

固体半导体物理

5*6 简答题； 2 *10作图题； 40~50计算题； 6 ~8分析说明题

向量运算法则： $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C})\vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B})\vec{C}$

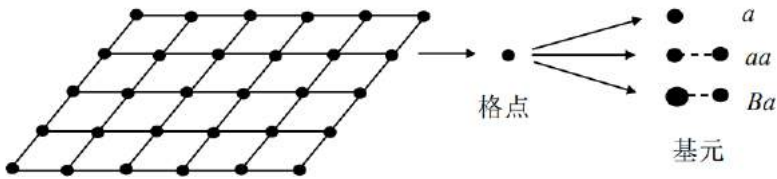
记住： $K_B T = 0.026\text{eV}$ 室温(300K)的情况

晶体结构

固体的分类： 晶体， 非晶体， 准晶体

晶体	非晶体	准晶体
原子周期性排列(长程有序) 晶体与非晶体之间可相互转化	原子的排列没有明确的周期性(短程有序) (玻璃， 橡胶， 塑料)	不具有平移对称性， 却有旋转对称性

晶格 = 格点 + 基元（基元a为简单格子， aa,Ba为复式格子）



格点	基元	空间点阵
将原子或原子集团的中心抽象为周期性排列的几何点 一种数学抽象	格点所代表的 原子或者原子集团 晶体的基本结构单元	格点的总体(14种) 14种布拉菲格子

简单格子(或称为 布拉菲格子)	复式格子
仅由一种原子组成， 基元中仅包含一个原子	基元包含两个或两个以上原子

如果晶体由一种原子组成， 且基元中仅包含一个原子， 则形成的晶格叫做布拉菲格子。

布拉菲格子 + 基元 = 晶体结构

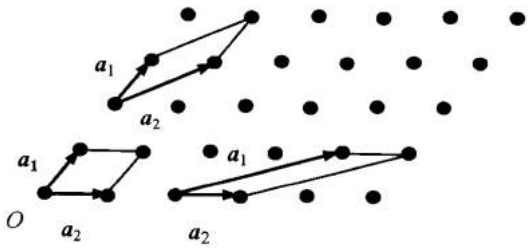
复式格子的特点：

- (1) 每一种等价的原子形成一个布拉菲格子
- (2) 不同等价原子形成的布拉菲格子是相同的
- (3) 复式格子就是由各等价原子组成的布拉菲格子套构而成的。

复式格子中找到布拉菲格子方法： 将周围相同的原子找出

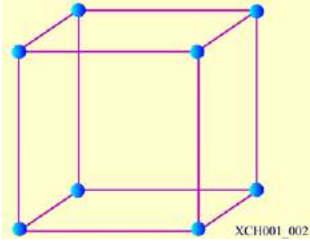
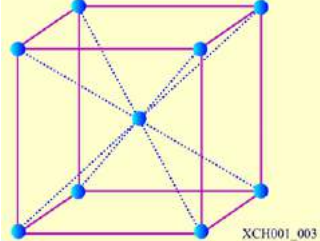
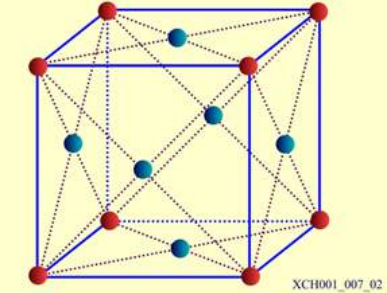
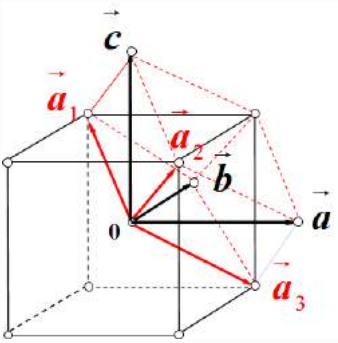
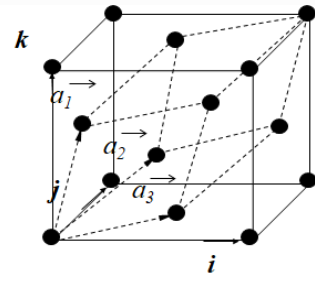
原胞	晶胞
由原胞基矢所构成的 体积最小 的周期性平行六面体单元	同时考虑晶格的周期性和对称性， 选取的重复单元
原胞基矢： $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 基矢选择不唯一， 不同选取得到的体积相同	晶胞基矢： $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$
只有一个格点（最主要的区别）	包含1个或1个以上的格点
$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$	$\Omega = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$
原胞格点必是顶点， 晶胞不一定	晶胞内含n个格点， 则其体积为原胞的n倍

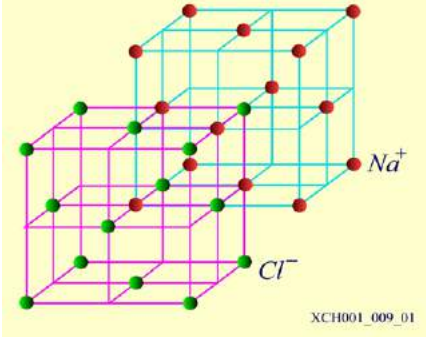
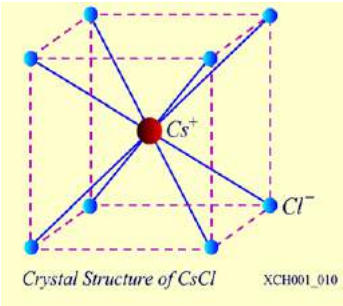
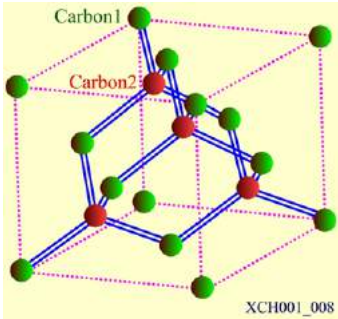
下图为二维晶格原胞的几种选取：



威格纳-赛兹原胞：只有一个格点，格点在多面体的中心，既是体积最小的重复单元，又具有布拉菲格子的全部宏观对称性；
是布拉菲格子最小的对称重复单元，因此也可以称为对称原胞；

常见的晶体结构

简单立方	体心立方	面心立方
		
晶胞只包含1个格点，晶胞等同于原胞	晶胞包含2个格点，晶胞体积相当于原胞两倍	包含4个格点，晶胞体积相当于原胞的四倍
$\begin{cases} \vec{a}_1 = \vec{i}a \\ \vec{a}_2 = \vec{j}a \\ \vec{a}_3 = \vec{k}a \end{cases}$	$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \end{cases}$ 体心到三个近邻顶点 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{1}{2}a^3$	$\begin{cases} \vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k} + \vec{i}) \\ \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j}) \end{cases}$ 到三个近邻面心 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{1}{4}a^3$
		

氯化钠结构	氯化铯结构	金刚石结构(Si、Ge)
		
两面心立方沿基矢方向位移1/2套构而成 配位数为6	两简单立方沿体对角线位移 1/2套构而成 配位数为8	两面心立方沿体对角线位移1/4套构而成 配位数为4
	CsBr、TiCl	闪锌矿ZnS结构类似 但是两个面心立方的元素不同

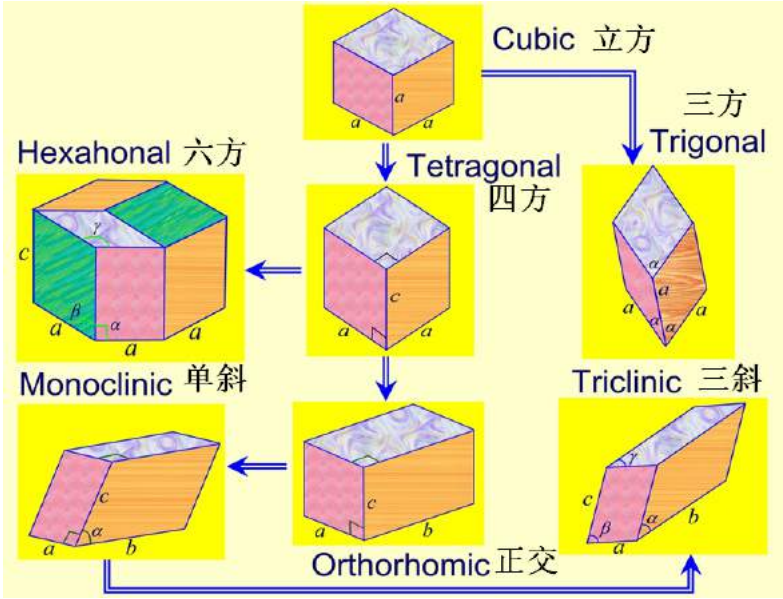
原子密堆积有两种：（配位数均为12，为最大配位数）

- 立方密堆积→ABCABC.....→布拉菲格子(面心立方)
- 六方密堆积→ABABAB.....→两个简单六方套构的复式格子

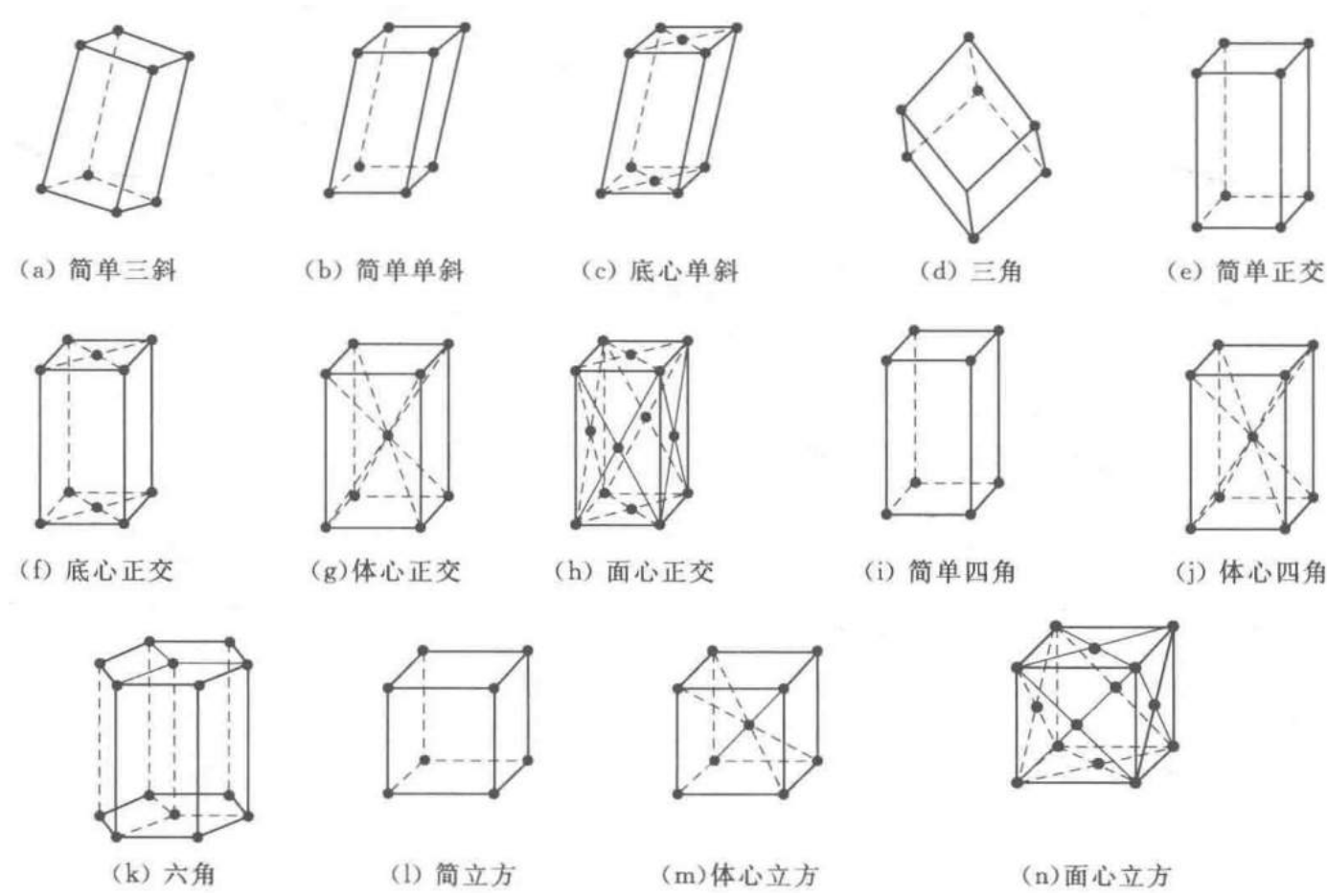
晶系 布拉菲晶胞

7大晶系，14种布拉菲格子

晶体划分：晶格常数 a 、 b 、 c ，夹角 α 、 β 、 γ ；



晶系	晶胞特征	布拉菲晶胞
立方晶系	$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单立方 体心立方 面心立方
三方晶系	$a = b = c \quad \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	简单三方
四方晶系	$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单四方 体心四方
六方晶系	$a = b \neq c \quad \alpha = \beta = 90^\circ \quad \gamma = 120^\circ$	简单六方
正交晶系	$a \neq b \neq c \quad \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	简单正交 底心正交 体心正交 面心正交
单斜晶系	$a \neq b \neq c \quad \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	简单单斜 底心单斜
三斜晶系	$a \neq b \neq c \quad \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	简单三斜



晶体的对称性

宏观对称要素(5个)：旋转，反映，倒反，象转，旋转-倒反 *微观对称要素：平移对称操作以及转动和平移结合的对称操作

旋转 C_n ：当晶体绕其某轴旋转 $\theta = 2\pi/n$ 后，晶体能自身重合的对称操作 $n = 1, 2, 3, 4, 6$

n	2	3	4	6
符号				

反映 σ	倒反 i	象转 S _n	旋转-倒反 \bar{n}
镜面对称 水平镜面 σ_h 垂直镜面 σ_v	中心点对称	旋转+反映 $S_n = C_n\sigma_h = \sigma_h C_n$	$\bar{n} = C_n i$ $\bar{1} = S_2 = i \quad \bar{2} = S_1 = \sigma$ $\bar{3} = S_6 \quad \bar{4} = S_4 \quad \bar{6} = S_3$

8个独立的宏观对称要素： C_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 、 C_6 、 σ 、i、 S_4

理论上晶体有32个点群，230个空间群

晶向指数[] + 晶面指数()

参考坐标——原胞基矢

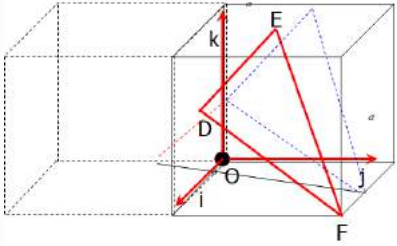
以下两行为拓展，考试不要求考虑：

密勒指数 借助 **晶胞基矢** a, b, c 为单位矢量，一般用一组互质的 h, k, l 表征晶面；

晶面指数 借助 **原胞基矢** a_1, a_2, a_3 为单位矢量，一般用一组互质的 h_1, h_2, h_3 表征晶面

晶列指数确定：以某个格点为原点, 以 \vec{a} 、 \vec{b} 、 \vec{c} 为原胞的 3 个基矢、则晶格中任一 各点的位矢可以表示为: $\vec{R}_l = m'\vec{a} + n'\vec{b} + p'\vec{c}$, 将 m' 、 n' 、 p' 化为互质的整数 m、n、p, 求得晶列指数 [mnp], 晶列指数可正、可负、可为零。

晶面指数确定：(1)找出晶面在三基矢方向的截距；(2)化截距的倒数之比为互质整数之比；(3) ($h_1 \ h_2 \ h_3$) 晶面指数

晶向指数[]	晶面指数()
[m n p] 代表一系列平行的晶列（mnp互质化）	(h k l)代表着一系列互相平行方向一致的晶面
m+n+p表示原子在该方向的密集程度 晶向指数大的晶向上原子密度小，晶列间距小	晶面指数小的晶面上原子密度大，晶面间距大 解理面 ——晶面指数小的晶面
已知晶向→晶向指数：求出向量→互质化 已知晶向指数→晶向：最大数字归一化→得到向量	已知晶面→晶面指数：求截距→取倒数→互质化 晶面指数→晶面：取到数→取出对应截距点→绘面
<div> <div> <div>1. OA</div> <div> $\vec{OA} = 0.5\vec{i} + \vec{j} + \vec{k} \Rightarrow (0.5, 1, 1) \Rightarrow [122]$ </div> </div> <div> <div>2. BC</div> <div> $\vec{OB} = \vec{j} + \vec{k} \Rightarrow \vec{BC} = \vec{OC} - \vec{OB} = \vec{i} - \vec{j} \Rightarrow [\bar{1}10]$ </div> </div> <div> <div>3. BD</div> <div> $\vec{OB} = \vec{j} + \vec{k}$ $\vec{OD} = \vec{i}$ $\Rightarrow \vec{BD} = \vec{OD} - \vec{OB} = \vec{i} - \vec{j} - \vec{k} \Rightarrow [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ </div> </div> </div> <div> 直接画出通过原点的晶列 1. [1 2 3] 构建OE方向 $OE = \frac{1}{3}\vec{i} + \frac{2}{3}\vec{j} + \vec{k} \Rightarrow [123]$ 2. [2 $\bar{1}$ 2] 构建OF方向 $OF = \vec{i} - \frac{1}{2}\vec{j} + \vec{k} \Rightarrow [2\bar{1}2]$ </div>	 <div> 截距：1/6、-1/2、1/2 倒数：6、-2、2 晶面指数（311） </div>
晶向族：晶体中因对称关系而等同的各组晶向	晶面族{ h k l }：晶体中因对称关系而等同的各组晶面
<1 0 0> 6个($2C_3^1$); <1 1 0> 12个($2 \times 2C_3^2$); <1 1 1> 8个($2 \times 2 \times 2$)	{100}: 6个; {110}: 6个; {111}: 4个

