

要点：晶体、导体、量子力学

# 半导体材料

## 晶体相关

- 单晶：组成晶体的原子按一定的方式**有规则的排列**而成，**几何周期性、各向异性、固定的熔点**
- 多晶：由大量的**微小单晶体**随机堆积而成的整块材料，如各种金属材料 and 电子陶瓷材料
- 非晶体（无定形）：无规则的外形和没有固定的熔点，内部结构也不存在长程有序

硅、锗是**金刚石**型晶格结构，能带结构是**间接禁带**类型

1. 简立方：8个拐角原子
2. 体立方：8个拐角原子+1个体心原子
3. 面心立方：8个拐角原子+6个面心原子
4. 金刚石：8个拐角原子+6个面心原子+4个中心原子

**米勒指数**：1.截距 2.取倒数 3.乘最小公分母

原子体密度注意共享的原子

## 导体、半导体

1. **导体**：电阻率小，约为 $10^{-8} \sim 10^{-6}$
2. **绝缘体**：电阻率大，约为 $10^8 \sim 10^{18}$
3. **半导体**：电阻率适中，约为 $10^{-5} \sim 10^6$

半导体、导体和绝缘体，能用能带理论解释，不存在能隙的是**导体**，能隙较小的是**半导体**，能隙较大的是**绝缘体**。

## 量子力学初步

### 基础量和公式

普朗克常数： $h = 6.625 \times 10^{-34} J \cdot s = 4.14 \times 10^{15} eV \cdot s$

电子质量： $9.11 \times 10^{-31} kg$

电子伏特： $1 eV = 1.6 \times 10^{-19} J$

光子能量

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda}$$

光电效应

$$E_k = h\nu - W$$

德布罗意波-动量

$$p = \frac{h}{\lambda} = mc$$

推导后的光子能量

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{p^2}{2m}$$

## 不确定原理

两组测不准关系的物理量分别是**坐标和动量**不能同时测准，**能量和时间**不能同时测准

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

其中， $\hbar$ 为约化普朗克常数， $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054 \times 10^{-34} J \cdot s$

## 薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, t) = j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

波函数的解为复数，其模的平方表示为：**某一时刻在空间某点出现的概率密度**，且满足概率的归一化条件

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} = 1$$

## 特定解

当没有任何外力作用于电子，即势函数  $V(\mathbf{r}) = 0$  时，薛定谔方程简化为

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) = j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

其解为平面波形式

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A \exp \left[ \frac{j}{\hbar} (x\sqrt{2mE} - Et) \right] + B \exp \left[ -\frac{j}{\hbar} (x\sqrt{2mE} + Et) \right]$$

若仅考虑一个方向，则

$$\Psi(x, t) = A \exp[j(kx - \omega t)]$$

其中， $k$  为波数，满足

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar}$$

## 无限深势阱

在无限深势阱中，粒子只能在有限的空间内运动，其波函数满足边界条件

$$\Psi(0, t) = \Psi(L, t) = 0$$

在这种条件下，薛定谔方程的解可以分为**驻波**和**行波**两种，其中**驻波对应的束缚态粒子**局限在势阱内，使得能级呈离散分布，从而实现能量量子化；而**行波则对应自由粒子**，不受此类约束。

驻波解类似于黑体辐射中电磁波模式的量子化，两者都是由于系统内部的约束条件自然形成的，而非外部强制规定的结果。单一粒子的量子化在宏观上可体现为能级的分裂，说明这种离散化本质上源于系统边界条件和空间限制。

