

固体物理

固体的电特性(输运过程)1

金属和半导体中电子的输运过程

冯 雪

x-feng@tsinghua.edu.cn

罗姆楼2-101B

固体能带理论解决的问题

德鲁德模型给出连接微观粒子运动与物质宏观特性的方法

1. 单个电子的运动
2. 大量电子组成的系综
3. 电子系综在外场作用下的运动

能带理论：

- 1. 周期性势场下电子可能的状态——能带
- 2. 晶体电子的运动规律——准经典运动

- 问题：

如何应用能带理论解释实际固体中大量电子的导电性？

本部分要解决的问题

- 问题：

如何应用能带理论解释实际固体中大量电子的导电性？

- 金属
 - 能带中近自由电子的导电特性
- 半导体
 - 电子和空穴的导电性
- 固体接触的导电性
 - 两种不同固体构成的系统
 - PN结和肖特基结

固体的电特性

- 金属中电子输运过程
- 半导体中的输运过程
- 固体间接接触的电特性
- 霍尔效应

黄昆 书 P275
(第6章, 第7章)
韦丹 书 P154
(第6章)

金属中自由电子的输运问题

回顾德鲁德模型

$$J = \left(\frac{ne^2\tau}{m} \right) E$$

电流密度方程解释了欧姆定律

$$\frac{dp}{dt} = -eE - \frac{p}{\tau}$$

电子运动方程

基于量子理论和能带理论如何研究金属的导电特性？？

金属中自由电子的输运问题

回顾德鲁德模型

$$J = \left(\frac{ne^2\tau}{m} \right) E$$

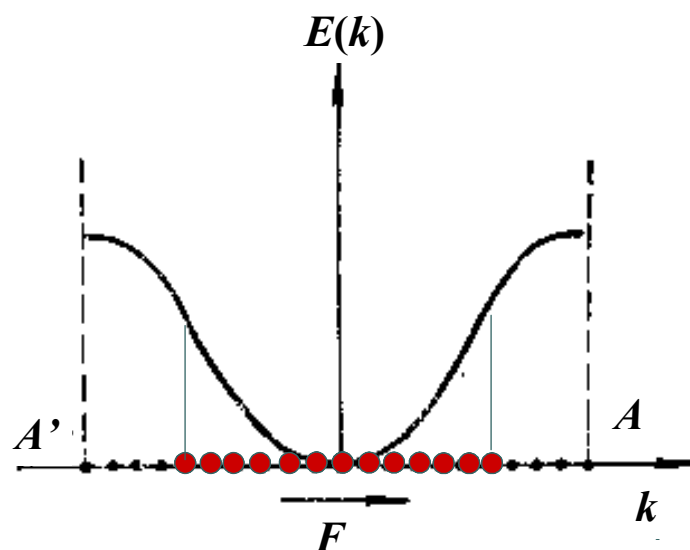
电流密度方程解释了欧姆定律

- 假定单位体积内有 n 个电子，平均速度 v_A ，电流密度为

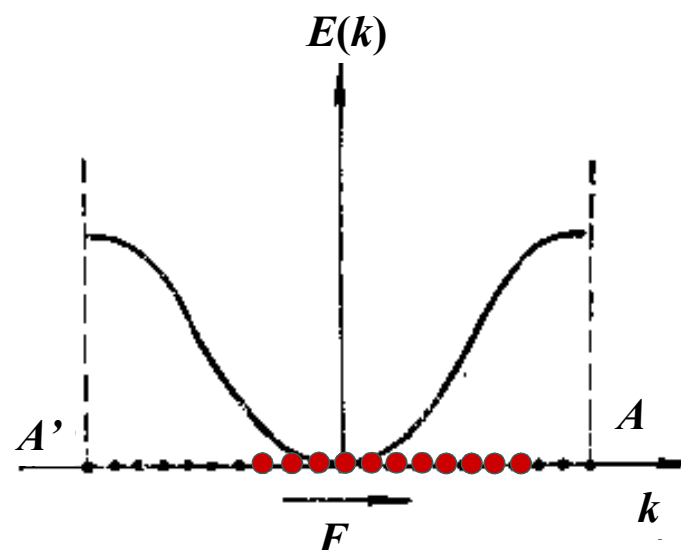
$$J = -nev_A \quad v_A = -e \frac{E\tau}{m} \quad m: \text{电子质量}$$