倒格子

和正格子类似，倒格子量纲是[m^{-1}] 与波矢的量纲相同

倒格子是一系列具有周期性的格点构成的格子；倒格子基矢：；

倒格子基矢 \vec{b}_1 、 \vec{b}_2 、 \vec{b}_3 :

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \end{cases} \quad \vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = \begin{cases} 2\pi & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

计算过程：1.建立一个正交坐标系；2.确立正格子的原胞基矢；3. 推导出倒格子原胞基矢；

二维正方格子：

正方格子的
正格子基矢

$$\begin{cases} \vec{a}_1 = a\vec{i} \\ \vec{a}_2 = a\vec{j} \end{cases}$$

设其倒格子
基矢如下

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = x_1\vec{i} + x_2\vec{j} \\ \vec{b}_2 = x_3\vec{i} + x_4\vec{j} \end{cases}$$

$$\vec{b}_1 \cdot \vec{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$$

$$\begin{cases} \vec{a}_1\vec{b}_1 = ax_1 = 2\pi \\ \vec{a}_1\vec{b}_2 = ax_3 = 0 \\ \vec{a}_2\vec{b}_1 = ax_2 = 0 \\ \vec{a}_2\vec{b}_2 = ax_4 = 2\pi \end{cases}$$

求得倒格子
基矢如下

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{j} \end{cases}$$

常见**立方晶系的倒格子**：（证明）

$$\Omega = \frac{a^3}{2}$$

体心立方正格子基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

体心立方的倒格子原胞为一面心立方

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{\pi}{a} \begin{vmatrix} i & j & k \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(\vec{j} + \vec{k})$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{\pi}{a} \begin{vmatrix} i & j & k \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(\vec{k} + \vec{i})$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{\pi}{a} \begin{vmatrix} i & j & k \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j})$$

$$\Omega = \frac{a^3}{4}$$

面心立方正格子基矢

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k})$$
$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\vec{k} + \vec{i})$$
$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j})$$

面心立方的倒格子原胞为一体心立方

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{2\pi}{a} \begin{vmatrix} i & j & k \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k})$$
$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) = \frac{2\pi}{a} \begin{vmatrix} i & j & k \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k})$$
$$\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{2\pi}{a} \begin{vmatrix} i & j & k \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k})$$

面心立方晶格常数为 a ，其倒格子的晶格常数为 $4\pi/a$

倒格子的性质：

① $\Omega^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$ Ω^* 、 Ω 分别为倒、正格子的原胞体积

② 倒格矢 $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ 和晶面 $(h_1h_2h_3)$ 正交

③ $d_{h_1h_2h_3} = \frac{2\pi}{|\vec{K}_h|}$ \vec{K}_h 的长度是晶面 (h_1, h_2, h_3) 晶面间距的 $d_{h_1h_2h_3}$ 的 2π 倍

④ $\vec{K}_h \cdot \vec{R}_l = 2\pi S$ 倒格矢与正格矢的点乘等于 2π 的整数倍

⑤ 正倒格子之间互为傅里叶变换

布里渊区

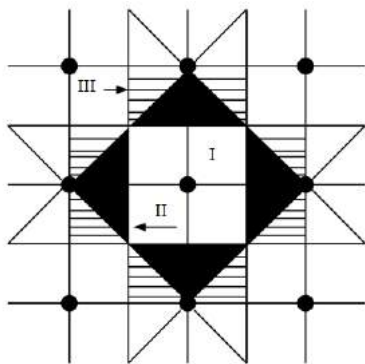
求解布里渊区的步骤：

1. 确定正格子原胞基矢
2. 利用公式求出倒格子原胞基矢
3. 利用画图法或者边界条件公式求出布里渊区边界

画图法：以某一个倒格点为原点，从原点出发作所有倒格点的位置矢量 \vec{K}_h 的**垂直平分面**，这些平面把倒格子空间划分成一些区域

第 n 布区穿过 $n - 1$ 个垂直平分面

二维：中心格点和最近的四个格点做垂分得第一布区，和次近邻的四个格点做垂分得第二布区



特点：

- 每个布区的体积相等，且等于一个倒格子原胞体积; Ω^*
- 每个布区经过适当平移可与另一个布区重合;
- 每个布区都关于原点中心对称

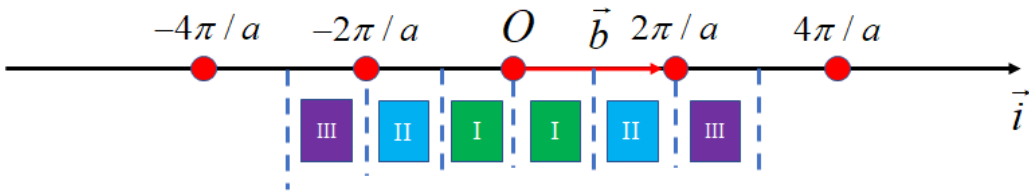
布里渊区边界方程: $\vec{k} \cdot \vec{K}_h = \frac{1}{2} |\vec{K}_h|^2$ \vec{k} 为布里渊边界上的某点的波矢坐标，为待求量

二维为例: $\vec{k} = k_x\vec{i} + k_y\vec{j}$, $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2$

晶格常数为 a 的一维晶体，晶格基矢 $\vec{a} = a\vec{i}$ ，其倒格子基矢为 $\vec{b} = \frac{2\pi}{a}\vec{i}$ 倒格矢为：

$$\vec{K}_h = h\vec{b} = \frac{2\pi h}{a}\vec{i} \quad (h = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

由原点作最近邻、次近邻等倒格点连线垂直平分线，第一布区 $[-\frac{\pi h}{a}, \frac{\pi h}{a}]$ 第二布区 $[-\frac{2\pi h}{a}, -\frac{\pi h}{a}] [\frac{\pi h}{a}, \frac{2\pi h}{a}]$



晶格常数为a的二维布拉菲格子的布里渊区：

1、正格子基矢： $\begin{cases} \vec{a}_1 = a\vec{i} \\ \vec{a}_2 = a\vec{j} \end{cases}$ 2、倒格子基矢： $\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\vec{i} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}\vec{j} \end{cases}$

3、倒格矢： $\vec{K}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(h_1\vec{i} + h_2\vec{j})$

4、利用边界条件求布区边界：(h1&h2为任意整数)

$$\vec{k} \cdot \vec{K}_h = \frac{1}{2}|\vec{K}_h|^2 \rightarrow k_x h_1 + k_y h_2 = \frac{\pi}{a}(h_1^2 + h_2^2)$$

边界方程

设 $\vec{k} = k_x\vec{i} + k_y\vec{j}$

求第一布区的边界方程 $\rightarrow (h_1, h_2)$ 分别取 (1,0) (-1,0) (0,1) (0,-1) 四组

第一布区边界方程

$$\begin{cases} k_x = \pi/a \\ \text{以及 } k_x = -\pi/a \\ \text{以及 } k_y = \pi/a \\ \text{以及 } k_y = -\pi/a \end{cases}$$

晶格常数为a的面心立方的第一布里渊区

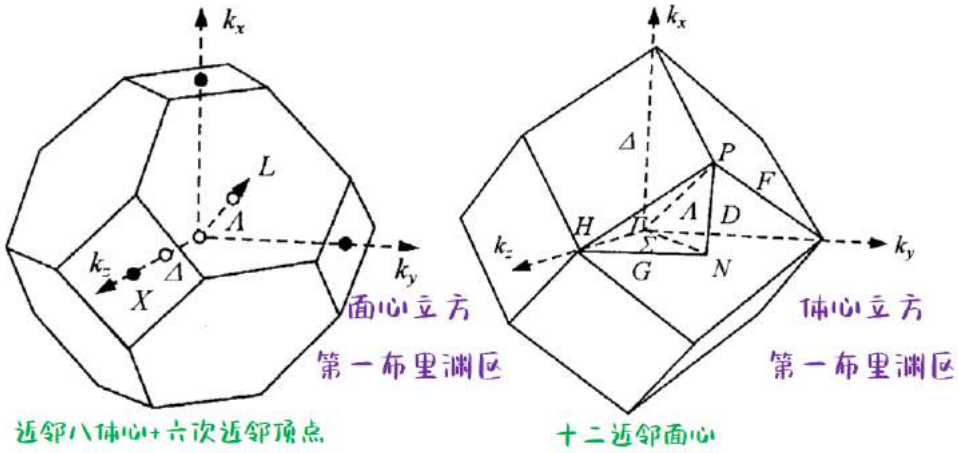
最近邻 (八个体心) 和次近邻 (6个相邻顶点)

$$\vec{K}_h = \frac{2\pi}{a}(\pm i \pm j \pm k)$$
$$\vec{K}_h = \pm \frac{4\pi}{a}i \quad \vec{K}_h = \pm \frac{4\pi}{a}j \quad \vec{K}_h = \pm \frac{4\pi}{a}k$$

晶格常数为a的体心立方的第一布里渊区

面心立方中的最近邻 (十二个面心)

$$\vec{K}_h = \frac{2\pi}{a}(\pm j \pm k)$$
$$\vec{K}_h = \frac{2\pi}{a}(\pm i \pm k) \quad \vec{K}_h = \frac{2\pi}{a}(\pm i \pm j)$$



晶格振动

由于晶体原子间的相互作用，原子的振动不是孤立的，而是以波的形式在晶体中传播，形成格波

一维单原子晶格振动

*推导过程：

将偏离平衡位置后的势能在平衡位置处泰勒展开，高阶略去 简谐近似： $U(a + \delta) = U(a) + \frac{\delta^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_a$

将 $U(a + \delta)$ 对 δ 求偏导： $F = -\frac{\partial U}{\partial \delta} = \left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right)_a \delta = -\beta\delta$ (简谐运动公式 $F = kx$)

运动方程： $\begin{cases} F_1 = -\beta\delta = -\beta(x_n - x_{n-1}) \\ F_2 = -\beta\delta = -\beta(x_n - x_{n+1}) \\ F = F_1 + F_2 \end{cases} \rightarrow m\ddot{x}_n = \beta(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n)$ (相邻两个原子间的作用力)

简谐波的试探解： $x_n = Ae^{i(qna - \omega t)}$ 其中波矢 $q = \frac{2\pi}{\lambda}$, $qa = \frac{2\pi}{\lambda}a$ 为相邻原子相位差, ω 为振动角频率

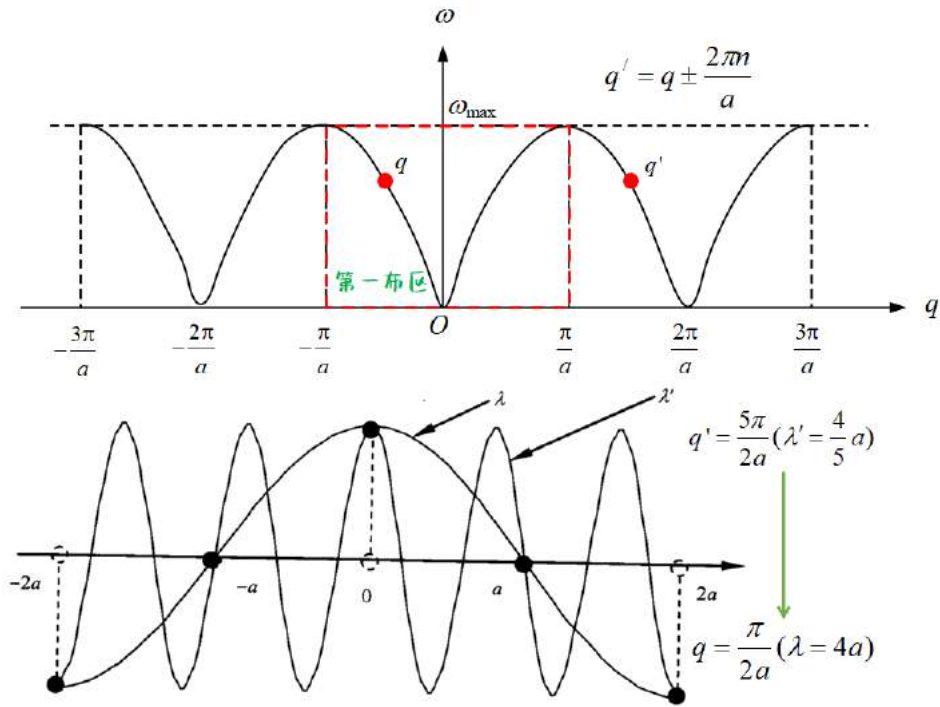
在简谐近似下，如果试探解成立，则晶格振动将以平面波的形式在晶体中传播——格波

格波：晶体内原子热振动表现为各种模式的波

色散方程： $\omega^2 = \frac{4\beta}{m} \sin^2 \left(\frac{1}{2} qa \right)$ $\omega_{\max} = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}$ v_p 相速度; v_g ：群速度

长波极限 $\lambda \rightarrow \infty, q \rightarrow 0$ 布区中心附近	短波极限 $ q \rightarrow \frac{\pi}{a}, \lambda \rightarrow 2a$ 布区边缘附近
$\sin(\frac{qa}{2}) \approx \frac{qa}{2}, w = w_{max} \frac{qa}{2} $	$w = w_{max} = 2\sqrt{\beta/m}$
$v_p = \frac{\omega}{q} = \frac{a}{2}\omega_{\max} = a\sqrt{\frac{\beta}{m}} v_g = v_p$	$v_p = \frac{\omega}{q} = \frac{2a}{\pi}\sqrt{\frac{\beta}{m}} v_g = 0$
相速度与波长无关，可视为 宏观弹性波 一般也称单原子链中传播的长格波为声学波	角频率与波长几乎无关； 波矢位于布里渊区边界的格波不能在晶体中传播（驻波）

基本周期 $-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a}$ $q' = q \pm \frac{2\pi n}{a}$ **只有在第一布区才能找到唯一波矢解** **第一布区外的波矢点可以找到其在第一布区的等效点**



一维双原子晶格振动

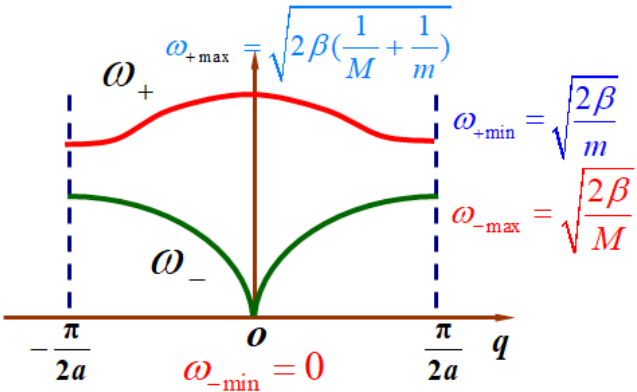
*推导过程：

从运动方程到色散方程：

$$\begin{cases} m\ddot{x}_{2n+1} = \beta(x_{2n+2} + x_{2n} - 2x_{2n+1}) \\ M\ddot{x}_{2n} = \beta(x_{2n+1} + x_{2n-1} - 2x_{2n}) \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x_{2n+1} = Ae^{i(q(2n+1)a - \omega t)} \\ x_{2n} = Be^{i(q2na - \omega t)} \end{cases} \rightarrow \begin{cases} (m\omega^2 - 2\beta)A + 2\beta\cos(qa)B = 0 \\ (M\omega^2 - 2\beta)B + 2\beta\cos(qa)A = 0 \end{cases}$$

