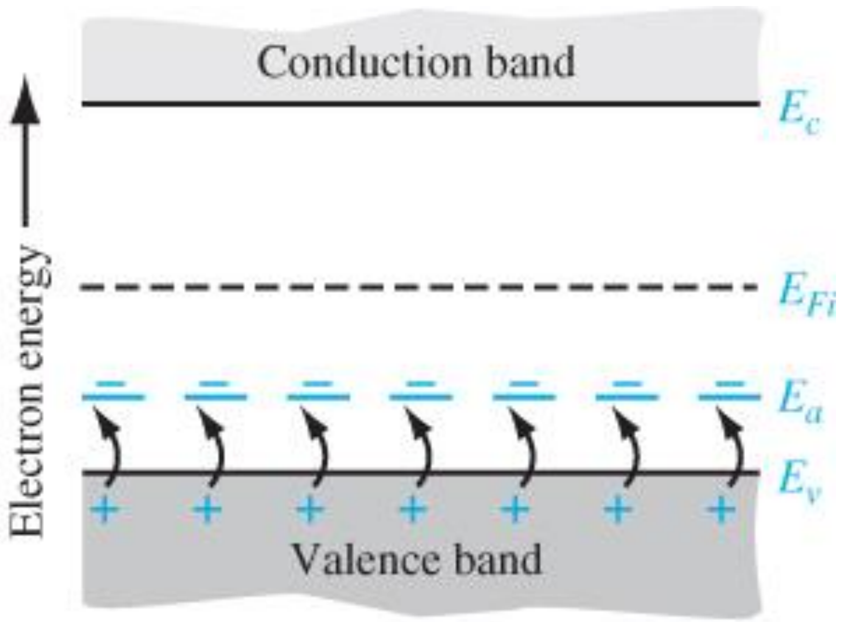
$$\frac{n_d}{n_d+n_0}=\frac{1}{1+\dfrac{N_c}{2N_d}\exp\left(-\dfrac{E_c-E_d}{kT}\right)}$$

常温下，可认为杂质原子完全电离

杂质电离（ionization）

室温条件下：





杂质完全电离

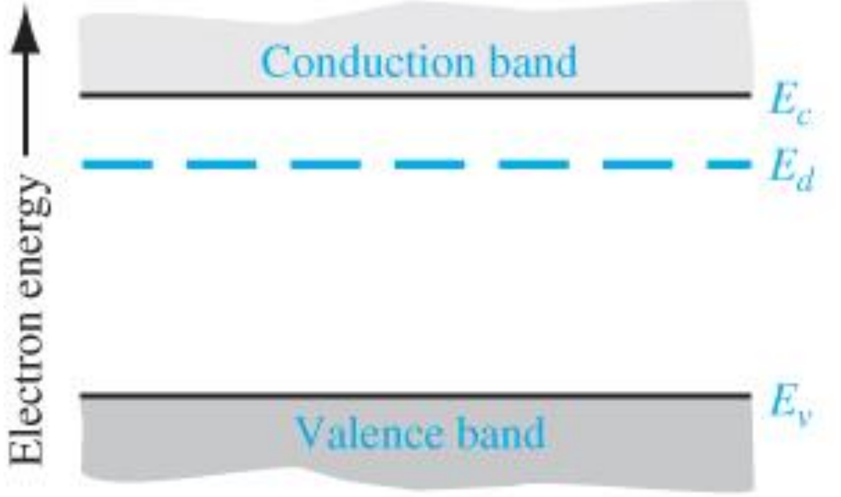
杂质电离

绝对零度时，所有电子都处于最低的可能能量状态；

n型半导体，每个施主能级都必须含有一个电子；

所以：$n_d=N_d$

$$n_d = \frac{1}{1+\frac{1}{2}\exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)} N_d$$