## 矩形势垒

在矩形势垒问题中，薛定谔方程的解可以拆分为两部分：

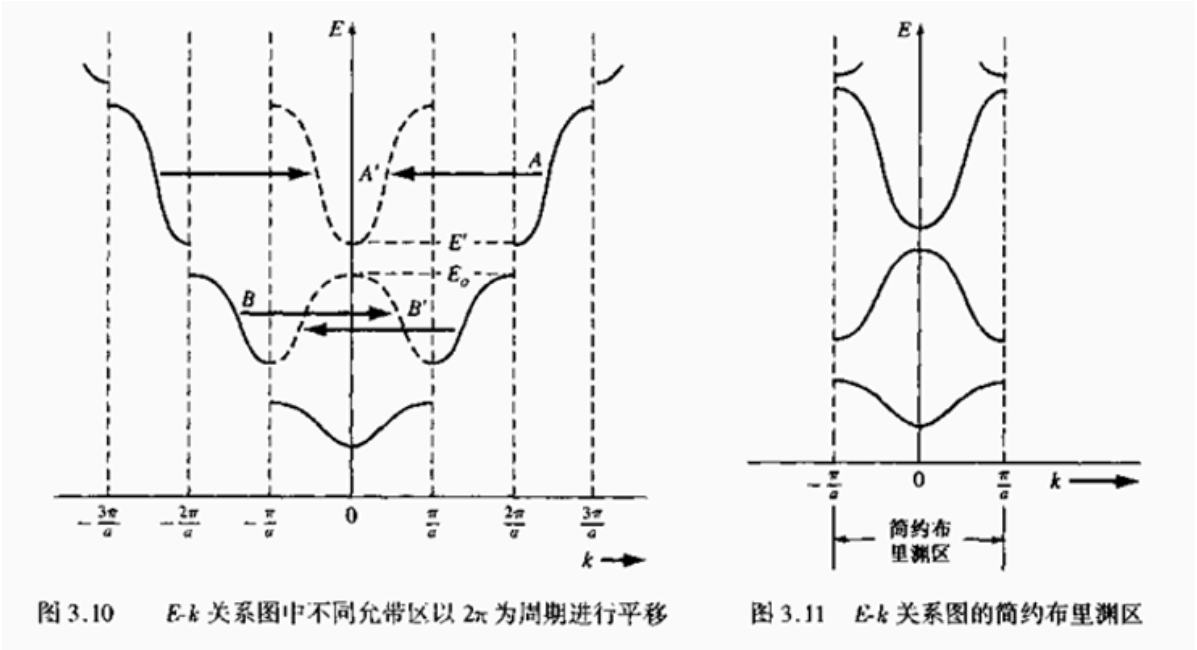
- 反射波：描述粒子遇到势垒后反射回去的部分；
- 透射波：描述粒子穿过势垒、继续前进的部分，这部分解对应的现象就是量子隧穿效应。

量子隧穿效应说明，即便粒子的能量低于势垒高度，也有非零的概率出现在势垒另一侧

## 固体量子理论

### 能带理论

根据克龙尼克-潘纳模型，对周期势函数下的薛定谔方程求解可得到解呈现出能带特征，解出  $k$  空间下的  $E$  分布图为



其中实线为允带区域，允带之间的竖直空白为禁带区域。右图为简化的第一布里渊区。

1. **能带**：当大量原子靠近形成固体时，原子的离散能级会分裂成带状结构
2. **价带**：被电子占据的最高能带，包含参与化学键合的电子
3. **导体**：价带上方的能带，电子在此可自由移动导电
4. **禁带**：价带与导带间的能量间隙，电子不能存在的区域