振幅 A, B 有非零解，行列式 $\begin{vmatrix} m\omega^2 - 2\beta & 2\beta\cos(qa) \\ 2\beta\cos(qa) & M\omega^2 - 2\beta \end{vmatrix} = 0$

$$\omega^2 = \frac{\beta}{Mm} \left[(M + m) \pm \sqrt{M^2 + m^2 + 2Mm \cos(2qa)} \right] \quad \omega_+ \text{为光学支, } \omega_- \text{为声学支}$$



声学支与与一维单原子晶格的色散关系相似；

光学波和声学波之间存在频率间隙， ω 不能在这个间隙取值，对应声子能量的禁带；

两原子质量差别越大，频隙就越宽，光学波本身频率范围越窄

当 $m = M$ 时，在第一布里渊区边界声学支和光学支的频率相同；色散关系为质量为 m 的原子组成的单原子链的振动；

	布中($q \rightarrow 0$)长波	布边($q \rightarrow \frac{q}{2a}$)短波	一般
声学支(ω_-)	$(A/B)_- = 1$	$A = 0, B \neq 0$	$(A/B)_- = \frac{2\beta \cos(qa)}{2\beta - m\omega_+^2} > 0$
倾向于沿同一方向振动	质心运动，无相对位移	轻原子不振动，重原子振动	相邻原子同向运动
	振动相位、振幅相同		
光学支(ω_+)	$(A/B)_+ = -M/m$	$A \neq 0, B = 0$	$(A/B)_+ = \frac{2\beta \cos(qa)}{2\beta - m\omega_+^2} < 0$
倾向于沿相反方向振动	反向，质心不动	重原子不振动，轻原子振动	相邻原子反向运动
	振动相位相反，振幅相同		

周期边界条件与格波数

玻恩—卡门条件

边界上原子的周围情况和体内不同，边界原子振动情况和内部原子有所不同

假设晶体在空间中是无限延伸的，把这个单原子链首尾相接，由于形成的环够大，还是可以把圆弧看成一段直线适用单原子链方程

基本假设：有 N 个原子的有限长链中，可**首尾相接**，并将第1个原子看成是第 $N + 1$ 个原子， $x_1 = x_{N+1}$

	一维单原子链	一维双原子链
方程的解	$\begin{cases} x_n = Ae^{i(qna-\omega t)} \\ x_{N+n} = Ae^{i[q(N+n)a-\omega t]} \end{cases} \rightarrow e^{iqNa} = 1$	$\begin{cases} x_n = Ae^{i(qna-\omega t)} \\ x_{2N+n} = Ae^{i[q(2N+n)a-\omega t]} \end{cases} \rightarrow e^{i2qNa} = 1$
解的数量	$qNa = 2\pi S \rightarrow S = \frac{qNa}{2\pi}$	$2qNa = 2\pi S \rightarrow S = \frac{qNa}{\pi}$
讨论第一布区	$-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a} \rightarrow -\frac{N}{2} < S \leq \frac{N}{2}$	$-\frac{\pi}{2a} < q \leq \frac{\pi}{2a} \rightarrow -\frac{N}{2} < S \leq \frac{N}{2}$
	S 只能取 N 个不同的值， q 只能取 N 个不同的值	
格波数	N 个独立的格波	$2N$ 个独立的格波

晶体振动的格波数：晶体由多个原胞组成

格波数	原子的自由度 k	原胞原子的自由度总数	晶体原子的自由度总数
1个 $\omega - q$ 称为1个格波	1 个原子所占据的空间维度数目	原胞中原子数目 $n \times$ 原子自由度 k	原胞数目 $N \times$ 原胞中原子数目 \times 原子自由度

概括性结论：

- 每支格波包含的格波数 = 晶体中的原胞数 N
- 格波的支数 = 每个原胞中原子的自由度总数 $n \cdot k$
声学支数 = 原子自由度 k 光学支数 = 格波支数-声学支数 = $n \cdot k - k$
- 总的格波数 = 晶体中原子的自由度总数 $N \cdot n \cdot k$

简单格子没有光学支，声学支与维度一致；

如果 k 维复式晶格原胞数为 **N** ，每个原胞含 **n** 个原子, 则：

每支格波包含的格波数 = N ；晶体中格波的支数 = nk 其中有 k 个声学支和 $nk - k$ 个光学支；总的格波数 = Nnk

举例说明（**格波支数不带N**）

晶体	格波支数（声学支、光学支）	每支格波的格波数	总的格波数
一维布拉菲格子($k = 1, n = 1$)	1 (1、0)	N	N
一维双原子格子($k = 1, n = 2$)	2 (1、1)	N	$2N$
二维正方格子($k = 2, n = 1$)	2 (2、0)	N	$2N$
金刚石结构($k = 3, n = 2$)	6 (3、3)	N	$6N$

晶格振动的量子化与声子

由玻恩卡门条件：晶格振动形成一系列互相独立的格波

每一个独立的振动模式，都可以看成是一个线性谐振子，总能量为 N 个谐振子能量之和

声子的由来：独立的简谐振子的振动来表述格波的独立模式

一个谐振子能量： $\varepsilon_l = n_l \cdot \hbar\omega_l + \frac{1}{2}\hbar\omega_l \quad n = 0, 1, 2 \dots$

$\hbar\omega_l$ ：声子能量，晶格振动能量量子化的最小单位 $\frac{1}{2}\hbar\omega_l$ ：晶格振动零点能 声子数目和温度密切相关

三维晶体中的振动模式总数为 $3Nn$ (k 维则 Nnk)，晶格总能量： $E = \sum_{l=1}^{3Nn} \left(n_l + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_l$

$\hbar\omega_l$ 中的 l 从 $1 \rightarrow 3Nn$ ， l 表示不同种类的声子，共有 $3Nn$ 种声子； n_l 为声子数，表明能量为 $\hbar\omega_l$ 的声子有 n_l 个；

晶体热量由晶格振动的格波来传递

声子和光子的区别：

- 声子是晶格振动能量的最小单位，一个声子的能量为 $\hbar\omega_l$ ；光子能量 $h\nu$
- 光子是一种真实粒子，可以在真空中存在；
声子是设想出来的一种粒子，不能游离于晶体之外，离开了晶格振动系统则无声子，**为准粒子**，静止时质量为0；
- 声子本身并不具有物理动量，有准动量 $\hbar q$ 和能量 $\hbar\omega$ ；
- 声子和光子一样是**玻色子**，都不受泡利不相容原理限制，粒子数也不守恒，并且服从玻色—爱因斯坦统计

一个格波的平均声子数 $\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}$ 光学波角频率大于声学波，所以声学波的平均声子数比光学波多；

晶格比热

固体比热主要来源于晶格振动和电子比热两部分贡献

	爱因斯坦模型	德拜模型
假设	(1) 晶体中原子的振动是相互独立的； (2) 晶体中所有的原子都以同种频率振动； (过于简单，忽视了格波对热容贡献的差异)	(1) 晶体是各向同性的连续介质，格波为弹性波 (2) 存在一支纵波和两支横波 (3) 晶格振动频率在 $0 \sim \omega_D$ 之间 (忽略了晶体的各向异性)
	高温极限下， $C_V \approx 3Nk_B$	低温极限下， $C_V \propto T^3$
	高温下实验符合，爱因斯坦频率为光学支 低温下不符合是因为没有考虑声学波对热容的贡献	温度越低符合得越好 低温下，主要是长波激发，长波晶格可看作连续介质 在高温下不能再把晶格看作连续介质

晶体中的电子状态

索末菲自由电子模型

模型思想：金属中的电子不受外力作用，没有相互作用，不能逸出金属

四个基本假设：自由电子近似、独立电子近似、无碰撞假设、自由电子费米气体假设

自由电子假设：忽略电子-离子实间的库仑吸引力，电子速度各向同性

独立电子假设：忽略电子-电子间的库仑排斥力

无碰撞假设：忽略金属离子对自由电子的作用，不考虑碰撞

能态密度

驻波为边界条件，行波为**周期条件**，以下取行波解

状态点在 k 空间分立且均分；每个状态占据的空间体积为 $(\frac{2\pi}{L})^3$ ；空间状态密度为 $(\frac{2\pi}{L})^{-3}$ （三维为例）

因为考虑泡利不相容原理 dG 需要乘2；一维的 k 不像二维三维一样只能取正，可正可负所以要多乘个2

	一维	二维	三维
波矢取值	$k = \frac{2\pi n}{L}$	$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}$ $k_y = \frac{2\pi n_y}{L}$	$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}$ $k_y = \frac{2\pi n_y}{L}$ $k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$
在 $k \sim k + dk$ 之间的能级数目 dG	$dG = \textcolor{red}{2} \cdot \textcolor{red}{2} \cdot (\frac{2\pi}{L})^{-1} \cdot dk$	$dG = 2 \cdot (\frac{2\pi}{L})^{-2} \cdot 2\pi k dk$	$dG = 2 \cdot (\frac{2\pi}{L})^{-3} \cdot 4\pi k^2 dk$
转为 dE 的形式 $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$	$dG = \frac{L}{\pi} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \frac{dE}{\sqrt{E}}$	$dG = \frac{mL^2}{\pi\hbar^2} dE$	$dG = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3} (2m)^{3/2} E^{1/2} dE$
能态密度	$Z(E) = \frac{dG}{dE} = \frac{L\sqrt{2m}}{\pi\hbar} E^{-1/2}$	$Z(E) = \frac{dG}{dE} = \frac{mL^2}{\pi\hbar^2}$	$Z(E) = \frac{dG}{dE} = \textcolor{violet}{C} E^{1/2}$

电子的分布函数

索末菲提出的电子气体应该遵循**费米狄拉克统计**：
$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T}\right) + 1}$$

其中 E_F 称为**费米能级** $E \sim E + dE$ 的电子数目： $dN = f(E)dG$ $N = \int_0^\infty f(E)dG$

费米能级是参考能级，与材料和温度有关，是体现在能量空间内电子占据几率的一个能级；对于给定的材料 E_F 是温度的函数

价带中电子已经占据了所有可能的能级，价带的空穴占据概率 $1 - f(E)$

不同温度下费米分布	$T = 0$	$T \neq 0$
$E < E_F$	$f(E) = 1$	$f(E) > 0.5$ $E - E_F \ll K_B T$ 时, $f = 1$
$E = E_F$	$f(E) = 0.5$	$f(E) = 0.5$
$E > E_F$	$f(E) = 0$	$f(E) < 0.5$ $E - E_F \gg K_B T$ 时, $f = A \exp(-\frac{E}{K_B T})$

可见在温度趋于绝对零度时，费米能级以下能级填满；费米能级以上能级空着 $N = \int_0^{E_F} f(E)dG$

布洛赫定理

周期势场的三个近似：

- 绝热近似：电子与离子无能量交换→多体问题化为多电子问题；
- 单电子近似：每个电子都处在相同的平均势场中→多电子问题化为单电子问题
- 周期场近似

定义：当势场具有晶格周期性时，波函数不再是平面波，而是调幅平面波

在周期性势场中运动的电子波函数是布洛赫波函数，等于周期性函数 $u(\vec{r})$ 与自由平面波因子相乘；

两条公式（本质相同）：(R_l 为晶格常数 a)

公式一： $\psi(\vec{r}) = u(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$	公式二： $\psi\left(\vec{r} + \vec{R}_l\right) = \psi(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_l}$
波函数可以看成是一个调幅平面波，其振幅按晶体的周期而周期变化 调幅波因子具有正晶格的周期性 $u(\vec{r} + \vec{R}_l) = u(\vec{r})$	波函数本身不具备正晶格的周期性 但是模(电子出现的几率)具有正晶格的周期性 相距任意 正格矢 的两个布洛赫波函数相差模为1的因子

近自由电子近似

电子基本上是自由的， 周期势场作为微扰

非简并微扰：

适用条件：晶体中周期场较弱；电子波矢距离布区边界较远

波函数：满足布洛赫定理；平面波+散射波；散射波对入射波干扰很小；

电子能量：与自由电子能量接近； k 取分立值， $E(k)$ 是准连续抛物线

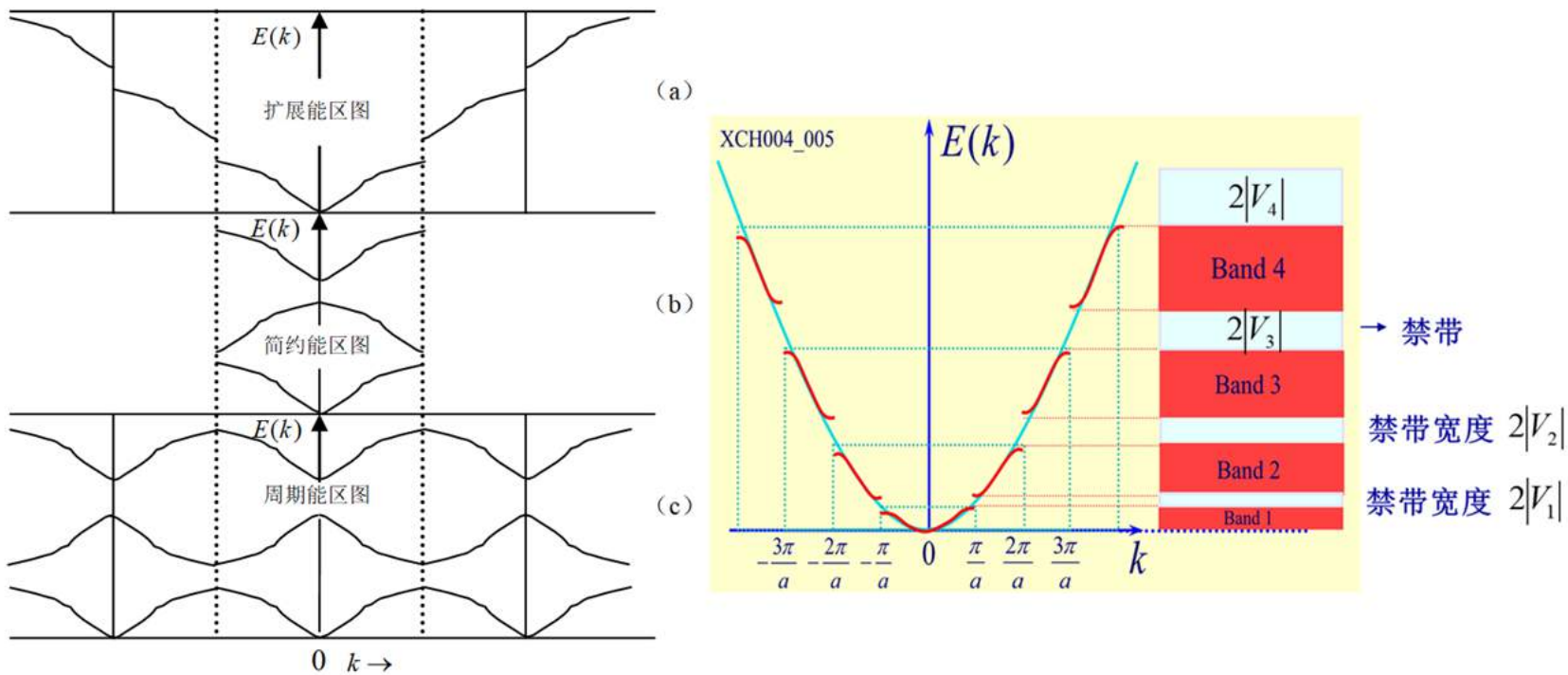
简并微扰：

在 $k = \frac{n\pi}{a}$ 处， E 不连续， $E_{\pm} = E_k^0 \pm |V_n|$

在 E_+ 和 E_- 之间没有允许的状态 (能级) 存在，称为**禁带或者带隙** 禁带宽度： $\Delta E_n = E_+ - E_- = 2|V_n|$

禁带出现的位置与晶格常数/晶体结构有关，禁带宽度与周期势场有关

每个能带能容纳的电子数与原胞数 N 有关，可容纳 $2N$ 个电子



紧束缚近似

紧束缚近似的假设：电子受孤立原子核束缚较强， 其它原子势场作为微扰

紧束缚近似的能量公式： $E = E_0 - \alpha - \gamma \sum_m \exp\left(-i\vec{k} \cdot \vec{\rho}_m\right)$ (γ 与 m 无关时的形式)

公式分为两部分

第一部分为前面两项，表示第 l 个原子对能量的贡献；

第二部分为为第三项，表示与第 l 个原子最近邻的 m 个原子对能量的贡献；第二部分为能量微扰， m 为晶体的配位数

γ 反映了原子间相互作用，作用越强，则 γ 值越大

关于简立方内层电子能带公式的讨论： (能带宽度 $\Delta E = E_{max} - E_{min}$)

