

半导体物理

刘斌

庄喆



课程基本信息

任课教师：

刘斌 bliu@nju.edu.cn

庄喆 zzhuang@nju.edu.cn

上课时间：周四，第3-4节；第7-8节

上课地点：

成绩占比：平时20%，期中40%，期末40%

2

课程的整体框架图



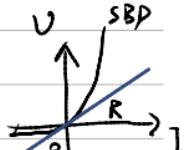
绪论

半导体 $\sigma \in [10^{-10}, 10^3]$ ($\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)

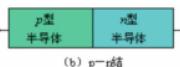
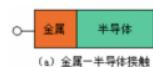
(Semiconductors)

Superconductors $\sigma > 10^3$ ($\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)

Insulators $\sigma < 10^{-13}$ ($\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)



虽然半导体器件种类繁多，但均可划分为几种基本的器件结构：



金属-半导体:

整流接触/欧姆接触-金半场效应晶体管；

p-n结:

是大部分半导体器件的关键基本结构-pnp双极型晶体管，可控硅器件，太阳能电池；

异质结:

III-V族半导体器件的基本结构-快速器件，光电器件；Al N 快！

MOS结构:

集成电路中最重要的器件结构-MOSFET。



晶体结构

原子按一定周期排列成规则的固体 (长程有序)

- > 规则外形、宏观对称
- > 解理面
- > 固定熔点
- > 各向异性

多晶体 并非长程有序
各向同性

Bravais 提出用晶体点阵 来表述晶体中原子周期排列方式

晶格

Lattice + Basis = Crystal

晶体点阵 基元

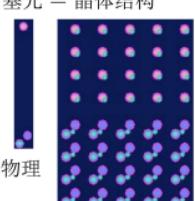
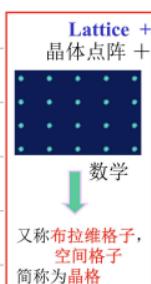
晶体结构

> 无限延展

> 平移对称

↪一部分原子用几何点所抽象

晶体结构 = 晶体点阵 (布拉维格子) + 结构基元



它是等同点的集合，反映的是理想的、无限大的、没有缺陷的晶体中，原子排列的情况。是抓住晶体核心特点（平移对称性）后的一种高度概括，将在晶体理论中起极其重要作用。

反映原子周期排列的方式

反映周期排列的内容

可以是一个原子
可以是一个分子
可以是一组原子
可以是分子集团

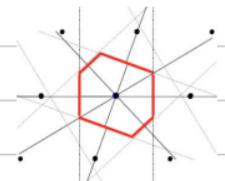
原胞 (Primitive cell)

由基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 为3个棱边组成的平行六面体晶格结构的 **最小重复单元**。其体积 $V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

每个原胞只含有 **一个格点** **有很多取法**

一种标准取法 Wigner-Seitz (WS) 原胞 \rightarrow 取法唯一
与相邻格点连线作中垂面围成的多边形

晶胞 (单胞) 体积一般是原胞的整数倍



能直观反映晶体对称性的晶格重复单元，称为晶胞。

晶胞参数：三个边长和三个边的夹角 $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$

常见布拉维格子

格点数

1. 简单立方 (Simple Cube, SC)

6

2. 面心立方 (FCC)

12

3. 体心立方 (BCC)

8

4. 简单六角 (SH)

| 晶格基矢： $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

| 满足原胞体积为 $|\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)|$

晶向、晶面及其标志

格点分布在一系列直线上，晶列 \Rightarrow 方向为晶向。

除点 A 到除点 B 的向量 $\vec{AB} = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$
则晶向为 $[l_1, l_2, l_3]$ 如 $3\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + 2\vec{a}_3 \Rightarrow [312]$

晶面指数 密勒指数

用原胞数

e.g. 立方晶格晶簇 $<111>$

晶面指数简易求法

在一平面族中，取一个不过原点的平面，它在三个坐标轴上的截距分别为 x_1 、 x_2 和 x_3 取它们的倒数之比

$$\frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3} = h : k : l$$

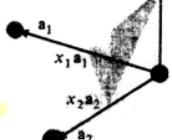
→ 定义法向



其中 h, k, l 为互质整数，则定义该晶面的面指数为 (hkl)

等效晶面（花括号）： $\{hkl\}$

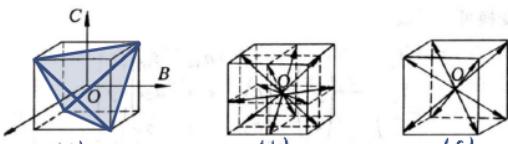
$$\{100\} = (100) + (010) + (001)$$



晶体的对称性 \rightarrow 考查物体改变变换下的对称性、不变性

$$\text{绕 } z\text{ 轴转角: } \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{中心反演 } \vec{r} \rightarrow -\vec{r}: \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

立方体对称性



- 如 (a) 图所示 3 个对称轴，转动 $\pi/2, \pi, 3\pi/2$ ，共 9 个对称操作
- 如 (b) 图所示 6 个面对角线，转动 π ，共 6 个对称操作
- 如 (c) 图所示 4 个体对角线，转动 $2\pi/3, 4\pi/3$ ，共 8 个对称操作
- 恒等操作
- 以上每个操作都可以再加上中心反演 共 $24 \times 2 = 48$ 个对称操作

正四面体 共 24 个

- π . 3 个
 - 0° 6 个
 - $\frac{2}{3}\pi, \frac{4}{3}\pi, 8$ 个
 - 恒等 1 个
- } 12 个
原 12 个
中心反演

Thm 晶体中允许的转动轴只能是1, 2, 3, 4, 6重轴

若一个物体绕某个轴旋转 k 周时保持不变

称作 n 重旋转轴 记做 n

\bar{n} : n 重旋转轴 - 反演轴

\bar{z} : $m \rightarrow$ 反映面

8个单独的对称素 $1, 2, 3, 4, 6, i, m, \bar{4}$

P: 简单格子; C: 底心格子; I: 体心格子; F: 面心格子

晶系	对称性特征	晶胞参数	所属点群	Bravais格子
三斜	只有 C_1 或 C_i	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma$	C_1, C_i	P
单斜	唯一 C_2 或 C_S	$a=b=c$ $\alpha=90^\circ \neq \beta$	C_2, C_S, C_{2h}	P, C
正交	三个 C_2 或 C_S	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	D_{2h}, C_{2v}, D_{2h}	P, C, I, F
三方	唯一 C_3 或 S_6	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	C_3, S_6, D_3 C_{3v}, D_{3d}	R
四方	唯一 C_4 或 S_4	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	C_4, S_4, C_{4h}, D_4 C_{4v}, D_{4d}, D_{4h}	P, I
六方	唯一 C_6 或 S_3	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ \neq 120^\circ$	C_6, C_{3h}, C_{3h}^2 D_6, C_{3v}, C_{3h}^2 D_{3h}	H
立方	四个 C_3	$a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	T, T_h, D_3 O, O_h	P, I, F

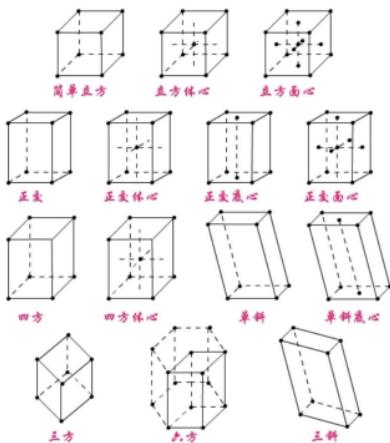
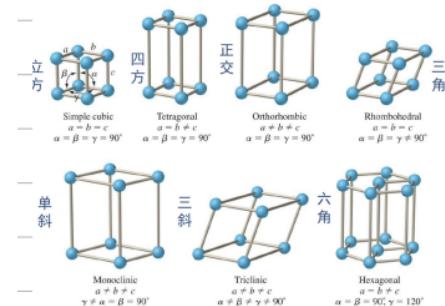


图7-57 14种Bravais立阵型式

几种典型晶体结构

堆积

把晶体中原子当作刚性圆球，讨论原子排列的紧密程度。这种紧密程度可用配位数和堆积密度来描述。

配位数：一个原子周围最近邻的原子数目。

堆积密度（致密度）：晶胞中原子所占的体积与晶胞体积之比。

显然晶体中，配位数和堆积密度越大，原子排列就越紧密。

如果晶体由同种原子构成，且把原子看成是等大刚性圆球，这些全同圆球最紧密的堆积为密堆积。密堆积对应的配位数就是最大配位数。

倒格子和布里渊区

倒格子 (Reciprocal lattice)