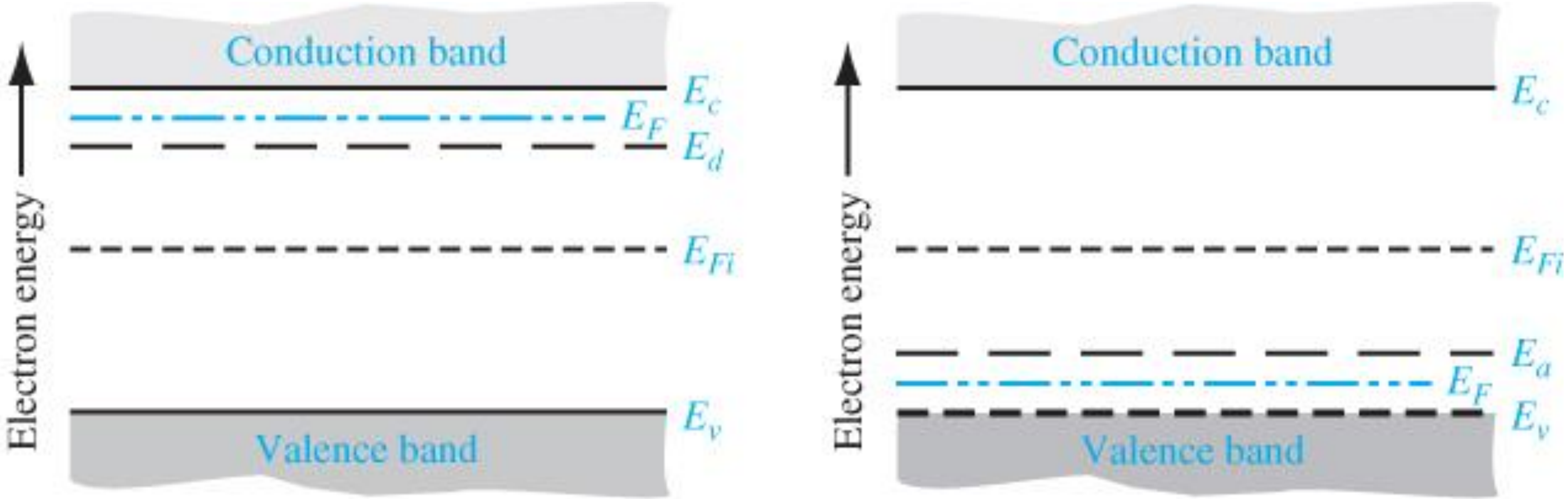


$\Rightarrow$ $\exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)=0$ T=0K

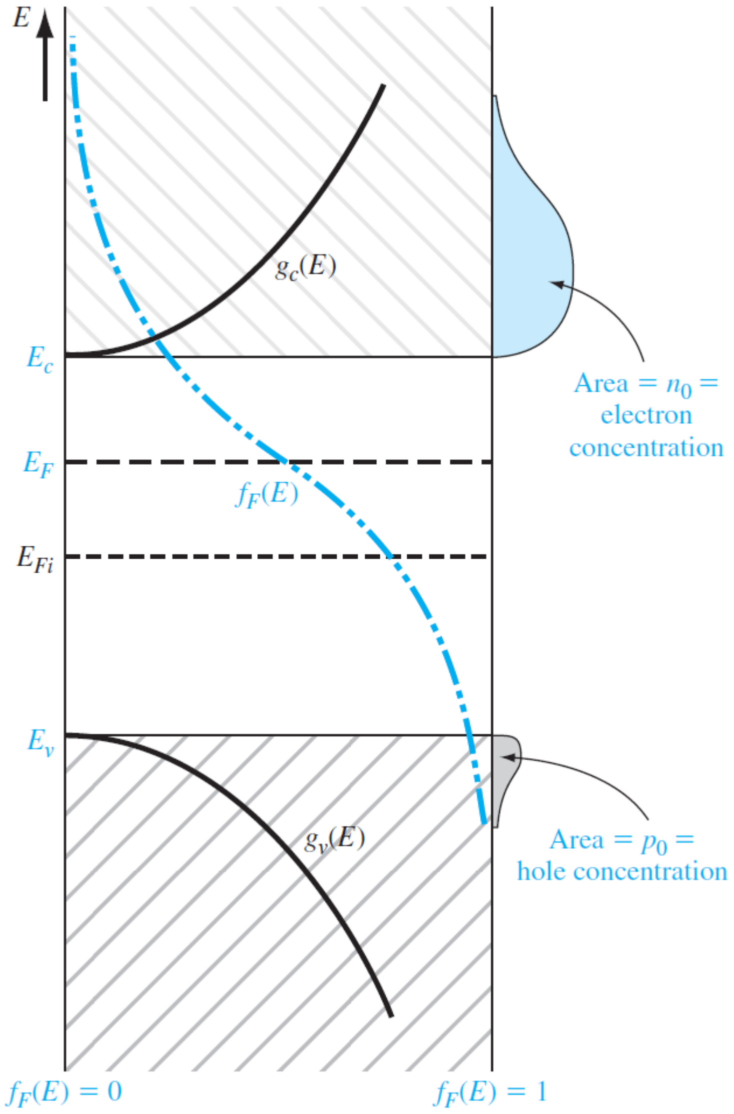
$\Rightarrow$ $\frac{E_d - E_F}{kT} \to -\infty$ $\Rightarrow$ $E_F > E_d$

杂质电离

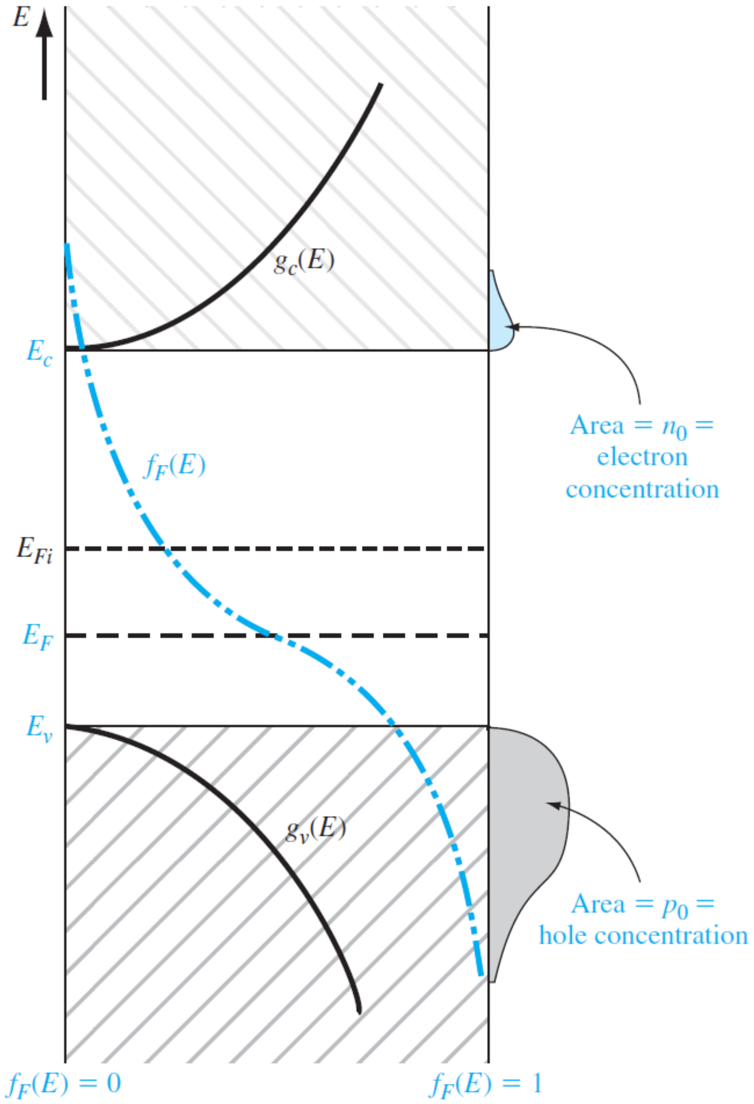
绝对零度时，费米能级E_F位置高于施主能级E_d：



非本征半导体的热平衡载流子浓度



费米能级高于本征费米能级



费米能级低于本征费米能级

热平衡状态下电子
和空穴浓度表达式：

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

$$p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{kT}\right)$$

本征和非本征半导体都适用！

非本征半导体的热平衡载流子浓度-习题

例 4.5 计算给定费米能级的热平衡电子浓度和空穴浓度。

假设 $T=300$ K 时，硅的参数为 $N_c=2.8\times10^{19}$ cm^{-3}，$N_v=1.04\times10^{19}$ cm^{-3}。设费米能级比导带低 0.25 eV。若硅的禁带宽度为 1.12 eV，则费米能级比价带高 0.87 eV。