简立方配位数为6, $\rho_m = (\pm a, 0, 0), (0, \pm a, 0), (0, 0, \pm a)$

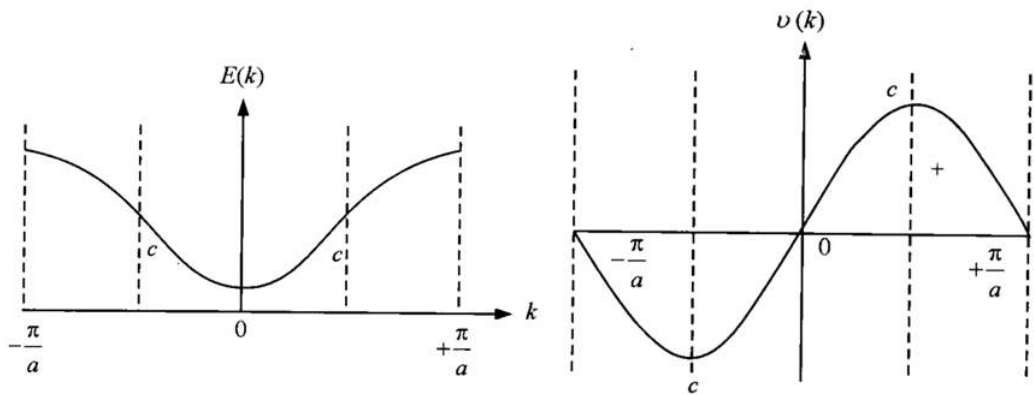
代入紧束缚近似的能量公式 $E = E_0 - \alpha - 2\gamma (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$

得到： $\Delta E = (E_0 - \alpha + 2\gamma \times 3) - (E_0 - \alpha - 2\gamma \times 3) = 12\gamma$ (最大值减最小值)

面心立方和体心立方为 16γ [推导.pdf](#) 二维正方格子 8γ

准经典运动

将布洛赫电子作为准经典粒子来处理晶体中的电子在外场中的运动规律



一维电子速度： $\vec{v}_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$ 布区中心速度为0；

偏离布区中心与电子运动方向相反的**散射波**加强，布区边缘散射波长满足布拉格条件，散射最大，形成驻波，电子运动速度为0

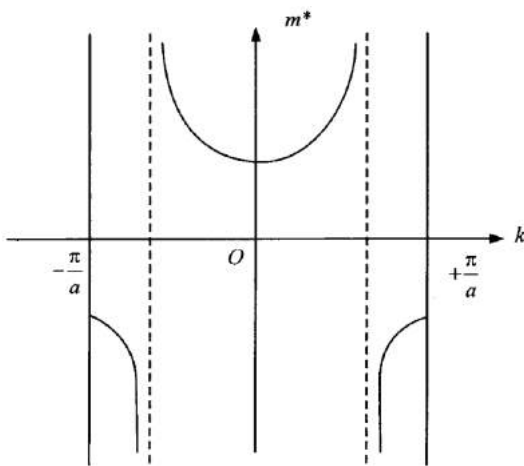
等能面在布里渊区边界上与界面垂直，因此恒有 $\frac{\partial E}{\partial k_{\perp}} = 0$ ，因此布区边界垂直界面分量 $v_{\perp} = 0$ ，速度必须与布区边界平行；

布洛赫电子的有效质量 m^* ： $(m^{*-1})_{i,j} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$ **张量的形式**，以二维正方格子带底为例： $\frac{1}{m^*} = \frac{2\gamma a^2}{\hbar^2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

布洛赫电子引入 m^* **概括了晶体内部势场的作用**，**在解决晶体中电子在外场作用下的运动规律时，可以不涉及到晶体内部势场的作用**

有效质量可以为正值，也可以为负值（外力作用不足以补偿内部势场的作用时，电子的真实动量是下降的，所以有效质量为负值）

有效质量在**能带底附近为正**，**能带顶附近为负**；



导体 半导体 绝缘体 空穴

导体、半导体和绝缘体的区分：

满带电子不导电，不满带电子导电

导体（金属）[外场下导电] 存在不满的能带(具备导电性的条件)	绝缘体[一般情况不导电] 只有满带和空带	半导体[有一定的导电性] $T = 0$ 时能带结构与绝缘体相同
碱金属：价电子数为奇数→导带是半满的	满带 + 很宽的 禁带 + 空带	满带 + 较窄的 禁带(小于2ev) + 空带
碱土金属：价电子数为偶数→ 能带交迭，禁带消失形成不满带	热激发电子难以穿越禁带	热激发可以使得电子穿越禁带 使得空带和满带都变成不满带
<div><div><div>禁带</div><div>空带</div><div>不满的能带</div></div><div><div>禁带消失</div><div>空带</div><div>满带</div></div></div>	<div><div>空带</div><div>禁带</div><div>满带</div></div>	<div><div>空带</div><div>禁带</div><div>满带</div></div> <div>白的为空穴</div>

空穴：满带(价带)中的空状态（**准粒子**） 空穴位于满带顶附近，具有正有效质量；

在能带中，电子的能量是向上增加的，而空穴的能量是向下增加的

	电子	空穴(1 - f(E))
携带电荷	负电荷	正电荷
波矢	\vec{k}_e	$\vec{k}_h = -\vec{k}_e$ ($\vec{k}_h + \vec{k}_e = 0$:)
能量	$E(\vec{k}_e)$	$E(\vec{k}_h) = -E(\vec{k}_e)$
速度	$v(\vec{k}_e)$	$v(\vec{k}_h) = v(\vec{k}_e)$
有效质量	$\frac{1}{m_e^*}$	$\frac{1}{m_h^*} = -\frac{1}{m_e^*}$

平衡状态的半导体

导带与价带

半导体中有两种载流子：导带底的电子，价带顶的空穴；金属只有电子一种载流子

导带 E_C (电子的空带底端)：价带电子热激发跃迁到空带，使空带底部有少量电子，这些电子参与导电

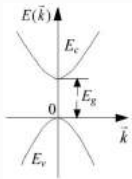
价带 E_V (电子的满带)：价带是指基态下晶体未被激发的电子所具有的能量水平，热激发后价带顶会出现空穴，空穴也能参与导电

价带和导带之间还存在一个禁带，价带的能量低于导带（一般费米能级在禁带中）

[知乎上的有趣解释](#)

由于费米能级的位置关系，导带的电子仅存于导带底附近，价带的空穴仅存于价带顶附近

半导体能带关系

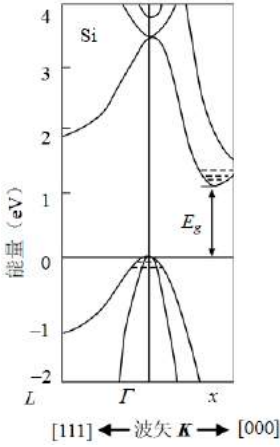
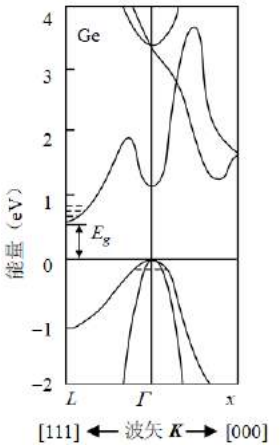
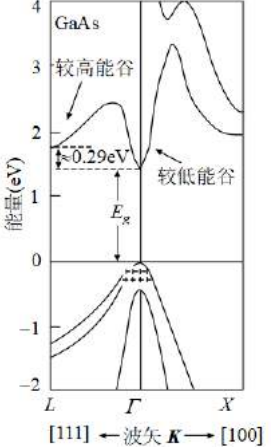
	导带底	价带顶
一般情况	$E_C(\vec{k}) = E_C(0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_{nx}^*} + \frac{k_y^2}{m_{ny}^*} + \frac{k_z^2}{m_{nz}^*} \right)$	$E_V(\vec{k}) = E_V(0) - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_{px}^*} + \frac{k_y^2}{m_{py}^*} + \frac{k_z^2}{m_{pz}^*} \right)$
各向同性物质	$E_C(\vec{k}) = E_C(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$	$E_V(\vec{k}) = E_V(0) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^2}$

各项同性：导带底($k = 0$)电子等能面为**球面**；**各项异性**：导带底(能量极值处 k_0)电子等能面为**旋转椭球面**

常见半导体的能带结构：

间接(直接)带隙半导体：导带底和价带顶位于K空间的**不同(相同)**处；

Si Ge 的禁带宽度 E_g 与温度的关系： $E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$

	硅 Si（间接带隙半导体）	锗 Ge（间接带隙半导体）	砷化镓 GaAs（直接带隙半导体）
导带底	在<100>方向布区中心到边缘的 0.85 倍处共6个等能面为 旋转椭球面	在<111>的布区边缘，共8个等能面为 旋转椭球面	在布区中心 $K = 0$ 处等能面为 球面
价带顶	在 $K = 0$ 布区中心处；等能面为扭曲的球面	在 $K = 0$ 布区中心处；等能面为扭曲的球面	在 $K = 0$ 布区中心处；等能面为扭曲的球面
能带结构图			

本征半导体和杂质半导体

本征半导体：半导体材料**无杂质和缺陷**，**仅存在本征激发**；(晶格完整，周期场无任何破坏)

- 本征激发：价带电子激发到导带
- 热运动使得电子从价带跨越禁带到达导带，形成导带的电子和价带的空穴，并很快达到平衡

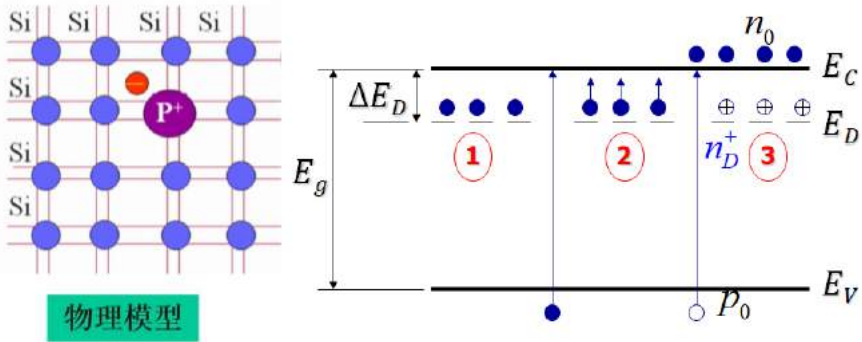
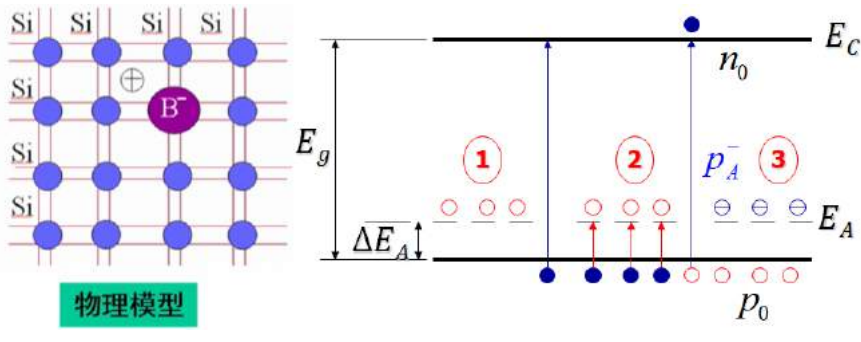
半导体呈本征型的条件：高纯、无缺陷的半导体或在高温时的杂质半导体

电中性条件： $n = p = n_i$ n —导带电子浓度； p —价带空穴浓度； n_i —本征载流子浓度

杂质半导体：破坏周期性势场

- 施主(n型)杂质：杂质向半导体施与电子，形成正电中心；
- 受主(p型)杂质：杂质从半导体处接受电子，形成负电中心；

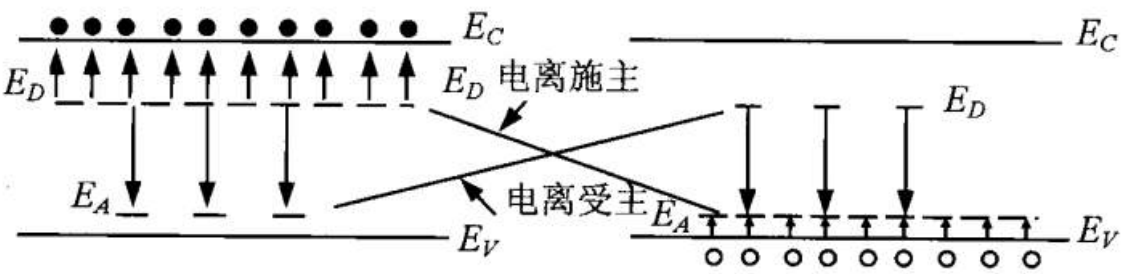
N_D 产生 n_D, n_D^+ , N_A 产生 p_A, p_A^- 电中性条件: $n_D^+ + p_0 = p_A^- + n_0$

n型半导体(主要依靠导带电子导电的半导体)	p型半导体(主要依靠价带空穴导电的半导体)
(导带)电子为多数载流子；空穴为少数载流子	(价带)空穴为多数载流子；电子为少数载流子
IV族晶体（Si晶体为例）掺入微量V族原子（P原子）	IV族晶体（Si晶体为例）掺入微量III族原子（B原子）
<div></div>	<div></div>
电中性条件: $n_0 = p_0 + n_D^+$	电中性条件: $p_0 = p_A^- + n_0$
ΔE_D : 施主电离能, 价电子挣脱施主束缚所需的能量;	ΔE_A : 受主电离能, 空穴摆脱受主束缚所需的能量;
E_D : 施主能级 , 施主束缚电子的能量; 孤立能级(能量不连续), 用虚线表示, 更靠近导带底;	E_A : 受主能级 , 受主束缚空穴的能量; 孤立能级(能量不连续), 用虚线表示, 更靠近价带顶
$\Delta E_D \ll E_g$, 施主电离比本征激发更容易发生;	$\Delta E_A \ll E_g$, 受主电离比本征激发更容易发生;
束缚态: 电子被束缚在原子（施主能级上）	束缚态: 空穴被束缚在原子（受主能级上）
施主电离: 施主能级上的电子吸收了不小于 ΔE_D 的能量后, 发生电离, 摆脱P原子的束缚	受主电离: 受主能级上的空穴吸收了不小于 ΔE_A 的能量后, 发生电离, 摆脱B原子的束缚
离化态: 电子完全摆脱了原子的束缚, 在晶体中运动	离化态: 空穴完全摆脱了原子的束缚, 在晶体中运动

*类氢模型：计算浅能级杂质电离能 杂质电离的过程可以近似看成与氢原子束缚电子电离的过程

杂质的补偿作用：半导体（或半导体某一部分）施主和受主杂质同时存在，具有相互抵消的作用

N_D ：施主杂质浓度， N_A ：受主杂质浓度， n ：导带中电子浓度， p ：价带的空穴浓度



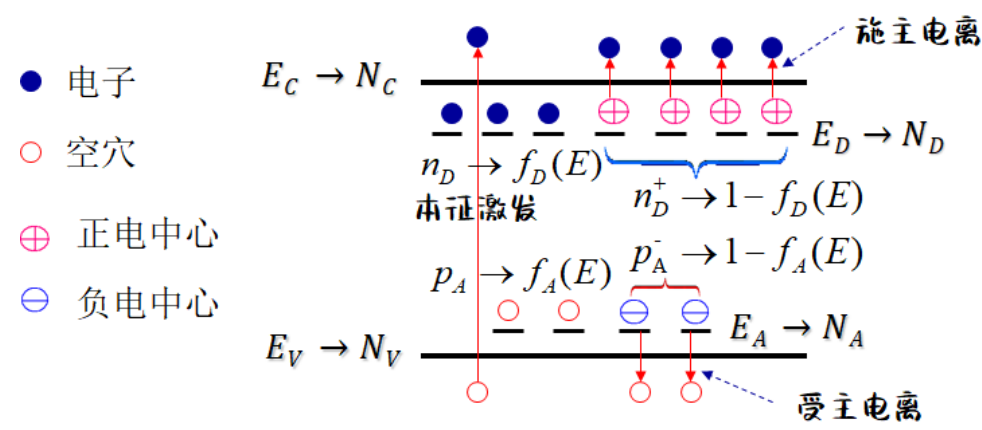
$N_D > N_A$ 时为n型; $N_D \gg N_A$ 时, $n = N_D - N_A \approx N_D$