导体价带与导带重叠、或价带未完全填满，没有禁带，电子可自由移动。

半导体禁带宽度较小，少量电子可获得足够能量跨越禁带。

绝缘体禁带宽度宽，几乎无电子可跨越禁带。

### 电子有效质量

在  $k$  空间内，能量与动量满足

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{k^2 \hbar^2}{2m} \tag{1}$$

其中，电子的动量和波数满足  $p = \hbar k$ 。

对式 (1)  $k$  求二阶导可得

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m}$$

即

$$\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{1}{m}$$

$$m = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}$$

$E$ 对 $k$ 的二阶导数(曲率)与粒子质量成反比, 比例系数为约化普朗克常数的倒数

## 费米能级

费米能级代表的是量子态被电子占据的几率是50%时对应的能级位置

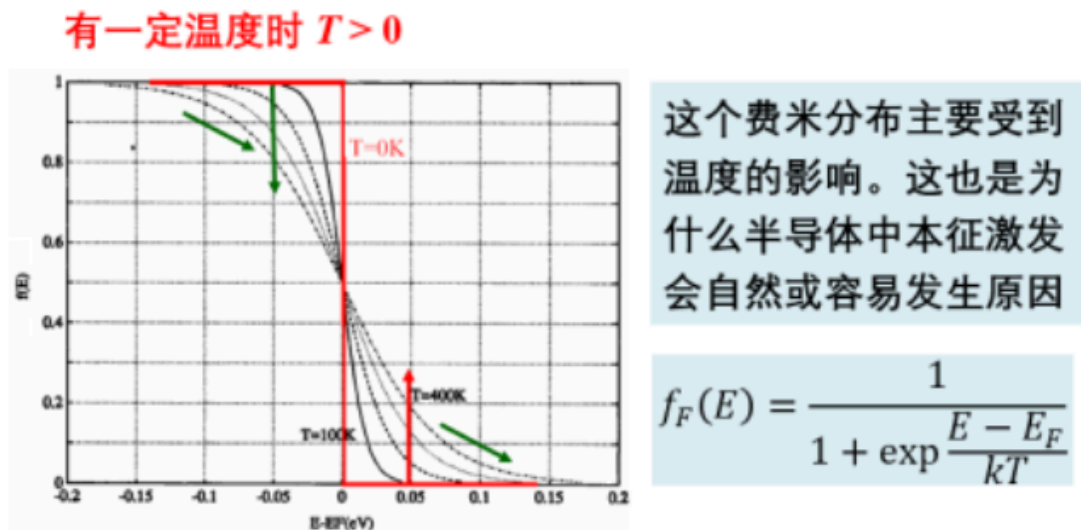
费米-狄拉克分布 (概率) 函数

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

当 $E - E_F \gg kT$ 时, 式 (2) 可简化为玻尔兹曼近似

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

费米分布和温度的关系如下图



- |                                 |   |   |
|---------------------------------|---|---|
| <p><b><math>T</math> 不变</b></p> | <p>I. <math>E &gt; E_F</math>, <math>E \uparrow \rightarrow f_F(E) \downarrow</math></p> <p>I. <math>E &lt; E_F</math>, <math>E \uparrow \rightarrow f_F(E) \downarrow</math></p> | <p><b>事实或规律:</b></p> <p>电子跃迁是从 <math>E_F</math> 附近的能级开始, 越靠近 <math>E_F</math>, 能级上电子跃迁几率越大, 温度提高, 能级上电子跃迁几率增大</p> |
| <p><b><math>E</math> 不变</b></p> | <p>I. <math>E &gt; E_F</math>, <math>T \uparrow \rightarrow f_F(E) \uparrow</math></p> <p>I. <math>E &lt; E_F</math>, <math>T \uparrow \rightarrow f_F(E) \downarrow</math></p>   |   |

能态密度函数 (单位体积单位能量范围内允许的能态数), 为

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

基于能态密度函数和费米-狄拉克分布函数，可求得载流子浓度

$$n = \int g_c(E) f_F(E) dE$$

## 平衡半导体

### 载流子分布

导带电子热平衡浓度为

$$n_0 = N_c \exp\left[\frac{-(E_c - E_F)}{kT}\right] \quad (3)$$

其中， $N_c$  为导带有效状态密度

价带电子热平衡浓度为

$$p_0 = N_v \exp\left[\frac{-(E_v - E_F)}{kT}\right] \quad (4)$$

其中， $N_v$  为价带有效状态密度

对于大多数半导体， $N_c$ 、 $N_v$  的数量级均约为  $10^{19}$ 。

### 本征载流子浓度

本征半导体中，导带中的电子浓度值等于价带中的空穴浓度值。分别表示为  $n_i$  和  $p_i$ ，且  $n_i = p_i = n_0 = p_0$

本征半导体的费米能级称为本征费米能级  $E_{Fi}$ ，类比式 (3) (4)，并进行相乘，可得到

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

也即

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

其中， $E_g$  为禁带宽度。

### 非本征半导体

当本征半导体掺杂后，其费米能级会偏移本征费米能级，而一旦费米能级偏移了禁带中央，则导带中的电子浓度和价带中的空穴浓度就会发生变化。但其关系式仍满足式 (3) (4)。

在此基础上，给出热平衡状态下电子浓度和空穴浓度的另一种表达式

$$\begin{cases} n_0 = n_i \exp\left[\frac{E_F - E_{Fi}}{kT}\right] \\ p_0 = n_i \exp\left[\frac{-(E_F - E_{Fi})}{kT}\right] \end{cases}$$

显然， $n_0 p_0 = n_i^2$

1. 对于 N 型掺杂半导体：

当施主完全电离且施主浓度  $N_D$  远大于本征载流子浓度  $n_i$  时，满足  $n_0 \approx N_D$

电子为多数载流子，此时  $p_0 \approx \frac{n_i^2}{N_D}$

2. 对于 P 型掺杂半导体：

当受主完全电离且受主浓度  $N_A$  远大于本征载流子浓度  $n_i$  时，满足  $p_0 \approx N_A$   
空穴为多数载流子，此时  $n_0 \approx \frac{n_i^2}{N_A}$