- 隐含了所有价电子（自由电子）都对导电有贡献

外加电场对部分填充能带的作用



平衡分布时，总电流为0
无外场的电子能带
净电流为0



外加电场的部分填充电子能带
整个电子 k 空间分布向一方移动，
部分抵消，有净电流

- 能带理论中电流是由于电子的状态分布变化引起的

电子的态分布随时间的变化

在平衡时，电子的分布遵从**Fermi—Dirac**统计分布：

$$f_0 = f(E), \text{ 这时, } E = E(k)$$

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1}$$

在有外场（如电场、磁场或温度梯度场）存在时，电子的平衡分布被破坏，在一般情况下，电子的能量：

$$E = E(r, k, t)$$

类似于气体运动论，我们可以用由 **r 和 k** 组成的相空间中的分布函数 **$f(r, k, t)$** 来描述电子的态分布随时间的变化

k 空间的状态密度

波矢 k 的取值不连续，每一个 k 的取值代表一个量子态，这些量子态在 k 空间中排成一个态空间点阵，每一个量子态在 k 空间中所占的体积：

$$k_{\alpha} = \frac{2\pi n_{\alpha}}{L_{\alpha}} \longrightarrow (2\pi)^3 / (L_x L_y L_z) = (2\pi)^3 / V$$

n_{α} 是整数

k 空间的“状态分布密度” g_k 为：
“点阵密度” $g_k = \frac{V}{(2\pi)^3} = \text{const.}$

电子的状态处在 $k-k+dk$ 范围内的电子数为：

f_0 ：平衡状态时的费米分布

$$dn = f_0 \cdot \frac{2 \cdot V}{(2\pi)^3} dk \quad S = 2 \quad \text{2个自旋态}$$

平衡状态时的电流

在 t 时刻, 单位体积内状态处在 $k-k+dk$ 范围的电子数:

$$dn = f_0 [E(k), t] \cdot 2 \cdot \frac{dk}{(2\pi)^3}$$

分布函数 f 为费米分布函数, 由于 $E(k)=E(-k)$

分布密度 f_0 对于 $k, -k$ 是对称的

电流 $-ev(k)$ 和 $-ev(-k)$, 方向相反, 大小相等而抵消

 平衡分布时, 总电流为0

非平衡状态下的分布函数

- 有外场作用下将形成稳定电流： $j = \sigma E$

——即欧姆定律，系数为电导率

稳定的电流表示电子处于新的定态统计分布 f ，可以用与平衡时相似的分佈函数 $f(k)$ 来描述，则单位体积内 dk 中的电子数：

$$dn = 2 f(k) dk / (2\pi)^3$$

总电流密度：

$$j = -2q \int f(k) \vec{v}(k) \cdot d\vec{k} / (2\pi)^3$$

$f(k)$ 确定，
则电流确定

一旦确定了分布函数 $f(k)$ ，就可以直接计算电流密度

通过非平衡情况下的分布函数来研究
输运过程的方法就是分布函数法

晶体电子的速度,加速度和有效质量

晶体电子的速度:
$$v_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$$

加速度:
$$\frac{dv_k}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k) \right)$$

晶体动量(准动量):
$$\hbar \frac{dk}{dt} = F$$

$$\frac{dv_\alpha}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k_\alpha} \right) = \frac{1}{\hbar} \sum_\beta \frac{dk_\beta}{dt} \frac{\partial}{\partial k_\beta} \left(\frac{\partial E(k)}{\partial k_\alpha} \right) = \frac{1}{\hbar^2} \sum_\beta F_\beta \cdot \frac{\partial^2}{\partial k_\beta \partial k_\alpha} E(k)$$