$N_D < N_A$ 时为p型; $N_A \gg N_D$ 时, $p = N_A - N_D \approx N_A$

$N_A = N_D$ 时杂质高度补偿，此时导电性很差

热平衡载流子的统计分析

状态密度

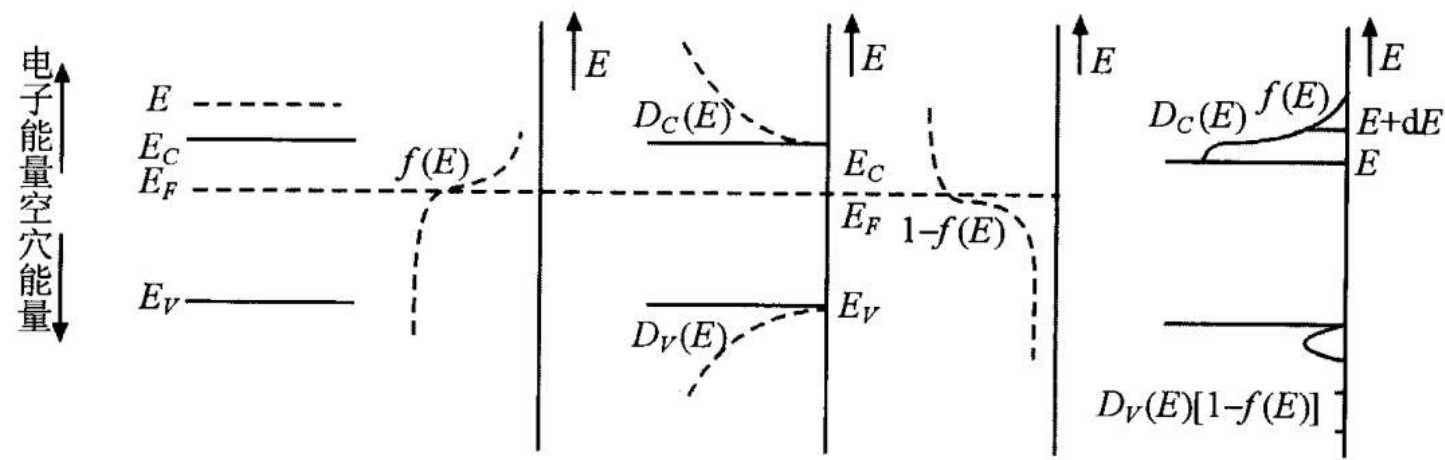


利用索末菲自由电子模型的能态密度修正

1. 布洛赫电子在状态空间能量也是离散并均分的： $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^{-3}$
2. 同样遵守泡利不相容原理
3. 能量公式 $\vec{E} = \vec{E}_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \Rightarrow \vec{E} - \vec{E}_C = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$

半导体导带底状态密度	半导体价带顶状态密度
$D_C(E) = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}(2m_n^*)^{3/2}(E - E_C)^{1/2}$	$D_V(E) = \frac{V}{2\pi^2\hbar^3}(2m_p^*)^{3/2}(E_V - E)^{1/2}$

电子和空穴能量方向相反，对电子和空穴而言， $E \uparrow \rightarrow D_C(E) \uparrow, D_V(E) \downarrow$



统计分布/简并条件

	费米狄拉克分布(简并)	变换条件	玻尔兹曼分布(非简并)
电子统计分布	$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T}\right) + 1}$	$E - E_F \gg K_B T$	$f_B(E) = \exp\left(-\frac{E - E_F}{K_B T}\right) = A \exp\left(-\frac{E}{K_B T}\right)$
空穴统计分布	$1 - f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_F - E}{K_B T}\right) + 1}$	$E_F - E \gg K_B T$	$1 - f_B(E) = \exp\left(-\frac{E_F - E}{K_B T}\right) = B \exp\left(\frac{E}{K_B T}\right)$

导致：导带中绝大多数电子分布在**导带底**附近；价带中绝大多数空穴分布在**价带顶**附近

非简并半导体 → 载流子浓度低 → 同一能级被两个电子占据的几率低 → 不受泡利不相容原理限制
→ 费米分布与经典分布统一 → **选择玻尔兹曼统计分布** → 费米能级位于禁带中并且与导带底和价带顶的距离远大于 $K_B T$

室温状态下：随着掺杂浓度的增加费米能级逐渐逼近导带/价带，逐渐不能满足玻尔兹曼分布，进入简并

简并化条件n型为例：

非简并半导体	简并半导体
非简并条件： $E_C - E_F > 2K_B T$ (弱简并： $0 < E_C - E_F \leq 2K_B T$)	简并化条件： $E_C - E_F \leq 0$
轻掺杂	重掺杂，禁带宽度变窄
常温下载流子浓度低	常温下载流子浓度高
饱和区内： $N_D < N_C$ 或者 $N_A < N_V$ ，常温下完全电离	常温下 $N_D \geq N_C$ 或者 $N_A \geq N_V$ ，不能完全电离
服从玻尔兹曼统计分布(也可费米狄拉克)	必须服从费米狄拉克统计分布
	杂质浓度高，杂质未充分电离
E_F 在禁带中	E_F 非常靠近或者进入导带或价带
	形成杂质能带，禁带宽度变窄
杂质能级→局部能级	杂质能带→连续能带

载流子浓度/本征费米能级

简并： 简并半导体的载流子浓度为：

$$\begin{cases} n_0 = N_C \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T} \right) \\ p_0 = N_V \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(-\frac{E_F - E_V}{K_B T} \right) \end{cases}$$

非简并： 根据统计分布规律，电子集中在导带底(空穴集中在价带顶)，所以可以将积分上限变为 ∞ (下限变为 ∞)，不影响结果

电子浓度公式	空穴浓度公式
$n_0 = \frac{1}{V} \int_{E_C}^{E'_C} f(E) D_C(E) dE$ E'_C 为导带顶	$p_0 = \frac{1}{V} \int_{E'_V}^{E_V} [1 - f(E)] D_V(E) dE$ E'_V 为价带底
$n_0 = \frac{1}{V} \int_{E_C}^{\infty} f_B(E) D_C(E) dE = N_C \exp \left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T} \right)$	$p_0 = \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{E_V} [1 - f_B(E)] D_V(E) dE = N_V \exp \left(-\frac{E_F - E_V}{K_B T} \right)$
导带的有效状态密度： $N_C = 2 \left(\frac{m_n^* K_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$	价带的有效状态密度： $N_V = 2 \left(\frac{m_p^* K_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$

载流子浓度乘积： $n_0 p_0 = N_C N_V \exp \left(-\frac{E_C - E_V}{K_B T} \right) = N_C N_V \exp \left(-\frac{E_g}{K_B T} \right)$ (热平衡状态下的非简并半导体的判据式)

半导体材料一定, m_n^*, m_p^* 和 E_g 确定, $n_0 p_0$ 与 E_F 无关只与温度 T 有关, 掺杂与否上式都满足;

本征费米能级 E_i ： (热平衡)

本征激发电中性条件:

$$n_0 = p_0 \rightarrow N_C \exp \left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T} \right) = N_V \exp \left(-\frac{E_F - E_V}{K_B T} \right) \rightarrow E_F = E_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{K_B T}{2} \ln \frac{N_V}{N_C}$$

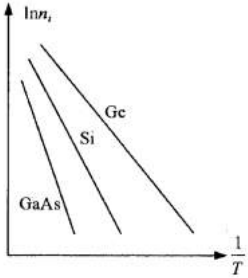
代入 N_C, N_V 表达式, $E_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3K_B T}{4} \ln \frac{m_p^*}{m_n^*} \approx \frac{E_C + E_V}{2}$

可知**本征半导体的费米能级 E_i 基本上在禁带中央处**

本征载流子浓度： (热平衡)

$$n_0 p_0 = n_i^2 \rightarrow n_i = n_0 = p_0 = (N_C N_V)^{1/2} \exp \left(-\frac{E_g}{2K_B T} \right) \rightarrow \ln n_i = \text{Const} - \frac{3}{2} \ln \frac{1}{T} - \frac{E_g(0)}{2K_B} \frac{1}{T}$$

其它形式：

$$\begin{cases} n_i = N_C \exp \left(-\frac{E_C - E_i}{K_B T} \right) \\ n_i = N_V \exp \left(-\frac{E_i - E_V}{K_B T} \right) \end{cases}$$


$$\begin{cases} n_0 = n_i \exp \left(\frac{E_F - E_i}{K_B T} \right) \\ p_0 = n_i \exp \left(\frac{E_i - E_F}{K_B T} \right) \end{cases}$$

n_i 只是 T 的函数, 在非简并的情况下, 无论掺杂多少, n_0, p_0 都满足 $n_0 p_0 = n_i^2$, 所以也是热平衡状态的判据式

室温下硅的本征载流子浓度为 $n_i = 1.5 \times 10^{16}/m^3$

为什么制造半导体器件一般都用含有适当杂质的半导体材料?

常温下，本征激发不显著；**本征载流子浓度随温度增加呈指数增加，高温下本征激发不可忽略**；由于本征载流子浓度随温度迅速变化，用本征材料制作器件的性能很不稳定，所以，制造半导体器件一般都用含有适当杂质的半导体材料。

对于杂质半导体，载流子主要来源于杂质电离，而本征激发可忽略不计。在**本征载流子浓度没有超过杂质电离所提供的载流子浓度**的温度范围内，如果杂质全部电离，载流子浓度是一定的，器件就能稳定工作。

杂质能级载流子浓度

电子占据杂质能级的几率，与电子占据导带价带能级的规律是不同的，**不能用费米分布函数表示电子占据杂质能级的几率**

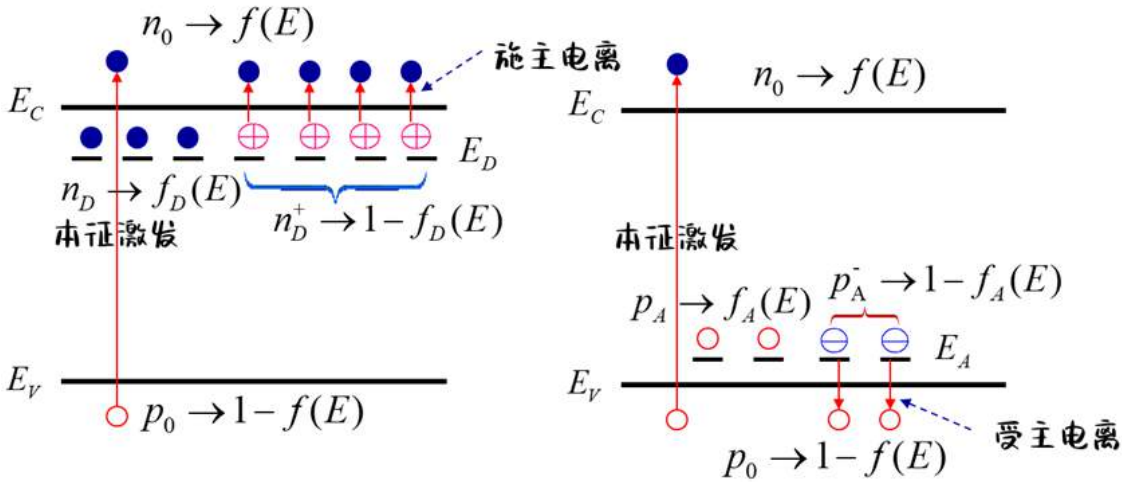
原因：因为杂质能级和能带中的能级是有区别的，**能带中的一个能级可以容纳自旋方向相反的两个电子，而施主杂质能级或者被一个电子占据，或者不接受电子**，施主能级**不允许同时被自旋相反的两个电子所占据**；

施主能级上的电子占据几率	$f_D(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\exp(\frac{E_D - E_F}{K_B T})}$	施主能级上的电子浓度	$n_D = N_D f_D(E)$
施主能级上未被电子占据的几率 (电子电离的几率)	$1 - f_D(E) = \frac{1}{1 + 2\exp(\frac{E_F - E_D}{K_B T})}$	电离施主浓度 n_D^+	$n_D^+ = N_D - n_D$
受主能级上的空穴占据几率	$f_A(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\exp\left(\frac{E_F - E_A}{K_B T}\right)}$	受主能级上的空穴浓度	$p_A = N_A f_A(E)$
受主能级上未被空穴占据的几率 (空穴被占据的几率)	$1 - f_A(E) = \frac{1}{1 + 2\exp\left(\frac{E_A - E_F}{K_B T}\right)}$	电离受主浓度 p_A^-	$p_A^- = N_A - p_A$

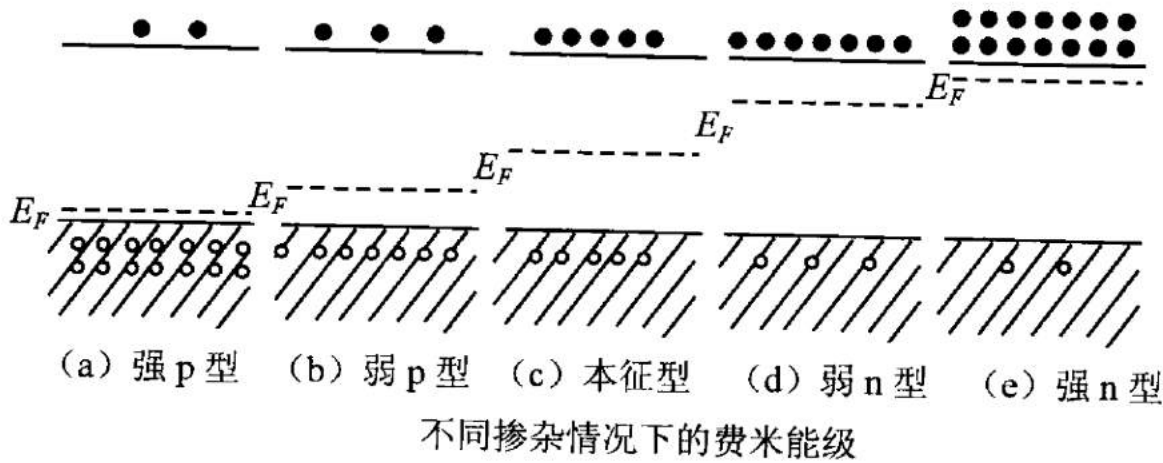
- 全电离： $E_D - E_F \gg K_B T \Rightarrow n_D^+ \approx N_D$ $E_F - E_A \gg K_B T \Rightarrow p_A^- \approx N_A$
- 电离不充分： $E_F - E_D \gg K_B T \Rightarrow n_D^+ \approx 0$ $E_A - E_F \gg K_B T \Rightarrow p_A^- \approx 0$
- 当 $E_F = E_D$ $E_F = E_A$ 时，有1/3电离；

半导体载流子浓度

电中性条件： $n_0 + p_A^- = p_0 + n_D^+$



具体带公式	n 型 $n_0 = n_D^+ + p_0$	p 型 $p_0 = p_A^- + n_0$
低温弱电离区 (本征激发不明显)	$p_0 \approx 0, n_0 = n_D^+ \\ E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \left(\frac{K_B T}{2}\right) \ln\left(\frac{N_D}{2N_C}\right)$	$n_0 \approx 0, p_0 = p_A^- \\ E_F = \frac{E_V + E_A}{2} - \left(\frac{K_B T}{2}\right) \ln\left(\frac{N_A}{2N_V}\right)$
常温强电离区 (本征激发不明显) (杂质完全电离)	$p_0 \approx 0, n_D^+ = N_D, n_0 = N_D \\ E_F = E_C + K_B T \ln\left(\frac{N_D}{N_C}\right)$	$n_0 \approx 0, p_A^- = N_A, p_0 = N_A \\ E_F = E_V - K_B T \ln\left(\frac{N_A}{N_V}\right)$
高温过渡区 (本征激发显著) (杂质完全电离)	$n_D^+ = N_D, n_0 = N_D + p_0 \\ E_F = E_i + K_B T [\text{sh}^{-1}(N_D/2n_i)]$	$p_A^- = N_A, p_0 = N_A + n_0 \\ E_F = E_i - K_B T [\text{sh}^{-1}(N_A/2n_i)]$
①近杂质饱和和电离区 $N_D \gg n_i/N_A \gg p_i$	多子: $n_0 = N_D + \frac{n_i^2}{N_D} \approx N_D$ 少子: $p_0 = n_0 - N_D = \frac{n_i^2}{N_D}$	多子: $p_0 = N_A + \frac{n_i^2}{N_A} \approx N_A$ 少子: $n_0 = p_0 - N_A = \frac{n_i^2}{N_A}$
②近本征激发区 $N_D \ll n_i/N_A \ll p_i$ (本征激发非常显著)	$\left. \begin{aligned} n_0 &= \frac{N_D}{2} + n_i \\ p_0 &= -\frac{N_D}{2} + n_i \end{aligned} \right\} n_0 = p_0$	$p_0 = n_0$
费米能级的变化		
载流子浓度的变化		