物理问题的描述

生根空间 (实空间, 正格子) Direct Lattice

动量 (波矢) 空间 (倒空间)
k 空间, 傅立叶空间

→ 原胞的基本

对晶格基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 的格矢 $\vec{R}_n = [n_1, n_2, n_3] \begin{bmatrix} \vec{a}_1 \\ \vec{a}_2 \\ \vec{a}_3 \end{bmatrix}$

原胞体积 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

定义一组新的基矢 $\{\vec{b}_i\}$ ($i=1, 2, 3$) s.t. $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$

则 $\{\vec{a}_i\}$ 与 $\{\vec{b}_i\}$ 互为正倒格子

对 $\{\vec{b}_i\}$ 也有位移矢量 $\vec{G}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$ 构成倒易晶阵

可证明

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega} \\ \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega} \\ \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega} \end{array} \right.$$

其中 $\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$

pf: $\because \vec{b}_1 \perp \vec{a}_2, \vec{b}_1 \perp \vec{a}_3 \therefore \vec{b}_1 = c \vec{a}_1 \times \vec{a}_2$
 $\therefore \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 = c \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = 2\pi$
 $\Rightarrow c = \frac{2\pi}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \Rightarrow \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}$

1. 两个晶阵的基本之间 正交 $\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$

2. 两个晶阵格矢面积是 2π 整数倍

$\vec{R}_n \cdot \vec{G}_{hkl} = 2\pi (n_1 h_1 + n_2 k_2 + n_3 l_3)$

3. 两个晶阵原胞体积关系

$$\Omega^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{(2\pi)^3}{\Omega}$$

4. 正晶阵面族 (h_1, h_2, h_3) 与倒晶阵格矢 $G_{h_1, h_2, h_3} = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$ 正交

即 \vec{G}_{h_1, h_2, h_3} 为 (h_1, h_2, h_3) 法向 且面间距 $d = \frac{\Omega \cdot \vec{G}}{|\vec{G}|} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$

不难证明 $\vec{G} \cdot \vec{x} = 2\pi n$ 为面系方程 ($n \in \mathbb{Z}$)

(可用点法式 $\vec{G} \cdot (\vec{x} - \frac{\vec{a}_i}{h_i}) = 0$ 而 $\vec{G} \cdot \frac{\vec{a}_i}{h_i} = 2\pi n$)

eg. 立方格子 $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$ $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}$ $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{z}$

$$Rn/d_{h_1h_2h_3} = \frac{a}{\sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}}$$

5. 正点阵和倒点阵是互易的

仅需证 $\vec{c}_1 = \frac{2\pi}{S^*} (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) \neq \vec{0}$ $S^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$

$$\vec{c}_1 = \frac{2\pi}{S^*} (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{2\pi}{S^*} \cdot \frac{2\pi}{S^*} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times \frac{2\pi}{S^*} (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)$$

利用 $\vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = \vec{B}(\vec{A} \cdot \vec{C}) - \vec{C}(\vec{A} \cdot \vec{B})$

6. 同一晶格的正格子和倒格子有相同的点阵对称性

即倒格子保留了正格子的全部宏观对称性

倒易点阵物理意义 $F(\vec{r}) = F(\vec{r} + \vec{R}_n)$

(F.A. 物理意义改)

同理 \rightarrow 傅立叶变换 $F(\vec{r}) = \sum_k A(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

$$\therefore A(\vec{k}) = \frac{1}{n} \int_R F(\vec{r}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r} = \iiint_{-\infty}^{\infty} A(k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} dk$$

用广义 $\vec{r} + \vec{R}_n$, $A(\vec{k})$ 不变可知 $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} = 1 \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{R}_n = 2\pi m$
而 $G \cdot \vec{R}_n = 2\pi n$ 故 $\vec{k} \in V\{\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3\}$

物理量在正点阵中的表述与在倒点阵中的描述符合 Fourier 变换关系

布里渊区

Brillouin Zone

布里渊区定义：在倒易点阵中，以某一格点为坐标原点，做所有倒格矢的垂直平分面，倒易空间被这些平面分成许多包围原点的多面体区域，这些区域称作布里渊区。

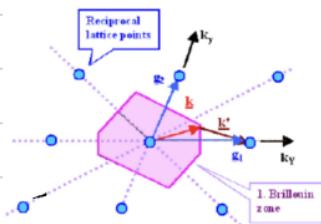
其中最靠近原点的平面所围成的区域称作第一布里渊区，第一布里渊区界面与次远垂直平分面所围成的区域称作第二布里渊区。

由于布里渊区界面是某倒格矢的垂直平面

\vec{k} : 由原点出发落在界面的矢量

$$\Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{G} = \frac{1}{2} G^2$$

布里渊区界面方程



倒易点阵与14种晶体点阵一一对应 共14种第一布里渊区

第一布里渊区形状只与布拉维点阵的几何性质有关

同一种晶体，所有布里渊区体积大小相等

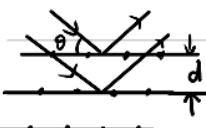
XDR X-Ray Diffraction

一个衍射花样的特征可以概括为两个方面：

一方面是衍射线在空间的分布规律（称之为衍射几何）；另一方面是衍射线的强度规律。

衍射线在空间的分布规律是由布拉维格子决定的，而衍射线的强度则由晶胞中原子的种类、数量和位置所决定的。

Bragg 定律



视X光衍射为原子平面反射

$$\text{衍射加强条件 } 2d \sin\theta = n\lambda \quad n=0, 1, 2, \dots$$

$$\lambda < 2d \text{ 不可能可见光}$$

Laue 解释

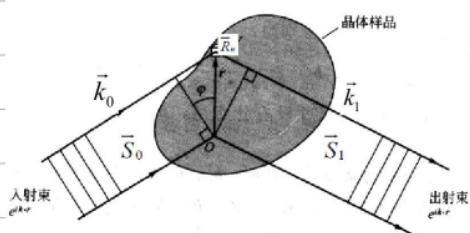
$$\text{而 } \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \hat{s}$$

考虑O点与位矢为 \vec{R}_n 的晶格点发生衍射

$$\vec{R}_n \cdot \hat{s}_0 - \vec{R}_n \cdot \hat{s}_1 = n\lambda \Rightarrow \vec{R}_n(\vec{k}_0 - \vec{k}_1) = 2\pi n$$

$$\text{而 } \vec{R}_n \cdot \vec{G}_{hkl} = 2\pi m$$

$$\therefore \vec{k}_0 - \vec{k}_1 = \vec{G}_{hkl} \quad \text{Laue 方程.}$$



入射波矢与散射波矢相差一个倒格矢矢量时将发生衍射

$$-\vec{k}_1 = \vec{G}_{hkl} - \vec{k}_0 \quad \text{平方有 } \vec{k}_1^2 = \vec{G}_{hkl}^2 - 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k}_0 + \vec{k}_0^2$$

弹性散射 波长数值不变. $\Rightarrow |\vec{k}_0| = |\vec{k}_1|$

Laue 衍射条件

①

$$\therefore 2\vec{G}_{hkl} \cdot \vec{k}_0 = \vec{G}_{hkl}^2 \quad \text{即 } \vec{G} \cdot \vec{k} = \frac{1}{2} \vec{G}^2 \quad \text{布里渊区边界方程}$$

1) 从某倒格点出发，凡是满足布里渊区边界方程的波矢的端点集合构成布里渊区界面。

2) 从某倒格点出发，凡波矢 k_0 端点落在布里渊区界面上的X射线，都满足衍射极大条件，而且其衍射束在 $k_0 - G$ 方向上。

Laue 条件 \Rightarrow Bragg 定律

$$\vec{k}_0 - \vec{k}_1 = \vec{G}_{h\bar{l}}$$

$\because k_0 = k_1 = k$ 弹性散射近似.

$$\therefore \vec{G}_{h\bar{l}} = 2k \sin \theta \quad \text{而} \quad \vec{G}_{h\bar{l}} = n \vec{G}_{l_0} \quad \rightarrow \quad \vec{G}_{l_0} \text{ 为 } \vec{G} \text{ 方向最短倒格矢}$$

$$\therefore n \vec{G}_{l_0} = 2k \sin \theta \quad \Rightarrow \quad \frac{2kn}{d} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta$$

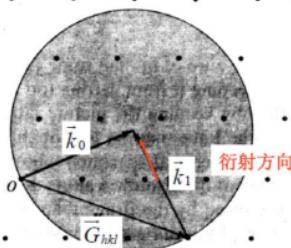
$$\therefore 2ds \sin \theta = n\lambda \quad n = 1, 2, \dots$$