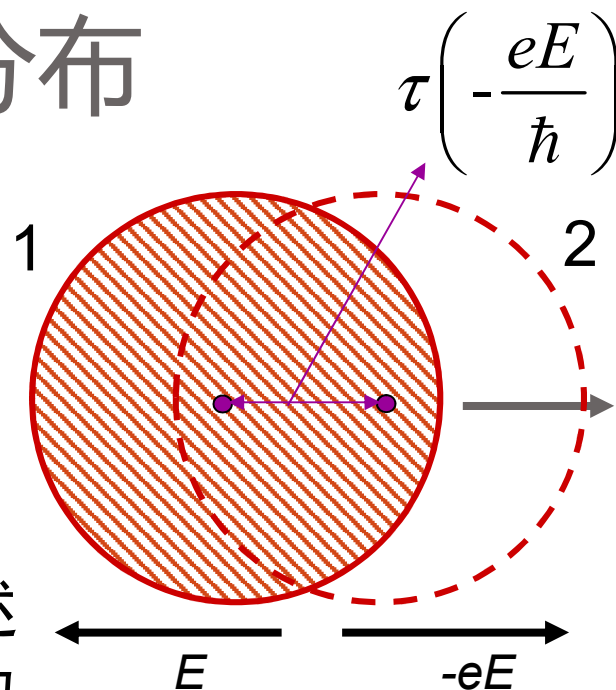
有效质量:
$$\frac{1}{m_\alpha^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \quad (\alpha, \beta = x, y, z)$$

存在电场时的非平衡分布

没有外场作用时，分布函数是费米分布

有外场作用时：
$$\frac{dk}{dt} = -\frac{eE}{\hbar}$$

在电场作用下，整个分布将在 k 空间以上述速度移动，原来对称的分布就将偏向一边，从而形成电流



如果电场一直作用，电子一直被加速甚至震荡，而这与欧姆定律矛盾。欧姆定律要求电子具有稳定的平均速度（稳定的电流）。

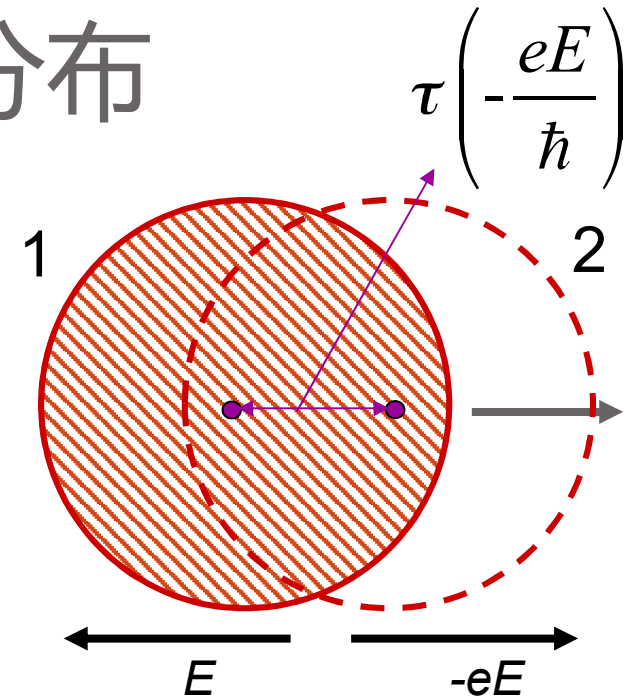
这就表明一定存在抵消外场加速的一种作用

存在电场时的非平衡分布

没有外场作用时，分布函数是费米分布

有外场作用时：
$$\frac{dk}{dt} = -\frac{eE}{\hbar}$$

抵消外场加速的作用——散射作用：
散射作用使费米球向后运动



电子的碰撞效果是使分布恢复平衡

在没有外场时，正是靠了碰撞，使系统保持平衡分布，
与理想气体保持麦克斯韦-玻尔兹曼分布是碰撞的结果一样

存在电场时的非平衡分布

一般电子理论下，欧姆定律的物理基础：

- 电子在电场作用下加速
- 因碰撞失去定向速度

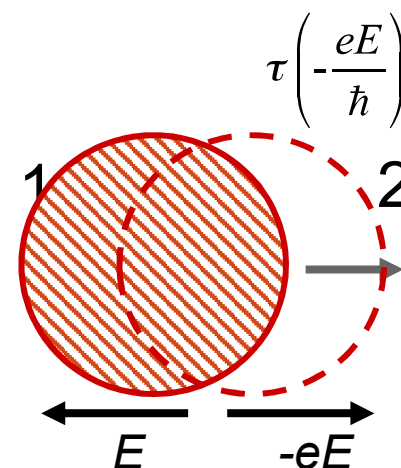
在电场力 $-eE$ 作用下，电子的状态变化：

$$\frac{dk}{dt} = -\frac{eE}{\hbar} \quad \text{从而形成电流}$$

电子碰撞的效果使得分布恢复平衡

粗略考虑：

电子有一个碰撞自由时间 τ (类似德鲁德模型)