$T = 300k$  时,  $kT \approx 0.0259eV$

## 本征费米能级位置

本征费米能级位置满足

$$E_{Fi} - E_{midgap} = \frac{3}{4}k \ln \left( \frac{m_p^*}{m_n^*} \right)$$

其中,  $E_{midgap}$  为禁带中央, 满足

$$E_{midgap} = \frac{E_c + E_v}{2}$$

如果电子和空穴的有效质量相等, 则本征费米能级会精确位于禁带中央。

## 名词解释

本征半导体、杂质半导体、载流子、空穴、平衡状态、非平衡状态、大注入、小注入、速度饱和、金属功函数、半导体功函数

**本征半导体**：纯净的具有完整晶体结构且不含杂质的半导体。

**杂质半导体**：在本征半导体中掺入少量杂质元素形成的半导体。

**载流子**：在半导体中能够自由移动参与导电的带电粒子，包括电子和空穴。

**空穴**：半导体中价带中的电子获得能量跃迁到导带后留下的空位，其可视为带正电的载流子。

**平衡状态**：半导体中载流子的产生和复合达到动态平衡，没有外界作用时系统的状态。

**非平衡状态**：半导体受到外界因素（如光照、注入等）干扰，使载流子分布偏离平衡态的状态。

**大注入**：注入的非平衡载流子（过剩载流子）浓度接近或超过多数载流子（多子）浓度的情况。

**小注入**：注入的非平衡载流子（过剩载流子）浓度远小于多数载流子（多子）浓度的情况。

**速度饱和**：当电场强度增大到一定程度时，载流子的漂移速度不再随电场强度增加而增加，趋于饱和的现象。

**金属功函数**：一个起始能量为费米能级的电子，从金属内部逸出到真空中所需要的最小能量。

**半导体功函数**：半导体的费米能级与真空能级的能量差。

## 载流子输运

载流子两种基本输运机制分别是**扩散运动**和**漂移运动**。载流子在外加电场作用下的定向运动称为**漂移运动**，所形成的电流称为**漂移电流**。载流子由于**浓度梯度**的存在而发生**扩散运动**，引起**扩散电流**

漂移电流密度为

$$J_{drf} = e(\mu_n n + \mu_p p)E$$

扩散电流密度为

$$J_{dif} = e(D_n \Delta n - D_p \Delta p)$$

则总电流密度为

$$J = e(\mu_n n + \mu_p p)E + e(D_n \Delta n - D_p \Delta p)$$

爱因斯坦关系式

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{kT}{e}$$

## 非平衡载流子浓度

在非平衡状态下，半导体的载流子浓度发生变化，以n型半导体为例

$$\begin{aligned} n_n &= n_0 + \delta n \\ p_n &= p_0 + \delta p \end{aligned}$$

且有

$$\delta n = \delta p$$

为过剩载流子

- 小注入假设：**过剩载流子浓度远小于平衡态多子浓度，此时满足

$$\begin{aligned} n_n &\approx n_0 \approx N_d \\ p_n &\approx \delta p \end{aligned}$$

- 大注入假设：**过剩载流子浓度接近或大于平衡态多子浓度，此时不满足上述近似

## 双极输运方程

在小注入假设条件下，我们可以推导出n型和p型半导体的双极输运方程。

### n型半导体下的双极输运方程

$$D_p \frac{\partial^2 \delta p}{\partial x^2} - \mu_p E \frac{\partial \delta p}{\partial x} - \mu_p \delta p \frac{\partial E}{\partial x} + g' - \frac{\delta p}{\tau_{p0}} = \frac{\partial \delta p}{\partial t}$$

### p型半导体下的双极输运方程

$$D_n \frac{\partial^2 \delta n}{\partial x^2} + \mu_n E \frac{\partial \delta n}{\partial x} + \mu_n \delta n \frac{\partial E}{\partial x} + g' - \frac{\delta n}{\tau_{n0}} = \frac{\partial \delta n}{\partial t}$$

## 半导体器件

### pn结和pn结二极管

内建电势差

$$V_{bi} = V_t \ln\left(\frac{N_a N_d}{n_i^2}\right)$$

内建电势差值的实质为p、n区本征费米能级的差值乘上电子电荷e

空间电荷区宽度

n区宽度为

$$x_n = \left\{ \frac{2\varepsilon_s V_{bi}}{e} \cdot \frac{N_a}{N_d} \cdot \frac{1}{N_a + N_d} \right\}^{1/2}$$

p区宽度为

$$x_p = \left\{ \frac{2\varepsilon_s V_{bi}}{e} \cdot \frac{N_d}{N_a} \cdot \frac{1}{N_a + N_d} \right\}^{1/2}$$

空间电荷区总宽度为

$$W = x_n + x_p = \left\{ \frac{2\varepsilon_s V_{bi}}{e} \cdot \frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right\}^{1/2}$$

## 反偏

在反偏情况下，实际上是内建电势差变大，因此前文公式使用  $V_{bi} + V_R$  替代即可

空间电荷区总宽度为

$$W = x_n + x_p = \left\{ \frac{2\varepsilon_s (V_{bi} + V_R)}{e} \cdot \frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right\}^{1/2}$$