Ewald 球图解法

对于给定的晶体，当入射波矢确定后，究竟在哪些方向可以观察到衍射呢？Ewald 利用反射球作图法给出了符合 Laue 条件的答案：

以入射波矢端点为圆心，凡以 k 为半径做反射球，凡落在球面上的倒格点都会满足 Laue 方程，因为原点必然落在反射球上，所以从原点到落在反射球上的其它格点恰好是一个倒格矢，故 \vec{k}_1 方向发生衍射。



三种 X 射线晶体学实验方法

1. Laue 方法 如上

2. 旋转型晶体法

3. 粉末衍射方法

影响衍射强度的因素

原子散射因子

正点阵 结晶上一个原子 电子局域在原子周围
强度满足 Thomson 公式 $I_e = I_0 \cdot \frac{e^4}{m c^2} \cdot \left(\frac{4 \cos^2 \theta}{\lambda^2} \right)$

电子受电磁场影响后
受迫辐射出与入射
电磁波等振幅的电波流

→ 一个原子的相干散射振幅和一个电子的相干散射振幅之比

$$\text{def: } f_a := \frac{A_a}{A_e} (= f_a(\theta, \lambda, \dots))$$

则原子散射波强度 $I_a = f_a^2 I_e$

几何结构因子

晶胞内只有一个原子 \rightarrow Bragg 公式 Laue 条件的 d 可确定
原子大小和位置

但若晶胞含两个以上原子 (FCC/BCC/金刚石/NaCl/...)
必须考虑原子相对位置及其种类

Def. 一个晶胞内所有原子/离子的散射振幅与电子散射振幅之比

$$F = \frac{A_b}{A_e}$$

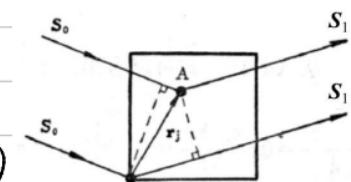
设 O, A 处各有一原子 (O 为原点)

光程差 $\delta_j = \vec{r}_j \cdot (\hat{s}_0 - \hat{s}_1)$

$$\Rightarrow \text{相位差 } \phi_j = \frac{2\pi}{\lambda} \delta_j = \vec{r}_j \cdot (\vec{k}_0 - \vec{k}_1)$$

若为 HKL 面发生衍射 $\Rightarrow \vec{k}_0 - \vec{k}_1 = \vec{G}_{HKL}$

$$\Rightarrow \phi_j = \vec{G}_{HKL} \cdot \vec{r}_j$$



晶胞内两个原子的相干散射

一个晶胞内所有原子相干散射振幅需对所有原子求和

$$A_b = A_e \sum_j f_j e^{i\phi_j} \Rightarrow F_{HKL} = \frac{A_b}{A_e} = \sum_j f_j \exp(i \vec{G}_{HKL} \cdot \vec{r}_j)$$

$$\text{衍射强度} \propto |F_{HKL}|^2 = \left[\sum_j f_j \cos(\vec{G}_{HKL} \cdot \vec{r}_j) \right]^2 + \left[\sum_j f_j \sin(\vec{G}_{HKL} \cdot \vec{r}_j) \right]^2$$

结构因子有可能使 Laue 条件允许的某些衍射斑点消失

对正边长为 a 的立方格子，倒格矢 $\vec{G} = H\vec{b}_1 + K\vec{b}_2 + L\vec{b}_3$

$$\therefore \vec{F}_{HKL} = \sum_{j=1}^n f_j \exp\left[\frac{2\pi i}{a}(H\hat{x} + K\hat{y} + L\hat{z})\right] = \frac{2\pi}{a}(H\hat{x} + K\hat{y} + L\hat{z})$$

1) 简单立方 只 1 个原子 $(0,0,0)$ $F_{HKL} = f_a$

2) 体心立方 2 个原子 $(0,0,0)$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ $F_{HKL} = f_a [1 + 0^{i\pi(H+K+L)}]$

$H+K+L$ 为偶数: $F_{HKL} = 2f_a \Rightarrow$ 出现衍射峰

奇数: $F_{HKL} = 0 \Rightarrow$ 不出现, 衍射面消光

3) 面心立方 4 个原子 $(0,0,0)$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

$$F_{HKL} = f_a [1 + e^{i\pi(H+K)} + e^{i\pi(K+L)} + e^{i\pi(L+H)}] \\ = f_a [1 + \cos\pi(H+K) + \cos\pi(K+L) + \cos\pi(L+H)]$$

H, K, L 全奇、全偶 $F_{HKL} = 4f_a$

H, K, L 奇偶混杂 $F_{HKL} = 0$

因此 Laue 条件需使用几何结构因子修正

Selection Rules for Reflection in Cubic Crystals

(hkl)	$h^2+k^2+l^2$	SC	BCC	FCC	
100	1	✓	✗	✗	
110	2	✓	✓	✗	
111	3	✓	✗	✓	
200	4	✓	✓	✓	
210	5	✓	✗	✗	
211	6	✓	✓	✓	
220	8	✓	✓	✓	
300	9	✓	✗	✗	
310	10	✓	✓	✗	
311	11	✓	✗	✓	
222	12	✓	✓	✓	
320	13	✓	✗	✗	
321	14	✓	✓	✗	
400	16	✓	✓	✓	

4) 金刚石 八个质子

$$\begin{aligned}
 F_{HKL} &= f_a [1 + \cos \pi(H+k) \cos \pi(k+l) + \cos \pi(l+h) \\
 &\quad + \exp(i\frac{\pi}{2}(H+k+l)) + \exp(i\frac{\pi}{2}(3H+3k+l)) + \exp(i\frac{\pi}{2}(3H+k+3l)) + \exp(i\frac{\pi}{2}(H+3k+3l))] \\
 &= f_a [1 + \cos \pi(H+k) \cos \pi(k+l) + \cos \pi(l+h)] [1 + \exp(i\frac{\pi}{2}(H+k+l)) \xrightarrow{A} \xrightarrow{B}]
 \end{aligned}$$

1° H, K, L 奇偶混杂 则 A=0 ∴ $F_{HKL}=0$ 衍射面消光

2° H, K, L 均为奇数 则 A=4 $|B|=\sqrt{2}$

$$\therefore |F_{HKL}| = 4\sqrt{2} f_a \text{ 出现衍射峰}$$

3° H, K, L 均为偶数 则 A=4 $B=1 + \cos \frac{H+K+L}{2} \cdot \pi$

1) $\frac{H+K+L}{2}$ 为奇数 则 B=0 ∴ $F_{HKL}=0$ 衍射面消光

$$\text{此时 } H+k+l = 2(2m+1) \quad m=0, 1, 2, \dots$$

2) $\frac{H+K+L}{2}$ 为偶数 则 B=2 $\therefore F_{HKL}=8f_a$ 出现衍射峰

晶体结合

$$\text{结合能 } E_b = E_N - U_0 \rightarrow \text{晶体在OK时能量}$$

\downarrow
N个自由电子的能量和

OK时 把晶体原子分成无限远的N个粒子所需要能量 ($E_N=0$)

$$E_b = -U_0 \quad (\text{一般 } m < n)$$

相互作用势

$$U(r) = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}$$

吸引势 排斥势

(要求 $r > 0$)

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} U > 0$$

$$\frac{\partial}{\partial r} U = \frac{a m}{r^{m+1}} - \frac{b n}{r^{n+1}} = 0 \Rightarrow r_c = \left(\frac{n b}{m a}\right)^{\frac{1}{n-m}}$$

平衡位置

2.3 晶体结合能

离子晶体的结合能

离子晶体中，任意离子间的相互作用能可以写作：

$$U(r_{ij}) = \pm \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^n}$$

库仑能

泡利排斥能

其中e为电子电荷， z_1 和 z_2 是两离子的价电子数。同性电荷离子之间相斥，取“+”号；异性电荷离子之间相吸，取“-”号。若晶体中正负离子总数为N，那么晶体的相互作用能为：

$$U = \frac{1}{2} N \sum_{i \neq j}^N \left(\pm \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^n} \right) \quad \begin{array}{l} \text{式中同性电荷取正值, 异性} \\ \text{电荷取负值} \end{array}$$

因子1/2：表示为两个离子所共有

取 $r_{ij} = a_i r$ r 是最近邻两离子间距离， a_i 是晶格结构决定的系数

$$U = -\frac{1}{2} N \left[\frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r^*} \sum_{i \neq j}^N \left(\pm \frac{1}{a_i} \right) - \frac{1}{r^n} \sum_{i \neq j}^N \frac{b}{a_i^n} \right] \quad \begin{array}{l} \text{式中同性电荷取负值,} \\ \text{异性电荷取正值} \end{array}$$