存在电场时的非平衡分布

一般电子理论下，欧姆定律的物理基础：

- 电子在电场作用下加速
- 因碰撞失去定向速度

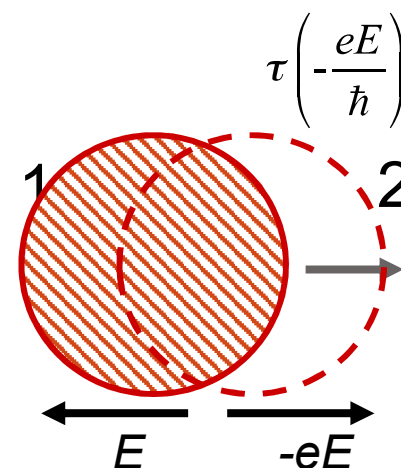
在电场力 $-eE$ 作用下，电子的状态变化：

$$\frac{dk}{dt} = -\frac{eE}{\hbar} \quad \text{从而形成电流}$$

电子碰撞的效果使得分布恢复平衡 碰撞自由时间 τ

两种作用综合的结果：

费米球保持了一定的偏心度，即电子具有一定的速度
——电子分布达到了非平衡定态分布（分布函数）



波尔兹曼方程

利用分布函数随时间演化的微分方程来研究输运过程

电子在外场作用下的漂移运动，从而引起分布函数的变化，这属于破坏平衡的因素，称为漂移变化。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{漂移}}$$

由于电子的碰撞而引起分布函数的变化，是恢复平衡的因素，称为碰撞变化。

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{碰撞}}$$

当体系达到稳定时：

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{漂移}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{碰撞}} = 0$$

——波尔兹曼方程

波尔兹曼方程

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{漂移}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}} = 0$$

——波尔兹曼方程

漂移项：

把 $f(k, t)$ 看成是 k 空间中流体的密度， $d\vec{k}/dt$ 便是流体各点的流速，根据流体力学的连续性原理：

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(k, t)}{\partial t} &= -\vec{\nabla}_k \cdot \left(f(k, t) \frac{d\vec{k}}{dt} \right) \\ &= -\frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \vec{\nabla}_k f(k, t) - f(k, t) \vec{\nabla}_k \cdot \left(\frac{d\vec{k}}{dt} \right) \end{aligned}$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{eE}{\hbar} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial f(k, t)}{\partial t} = -\frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \vec{\nabla}_k f(k, t)$$

波尔兹曼方程

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{漂移}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}} = 0 \quad \text{——波尔兹曼方程}$$

漂移项:

对于更为广泛的问题, 存在外场分布与位置有关时(例如温度场分布时), 需要同时考虑 k 和 r 共同的相空间, 把 $f(k, r, t)$ 看成是相空间中流体的密度, 这时可有更一般的表达式

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(k, t)}{\partial t} &= -\frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \vec{\nabla}_k f(k, r, t) - \frac{d\vec{r}}{dt} \cdot \vec{\nabla}_r f(k, r, t) \\ &= -\frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \vec{\nabla}_k f(k, r, t) - \vec{v}(k) \cdot \vec{\nabla}_r f(k, r, t) \end{aligned}$$

波尔兹曼方程

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{漂移}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}} = 0$$

——波尔兹曼方程

漂移项：

对于定态导电问题时， f 与位置 r 无关：

（例如：一根均匀导线内的情形）

$$\frac{\partial f(k, t)}{\partial t} = - \frac{d\vec{k}}{dt} \cdot \vec{\nabla}_k f(k, t)$$

$$\left[\frac{\partial f(k, t)}{\partial t} \right] = \frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f(k, t)$$

$\frac{dk}{dt} = -\frac{eE}{\hbar}$

波尔兹曼方程

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{漂移}} - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}} = 0 \quad \text{——波尔兹曼方程}$$