■ **解**

根据式(4.11)有

$$n_0=(2.8\times10^{19})\exp\left(\frac{-0.25}{0.0259}\right)=1.8\times10^{15}\ \text{cm}^{-3}$$

而根据式(4.19)有

$$p_0=(1.04\times10^{19})\exp\left(\frac{-0.87}{0.0259}\right)=2.7\times10^{4}\ \text{cm}^{-3}$$

费米能级是一把尺子，它是杂质浓度的函数，费米能级的很小变化能使载流子浓度变化若干个数量级！

非本征半导体的特性

$$n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right)$$

$$= N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{Fi} + E_{Fi} - E_F}{kT}\right)$$

$$= N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_{Fi}}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right)$$

$$= n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right)$$

请推导空穴的表达式！

$$p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right)$$

n_0和p_0的乘积

$$n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right) \qquad p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right)$$

$$n_0 p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right) \cdot n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right)$$

$$= n_i^2$$

$$\boxed{n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)}$$

费米能级的位置

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \qquad p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{kT}\right)$$

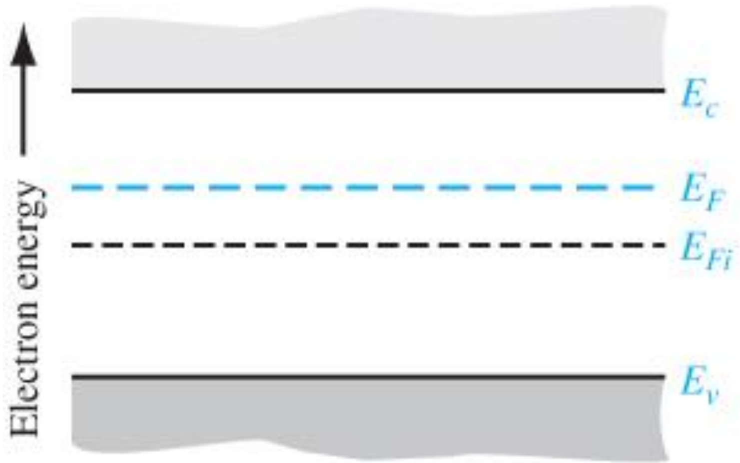
$$\boxed{E_c - E_F = kT\ln\left(\frac{N_c}{n_0}\right) \qquad E_F - E_v = kT\ln\left(\frac{N_v}{p_0}\right)}$$

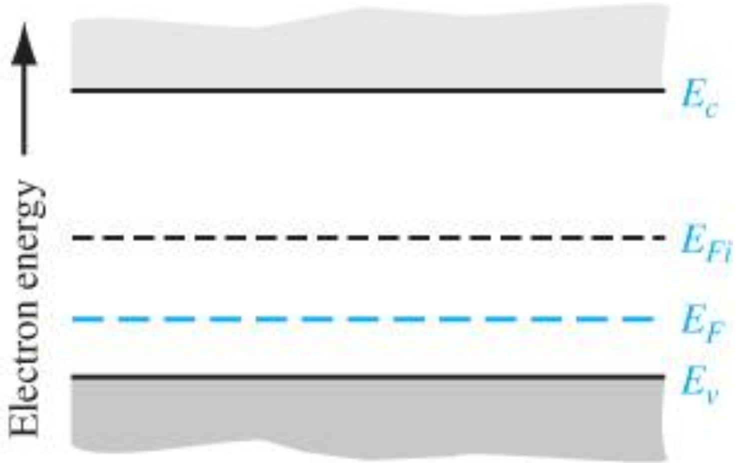
$$E_c - E_F = kT\ln\left(\frac{N_c}{N_d}\right) \qquad E_F - E_v = kT\ln\left(\frac{N_v}{N_a}\right)$$