→ 记为 B

马德隆常数 谓为 α

$$\text{则 } U = -\frac{1}{2} N \left[\frac{z_1 z_2 \alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r^*} \alpha - \frac{B}{r^n} \right]$$

$$\text{且要求 } \left. \frac{\partial U}{\partial r} \right|_{r_0} = 0$$

$$B = \frac{z_1 z_2 \alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 n} r_0^{n-1}$$

$$r_0 = \left(\frac{4\pi\epsilon_0 n B}{z_1 z_2 \alpha e^2} \right)^{\frac{1}{n-1}}$$

$$U_0 = -\frac{1}{2} N \frac{z_1 z_2 \alpha e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right)$$

晶体处于稳定态时的能量

能带理论

$$\begin{cases} \psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r}) \\ u_k(\vec{r} + \vec{R}_n) = u_k(\vec{r}) \end{cases} \Leftrightarrow \psi_k(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \psi_k(\vec{r})$$

$$\psi_k(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{R}_n)} u_k(\vec{r} + \vec{R}_n) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \cdot e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \psi_k(\vec{r})$$

Pf:

Def: $\hat{T}_R : T_R f(r) = f(r+R)$ $\forall j T_R T_{Rj} = T_R T_R = T_{R+R}$

$\hat{H}_{R\text{总}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + U(r)$
 $= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{R+r}^2 + U(r+R) \Rightarrow T_R \hat{H} = \hat{H}$

$\forall j \hat{T}_R(\hat{H} \psi(r)) = \hat{H}_{R+r} \psi(R+r) = \hat{H}(\hat{T} \psi(r))$
 $\Rightarrow \hat{T}_R \hat{H} = \hat{H} \hat{T}_R$

$\Rightarrow \hat{H}$ 与 \hat{T} 有相同本征态

$$\hat{T}_{R_1} \hat{T}_{R_2} \psi = \lambda_{R_2} \hat{T}_{R_1} \psi = \lambda_{R_1} \lambda_{R_2} \psi = \lambda_{R_1+R_2} \psi$$
 $\Rightarrow \text{记} \lambda_R = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}}$

$\forall j \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \vec{R}) = \psi(\vec{r} + n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3) = \hat{T}_{a_1}^{n_1} \hat{T}_{a_2}^{n_2} \hat{T}_{a_3}^{n_3} \psi(\vec{r})$
 $= e^{-i\vec{k}(n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3)} \psi_n(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r})$

周期性边界条件 $\psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r} + N_i \vec{a}_i)$ ($i=1, 2, 3$)

$\forall i e^{i\vec{k} \cdot N_i \vec{a}_i} = 1 \Rightarrow \vec{k}_i \cdot N_i \vec{a}_i = 2\pi l_i$ ($i=1, 2, 3, l_i \in \mathbb{N}$)

$$\vec{k}_0 \cdot \vec{a}_i = 2\pi \frac{l_i}{N_i}$$

$$\exists i \lambda \vec{k} = \frac{l_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \vec{b}_3 \quad \forall j \vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$$

每个格点占有空间体积 $\Delta K = \left| \frac{l_1}{N_1} \vec{b}_1 \cdot \left(\frac{l_2}{N_2} \vec{b}_2 \times \frac{l_3}{N_3} \vec{b}_3 \right) \right| = \frac{(2\pi)^3}{V}$

有效质量

→ 一阶导为 0

考虑在能带顶部与底部的电子 $\Rightarrow E(k)$ 极大 / 极小

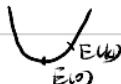
$$E(k) = E(0) + E'(0) \cdot k + \frac{1}{2} E''(0) \cdot k^2 + \dots \quad (\text{展开至 } k^2)$$

$$\approx E(0) + \frac{1}{2} E''(0) \cdot k^2$$

$$E(k) - E(0) = \frac{1}{2} E''(0) \cdot k^2 \quad (\text{为了满足 } E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ 这种形式})$$

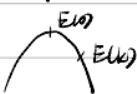
有 $E''(0) = \frac{\hbar^2}{m_n^*}$ m_n^* 为电子有效质量

导带底部 $E(k) > E(0) \Rightarrow m_n^* > 0$ 正值



m_n^* 与 $E''(0)$ 同号

(价带) 顶部 $E(k) < E(0) \Rightarrow m_n^* < 0$ 负值 (加上负号为负质量)



m_n^* 与 $E''(0)$ 同号.

$$m_n^* = \frac{\hbar^2}{E''(0)} = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}|_{k=0}}$$

极值附近用有效质量代替自由电子质量后
电子在极值附近具有与自由电子相同的能量形式

三维空间 k_x, k_y, k_z 读 k 值 空间内 \vec{k} 为波矢

(1) 各向同性

$$E(\vec{k}) - E(\vec{k}_0) = \frac{\hbar^2}{2} \frac{(\vec{k} - \vec{k}_0)^2}{m^*}$$

则 k 空间内 某 $E(\vec{k})$ 对应一组 (k_x, k_y, k_z) 对应一个曲面 如图 

(2) 各向异性

$$\sum_{x,y,z} \frac{(k_x - k_{0x})^2}{2m_n^*(E-E_0)} = 1 \quad \Rightarrow \text{可能为椭球}$$

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right|_{k=0} \quad \text{带越亮} \quad \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \text{ 越大. } m_n^* \text{ 越小}$$

半导体杂质和缺陷能级

Si: Ge

一、替换式 间隙式杂质

二、施主杂质 施主能级

e.g. P 占据了 Si 位置
 则 电子略加能量，就可以进入导带参与导电

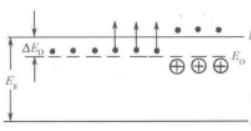


图 2-4 施主能级和施主电离

$\Delta E_D = E_c - E_D \ll E_g$
 $\Delta E_B = E_v - E_D$

依靠电子导电半导体 \rightarrow 电子型 / n 型半导体
 电子浓度 $>$ 空穴浓度
 好 好

三、受主杂质、受主能级 亚族 提供空穴 \rightarrow 空穴 p 型半导体

类似施主电离 有施主电离

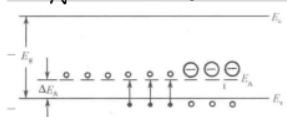


图 2-6 受主能级和受主电离

补偿

1) 有效杂质浓度 (谁大谁占主导)

2) 杂质补偿 形成 P-n 结

3) 高度补偿 \neq 高纯半导体

半导体中载流子的统计分布

电子和空穴 $\begin{cases} \text{热激发} \\ \text{杂质电离} \end{cases}$ 吸收E 但也会复合 \Rightarrow 放出E
热平衡载流子

热平衡状态下 电子浓度 空穴浓度 载流子浓度

允许的量子态、按能量如何分布

电子在允许的量子态中如何分布

状态密度 $E \sim E + dE$ 内含 dZ 个量子状态

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

① 计算 k 空间中的量子状态密度

② 计算 k 空间中与能量 $E \sim E + dE$ 所对应 k 空间的体积 dV_k

③ k 空间 dV_k 内量子状态数量 $= P_{\text{空间}} \cdot dV_k = dZ$

$$\text{④ } g(E) = \frac{dZ}{dE}$$

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

k 空间的状态密度

$$\begin{cases} k_x = \frac{2\pi n_x}{L} \\ k_y = \frac{2\pi n_y}{L} \\ k_z = \frac{2\pi n_z}{L} \end{cases}$$

(n_x, n_y, n_z) - \vec{k} 对应
一个 \vec{k}

$$\text{那么 } P = \frac{2}{8\pi^2 V} = 2 \cdot \frac{V}{8\pi^2} \quad (\text{2是因为自旋})$$

状态密度

$$\text{导带底 } E(k) = E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad dE = \frac{\hbar^2 k}{m_n^*} dk \quad k = \frac{(E - E_C)^{\frac{1}{2}} (2m_n^*)^{\frac{1}{2}}}{\hbar}$$

$$\therefore dZ = \frac{2V}{8\pi^3} \cdot 4\pi k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk = \frac{V}{\pi^2} k \frac{m_n^*}{\hbar^2} dE$$

$$= \frac{V}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{1}{2}}}{\hbar^2} (E - E_C)^{\frac{1}{2}} dE \quad (\text{球体 } dV_k = d(\frac{4}{3}\pi k^3))$$

$$\therefore g(E) = \frac{dz}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$$

稍简 $g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{(8m_n^* m_y^* m_z^*)^{\frac{1}{2}}}{h^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$