碰撞项：

由于晶格振动或是杂质等原因，电子不断地发生从一个状态 k 到另一个状态 k' 的跃进，这种运动状态的突变和分子运动论中一个分子遭受碰撞由速度 v 变为另一速度 v' 的情况非常相似。电子态的这种变化称为**散射**

dt 时间内： 从 k 态跃迁到其它态的几率： a
从其它状态跃迁到 k 态的几率： b

波尔兹曼方程

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{漂移}} - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}} = 0 \quad \text{——波尔兹曼方程}$$

碰撞项：由于散射几率中包含了未知的分布函数

一般采取近似，假设由于散射， dt 时间内电子数的变化是：

$$b - a = -\frac{f - f_0}{\tau(k)}$$

f_0 为平衡费米函数
 τ 为弛豫时间，是 k 的函数

本式的物理根据是碰撞使系统趋于平衡

波尔兹曼方程

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{漂移}} - \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}} = 0$$

——波尔兹曼方程

对于非平衡状态: $f = f_0 + (\Delta f)_0$

当只有碰撞作用时: $\frac{\partial f}{\partial t} = b - a = -\frac{f - f_0}{\tau(k)}$

$$\Delta f = (\Delta f)_0 e^{-t/\tau(k)}$$

弛豫时间 τ 大致度量了恢复平衡所需要的时间
(类似德鲁德模型, 区别在于 τ 是 k 的函数)

波尔兹曼方程

$$\frac{df}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{漂移}} + \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{碰撞}} = 0 \quad \text{——波尔兹曼方程}$$

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \nabla_k f(k, t)$$

$$b - a = -\frac{f - f_0}{\tau(k)} = -\frac{\Delta f}{\tau(k)}$$



简化的波尔兹曼方程

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_k f(k) = b - a = -\frac{\Delta f}{\tau(k)}$$

用于研究稳态问题

波尔兹曼方程与德鲁德电子运动方程

德鲁德自由电子运动方程

$$\frac{dp}{dt} = -eE - \frac{p}{\tau}$$

波尔兹曼方程

$$\frac{df}{dt} = \frac{e\vec{E}}{\hbar} \nabla_k f(k, t) - \frac{\Delta f}{\tau(k)}$$

形式非常接近，区别在于：

1. τ 不再是一个简单的常数而是 k 的函数
2. 单个电子的动量替换为大量电子的分布函数

波尔兹曼方程蕴含的物理意义：

金属导电性并不是由全部的电子决定，而是由电子能态在 k 空间的分布决定（能带理论和量子统计）

由玻尔兹曼方程求金属的电导率

德鲁德模型

$$J = \left(\frac{ne^2\tau}{m} \right) E \quad \text{电流密度方程解释了欧姆定律}$$

简化的玻尔兹曼方程——稳态解（不是热平衡态）

$$-\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f(k) = -\frac{\Delta f}{\tau(k)}$$



$$J = (?) E$$

将分布函数展开求 Δf

- 对于电场 E 下的定态分布函数，应是 E 的函数： Δf

$$f = f_0 + a_1 \vec{E} + a_2 \vec{E}^2 + \dots = f_0 + f_1 + f_2 + \dots$$

- f_0 代表 $qE=0$ 的值，即平衡状态下的费米分布函数
将上式代入简化玻尔兹曼方程：

$$\frac{e\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f(k) = \frac{\Delta f}{\tau(k)}$$

$$-\frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_k f_0 - \frac{e}{\hbar} \vec{E} \cdot \nabla_k (f_1) + \dots = -\frac{f_1}{\tau} - \frac{f_2}{\tau} + \dots$$

按照E的幂级数展开的分布函数

根据E的同次幂相等，应有

$$f_1 = \frac{e\tau}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k f_0 \qquad \vec{v}(k) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k E(k)$$

$$= \frac{e\tau}{\hbar} \vec{E} \cdot \left[\left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{\nabla}_k E(k) \right] = e\tau \vec{E} \cdot \vec{v}(k) \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)$$