半导体的导电性

载流子的散射

漂移运动：载流子在电场的作用下作定向运动

散射的原因：晶体周期势场遭到破坏

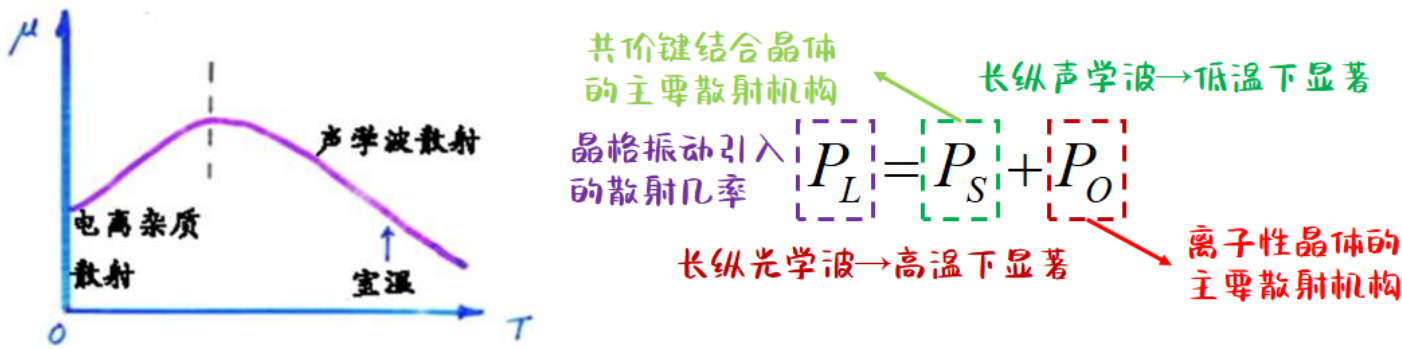
来源：①杂质原子和缺陷的存在；②晶格振动

自由程→两次散射之间载流子是自由的，其距离即自由程 平均自由程

自由时间→两次散射之间的时间间隔 平均自由时间 τ

平均自由时间与散射几率互为倒数 $\tau = 1/P$ τ 是 $N(t)$ 衰减到 $1/e$ 的时间

主要的散射机制：



电离杂质散射：（低温占主导）	晶格振动散射：（高温占主导）
电离施主或者电离受主形成的库仑势场下起主要作用 会在局部破坏周期性势场，而引入附加势场 ΔV	光学波和声学波振动会使得原子偏离平衡位置 使严格周期结构受到破坏，继而引入附加势场 ΔV 长波起主要散射作用；长波中的纵波在散射中起主要作用
$P_i \propto N_i T^{-3/2}$	$P_S \propto T^{3/2}$ 压缩状态 $E_g \uparrow$ ；膨胀状态 $E_g \downarrow$

载流子漂移运动的基本规律

$n_i = 1.5 \times 10^{10}/\text{cm}^3$ 硅的原子密度 $n_{si} = 5 \times 10^{22}/\text{cm}^3$

掺杂越多散射几率越大，迁移率降低，电导率上升；

	n型	p型	电子空穴同时带电	本征半导体
迁移率 描述载流子在电场中漂移运动难易程度的物理量 迁移率习惯上取正值；($\mu_n \gg \mu_p$)	$\mu_n = \frac{q\tau_n}{m_n^*}$	$\mu_p = \frac{q\tau_p^*}{m_p^*}$	$\mu = \mu_n + \mu_p$	
电导率：描述材料导电能力的物理量	$\sigma_n = nq\mu_n$	$\sigma_p = pq\mu_p$	$\sigma = nq\mu_n + pq\mu_p$	$\sigma_i = n_i q(\mu_n + \mu_p)$
电阻率： $\rho = 1/\sigma$	$\rho_n = \frac{1}{nq\mu_n}$	$\rho_p = \frac{1}{pq\mu_p}$	$\rho = \frac{1}{nq\mu_n + pq\mu_p}$	$\rho_i = \frac{1}{n_i q(\mu_n + \mu_p)}$

非平衡载流子

非平衡载流子的注入

当对半导体施加外界作用（光照、电场等），热平衡状态破坏，额外产生的载流子

注入方式：光注入、电注入

非平衡载流子浓度： $\Delta n, \Delta p$ 导带电子浓度： $n = n_0 + \Delta n$ 价带电子浓度： $p = p_0 + \Delta p$ $np \neq n_i^2$ $\Delta n = \Delta p$

n型：

小注入条件： $\Delta n, \Delta p \ll n_0$ （注入的非平衡载流子浓度 \ll 平衡态时的多子浓度）

可能满足： $\Delta p \gg p_0$ （非平衡少子浓度可能比平衡少子浓度大得多）

对于小注入而言，非平衡载流子寿命即非平衡少子的寿命（非平衡少子浓度衰减至最初的1/e时所需要的时间）

准费米能级

准费米能级是导带和价带的局部费米能级。统一的费米能级是热平衡状态的标志

热平衡时有统一的费米能级：
$$\begin{cases} n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T}\right) \\ p_0 = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{K_B T}\right) \end{cases} \Rightarrow n_0 p_0 = n_i^2$$

非平衡时，电子的费米能级和空穴的费米能级不再统一，引入准费米能级（局部能级） E_F^n, E_F^p

非平衡下载流子浓度公式：（红色部分反映非平衡的程度）

$$\begin{cases} n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F^n}{K_B T}\right) = n_i \exp\left(\frac{E_F^n - E_i}{K_B T}\right) \\ p = N_V \exp\left(-\frac{E_F^p - E_V}{K_B T}\right) = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F^p}{K_B T}\right) \end{cases} \Rightarrow np = n_i^2 \exp\left(\frac{E_F^n - E_F^p}{K_B T}\right)$$
$$\begin{cases} n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T}\right) \\ n = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F^n}{K_B T}\right) \end{cases} \Rightarrow E_F^n - E_F = K_B T \ln \frac{n}{n_0}$$
$$\begin{cases} p_0 = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{K_B T}\right) \\ p = N_V \exp\left(-\frac{E_F^p - E_V}{K_B T}\right) \end{cases} \Rightarrow E_F - E_F^p = K_B T \ln \frac{p}{p_0}$$

n型半导体	p型半导体
$\Delta n \ll n_0 \rightarrow n > n_0$, 但 $n \approx n_0$ $\Delta p \gg p_0 \rightarrow p \gg p_0$	$\Delta n \gg n_0 \rightarrow n \gg n_0$ $\Delta p \ll p_0 \rightarrow p > p_0$, 但 $p \approx p_0$
E_F^n 在 E_F 之上，但是偏离很小 E_F^p 在 E_F 之下，有大且明显的偏离	E_F^n 在 E_F 之上，有大且明显的偏离 E_F^p 在 E_F 之下，但是偏离很小
<div><div>平衡状态</div><div>非平衡状态</div><div></div></div>	<div><div>平衡状态</div><div>非平衡状态</div><div></div></div>

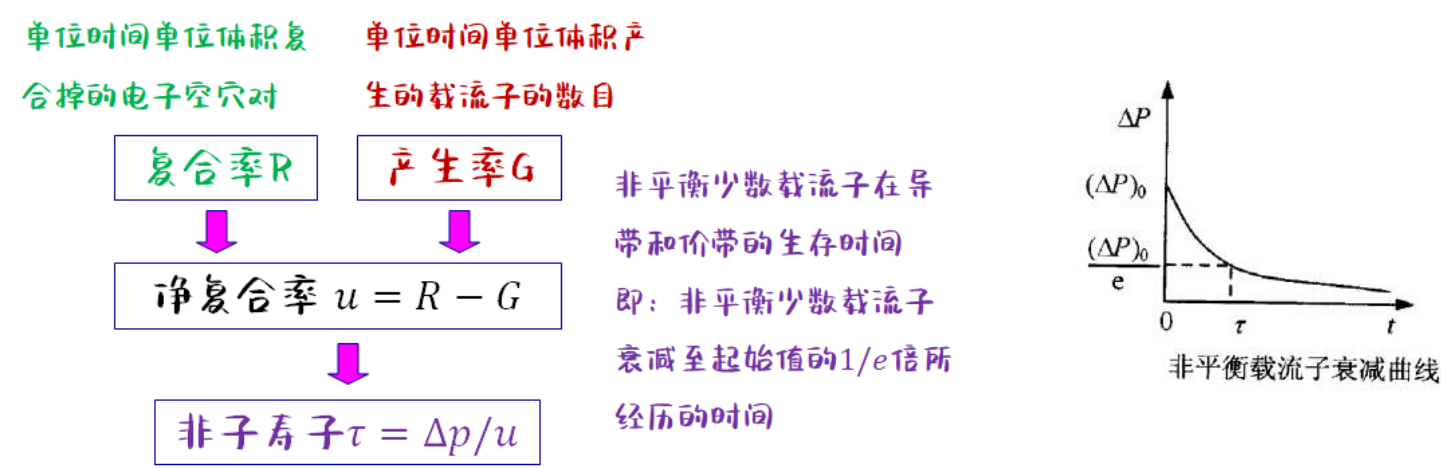
非平衡载流子的复合

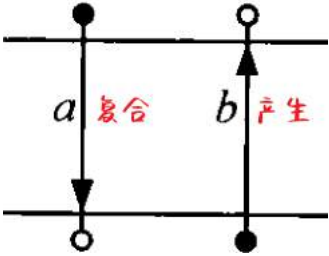
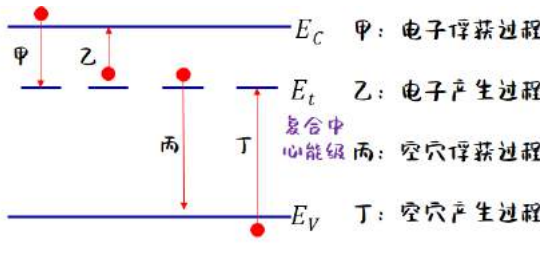
跃迁方式分类：直接复合（不占主体部分）；间接复合；按复合发生的部位分类：体内复合、表面复合

释放能量的方式：①发射光子；②发射声子（传递给晶格）；③能量传递给其他载流子（俄歇复合）；

非平衡载流子的复合：当外界作用撤除后，半导体导带中的非平衡载流子落入到价带的空状态中，使电子和空穴成对地消失

最有效的复合中心能级位置在 E_i 附近；



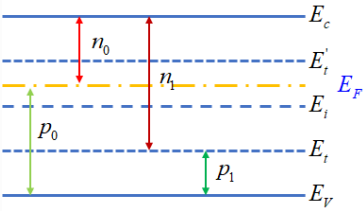
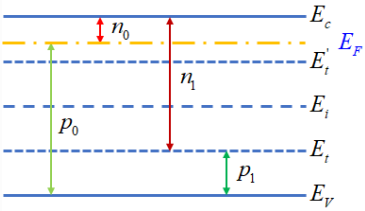
	直接复合(导带直接落到价带)	间接复合(载流子通过复合中心的复合)
		
参数说明	γ : 电子-空穴复合几率, 与 T 相关 n : 导带提供的电子数; p : 价带有多少空位 (空穴) 供导带电子去复合	N_t : 复合中心浓度; n_t : 复合中心电子浓度; $n_t = N_t f(E_t)$ r_n, r_p : 复合中心俘获电子(空穴)的能力; s_-, s_+ : 电子(空穴)的激发系数或激发几率
	复合率 $R = \gamma np$	甲: $R_n = r_n n (N_t - n_t)$ 乙: $G_n = s_- n_t$ 丙: $R_p = r_p p n_t$ 丁: $G_p = s_+ (N_t - n_t)$
热平衡	产生率: $G = G_0 = R_0 = \gamma n_0 p_0 = \gamma n_i^2$ 最终产生率等于平衡时的复合率; $\Delta n = \Delta p = G\tau$	甲=乙: $s_- = r_n n_1$ 丙=丁: $s_+ = r_p p_1$ n_1 : 平衡且 $E_F = E_t$ 时, 导带的电子浓度 p_1 : 平衡且 $E_F = E_t$ 时, 价带的空穴浓度
净复合率	$u = R - G = \gamma(np - n_i^2)$ $= \gamma(n_0 + p_0 + \Delta p)\Delta p$	$u = \frac{N_t r_n r_p}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)} (np - n_i^2)$
非平衡载流子的寿命	$\tau = \frac{\Delta p}{u} = \frac{1}{\gamma(n_0 + p_0 + \Delta p)}$	$\tau = \frac{\Delta p}{u} = \frac{r_n(n_0 + n_1 + \Delta p) + r_p(p_0 + p_1 + \Delta p)}{N_t r_n r_p (n_0 + p_0 + \Delta p)}$
小注入 ($n_0 + p_0 \gg \Delta p$)	$\tau = \frac{1}{\gamma(n_0 + p_0)}$	$\tau = \frac{r_n(n_0 + n_1) + r_p(p_0 + p_1)}{N_t r_n r_p (n_0 + p_0)}$
小注入	$\begin{cases} n\text{型}: \tau = \frac{1}{\gamma n_0} \\ p\text{型}: \tau = \frac{1}{\gamma p_0} \end{cases}$ 在温度和掺杂一定时, 寿命是一个常数; 与多数载流子浓度成反比	$n_0 : n_1 : p_0 : p_1 = \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{K_B T}\right) : \exp\left(-\frac{E_C - E_t}{K_B T}\right) : \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{K_B T}\right) : \exp\left(-\frac{E_t - E_V}{K_B T}\right)$ 反映在能级距离上, 距离越小越大
大注入	$n_0 + p_0 \ll \Delta p \rightarrow \tau = \frac{1}{\gamma \Delta p}$ 非平衡载流子寿命不是常数	$\Delta p = \Delta n \gg n_0, p_0, n_1, p_1$ $\rightarrow \tau = \frac{1}{N_t r_p} + \frac{1}{N_t r_n} = \tau_p + \tau_n$ 非平衡载流子寿命近似常数
有效复合中心		有效复合中心的能级靠近禁带中部 $E_t \approx E_i$ 此时 u 有最大值

间接复合小注入两种大情况的各自四种情况： $\tau = \frac{r_n(n_0 + n_1) + r_p(p_0 + p_1)}{N_t r_n r_p (n_0 + p_0)}$ 化简该公式

E_t 更靠近 E_C （导带）的情况：

强 p 型区：费米能级在价带顶与 E_t' 之间	p 型高阻区：费米能级在本征费米能级与 E_t' 之间
	
$p_0 \gg n_1 \gg p_1 \gg n_0 \rightarrow \tau = \tau_n = \frac{1}{N_t r_n}$	$n_1 \gg p_0 \gg n_0 \gg p_1 \rightarrow \tau = \frac{1}{N_t r_p} \cdot \frac{n_1}{p_0} = \tau_p \frac{n_1}{p_0}$
n 型高阻区：费米能级在本征费米能级与 E_t 之间	强 n 型区：费米能级在导带底与 E_t 之间
	
$n_1 \gg n_0 \gg p_0 \gg p_1 \rightarrow \tau = \frac{1}{N_t r_p} \cdot \frac{n_1}{n_0} = \tau_p \frac{n_1}{n_0}$	$n_0 \gg n_1 \gg p_1 \gg p_0 \rightarrow \tau = \tau_p = \frac{1}{N_t r_p}$

E_t 更靠近 E_V （价带）的情况：（补充作业）

强p型区：费米能级在价带顶与E_t之间 	p型高阻区：费米能级在本征费米能级与E_t之间 
$p_0 \gg p_1 \gg n_1 \gg n_0 \rightarrow \tau = \tau_n = \frac{1}{N_t r_n}$	$p_1 \gg p_0 \gg n_0 \gg n_1 \rightarrow \tau = \frac{1}{N_t r_n} \cdot \frac{p_1}{p_0} = \tau_n \frac{p_1}{p_0}$
n型高阻区：费米能级在本征费米能级与E_t'之间 	强n型区：费米能级在导带底与E_t'之间 
$p_1 \gg n_0 \gg p_0 \gg n_1 \rightarrow \tau = \frac{1}{N_t r_n} \cdot \frac{p_1}{n_0} = \tau_p \frac{p_1}{n_0}$	$n_0 \gg p_1 \gg n_1 \gg p_0 \rightarrow \tau = \tau_p = \frac{1}{N_t r_p}$