在此给出反偏或零偏状态下pn结内最大电场强度（实际为冶金结 $x=0$ 处）

$$E_{max} = \frac{-2(V_{bi} + V_R)}{W}$$

## 结电容

$$C' = \left\{ \frac{e\varepsilon_s N_a N_d}{2(V_{bi} + V_R)(N_a + N_d)} \right\}^{1/2}$$

也即

$$C' = \frac{\varepsilon_s}{W}$$

## 单边突变结

当pn结一侧为重掺杂，一侧为轻掺杂时，称该pn结为单边突变结，其具有一些特性

以p+n结（p区重掺杂，n区轻掺杂）为例，此时  $N_a \gg N_d$

因此，

$$x_p \approx 0, x_n \approx W = \left\{ \frac{2\varepsilon_s (V_{bi} + V_R)}{e N_d} \right\}^{1/2}$$

## 结击穿

### 齐纳击穿 (Zener Breakdown)

机理：

- 发生在高掺杂、空间电荷区较窄的 PN 结中
- 在强电场作用下，价带电子直接穿隧到导带
- 电场强度通常需要达到  $10^7$  V/cm 以上
- 温度系数为负（温度升高，击穿电压降低）



**特点：**

- 击穿电压较低（一般小于 5-6V）
- 击穿过程快速可逆
- 不会造成器件损坏
- 通常用于稳压二极管

## 雪崩击穿 (Avalanche Breakdown)

**机理：**

- 发生在低掺杂、空间电荷区较宽的 PN 结中
- 少数载流子在强电场加速后获得足够能量
- 加速电子碰撞晶格原子产生电子-空穴对
- 形成连锁反应，载流子数量呈雪崩式增长
- 温度系数为正（温度升高，击穿电压升高）

**特点：**

- 击穿电压较高（通常大于 6V）
- 过程中产生较大电流
- 如果没有限流措施，可能导致器件过热损坏
- 在雪崩二极管、雪崩晶体管等器件中应用

两种机制可能同时存在，低电压时齐纳机制占主导，高电压时雪崩机制占主导。

当刚好发生击穿时，pn结内部最大电场强度称为临界电场  $E_{crit}$ ，其满足

$$V_B = \frac{\varepsilon E_{crit}^2}{2eN_B}$$

其中， $V_B$  为击穿电压， $N_B$  为低掺杂区掺杂浓度

## 少数载流子分布

在pn结内部，可以求得双极输运方程的近似解为

$$\partial p_n(x) = p_n(x) - p_{n0} = p_{n0} \cdot \left[ \exp\left(\frac{eV_a}{kT} - 1\right) \right] \cdot \exp\left(\frac{x_n - x}{L_p}\right) \quad x \geq x_n \quad (5)$$

$$\partial n_p(x) = n_p(x) - n_{p0} = n_{p0} \cdot \left[ \exp\left(\frac{eV_a}{kT} - 1\right) \right] \cdot \exp\left(\frac{x_p + x}{L_p}\right) \quad x \leq -x_p \quad (6)$$

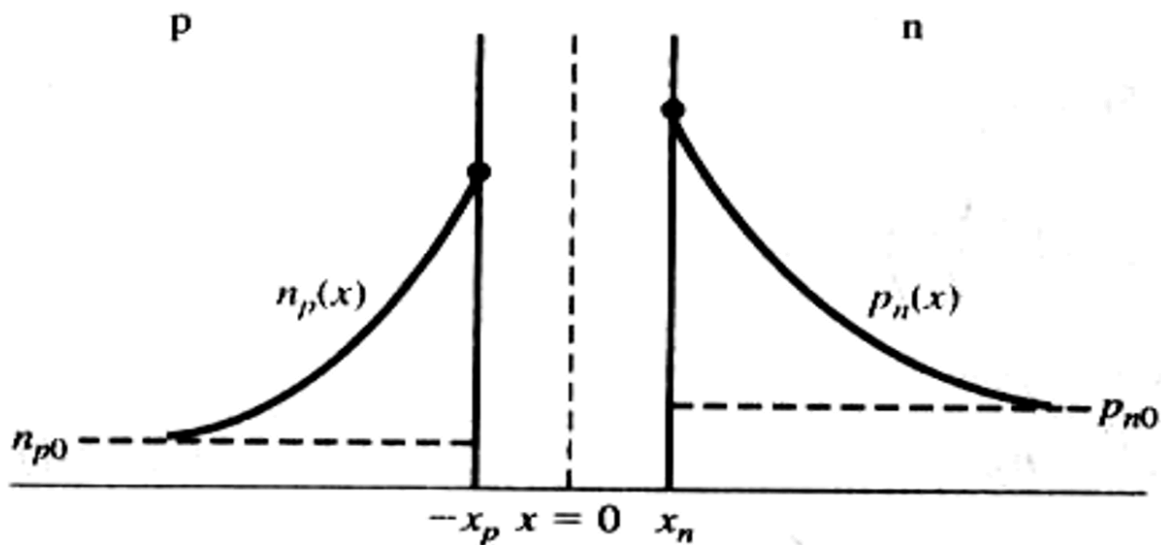


图 8.5 正偏条件下 pn 结内部的稳态少子浓度

在此根据载流子浓度，定义准费米能级

$$p = p_0 + \partial p = n_i \exp\left(\frac{E_{Fi} - E_{Fp}}{kT}\right)$$

$$n = n_0 + \partial p = n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fi}}{kT}\right)$$