根据欧姆定律，电流与电场成正比，分布函数只需要考虑一次幂

$$f = f_0 + f_1$$

$$j = -e \int 2 f \vec{v}(k) d\vec{k} / (2\pi)^3$$

$$= -e \int 2 f_0 \vec{v}(k) d\vec{k} / (2\pi)^3 - e \int 2 f_1 \vec{v}(k) d\vec{k} / (2\pi)^3$$

平衡分布电流=0

按照E的幂级数展开的分布函数

根据E的同次幂相等，应有

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{e\tau}{\hbar} \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k f_0 & \vec{v}(k) &= \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k E(k) \\ &= \frac{e\tau}{\hbar} \vec{E} \cdot \left[\left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \vec{\nabla}_k E(k) \right] & &= e\tau \vec{E} \cdot \vec{v}(k) \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) \end{aligned}$$

根据欧姆定律，电流与电场成正比，分布函数只需要考虑一次幂

$$\begin{aligned} f &= f_0 + f_1 \\ j &= -e \int 2 f \vec{v}(k) d\vec{k} / (2\pi)^3 \\ &= -e \int 2 f_0 \vec{v}(k) d\vec{k} / (2\pi)^3 - e \int 2 f_1 \vec{v}(k) d\vec{k} / (2\pi)^3 \\ &= -2e^2 \int \tau(k) \left[\vec{v}(k) \cdot \vec{E} \right] \frac{\partial f_0}{\partial E} \vec{v}(k) d\vec{k} / (2\pi)^3 \end{aligned}$$

一般情况下的电导率

即得欧姆定律一般形式，用分量表示：

$$j_{\alpha} = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} E_{\beta} \quad (\alpha, \beta = x, y, z)$$

电导率：

$$\sigma_{\alpha\beta} = -2e^2 \int \tau(k) v_{\alpha}(k) v_{\beta}(k) \left(\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dk / (2\pi)^3$$

积分中的 $\partial f/\partial E$ 表明，由于分布函数的变化主要在费米能级 E_F 附近，电导率决定于费米面附近情况

○ 各向同性，有效质量近似条件下

$$E_F^0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3}$$

$$\sigma_0 = \frac{ne^2 \tau(E_F)}{m^*}$$

$$\text{电阻率：} \rho = \frac{1}{\sigma}$$

与德鲁德模型的对比

德鲁德电流密度方程：

$$J = \left(\frac{ne^2\tau}{m} \right) E$$

电导率：

$$\sigma_D = \frac{ne^2\tau}{m}$$

各向同性晶体中的电导率：

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau(E_F)}{m^*}$$

1. 电子的质量→有效质量（能带理论的必然结果）
2. 弛豫时间只由费米面附近的电子状态决定（量子统计的结果）

固体的电特性

- 金属中电子输运过程
- 半导体中的输运过程
- 固体间接接触的电特性
- 霍尔效应

黄昆 书 P275
(第6章, 第7章)
韦丹 书 P154
(第6章)

基于半导体材料的电子器件

- 二极管（应用：整流、混频）
 - 金属-半导体二极管、半导体PN结二极管
- 晶体管（三极管）（应用：交流信号放大）
 - 半导体晶体管、金属-氧化物-半导体场效应管
- 集成电路（应用：计算机、手机...无所不在）
 - 同一芯片内集成无数个晶体管、电阻、电容