费米能级的位置

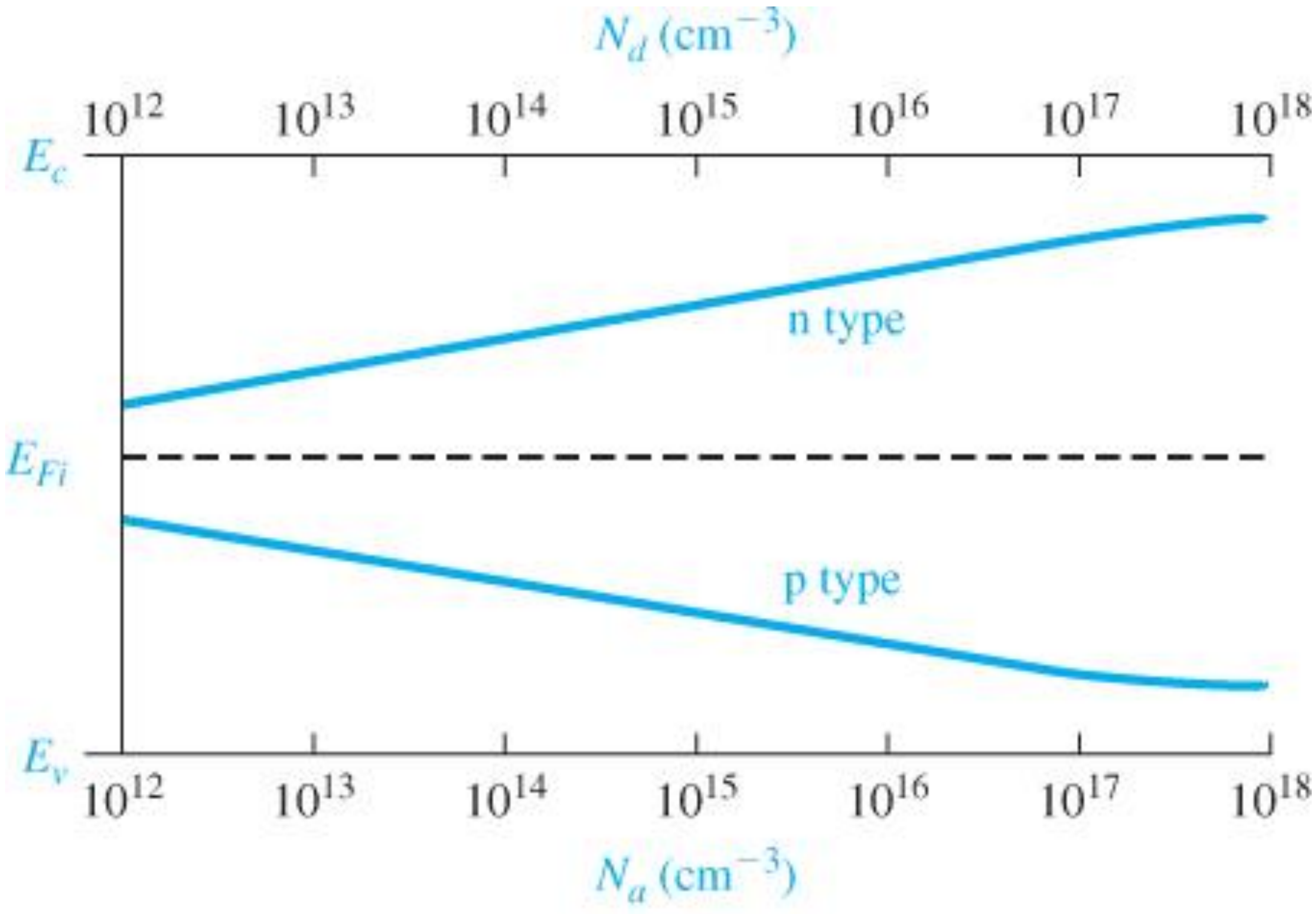
$$n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right) \qquad p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right)$$

$$E_F - E_{Fi} = kT \ln\left(\frac{n_0}{n_i}\right) \qquad E_{Fi} - E_F = kT \ln\left(\frac{p_0}{n_i}\right)$$