联立可解得

$$np = n_i^2 \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{kT}\right)$$

此处的  $E_{Fn} - E_{Fp}$  可类比前文关于  $V_{bi}$  的解释，不难发现其实质上也是正偏电压  $V_a$  造成的，其满足

$$E_{Fn} - E_{Fp} = e \cdot V_a$$

## pn结电流

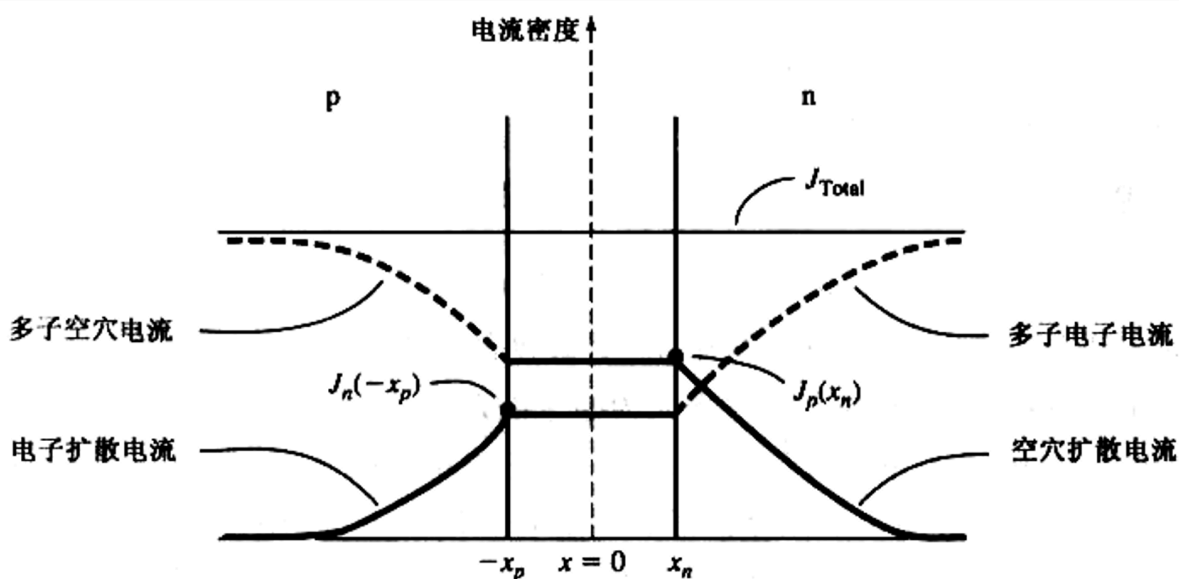


图 8.9 正偏下 pn 结内的理想电子电流与空穴电流成分

pn结存在电中性假设，因此其不存在漂移电流，仅存在扩散电流，而扩散电流密度的公式已在前文给出，这里直接与式(5)(6)联立可得p区与n区少子扩散电流为

$$J_p(x) = \frac{eD_p p_{n0}}{L_p} \cdot \left[ \exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \cdot \exp\left(\frac{x_n - x}{L_p}\right) \quad x \geq x_n \quad (7)$$

$$J_n(x) = \frac{eD_n n_{p0}}{L_n} \cdot \left[ \exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \cdot \exp\left(\frac{x_p + x}{L_n}\right) \quad x \leq -x_p \quad (8)$$

因为pn结电流密度为空穴电流密度和电子电流密度之和，又因为n区结边界处的多子电流密度等价于p区结边界的少子空穴密度（反之亦然），因此总的电流密度可以表示为

$$J_{total} = J_p(x_n) + J_n(x_p) = J_s \cdot \left[ \exp\left(\frac{eV_a}{kT}\right) - 1 \right] \quad (9)$$

其中

$$J_s = \left[ \frac{eD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{eD_n n_{p0}}{L_n} \right]$$