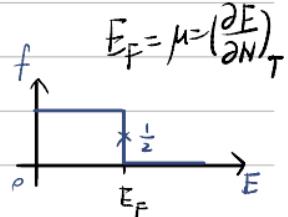
定义 $N(E) = \frac{g(E)}{V}$ 单位体积、 $E=E$ 的量子态数

推导: $N(E) = \frac{s(8m_n^* m_i^*)^{\frac{1}{2}}}{2\pi^2 h^3} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$

→ 简并

费米分布函数

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



$T > 0K$ 时

$E < E_F$ $f > 50\%$

$E = E_F$ $f = 50\%$

$E > E_F$ $f < 50\%$

)

\Rightarrow 反映电子填充规律

当 T 升高时 $E > E_F$ 部分 f 会变大

通常说 费米能级标志了电子填充能级的水平

$$E - E_F \gg k_B T$$

玻尔兹曼分布函数.

$$f_B(E) = \exp(-\frac{E - E_F}{k_B T})$$

非简并

① 当 $E - E_F \gg k_B T$. $f_p \approx f_B$

f 很小. 电子很少. 泡利不相容可忽略

$$k_B T \approx 0.02 \text{ eV}$$

($T = 300K$)

$$1 - f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E - E_F}{k_B T})} \approx \exp(\frac{E_F - E}{k_B T})$$

那么 可计算 导带 电子浓度

$$n_o = \int_{E_c}^{E_c'} N(E) f(E) dE = \int_{E_c}^{E_c'} \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \exp(-\frac{E - E_F}{k_B T}) (E - E_c)^{\frac{1}{2}} dE$$

$$\text{令 } x = \frac{E - E_F}{k_B T}$$

$$n_o = \frac{1}{2\pi^2} \frac{(2m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} (k_B T)^{\frac{3}{2}} \exp(\frac{E_c - E_F}{k_B T}) \int_0^{\infty} x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx$$

$$\int_0^{+\infty} x^{\frac{1}{2}} e^{-x} dx = \sqrt{\pi}$$

令 $E_c' \rightarrow +\infty$

$$n_o = 2 \left(\frac{m_n^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T} \right)$$

$\downarrow N_c$

$$= N_c \exp \left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T} \right)$$

$$N_c = 2 \frac{(2\pi m_n^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \alpha T^{\frac{3}{2}}$$

$$\text{对电子 } p_o = 2 \left(\frac{m_p^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left(-\frac{E_F - E_v}{k_B T} \right) \quad N_v = 2 \frac{(2\pi m_p^* k_B T)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \alpha T^{\frac{3}{2}}$$

$$n_o p_o = N_c N_v \exp \left(-\frac{E_c - E_v}{k_B T} \right) = N_c N_v \exp \left(-\frac{E_g}{k_B T} \right) \alpha T^3$$

$$= 4 \left(\frac{k_B}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_n^* m_p^*)^{\frac{1}{2}} T^3 \exp \left(-\frac{E_g}{k_B T} \right)$$

电子和空穴浓度乘积与 E_g 无关，
给定半导体与 T 的 $\frac{m^*}{E_g}$
便可得到 $n_o p_o$ 。若可确定 $E_F \Rightarrow n_o, p_o$ 确定

本征半导体

$$\text{即 } n_o \cdot p_o = n_i^2$$

$$n_o = p_o \quad \text{记为 } n_i$$

$$n_i = \sqrt{n_o p_o} = \sqrt{N_c N_v} \exp \left(-\frac{E_g}{2k_B T} \right)$$

$$T \uparrow n_i \uparrow$$

$$N_c \exp \left(-\frac{E_c - E_F}{k_B T} \right) = N_v \exp \left(-\frac{E_F - E_v}{k_B T} \right).$$

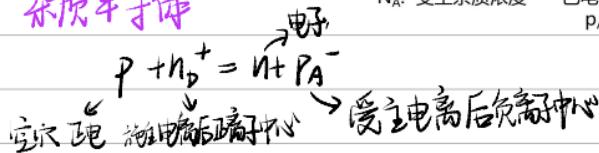
$$\ln \frac{N_c}{N_v} = \frac{E_c + E_v}{2k_B T} - \frac{2E_F}{k_B T} \quad \text{记此时的 } E_F \text{ 为 } E_i$$

$$E_i = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln \frac{m_p^*}{m_n^*} \approx \frac{E_c + E_v}{2}$$

N_D : 施主杂质浓度 --- 已电离 n_D^+ ; 未电离 n_D ;
 $n_D^+ + n_D = N_D$

N_A : 受主杂质浓度 --- 已电离 p_A^- ; 未电离 p_A ;
 $p_A^- + p_A = N_A$

杂质半导体



给出结论 证明见 3.7

电子占据施主能级的几率:

$$f_D(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} e^{\frac{E_F - E_D}{k_B T}}}, \quad g_D = 2$$

空穴占据受主能级的几率:

$$f_A(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{g_A} e^{\frac{E_F - E_A}{k_B T}}}, \quad g_A = 4$$

当: $E_D - E_F \gg k_B T$, $f_D(E) \sim 0$, $n_D \sim 0$, $n_D^+ \sim N_D$

当: $E_D - E_F = 0$, $f_D(E) = 2/3$, $n_D = 2N_D/3$, $n_D^+ \sim N_D/3$

当: $E_F - E_D \gg k_B T$, $f_D(E) \sim 1$, $n_D \sim N_D$, $n_D^+ \sim 0$

1、施主能级上的电子浓度:

$$n_D = N_D f_D(E) = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{g_D} e^{\frac{E_F - E_D}{k_B T}}}$$

2、受主能级上的空穴浓度:

$$p_A = N_A f_A(E) = \frac{N_A}{1 + \frac{1}{g_A} e^{\frac{E_F - E_A}{k_B T}}}$$

3、电离施主浓度:

$$n_D^+ = N_D - n_D = N_D (1 - f_D(E)) = \frac{N_D}{1 + g_D e^{\frac{E_F - E_D}{k_B T}}}$$

4、电离受主浓度:

$$p_A^- = N_A - p_A = N_A (1 - f_A(E)) = \frac{N_A}{1 + g_A e^{\frac{E_F - E_A}{k_B T}}}$$

只有一种杂质

引入的能级为 E_D/E_A

N_D/N_A 即为量子密度

(单位体积 $\epsilon = E_D/E_A$)

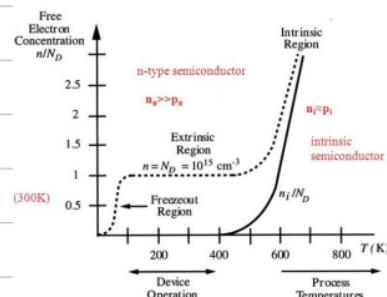
的量子态数, 与 $N(E)$ 一致

就一种 E_D/E_A

$$\therefore n_D = N_D f_D, \quad p_A = N_A f_A$$

下面 只考虑 n 型半导体 且仅含一种施主杂质
 则 $P + n_D^+ = n$ (无受主负电中心)

$$N_c \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) + \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right)}$$



低温杂质电离区: 低温弱电离 --- 中间电离区;
 杂质饱和电离区: 强电离 --- 过渡区;
 高温本征激发区: 高温本征激发;

OK	300K	600K
$n = 0$	$n = N_D$	$n = p = n_i$
$p = 0$	$p = n^2/N_D$	本征激发
无本征激发	杂质全部电离	
无杂质电离		

一、低温弱电离区

仅少量杂质电离 而本征激发更少 $\rightarrow p \ll 1, p \rightarrow 0$

$$n = n_D^+ + p \Rightarrow n \approx n_D^+$$

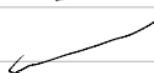
$$\text{故 } N_c \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right)} = n$$

$$\hookrightarrow n_D^+ = f_D(E) \cdot N_D \ll N_D \quad f_D(E) \text{ 分母很大} \quad 2 \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) \gg 1$$

$$\Rightarrow N_c \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) = \frac{1}{2} N_D \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) = n \rightarrow n = \frac{\sqrt{N_c N_D}}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{2 k_B T}\right)$$

$$\Rightarrow E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \left(\frac{k_B T}{2}\right) \ln \frac{N_D}{2 N_c} = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{1}{2} k_B T \left(\ln \frac{N_D}{2} - \ln \frac{2(m_n^* k)^{\frac{3}{2}}}{2 \pi h^2} - \frac{3}{2} \ln T \right)$$

$$\text{则 } \frac{dE_F}{dT} = \frac{E_C + E_D}{2}$$



如图所示

$$\frac{dE_F}{dT} = \frac{k_B}{2} \ln \frac{N_D}{2 N_c} - \frac{k_B T}{2} \times \frac{3}{2} = \frac{k_B}{2} \left(\ln \frac{N_D}{2 N_c} - \frac{3}{2} \right)$$