费米能级随掺杂浓度的变化

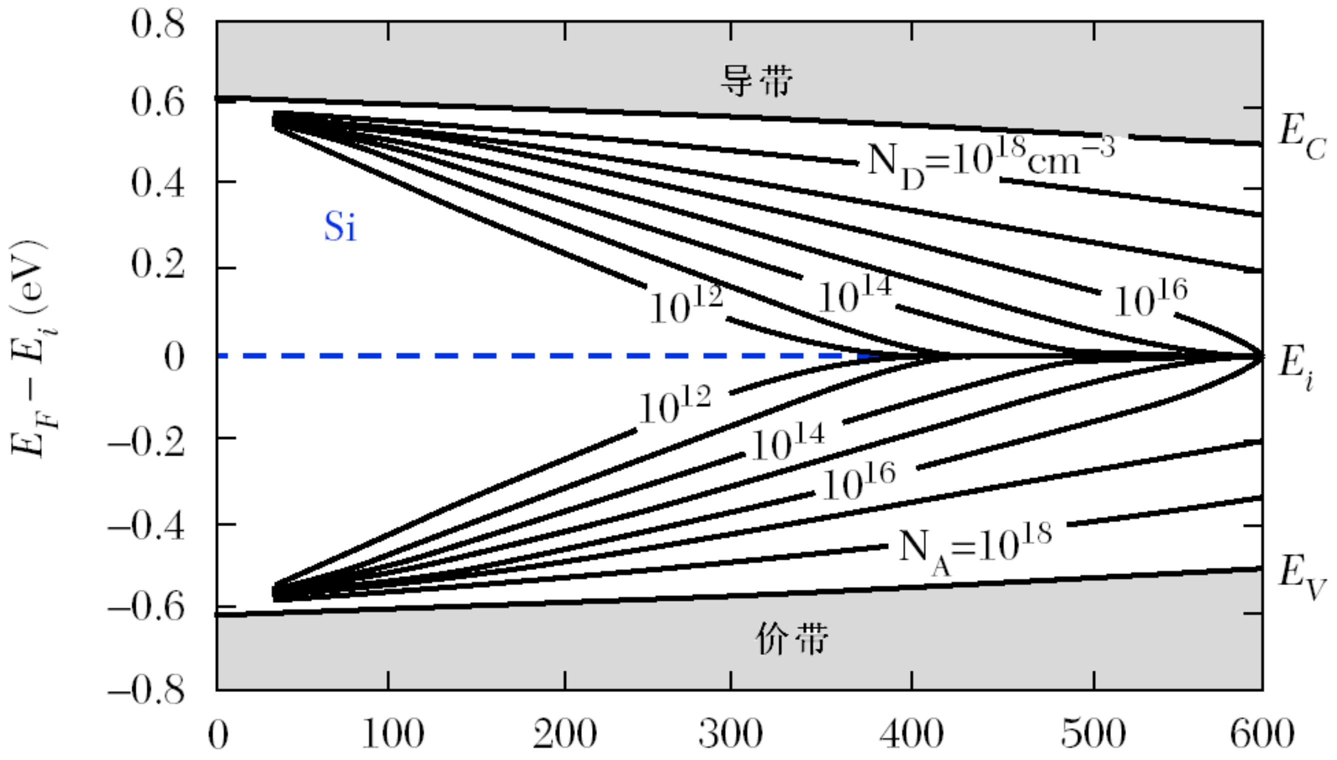


在玻尔兹曼近似成立的前提下推导得出！

费米能级随温度的变化

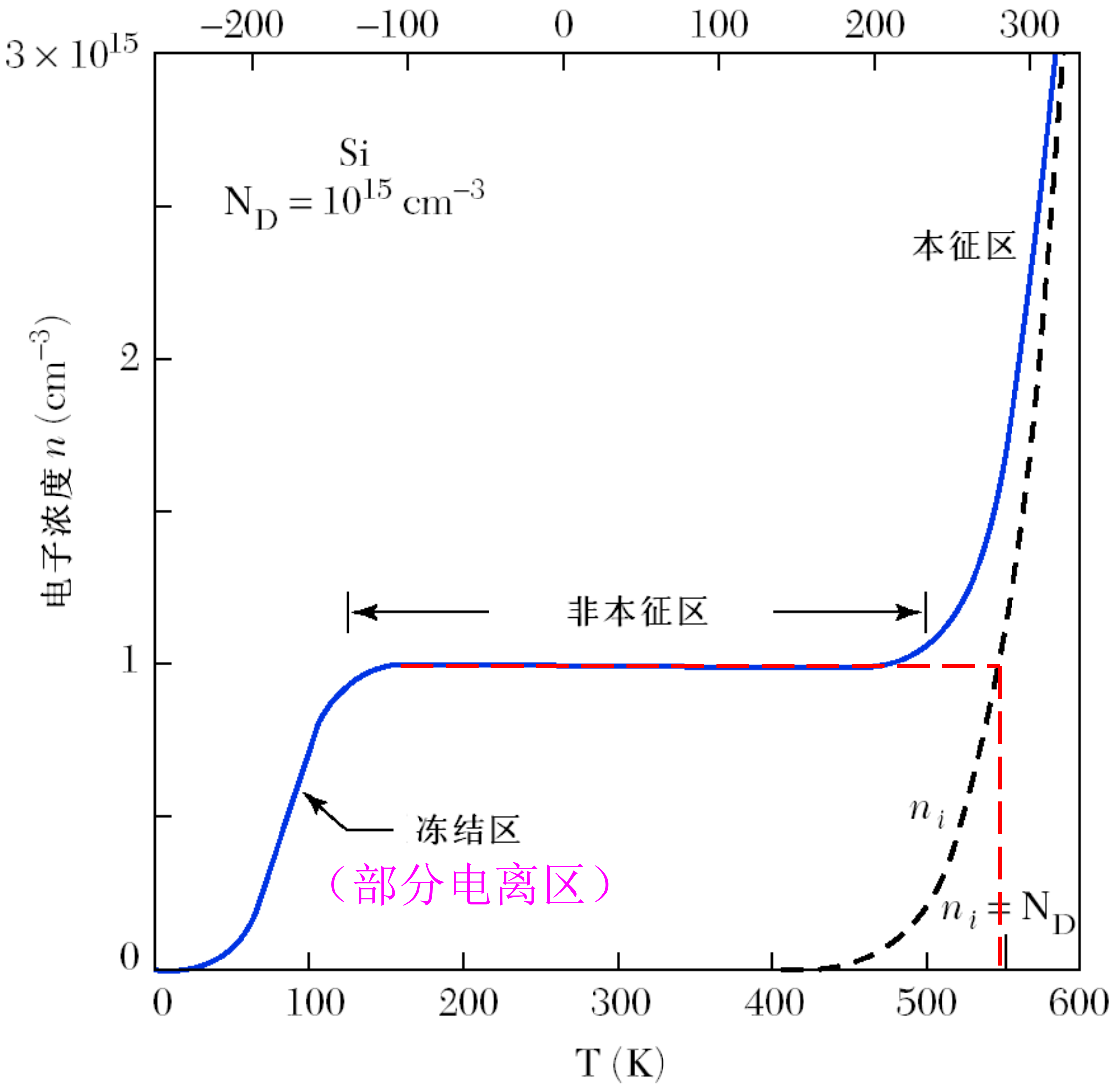
$$E_F - E_{Fi} = kT\ln\left(\frac{n_0}{n_i}\right)$$

$$E_{Fi} - E_F = kT\ln\left(\frac{p_0}{n_i}\right)$$



$$n_i = \sqrt{N_c N_v}\exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right)$$