半导体光子器件

- 光学吸收

- 太阳能电池：作为电源给负载供电；以Si材料为主
- 光电探测器：将光信号转换为电信号；Si、Ge、InGaAs

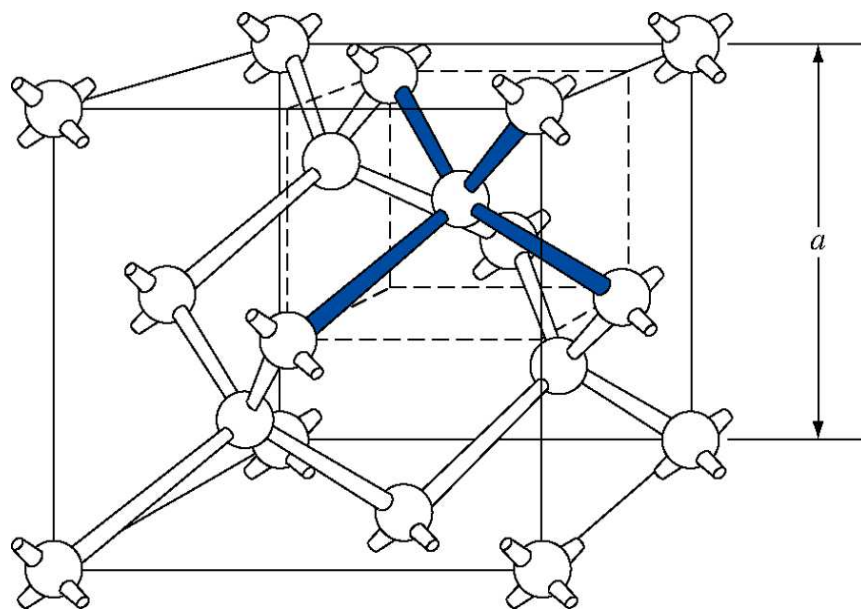
- 产生光信号：GaAs、InP、GaN，梦想—Si产生光

- 发光二极管：将电流转化为光
 - 可见光：照明、显示
 - 红外光：低速率通信、遥控
- 激光二极管：将电流转化为激光
 - 光子具有很好的单色性、相干性、方向性
 - 应用于高速光通信、光存储、激光测距等

半导体热电器件

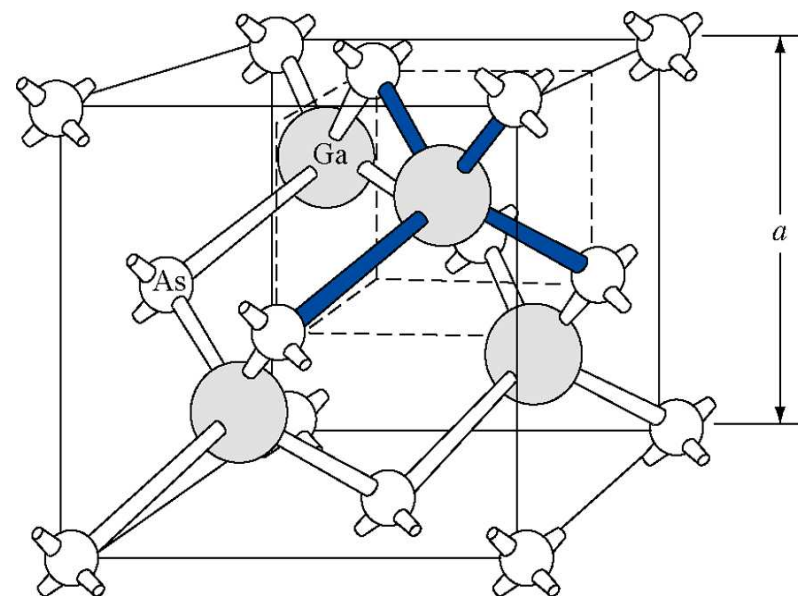
- 半导体温度传感器
 - 热敏电阻
- 半导体致冷/制热
 - 自动控温仪器、小型冷藏
 - 片上量子基态？
- 半导体温差发电
 - 深空探测宇航船
 - 热力发电（研究中）

半导体材料的基本晶体结构



元素半导体

金刚石结构，共价键



大部分III-V族，II-VI族

化合物半导体

闪锌矿结构，共价(离子)键

半导体材料的基本特性

- 绝对零度不导电而室温具有导电性
 - 室温电阻率 ρ 介于金属与绝缘体之间
 - 金属 $< 10^{-6} (\Omega \cdot \text{cm})$
 - 半导体 $10^{-3} \sim 10^9 (\Omega \cdot \text{cm})$
 - 绝缘体 $> 10^{14} (\Omega \cdot \text{cm})$
- 温度增加时电阻率 ρ 减小
 - 与金属在温度增加时电阻率增大相反
- 半导体有两种载流子
 - 电子 (electron, negative)
 - 空穴 (hole, positive)