令 $\frac{dE_F}{dT} = 0$ 当 T 使 $N_c = \frac{e^{-\frac{3}{2}}}{2} N_D \approx 0.11 N_D$ 时, E_F 有 $(E_F)_{\max}$

对于同材料, N_D 越大, $(E_F)_{\max}$ 所需 T 最大 ($(E_F)_{\max} = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{3}{4} k_B T_m$)

$$n = \sqrt{\frac{N_c N_D}{2}} \exp\left(-\frac{\Delta E_D}{2 k_B T}\right) \propto T^{\frac{3}{4}} \exp\left(\frac{-\Delta E_D}{2 k_B T}\right)$$

$$\ln n = \frac{1}{2} \ln \frac{N_c N_D}{2} - \frac{\Delta E_D}{2 k_B T}$$

$\ln n \sim T^{-\frac{3}{4}}$ 图中为直线

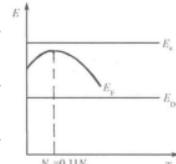
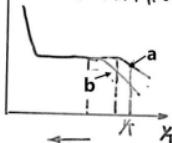


图 3-9 低温弱电离区
 E_F 与 T 的关系

讨论2: a和b哪个杂质的电离能大?

不同杂质半径的 N_D



a: ΔE_D 小

b: ΔE_D 大

T一定时 ΔE_D 小, n 大
 ΔE_D 大, n 小

ΔE_D 小, 进入强电离区温度低;
 ΔE_D 大, 进入强电离区温度高;

强电离区

二、半等电离区

不满足 $n_p^+ \ll N_D$

但本征激发 p 仍有 $p \ll 1$

故仍有

$$n \approx n_p^+$$

即

$$N_c \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right)}$$

$$\frac{y}{2} \frac{N_c}{N_D} \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) (y+1) = 1 \quad \frac{1}{2} x = \frac{N_c}{2N_D} \exp\left(\frac{-\Delta E_F}{k_B T}\right)$$

$$y^2 + y - \frac{1}{x} = 0 \quad y = \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{4}{x}}}{2}$$

$$-\frac{E_C - E_F}{k_B T} = \ln \frac{y}{2} \quad \Rightarrow \quad E_F = E_D + k_B T \ln \frac{\sqrt{1 + \frac{4}{x}} - 1}{4}$$

$$E_F = E_D + k_B T \ln \frac{\sqrt{1 + \frac{8N_D}{N_c} \exp\left(\frac{\Delta E_F}{k_B T}\right)} - 1}{4} \quad T \rightarrow 0^+ \text{ 时 } x \rightarrow 0^+$$

$$\lim_{T \rightarrow 0^+} E_F = E_D + k_B T \ln \frac{\frac{1}{4}}{4} = E_D + k_B T \ln \frac{1}{2x} \quad \text{与低温度等价 } (y^2 = \frac{1}{x})$$

考虑 T 时 E_F 当 E_F 低至 E_D

$$\exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) = 1$$

$$\text{则 } n_p^+ = \frac{N_D}{1 + g_0 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right)} = \frac{N_D}{3}$$

三、强电离 (饱和区)

仍有 $p \ll 1$

$$\text{但 } n_p^+ \approx N_D \Rightarrow n = N_D$$

$$E_D - E_F \gg k_B T \\ f_0(E) \rightarrow 1$$

$$N_c \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) = N_D \Rightarrow E_F = E_C + k_B T \ln \frac{N_D}{N_c}$$

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{g_0} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right)} \sim 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) \ll 1$$

代入 N_c 可得温度

$$n_D \approx 2N_D \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right) = 2N_D \frac{N_D}{N_c} \exp\left(\frac{\Delta E_F}{k_B T}\right)$$

$$\therefore D^- = 2 \frac{N_D^2}{N_c} \exp\left(\frac{\Delta E_F}{k_B T}\right) \quad \text{有 } n_D \approx D^- N_D$$

$D^- \leq 10\%$ 表示杂质电离较弱

四、过渡区

未损全部电离 $n_p^+ \approx N_D$ ($n_D \ll 1$)

本征激发已需考虑，但不强 \rightarrow 空穴P存在

$$n = N_D + p \quad \rightarrow n_p = n_i^2 \text{ 联立}$$

$$E_F = E_i + k_B T \operatorname{arsh} \left(\frac{N_D}{2n_i} \right)$$

$$\textcircled{1} \quad N_D \gg n_i \quad \begin{cases} n = N_D + \frac{n_i^2}{N_D} \\ p = \frac{n_i^2}{N_D} \end{cases}$$

$$E_F = E_i + k_B T \ln \left(\frac{\frac{N_D + \sqrt{N_D^2 + 4n_i^2}}{2}}{n_i} \right) \approx E_i + k_B T \ln \frac{N_D}{n_i}$$

$$\left(= E_i + k_B T \ln \frac{N_D}{N_c \exp(-\frac{E_c - E_i}{k_B T})} = E_c + k_B T \ln \frac{N_D}{N_c} \right)$$

$$\textcircled{2} \quad N_D \ll n_i \quad E_F \rightarrow E_i \quad \begin{cases} n = \frac{N_D}{2} + n_i \\ p = -\frac{N_D}{2} + n_i \end{cases} \Rightarrow \text{均等于 } n.$$

↓简并区

五、本征激发 $n = N_D + p$

$$\begin{cases} n = \frac{N_D}{2} + n_i \\ p = -\frac{N_D}{2} + n_i \end{cases}$$

一般半导体

若含少量 N_A 的n型半导体 $n_p^+ + p = P_A^- + n$

$$P_A^- + N_D + P_A = n_p + N_A + n_D \quad \Leftarrow$$

$$\text{极低温 } E_F = E_D + k_B T \ln \left(\frac{N_D - N_A}{2N_A} \right)$$

$$\text{若 } N_D \gg N_A \quad E_F = E_D - \ln \frac{N_D}{N_A}$$

§ 4 半导体の導電性

$$I = \frac{V}{R} \quad R = \rho \frac{l}{S} = \frac{1}{\sigma} \frac{l}{S}$$

$$J = \frac{\partial I}{\partial S} = \frac{V}{R \Delta S} = \sigma \frac{V}{l} = \sigma E \quad (\vec{J} = \sigma \vec{E})$$

$$I = \frac{-nq \bar{v}_d t s}{t} = -nq \bar{v}_d s \Rightarrow J = -nq \bar{v}_d = \sigma E$$

$E \uparrow \rightarrow I \uparrow \rightarrow J \uparrow \rightarrow \bar{v}_d \uparrow$ 故 $\bar{v}_d = \mu E$

μ : 单位场强下 电子的平均漂移速度 — 迁移率

$$\text{习惯取正值} \quad \mu = |\bar{v}_d| \Rightarrow J = nq \mu E \Rightarrow \sigma = nq \mu$$

$$\text{同时考虑 } n, p \quad J = (nq \mu_n + p q \mu_p) \sigma \Rightarrow \sigma = nq \mu_n + p q \mu_p$$

$$n \gg p : \sigma = nq \mu_n \quad p \ll n : \sigma = nq \mu_p \quad n=p=n_i : \sigma = n_i q (\mu_n + \mu_p)$$

主要散射机构 — 本原原因、周期势场被破坏 \rightarrow 出现附加势场

1. 电离杂质的散射

浓度为 N_i 的电离杂质、 P_i 为载流子散射概率、 τ 为平均自由时间

$$P_i \propto N_i T^{-\frac{3}{2}} \quad \tau \propto P_i^{-1} \quad (T^{\frac{3}{2}} N_i^{-1})$$

2. 晶格振动的散射

\hookrightarrow 引起原子间距变化 \rightarrow 周期性打破

3. 其他

e.g. 中性杂质散射 (杂质不电离)
位错散射

§4.3 迁移率与载流浓度和温度的关系

§4.3.1 平均自由时间 τ 与散射概率 P $P\tau = 1$

设 $N(t)$ 为 t 时刻 尚未遭到散射的电子数.

$$dN(t) = -N(t)P dt \Rightarrow N(t) = N_0 e^{-Pt}$$

dt 内有 $N_0 Pe^{-Pt} dt$ 数量被散射 \Rightarrow 则自由时间为 τ

则 $\tau = \frac{1}{N_0} \int_0^{+\infty} t \cdot N_0 Pe^{-Pt} dt$ 可算出 $\tau = \frac{1}{P}$