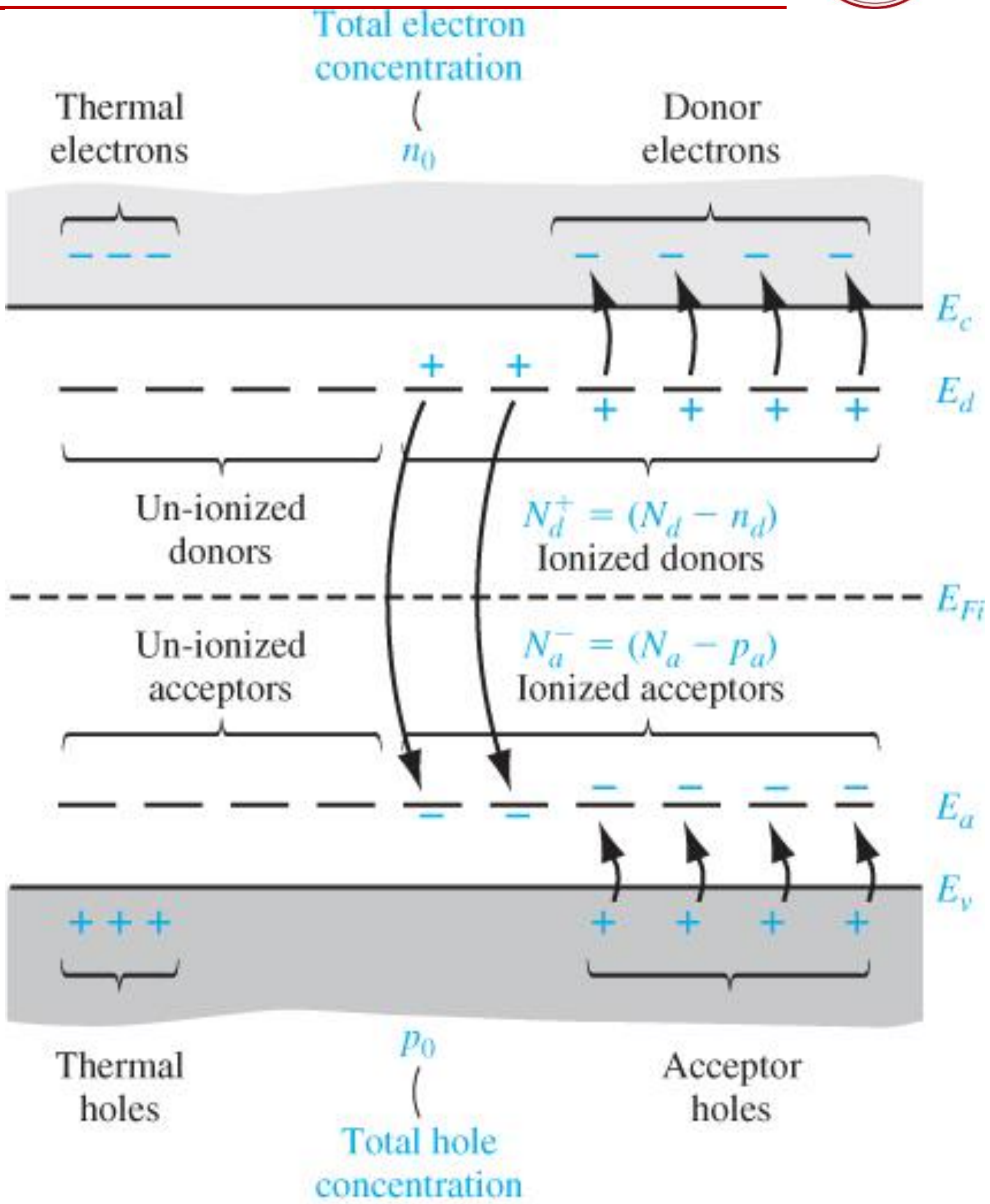
电子浓度随温度的关系



-200
-100
0
100
200
300
3 × 10^15
2
1
0
Si
N_D = 10^15 cm^-3
本征区
非本征区
冻结区
（部分电离区）
n_i
n_i = N_D
电子浓度 n (cm^-3)
0
100
200
300
400
500
600
T (K)

补偿半导体

补偿半导体：同一区域内同时含有施主和受主杂质的半导体



补偿半导体

假设全电离： $n_0 + N_a = p_0 + N_d$

热平衡状态下： $n_0 + N_a = \frac{n_i^2}{n_0} + N_d$

$$n_0^2 + (N_a - N_d)n_0 - n_i^2 = 0$$

$$\boxed{n_0 = \frac{N_d - N_a}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d - N_a}{2}\right)^2 + n_i^2}}$$

补偿半导体

$$n_0 = \frac{N_d - N_a}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d - N_a}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

$\approx N_d\text{-}N_a$ （室温下）

$$p_0 = \frac{N_a - N_d}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_a - N_d}{2}\right)^2 + n_i^2}$$

$\approx N_a\text{-}N_d$ （室温下）

例 4.9 试计算给定掺杂浓度条件下，热平衡电子的浓度和空穴的浓度。假设 $T=300$ K，(a)n 型硅掺杂浓度为 $N_d=10^{16}$ cm^{-3} 和 $N_a=0$；(b)$N_d=5\times10^{15}$ cm^{-3} 和 $N_a=2\times10^{15}$ cm^{-3}。

本征载流子浓度假定为 $n_i=1.5\times10^{10}$ cm^{-3}。

■ **解**

(a)根据式(4.60)，多数载流子电子浓度为

$$n_0=\frac{10^{16}}{2}+\sqrt{\left(\frac{10^{16}}{2}\right)^2+(1.5\times10^{10})^2}\approx10^{16}\,\mathrm{cm}^{-3}$$

少数载流子空穴浓度为

$$p_0=\frac{n_i^2}{n_0}=\frac{(1.5\times10^{10})^2}{10^{16}}=2.25\times10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$$

(b)根据式(4.60)，多数载流子电子浓度为

$$n_0=\frac{5\times10^{15}-2\times10^{15}}{2}+\sqrt{\left(\frac{5\times10^{15}-2\times10^{15}}{2}\right)^2+(1.5\times10^{10})^2}\approx3\times10^{15}\,\mathrm{cm}^{-3}$$

少数载流子空穴浓度为

$$p_0=\frac{n_i^2}{n_0}=\frac{(1.5\times10^{10})^2}{3\times10^{15}}=7.5\times10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$$

当载流子浓度(掺杂浓度)高于导带或价带有效态密度时:

$$n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \qquad p_0 = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{kT}\right)$$

➡ E_F高于E_c或低于E_v

$$n_0 \approx \int_{E_c}^{\infty} g_c(E)\, f_F(E)\, dE \quad , \quad g_c(E) = \frac{4\pi (2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\sqrt{E - E_c}$$

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \approx \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right)$$

费米-狄拉克积分计算

如果波尔兹曼近似有效：

$$n_0 = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{E - E_c}\ \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right) dE$$

如果波尔兹曼近似失效：

$$n_0 = \frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_{E_c}^{+\infty} \sqrt{E - E_c}\, \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} dE$$

费米-狄拉克积分计算

$$n_0=\frac{4\pi(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\int_{E_c}^{+\infty}\sqrt{E-E_c}\,\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{kT}\right)}dE$$