为反向饱和电流密度

而又根据电流连续性方程，因此pn结内部任何一处电流密度都是恒定的为  $J_{total}$ ，故联立式(7)(8)(9)可得到pn结任意一处的多子电流密度为

$$\begin{cases} J_n(x) &= J_{total} - J_p(x) & x \geq x_n \\ J_p(x) &= J_{total} - J_n(x) & x \leq -x_p \end{cases}$$

## 产生-复合电流

前文的推导都忽略了pn结空间电荷区内的载流子产生-复合过程，但实际上pn结空间电荷区内的载流子浓度是非平衡状态，因此需要考虑产生-复合电流。

这里给出基于SRH复合理论的过剩电子与空穴的复合率公式

$$R = \frac{C_n C_p N_t (np - n_i^2)}{C_n (n + n') + C_p (p + p')}$$

其中，  $np = n_i^2 \exp\left(\frac{qV}{kT}\right)$

不难发现，当

- $V = 0$ , 即pn结处于平衡状态时,  $R = 0$ , 无复合
- $V < 0$ , 即pn结处于反偏状态时,  $R > 0$ , 净产生
- $V > 0$ , 即pn结处于正偏状态时,  $R < 0$ , 净复合

接下来对反偏和正偏情况一次进行讨论

## 反偏条件下的产生-复合电流

在反偏条件下，pn结空间电荷区发生净产生，且产生率为  $R_{gen}$ ，产生电流密度为

$$J_{gen} = \frac{en_i W}{2\tau_0}$$

总反偏电流密度为理想反向饱和电流密度  $J_s$  和反向产生电流密度  $J_{gen}$  的和

$$J_R = J_s + J_{gen}$$

其中，理想反向饱和电流密度与反偏电压无关，但反向产生电流密度与空间电荷区宽度，也即反偏电压有关，故在考虑产生-复合电流后，pn结的反向电流密度不再与反偏电压无关

### 正偏条件下的产生-复合电流

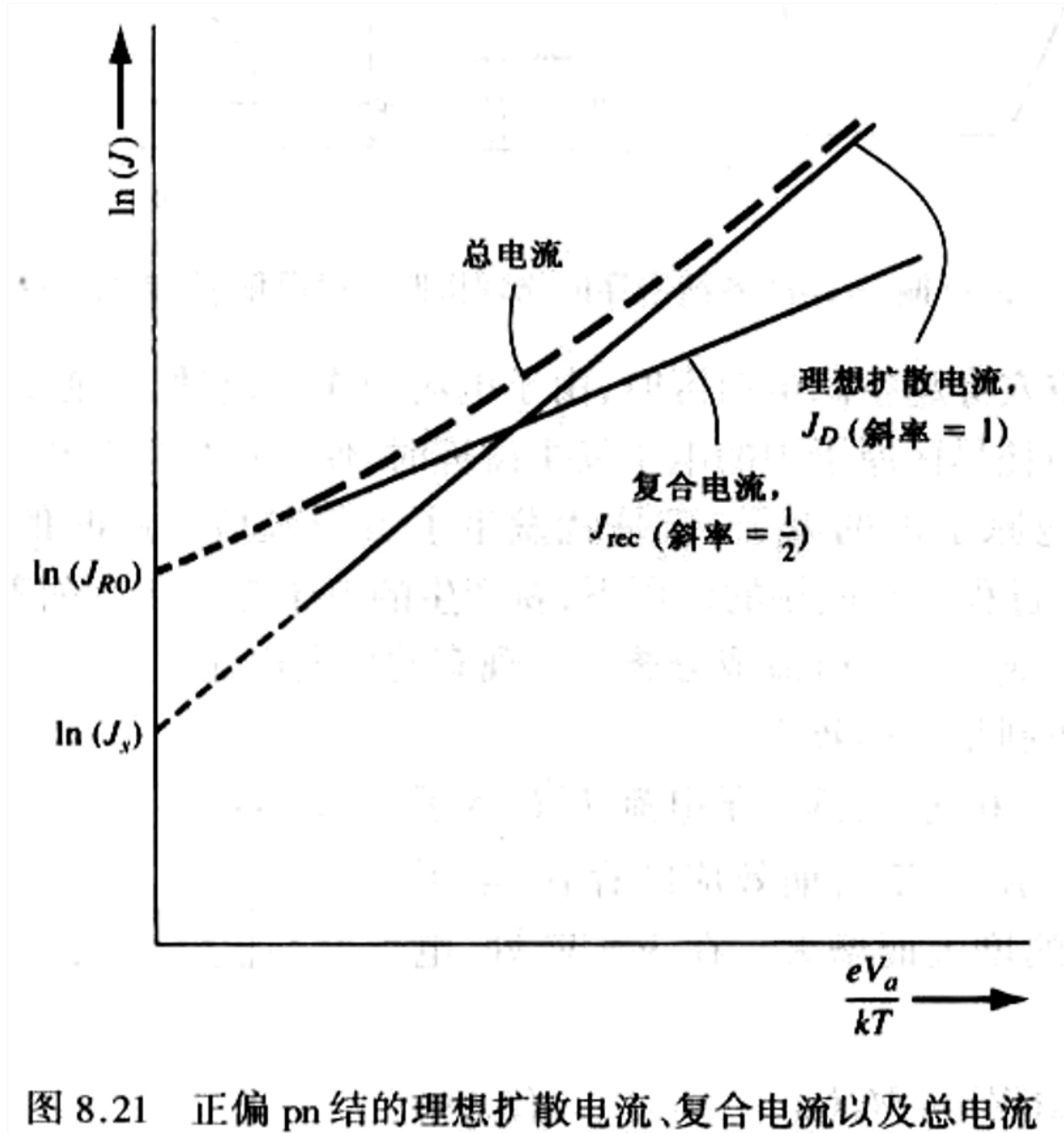
在正偏条件下，pn结空间电荷区发生净复合，且复合率为  $R_{rec}$ ，复合电流密度为