§4.3.2 σ, μ, τ 关系

考虑均匀电场 E 沿 x 方向, $v_x = v_{x0} - \frac{qE}{m_n^*} t$

实际上 $\bar{v}_{x0} = 0$ (表示每次散射后, 速度方向任意)

$$\therefore \bar{v}_x = \bar{v}_{x0} - \frac{1}{N_0} \int_0^{\infty} \frac{qE}{m_n^*} N P e^{-Pt} dt = - \frac{qE}{m_n^*} \tau_n$$

$$\therefore \mu_n = \frac{|\bar{v}_x|}{E} = \frac{q\tau_n}{m_n^*}$$

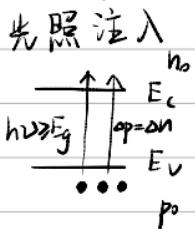
$$\sigma = n q (\mu_n + \mu_p) = \frac{n q^2 \tau_n}{m_n^*} + \frac{P q^2 \tau_p}{m_p^*}$$

对碰, 6 个旋转椭球面, $J_x = \frac{n}{3} q (\mu_1 + \mu_2 + \mu_3) E_x$

$$\therefore \mu_c = \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 \quad \text{并令 } \mu_c = \frac{q\tau_n}{m_c}$$

$$\text{可知 } \frac{1}{m_c} = 3 \left(\frac{1}{m_1} + \frac{2}{m_2} \right) \quad m_c \text{ 为电导有效质量}$$

§5. 非平衡载流子



对 n 型 $n_0 \gg p_0$

$$p_0 \ll \Delta p = \Delta n \ll n_0$$

$$p_0 + \Delta p \approx \Delta p$$

$$n_0 + \Delta n \approx n_0$$

p 型 $p_0 \ll n_0$

$$n_0 \ll \Delta n = \Delta p \ll p_0$$

$$n_0 + \Delta n \approx \Delta n$$

$$p_0 + \Delta p \approx p_0$$

对少子影响相当大

故非平衡少子载流子起着重要作用

当光照撤去

\Rightarrow 非平衡载流子逐渐消失

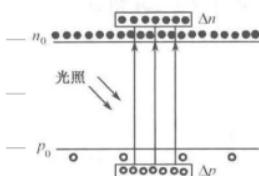


图 5-1 光照产生非平衡载流子

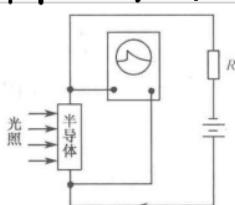


图 5-2 光注入引起附加光电导

设净复合寿命为 τ

$$\frac{d(\Delta p(t))}{dt} = -\xi \cdot \Delta p(t) \Rightarrow \Delta p(t) = P_0 e^{-\frac{\xi t}{\tau}}$$

$$\therefore \bar{\tau} = \frac{\int_0^{+\infty} P_0 \xi e^{-\frac{\xi t}{\tau}} t dt}{P_0} = \frac{1}{\xi} = \tau \quad \therefore \Delta p(t) = P_0 e^{-\frac{t}{\tau}}$$

热平衡：产生率 $S_{热} = R$

加光器 $S_{光} \rightarrow S_{热} + S_{光} > R$ 则 R 升至 R'

$U = R' - S_{热}$ 为净复合率 (单位时间、体积内复合掉的非平衡载流子)

准费米能级

导带、价带自身处平衡态 \Rightarrow 费米能级与统计分布函数各自适用

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{F_n}}{k_B T}\right) \quad p = N_v \exp\left(-\frac{E_v - E_{F_p}}{k_B T}\right)$$

$$= n_0 \exp\left(-\frac{E_c - E_{F_{n0}}}{k_B T}\right) \quad = p_0 \exp\left(-\frac{E_v - E_{F_p}}{k_B T}\right)$$

$$= n_i \exp\left(-\frac{E_c - E_{F_{n_i}}}{k_B T}\right) \quad = n_i \exp\left(-\frac{E_v - E_{F_{p_i}}}{k_B T}\right)$$

非平衡少子载流子的准费米能级偏离平衡时费米能级更多

$$np = n_i^2 \exp\left(\frac{E_{F_n} - E_{F_p}}{k_B T}\right) > n_i^2$$

复合理论

1. 直接复合

↳ 适用于 { 直接辐射复合
声子跃迁过程

产生率 单位 t 与 V 所产生的电子空穴对数

复合率

复合的对数

令 r 为电子与空穴复合的几率，则复合率 $R = r np$

↳ 仅是温度的函数

考虑产生率 G ，认为非简并下不受 n, p 影响

$$\text{则 } G = G_{\text{平衡时}} = R_{\text{平衡时}} = r n_0 p_0 \quad (= r n_i^2)$$

净复合率 $U_d = R - G = r(np - n_0 p_0)$ 而 $\begin{cases} n = n_0 + \Delta n \\ p = n_0 + \Delta p \end{cases}$ ($\Delta p = \Delta n$)

$$\therefore U_d = r(n_0 + p_0 + \Delta n + \Delta p)\Delta p \quad \text{则净复合频率为 } \frac{U_d}{\Delta p} = r(n_0 + p_0 + \Delta n + \Delta p)$$

$$\Rightarrow \text{非平衡载流子平均寿命 } \tau = \frac{\Delta p}{U_d} = \frac{1}{r(n_0 + p_0 + \Delta n + \Delta p)}$$

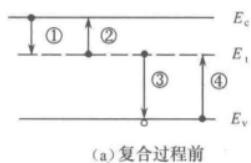
若为小注入 $\Delta p \ll (n_0 + p_0)$ $\therefore \tau \approx \frac{1}{r(n_0 + p_0)}$ $\begin{cases} n\text{-type: } \tau = \frac{1}{rn_0} \\ p\text{-type: } \tau \approx \frac{1}{rp_0} \end{cases}$

2. 间接复合

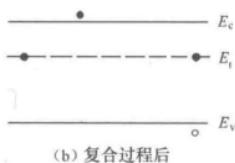
复合中心 \Rightarrow 杂质和缺陷

对应了复合中心能级 E_t

(为方便, 这里仅考虑存在一种 E_t)



(a) 复合过程前



(b) 复合过程后

图 5-7 间接复合的 4 个过程

①—俘获电子; ②—发射电子; ③—俘获空穴; ④—发射空穴

电子俘获系数 反映复合中心俘获电子的能力

① 过程 电子俘获率 $C_n = r_n n (N_t - n_t)$

电子俘获系数

② 过程 电子产生率 $E_n = S_- n_t$

电子激发概率

平衡时, 电子的净俘获率 $R_n = C_n - E_n = 0 \Rightarrow r_n n (N_t - n_t) = S_- n_t$

对应 ③ 空穴俘获率 $C_p = r_p p n_t$

④ 空穴产生率 $E_n = S_+ (N_t - n_t)$

对①② 平衡时设有 n_o n_{to}

$$(S_n) S_- = \frac{r_n n_o (N_t - n_{to})}{n_{to}}$$

$$= \dots = r_n N_c \exp\left(\frac{E_t - E_c}{k_B T}\right) = r_n n_i$$

记为 n_i

类似的 $S_+ (S_p) = r_p p_i$

$$p_i = N_c \exp\left(\frac{E_v - E_t}{k_B T}\right)$$

恰好等于 Fermi 能级与 E_t 重合时
导带(价带)的电子(空穴)浓度

$$\left\{ \begin{array}{l} C_n = r_n n_o (N_t - n_{to}) \\ E_n = r_n n_t n_t \end{array} \right.$$

稳态时 $\frac{dn_t}{dt} = 0$.

$$C_p = r_p p_o n_{to}$$

$$C_n + E_p = C_p + E_n$$

$$E_p = r_p p_i (N_t - n_{to})$$

或 $C_n - E_n = G - E_p = U$ \rightarrow 净速率

代入有

$$n_t = N_t \frac{n r_n + p_i r_p}{r_n (n + n_i) + r_p (p + p_i)}$$

$$U = - \frac{N_t r_n r_p (n p - n_i^2)}{r_n (n + n_i) + r_p (p + p_i)}$$

在平衡载流子情况下 $V=0$ ($np=n_i^2$)

注入非平衡载流子后 $n=n_0+\Delta n$ $p=p_0+\Delta p$ $\Delta n=\Delta p$

$$\Rightarrow V = \frac{N_t r_{pn} (n_0 \Delta p + p_0 \Delta p + \Delta p^2)}{k_n (n_0 + n_1 + \Delta p) + r_p (p_0 + p_1 + \Delta p)}$$

$$\tau = \frac{1}{\frac{V}{q}} = \frac{r_n (n_0 + n_1 + \Delta p) + r_p (p_0 + p_1 + \Delta p)}{N_t r_{pn} (n_0 + p_0 + \Delta p)}$$

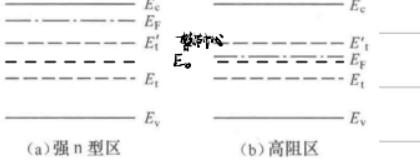
寿命随载流子能量变化

对 n-type 设 E_F 在禁带下半部 \rightarrow ?