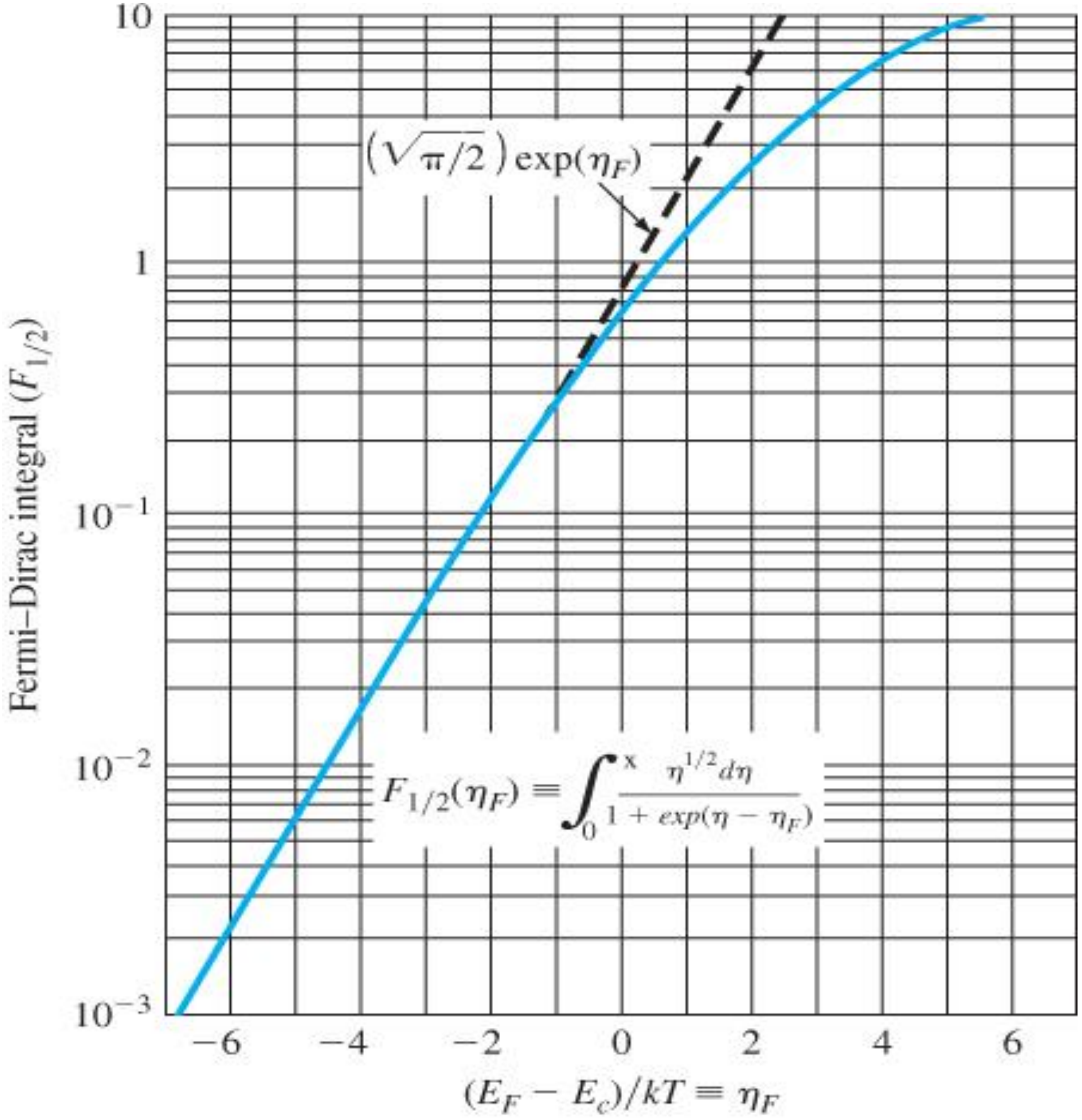
$$n_0=\frac{4\pi(2m_n^*kT)^{\frac{3}{2}}}{h^3}\boxed{\int_0^{+\infty}\frac{\eta^{\frac{1}{2}}d\eta}{1+\exp(\eta-\eta_F)}}$$

$$\eta=\frac{E-E_c}{kT}$$

$$\eta_F=\frac{E_F-E_c}{kT}$$

$$F_{1/2}(\eta_F)=\int_0^{+\infty}\frac{\eta^{\frac{1}{2}}d\eta}{1+\exp(\eta-\eta_F)}:$$ 费米-狄拉克积分