$$J_{rec} = \frac{en_i W}{2\tau_0} \exp\left(\frac{eV}{2kT}\right) = J_{r0} \exp\left(\frac{eV}{2kT}\right)$$

同理，总的正偏电流密度为扩散电流密度  $J_D$  和正向复合电流密度  $J_{rec}$  的和

$$J = J_D + J_{rec}$$

其中， $J_D$  由式 (9) 给出



在正偏情况下， $J$  小时主要为复合电流， $J$  大时主要为扩散电流

一般情况下，二极管的电流电压关系为

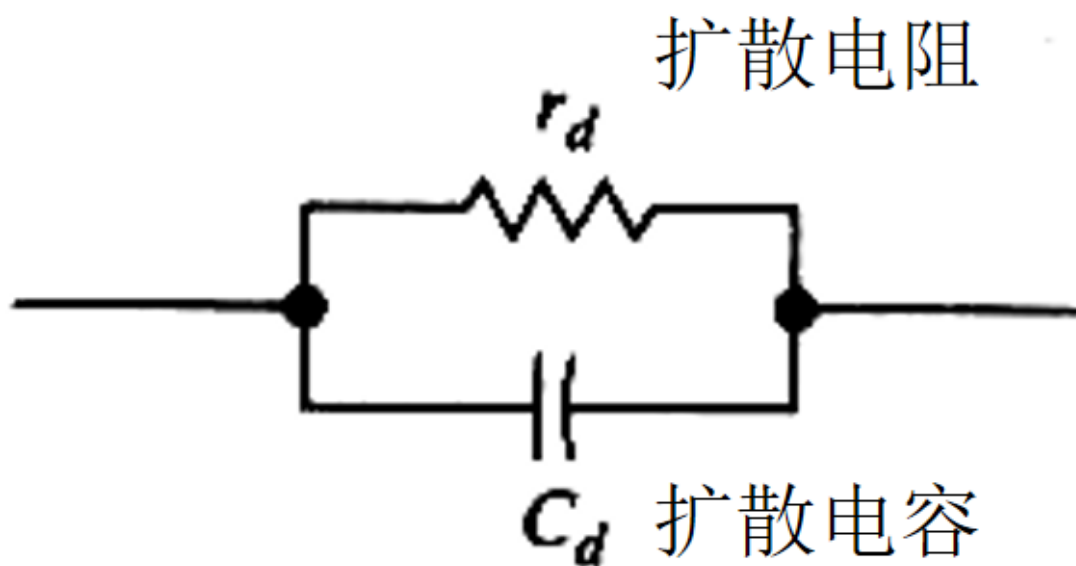
$$I = I_s \left[ \exp\left(\frac{eV_a}{nkT}\right) - 1 \right]$$

其中,  $n$  为理想因子

- 正偏电压较大,  $n \approx 1$
- 正偏电压较小,  $n \approx 2$
- 过渡区内,  $1 < n < 2$

## pn结的小信号模型

当pn结通入直流载波的小交流信号, 其电压-电流关系可用小信号模型来阐述, 即pn结本身可用等效电路进行替代



- 扩散电阻

$$r_d = \frac{V_t}{I_{DQ}}$$

- 扩散电容

$$C_d = \left(\frac{1}{2V_t}\right)(I_{po}\tau_{po} + I_{no}\tau_{no})$$

其中,  $I_{Po}$  为空穴扩散电流的直流成分,  $I_{no}$  为电子扩散电流的直流成分

## 金属半导体和半导体异质结

### 肖特基势垒二极管