非平衡载流子的扩散和漂移运动

载流子的两大运动：

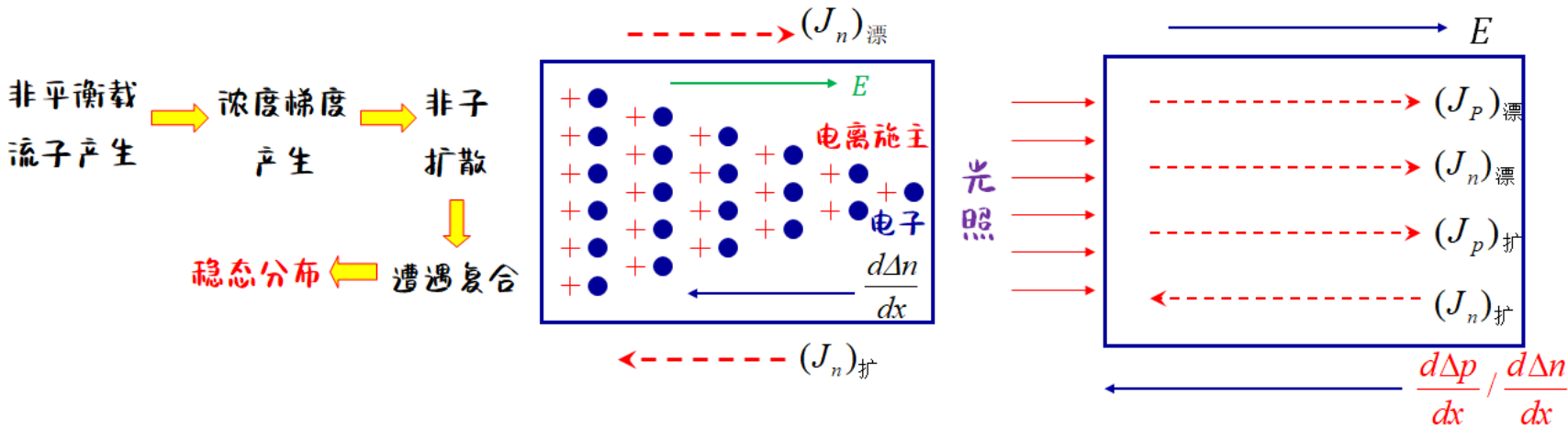
- 漂移运动：**定向电场牵引**（ μ 迁移率）
- 扩散运动：**浓度梯度牵引**（ D 扩散系数）
 - 载流子分布不均匀引入浓度梯度
 - 非子注入或抽取引入浓度梯度

载流子**扩散系数** D ：反映有浓度梯度时，载流子运动难易程度的物理量；**扩散系数决定散射机构**；

扩散长度： $L = \sqrt{D\tau}$

一维 n 型半导体的非平衡载流子光注入	非平衡电子	非平衡空穴
扩散流密度 单位时间通过单位截面的粒子数	$S_n = -D_n \frac{d\Delta n(x)}{dx}$	$S_p = -D_p \frac{d\Delta p(x)}{dx}$
扩散电流密度 单位时间通过单位截面的电量	$(J_n)_{\text{扩}} = qD_n \frac{d\Delta n(x)}{dx}$	$(J_p)_{\text{扩}} = -qD_p \frac{d\Delta p(x)}{dx}$
漂移运动	$(J_n)_{\text{漂}} = q(n_0 + \Delta n)\mu_n \vec{E} = qn\mu_n \vec{E} $	$(J_p)_{\text{漂}} = q(p_0 + \Delta p)\mu_p \vec{E} = qp\mu_p \vec{E} $

扩散运动方向总是从浓度高向浓度低处，即**逆着浓度梯度方向**（理解 $d\Delta p/dx$ 的方向）



自建场由扩散运动而产生，并且总是阻碍扩散运动的发生

爱因斯坦关系式：是描述扩散运动和漂移运动（**扩散系数和迁移率**）之间联系的关系式 $\frac{D}{\mu} = \frac{K_B T}{q}$

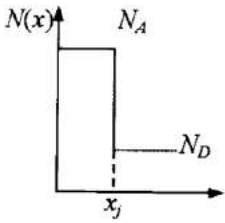
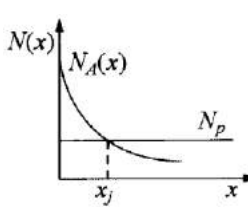
该非均匀半导体热平衡下，电子和空穴电流密度应该为0，即： $J_n = (J_n)_{\text{漂}} + (J_n)_{\text{扩}} = 0, J_p = (J_p)_{\text{漂}} + (J_p)_{\text{扩}} = 0$

引入了附加电势 $V(x)$ ，其导带底将做如下修正： $E_C \rightarrow E_C - qV(x)$ ，其价带顶将做如下修正： $E_V \rightarrow E_V - qV(x)$

半导体器件物理基础

制作p-n结的方法有：①合金法；②扩散法；③外延法；④离子注入法；

一般把杂质分布归结为两种情况：

突变结	缓变结
	

符合以下假设条件的p-n结称为理想p-n结模型，即：

- ① 小注入：注入的少数载流子浓度比平衡多数载流子浓度小得多；
- ② 突变耗尽层：耗尽层中的电荷是由电离施主和电离受主组成的，耗尽层外的半导体是电中性的，因此外加电压和接触电势差都降落在耗尽层上，注入的少子在p区和n区是纯扩散运动；
- ③ 不考虑耗尽层中载流子的产生及复合作用，因此通过耗尽层的电子和空穴电流为常量；
- ④ 玻尔兹曼边界条件：在耗尽层两端，载流子分布满足玻尔兹曼统计分布。

平衡p-n结

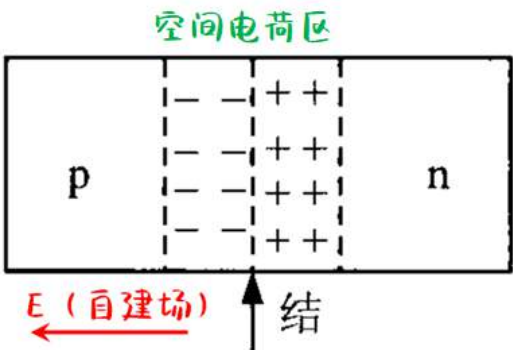
平衡p-n结的形成：在*n*型和*p*型半导体的交界面处有电子和空穴浓度梯度

- n*区中的电子向*p*区扩散，在*n*区剩下带正电的电离施主，形成一个带正电荷的区域；
- p*区中的空穴向*n*区扩散，在*p*区剩下带负电的电离受主，形从一个带负电荷的区域；

p-n结的空间电荷区：在*n*型区和*p*型交界面的两侧形成了带正、负电荷的区域；

自建场：空间电荷区中的正负电荷形成电场，电场方向由*n*区指向*p*区

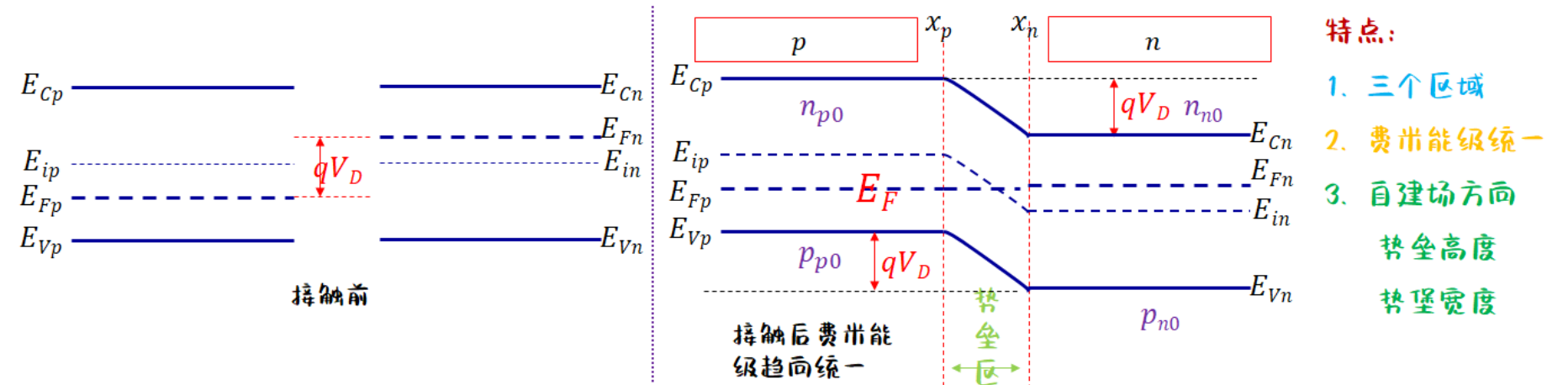
自建电场由扩散电场产生，又阻碍扩散运动，当扩散运动 = 漂移运动 → 稳态分布 → 热平衡p-n结



平衡p-n结的能带图：

任何平衡系统内费米能级是**统一**的；电子将从费米能级高的*n*区流向费米能级低的*p*区，空穴从*p*区流向*n*区

E_{Fn} 不断下降， E_{Fp} 不断上升，直到 $E_{Fn} = E_{Fp} = E_F$



接触电势差： *p*区与*n*区的电势之差，势垒高度： $qV_D = E_{Fn} - E_{Fp}$ ；

势垒区、空间电荷区、结区同为一区域

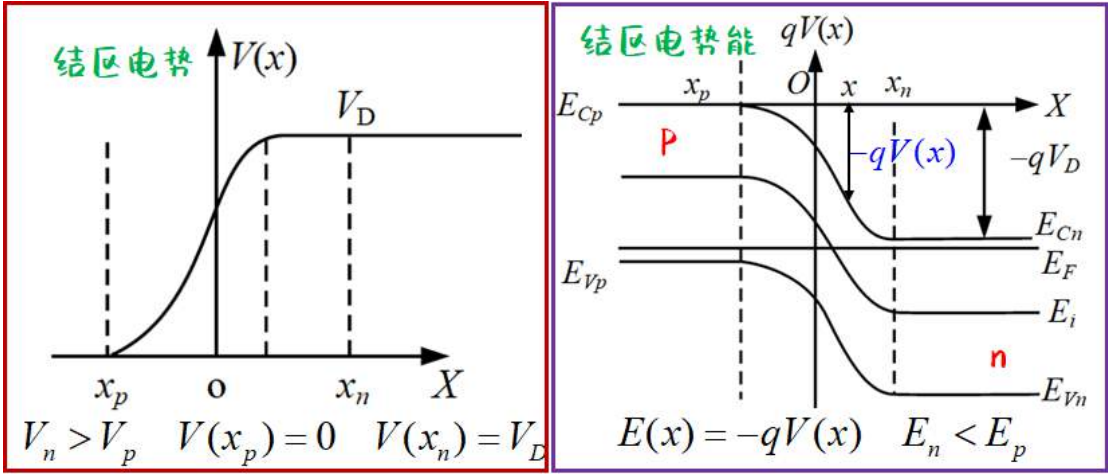
n_{n0} ： *n*区平衡电子浓度； n_{p0} ： *p*区平衡电子浓度；

$$\left. \begin{aligned} n_{n0} &= n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_i}{K_B T}\right) \\ n_{p0} &= n_i \exp\left(\frac{E_{Fp} - E_i}{K_B T}\right) \end{aligned} \right\} \Rightarrow \ln \frac{n_{n0}}{n_{p0}} = \frac{1}{K_B T} (E_{Fn} - E_{Fp}) \Rightarrow V_D = \frac{1}{q} (E_{Fn} - E_{Fp}) = \frac{K_B T}{q} \left(\ln \frac{n_{n0}}{n_{p0}} \right)$$

室温条件下杂质全电离： $\therefore n_{n0} \approx N_D, p_{p0} \approx N_A, n_{p0} \approx n_i^2/N_A \Rightarrow V_D = \frac{K_B T}{q} \ln \left(\frac{N_D N_A}{n_i^2} \right)$ 室温下硅的 $V_D = 0.70V$

平衡p-n结载流子分布：

取p区电势为0， 接近n区的点其电势越高， 势垒区边界处 x_n 电势最高位 V_D



对电子而言： $E_i(x) = E_{in} + qV_D - qV(x)$ $E_{in} + qV_D$ 即为 E_{ip}

势垒区内 x 处的平衡电子浓度：

$$\begin{aligned} n_0(x) &= n_i \exp \left(-\frac{E_i(x) - E_F}{K_B T} \right) \\ &= n_i \exp \left(-\frac{E_{in} - E_F}{K_B T} \right) \exp \left(-\frac{qV_D - qV(x)}{K_B T} \right) \Rightarrow \begin{cases} n_0(x_n) = n_{n0} \\ n_0(x_p) = n_{n0} \exp \left(-\frac{qV_D}{K_B T} \right) = n_{p0} \end{cases} \quad n_{n0} \gg n_{p0} \\ &= n_{n0} \exp \left(-\frac{qV_D - qV(x)}{K_B T} \right) \end{aligned}$$

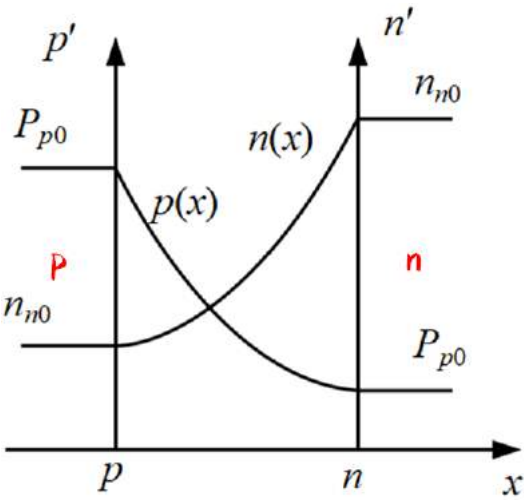
同理：势垒区内 x 处的空穴浓度：

$$p_0(x) = p_{n0} \exp \left(\frac{qV_D - qV(x)}{K_B T} \right) = p_{p0} \exp \left(-\frac{qV(x)}{K_B T} \right) \Rightarrow \begin{cases} p_0(x_n) = p_{n0} \\ p_0(x_p) = p_{n0} \exp \left(\frac{qV_D}{K_B T} \right) = p_{p0} \end{cases} \quad p_{p0} \gg p_{n0}$$

多子耗尽区的由来举例： 设势垒高度为0.7eV， 则在 $qV(x) = 0.6\text{eV}$ 处

$$\begin{aligned} n_0(x) &= n_{n0} \exp \left(-\frac{qV_D - qV(x)}{K_B T} \right) \approx \frac{n_{n0}}{50} \approx \frac{N_D}{50} \\ p_0(x) &= p_{p0} \exp \left(-\frac{qV(x)}{K_B T} \right) = p_{p0} \exp \left(-\frac{0.6}{K_B T} \right) \approx 10^{-10} p_{p0} \approx 10^{-10} N_A \end{aligned}$$

虽然杂质都已电离， 但载流子浓度比起n区和p区的多子浓度小得多， 也称势垒区为耗尽区； 空间电荷密度就等于电离杂质浓度



n区($x \geq x_n$)	p区($x \leq x_p$)	关系	结区($x_p < x < x_n$)
$n_{n0} = N_C \exp \left(-\frac{E_{Cn} - E_F}{K_B T} \right)$ $p_{n0} = N_V \exp \left(-\frac{E_F - E_{Vn}}{K_B T} \right)$	$n_{p0} = N_C \exp \left(-\frac{E_{Cp} - E_F}{K_B T} \right)$ $p_{p0} = N_V \exp \left(-\frac{E_F - E_{Vp}}{K_B T} \right)$	$n_{p0} = n_{n0} \exp \left(-\frac{qV_D}{K_B T} \right)$ $p_{n0} = p_{p0} \exp \left(-\frac{qV_D}{K_B T} \right)$	$n(x) = n_{n0} \exp \left(-\frac{qV_D - qV(x)}{K_B T} \right)$ $p(x) = p_{p0} \exp \left(-\frac{qV(x)}{K_B T} \right)$

非平衡p-n结

当两端有外加电压时， p-n结处于非平衡状态

定向电场叫漂移运动， 浓度梯度叫扩散运动

正向偏压偏压下的p-n结	反向偏压下的p-n结
正向注入（少子）	反向抽取（少子）
1)外加正向电场 E_f ，其方向与自建场方向相反， p区指向n区	1)外加反向电场 E_r ，方向与自建场方向相同， n区指向p区
2)自建场被削弱， 扩散运动>漂移运动 ；	2)自建场被增强， 漂移运动>扩散运动
3)结区出现净的扩散流 p 区在 x_p 处将被注入由 n 区扩散来的非平衡电子 n 区在 x_n 处将被注入由 p 区扩散来的非平衡空穴	3)结区出现净的漂移流 x_p 处的非平衡电子将被抽向 n 区 x_n 处的非平衡空穴将被抽向 p 区
4)扩散的非平衡载流子将继续往 p 区和 n 区内部扩散，边扩散边复合，直至形成 稳态分布 为止	4)被抽取的非平衡载流子与 n 区和 p 区形成载流子浓度梯度，产生非子扩散运动，直至形成 稳态分布 为止
势垒高度减少： $qV_D \rightarrow qV_D - qV_f$	势垒高度变大： $qV_D \rightarrow qV_D + qV_r$
(图像右边整体上移 qV_f)	(图像右边整体下移 qV_r)

非平衡p-n结电流电压特性：

电流—电压方程：肖克莱方程： $J = \left(\frac{qD_n n_{p0}}{L_n} + \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} \right) \left[\exp \left(\frac{qV}{K_B T} \right) - 1 \right] = J_S \left[\exp \left(\frac{qV}{K_B T} \right) - 1 \right]$ 电流同理