强 n 型区 : $E_F \in (E_{t'}, E_c)$

$$n_0 > p_1 > n_1 > p_0$$

则 $\tau = \tau_p = \frac{1}{N_t r_p} \rightarrow$ 主要由空穴俘获系数 r_p 决定



\rightarrow 禁带中心几乎充满了电子

同理 p-type 中 强 p 型区 $\tau = \tau_n \approx \frac{1}{N_t r_n}$

弱 n 型(高阻)区 $E_F \in (E_0, E_{t'})$ 有 $p_1 > n_0 > p_0 > n_1$

$$\tau \approx \frac{p_1}{N_t r_n} \cdot \frac{1}{n_0} = \tau_n \cdot \frac{p_1}{n_0}$$

$$\text{P-type } \tau = \tau_p \cdot \frac{n_1}{p_0}$$

本征半导体 $n_0 = p_0 = n_i$ $p_1 > n_0 = p_0 > n_1$

$$\tau = \tau_n \frac{p_1}{2 n_i}$$

是最大的

将上述公式代入 V . 假设 $r_n = r_p$ 有 $V = \frac{N_t r (np - n_i^2)}{n + p + 2n_i \ln(\frac{E_0 - E_F}{E_{t'} - E_F})}$

则 $E_t = E_i$ 时 V 极大

载流子的扩散作用

一维情况 $\nabla(\text{op})$ 为浓度梯度

(下标P表示空穴)

$$\text{空穴扩散密度 } S_p = -D_p \nabla(\text{op}) \quad D_p \text{ 称为扩散系数} \quad \text{cm}^2/\text{s}$$

则 电流密度 $J_{\text{ff}} = \pm q S$

$$\begin{aligned} \text{面积 A} & \left[\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & dx & \\ \hline \end{array} \right] A \frac{d\text{op}(x)}{dx} \cdot dx = [S_p(x) - S_p(x+dx)] A - \frac{\Delta p(x)}{2} A \cdot dx = 0 \\ & - \frac{d S_p(x)}{d x} = \frac{\Delta p(x)}{2} \quad \left(-\nabla \cdot \vec{S}_p = \frac{\Delta p}{L_p} \right) \\ & D_p \frac{d^2 S_p(x)}{dx^2} S_p(x) = \frac{\Delta p(x)}{2} \quad (D_p \nabla^2 \text{op}) = \frac{\Delta p}{L_p} \end{aligned}$$

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

1. 足够厚 约界条件 $\begin{cases} \Delta p(+\infty) = 0 \\ \Delta p(0) = (\Delta p)_0 \end{cases} \Rightarrow \Delta p(x) = (\Delta p)_0 e^{-\frac{x}{L_p}}$

$$\bar{x} = \frac{\int_0^{+\infty} x \Delta p(x) dx}{\int_0^{+\infty} \Delta p(x) dx} = L_p \text{ 扩散长度} \quad \text{量纲 m. [L]}$$

$$\text{而 } S_p(x) = -D_p \nabla(\text{op}) = \frac{D_p}{L_p} (\Delta p) \cdot e^{-\frac{x}{L_p}}$$

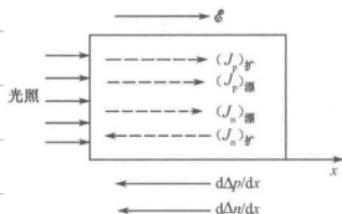
$$\frac{D_p}{L_p} \Rightarrow \text{扩散速度} (\text{cm/s})$$

2. 厚度一定 则 $\Delta p(w) = \Delta p(x=0) \Rightarrow \text{可解出系数 A, B}$

$$w \ll L_p \text{ 时 } \Delta p(x) \approx (\Delta p)_0 (1 - \frac{x}{w}) \Rightarrow \text{复合作用被忽略}$$

$$J_p = (J_p)_{\text{源}} + (J_p)_{\text{散}} = qp\mu_p |E| - qD_p \frac{d\Delta p}{dx}$$

$$J_n = (J_n)_{\text{源}} + (J_n)_{\text{散}} = qn\mu_n |E| + qD_n \frac{d\Delta n}{dx}$$

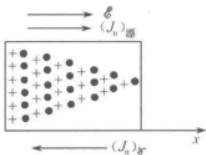


考虑一热平衡的非均匀 n 型半导体

电子浓度 $n_0(x)$

$$(J_n)_{\text{ff}} = q D_n \frac{dn_0(x)}{dx} \quad (J_p)_{\text{ff}} = -q D_p \frac{dp_0(x)}{dx}$$

电子向右扩散 → 形成内建电场 E



$$\Rightarrow \text{出现漂移电流} \quad \begin{cases} (J_n)_{\text{漂}} = n_0(x) q \mu_n E \\ (J_p)_{\text{漂}} = p_0(x) q \mu_p E \end{cases}$$

$$J_n = (J_n)_{\text{ff}} + (J_n)_{\text{漂}} = 0$$

$$\text{即} \quad q D_n \frac{dn_0(x)}{dx} + n_0(x) q \mu_n E = 0 \quad (2) \quad E = - \frac{dV(x)}{dx}$$

$$n_0(x) = N_c \exp \left[\frac{E_F + qV(x) - E_c}{k_b T} \right] \quad \therefore \quad \frac{dn_0(x)}{dx} = n_0(x) \frac{q}{k_b T} \frac{dV(x)}{dx}$$

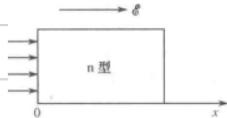
$$\text{又} \lambda(x): \quad \frac{D_n q}{k_b T} = \mu_n \quad \text{即} \quad \frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_b T}{q} \quad (\nabla n_0(x) = n_0(x) \frac{q}{k_b T} \nabla V(x))$$

$$\text{同理} \quad \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_b T}{q}$$

连续性方程

仍以一维情况 n型半导体为位

单位t与V内积累的空穴数



$$\text{扩散} \quad -\frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} (J_p)_\text{扩} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}$$

$$\text{漂移} \quad -\frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} (J_p)_\text{漂} = -\mu_p E \frac{\partial p}{\partial x} - \mu_p P \frac{\partial E}{\partial x}$$

则 $\frac{\partial p}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p (E \frac{\partial p}{\partial x} + P \frac{\partial E}{\partial x}) - \frac{\Delta p}{\tau} + g_p$

\downarrow
 连续性方程 $\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p + G_p - R_p$
 复合部分 离开因素

1) 稳定注入 $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$

材料均匀. $g_p = 0$. 电场均匀. 光照均匀. P_0 与 x 无关

则 方程为 $D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} - \mu_p E \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\Delta p}{\tau} = 0$

$$D_p \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} - \mu_p |E| \frac{d \Delta p}{dx} - \frac{\Delta p}{\tau} = 0$$

扩散+漂移+复合

其普遍解为: $\Delta p = A e^{\lambda_1 x} + B e^{\lambda_2 x}$

令: $L_p(|E|) = |E| \mu_p \tau$

牵引长度: 代表在寿命时间里载流子在电场牵引下走过的距离。

$$L_p^2 \lambda^2 - L_p(|E|) \lambda - 1 = 0$$

$$\lambda_1, \lambda_2 = \frac{L_p(|E|) \pm \sqrt{L_p^2(|E|) + 4L_p^2}}{2L_p^2}$$

$$\lambda_1 > 0 \quad \lambda_2 < 0$$

非平衡载流子随 x 是衰减的

$$A=0, \Delta p = \Delta p_0 e^{\lambda_2 x}$$

第七章 金属和半导体的接触

功函数

$$W_m = E_0 - (E_F)_m = q\phi_m \quad \text{metal}$$

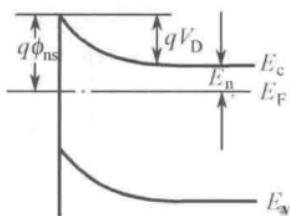
E_0 : 真空中电子能量

起始能级是费米能级的电子逃逸到真空中所需最小能量
标志电子在金属中束缚的强弱

同样 对于半导体
电子亲和能

$$W_s = E_0 - (E_F)_s$$

$$q\chi = E_0 - E_c$$



$$q\phi_{ns} = q(\phi_m - \chi)$$

$$W_m > W_s$$