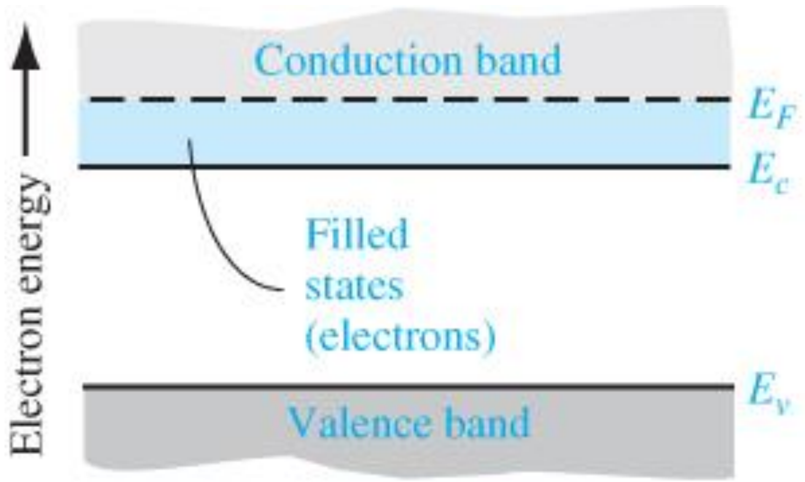
费米-狄拉克积分计算

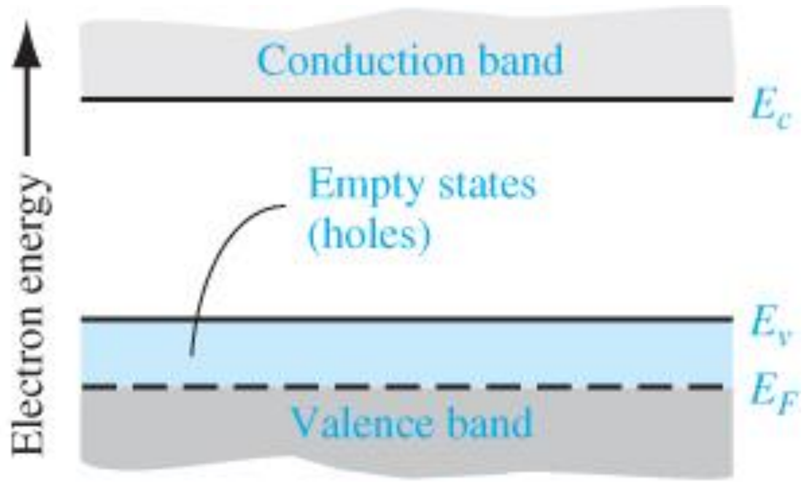


10
1
10^{-1}
10^{-2}
10^{-3}
Fermi–Dirac integral ($F_{1/2}$)
$(\sqrt{\pi}/2)\exp(\eta_F)$
$F_{1/2}(\eta_F) = \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2}d\eta}{1+exp(\eta-\eta_F)}$
−6
−4
−2
0
2
4
6
$(E_F - E_c)/kT \equiv \eta_F$

简并（degenerate）半导体

特点：1）载流子浓度高，导电率接近于金属





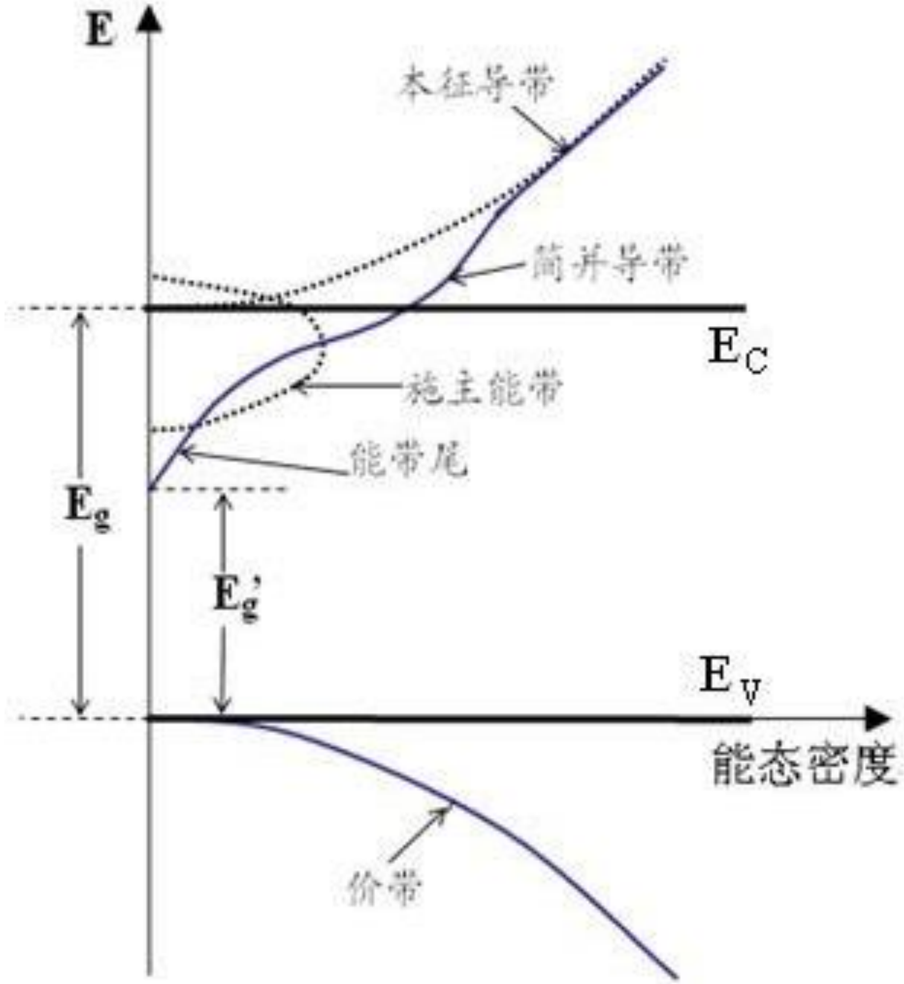
非本征半导体的特性

特点：2）禁带宽度变窄效应；

$$\Delta E_g = 22\left(\frac{N}{10^{18}}\right)^{\frac{1}{2}} \ \mathbf{meV}$$

$$N \le 10^{18}\,cm^{-3}, \Delta E_g \le 0.022eV;$$

$$N \ge N_c = 2.86\times 10^{19}\,cm^{-3}, \Delta E_g \ge 0.12eV;$$



热平衡载流子浓度小结

1) 状态密度、导带态密度$g_c(E)$、导带有效态密度N_c
2) 导带有效态密度N_c和温度及有效质量m^*_n的关系
3) 费米狄拉克分布、玻尔兹曼近似($E-E_F>3kT$)
4) 热平衡
5) 热平衡载流子浓度n_0, p_0
   - Γ(3/2)函数
6) 本征费米能级E_{Fi}的位置
7) 本征载流子浓度n_i
8) 本征半导体、非本征半导体
9) 离化能（E_a, E_d）
10) 热平衡载流子浓度n_0, p_0的两种表达式（E_F相对于E_C和E_{Fi}的位置）
11) 费米能级随掺杂浓度及温度的变化
12) 离化率（常温、低温）、简并因子g
13) 电子浓度随温度的变化（部分电离区、非本征区、本征区）
14) 补偿半导体
15) 简并半导体
   - 载流子浓度高，导电率接近金属
   - 禁带宽度变窄效应（施主能级分裂为能带与导带底交叠）

$$n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{KT}\right)$$

$$p = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{KT}\right)$$

$$n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right)$$

$$p_0 = n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}\right)$$