特性：

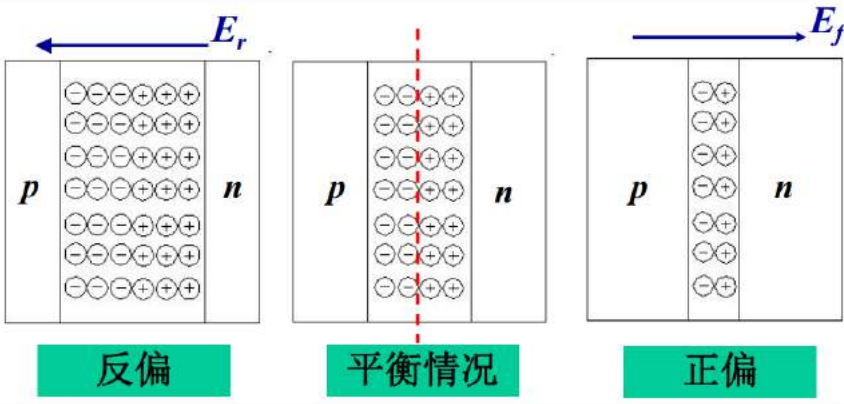
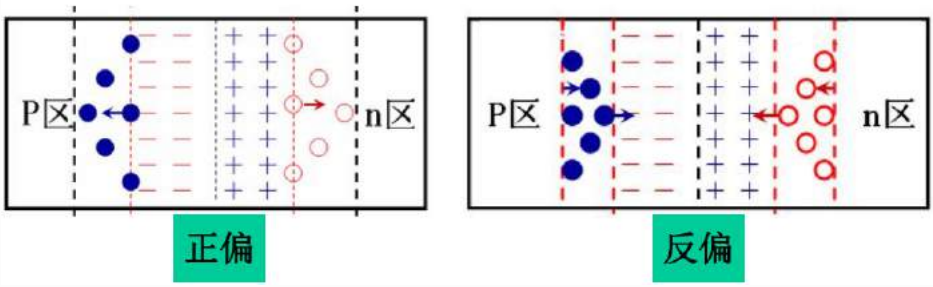
- 1) 温度影响很大
- 2) 单向导电性：

正向偏压 ($V > 0$)	$\exp \left(\frac{qV}{K_B T} \right) \gg 1$	$J \approx J_S \exp \left(\frac{qV}{K_B T} \right)$
反向偏压 ($V < 0$)	$\exp \left(\frac{qV}{K_B T} \right) \approx 0$	$J \approx -J_S$ (反向饱和电流密度)

p-n结电容与击穿

p-n结电容：“存”“放”电荷的特性

- 电容值随偏置电压的方向和大小变化
- 正偏时，**既有势垒电容，也有扩散电容**
- 反偏时，**势垒电容为主，扩散电容很小**

势垒电容	扩散电容
p-n结上外加电压改变→电子和空穴在势垒区“存入”或“取出”	扩散区电荷数量随外加电压的变化而产生的电容效应 正向偏压影响大；反偏时影响很小
	

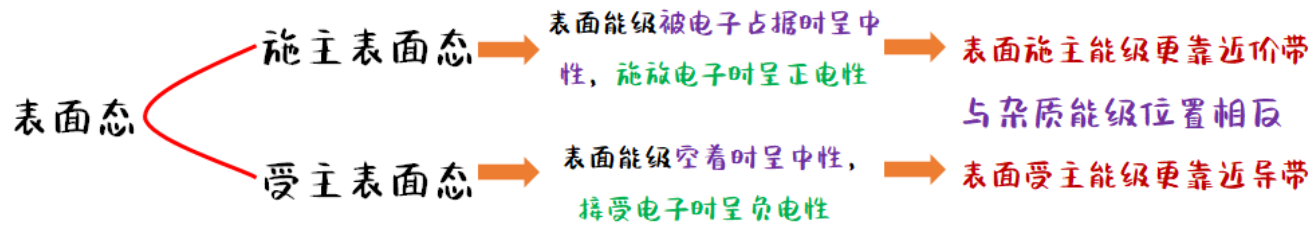
p-n结击穿

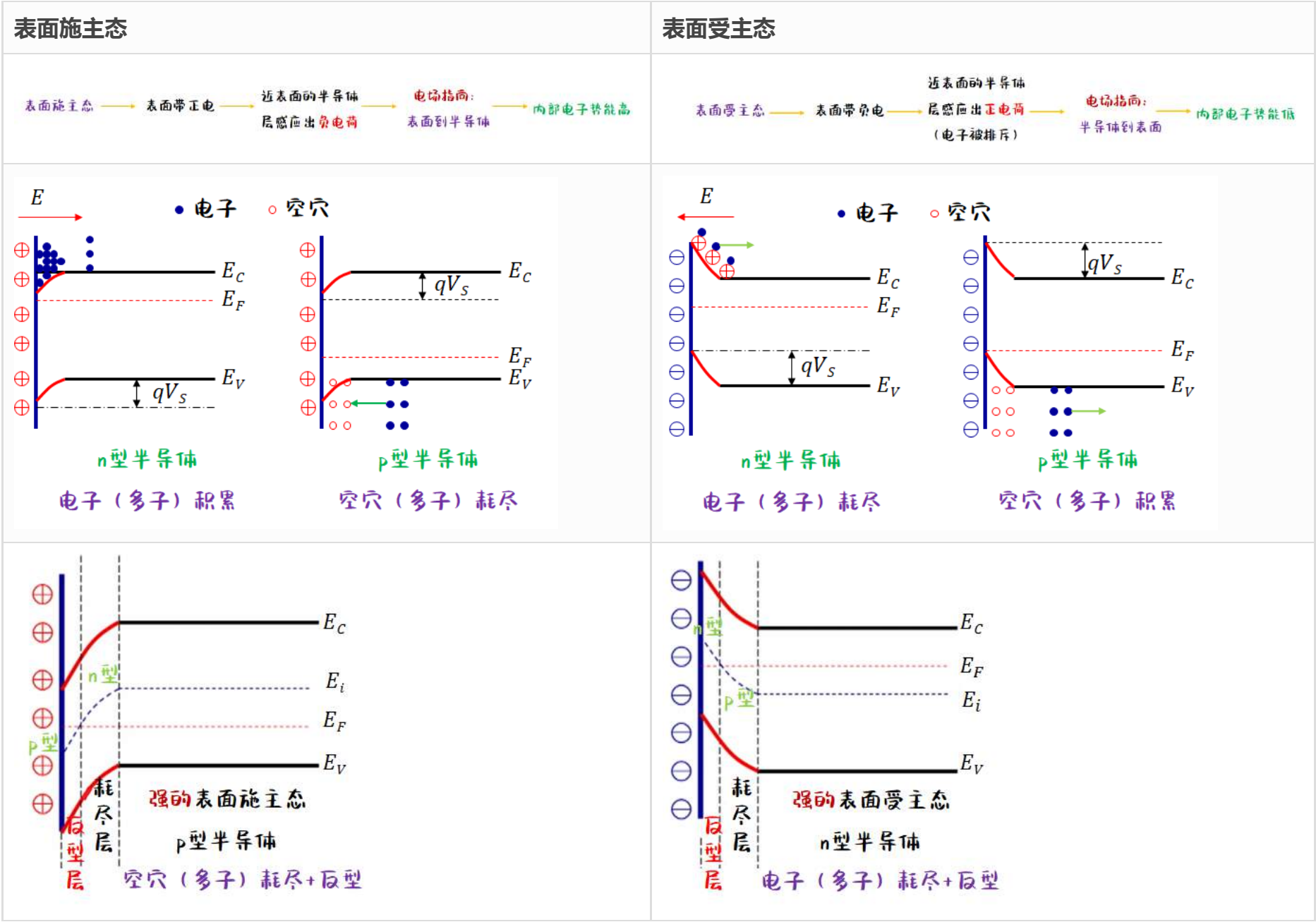
类型	机理	决定因素	掺杂浓度	反向偏压	势垒区宽度
雪崩击穿	碰撞电离使载流子浓度急剧增加，导致载流子 倍增效应 ，使势垒区单位时间内产生大量载流子，致使 反向电流迅速增大 ，从而发生p-n结击穿	势垒区电场和势垒宽度	低	高	宽
隧道击穿	当电场 E 大到或隧道长度短到一定程度时，将使p区价带中大量的电子 通过隧道效应穿过势垒 到达n区导带中去，使 反向电流急剧增大 ，于是p-n结发生隧道击穿。	外加电场	高	低	窄

半导体表面

纯净表面——理想表面

杂质：n型杂质又叫施主杂质，p型杂质又叫受主杂质

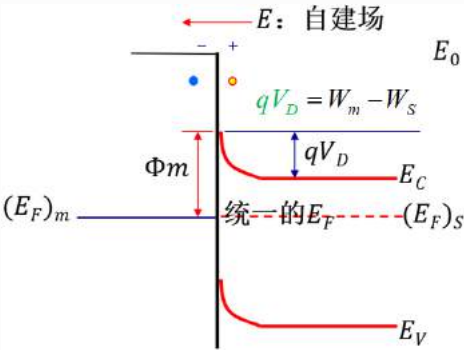
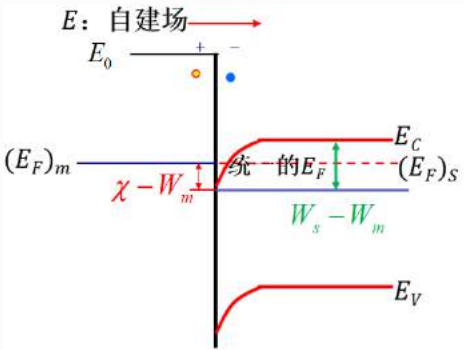


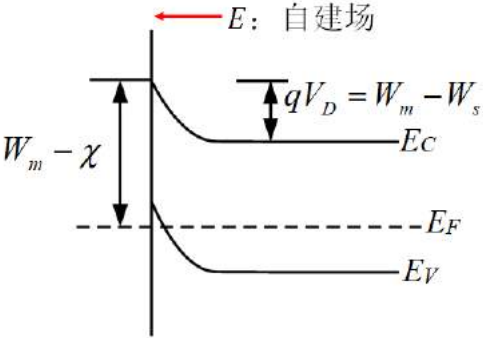
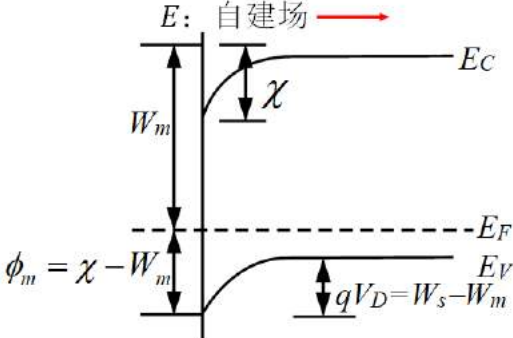


肖特基势垒模型

肖特基势垒模型条件：理想的金半接触模型，不存在表面态

费米能级统一但功函数并未统一

金属与n型半导体接触，接触前 $W_m > W_s \rightarrow (E_F)_m < (E_F)_s$	金属与n型半导体接触，接触前 $W_m < W_s \rightarrow (E_F)_m > (E_F)_s$
<div>扩散运动：电子从半导体表面流向金属表面</div> <div>自建场阻碍扩散的继续进行，当二者平衡，流动结束，费米能级统一！</div> <div>金属表面接收电子形成负电区； 半导体表面流失电子形成正电区</div> <div>自建场形成，方向从半导体指向金属</div>	<div>扩散运动：电子从金属表面流向半导体表面</div> <div>自建场阻碍扩散的继续进行，当二者平衡，流动结束，费米能级统一！</div> <div>金属表面流失电子形成正电区； 半导体表面接收电子形成负电区</div> <div>自建场形成，方向从金属指向半导体</div>
	
半导体势垒高度： $qV_D = -qV_S = W_m - W_s$ 肖特基势垒高度： $\phi_m = qV_D + E_n = W_m - W_s + E_n = W_m - \chi$	
n型阻挡层	n型反阻挡层

金属与p型半导体接触，接触前 $W_m > W_s \rightarrow (E_F)_m < (E_F)_s$	金属与p型半导体接触，接触前 $W_m < W_s \rightarrow (E_F)_m > (E_F)_s$
	
	肖特基势垒高度： $\phi_m = \chi - W_m$
p型反阻挡层	p型阻挡层

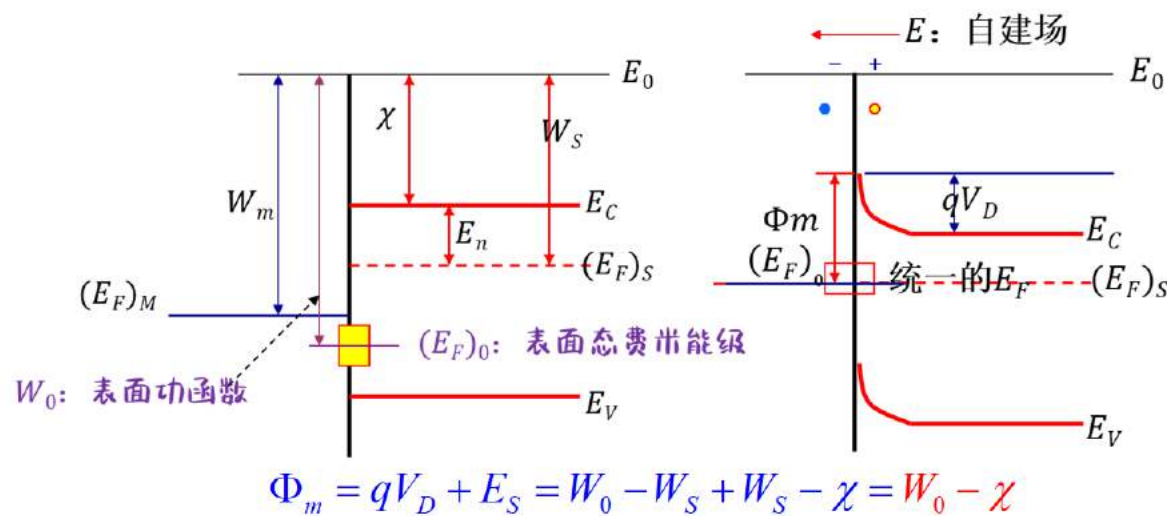
阻挡是针对多子，空穴在能带图上越往下能量越高；电子在能带图上越往上能量越高

阻挡层I-V为曲线；反阻挡层I-V为直线；

	n型	p型
$W_m > W_s$	阻挡层	反阻挡层
$W_m < W_s$	反阻挡层	阻挡层

巴丁势垒模型

考虑到表面态后的金半接触势垒模型 W_0 为表面态功函数



ϕ_m 取决于半导体本身的固有性质：电子亲和能 χ 和表面态 W_0 ，与金属功函数无关

平衡后，系统三个部分：金属+表面态+半导体的费米能级统一

结论：在巴丁势垒模型下，金属的功函数对金半接触的影响不大，故n型半导体即使在 $W_m < W_s$ ，也可形成阻挡层

肖特基接触(整流接触)

平衡时	正向偏压（金属接正）	反向偏压（金属接负）
构成动态平衡，净电流为零	形成方向从 金属到半导体的正向电流	形成方向从 半导体到金属的反向电流 反向电流很小，并趋于饱和
	半导体势垒降低；金属势垒 ϕ_m 不变； 从半导体流向金属的电子更多	半导体势垒增高；金属势垒 ϕ_m 不变； 从金属流向半导体的电子更多

结论：

- n型阻挡层：金属接正电压，形成从金属流向半导体的正向电流；
- p型阻挡层：金属接负电压，形成方向从半导体流向金属的正向电流；
- 反阻挡层没有整流作用（单向导电性）

电流电压关系： $J_0 = AT^2 \exp\left(-\frac{\Phi_m}{K_B T}\right)$ （利用温度测量肖特基势垒高度）

肖特基势垒二极管(SBD)与p-n结的比较：

SBD	p-n结	比较
电流为多子电流，越过势垒成为漂移电流 不存在电荷存储效应	电流为少子电流，先积累再扩散 存在电荷存储效应	SBD高频性能好，开关速度快
多子漂移（热运动数量级:10 ⁷ cm/s）	少子扩散（≈ 10 ⁴ cm/s）	SBD形成电流比p-n结大得多

欧姆接触

特点：接触电阻小；半导体内部载流子浓度不发生显著改变； $I - V$ 具有对称和线性关系

实现方法：考虑表面态的影响，选择高掺杂的半导体和金属接触

机理：电子的隧穿效应；

隧道穿透的几率依赖于：隧道长度： $l \propto \frac{1}{\sqrt{N_D}}$ ；隧道高度：偏置电压