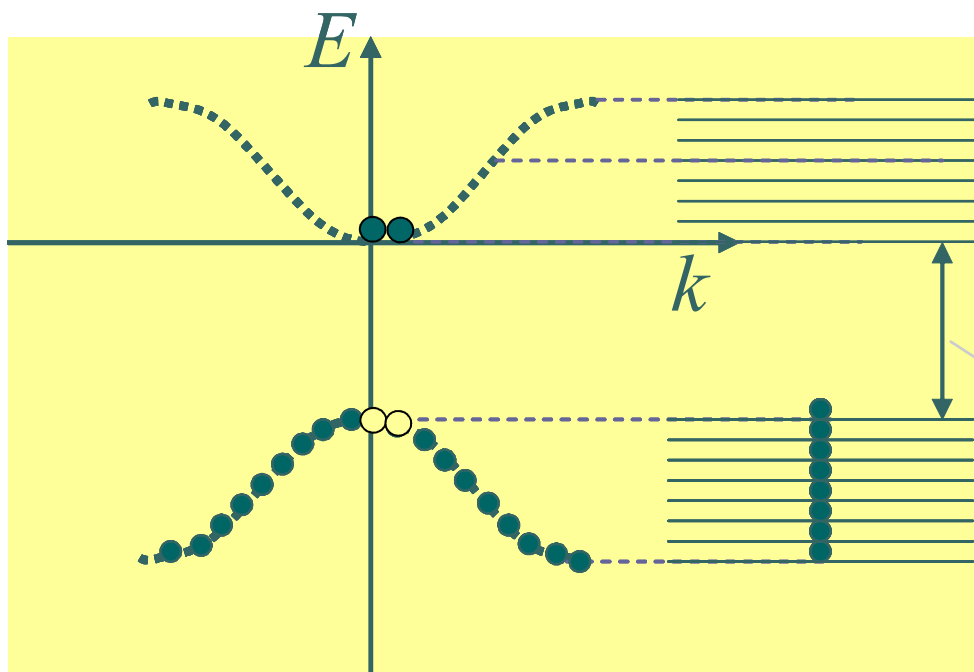
半导体中载流子的运输过程

- 载流子浓度与费米能级
- 本征激发
- 杂质与杂质激发
- 载流子的迁移
- 非平衡载流子和载流子的扩散

半导体的能带模型

最高的满带的电子容易被激发到上面的空带，
从而使两个带皆变成未满带，产生一定的导电性

半导体



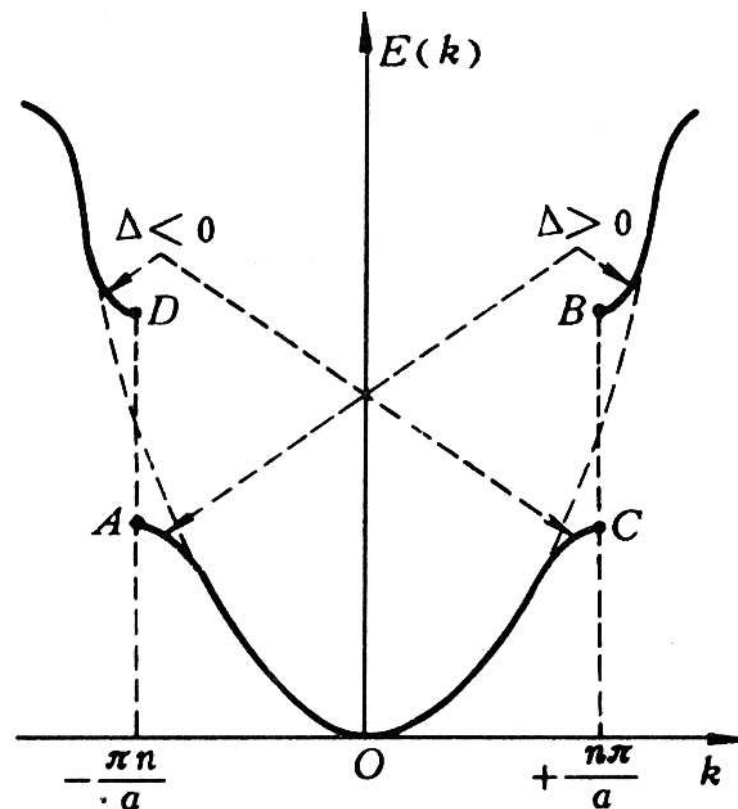
禁带宽度 $E_g < 2\text{eV}$

能带底部和顶部的 $E-k$ 关系

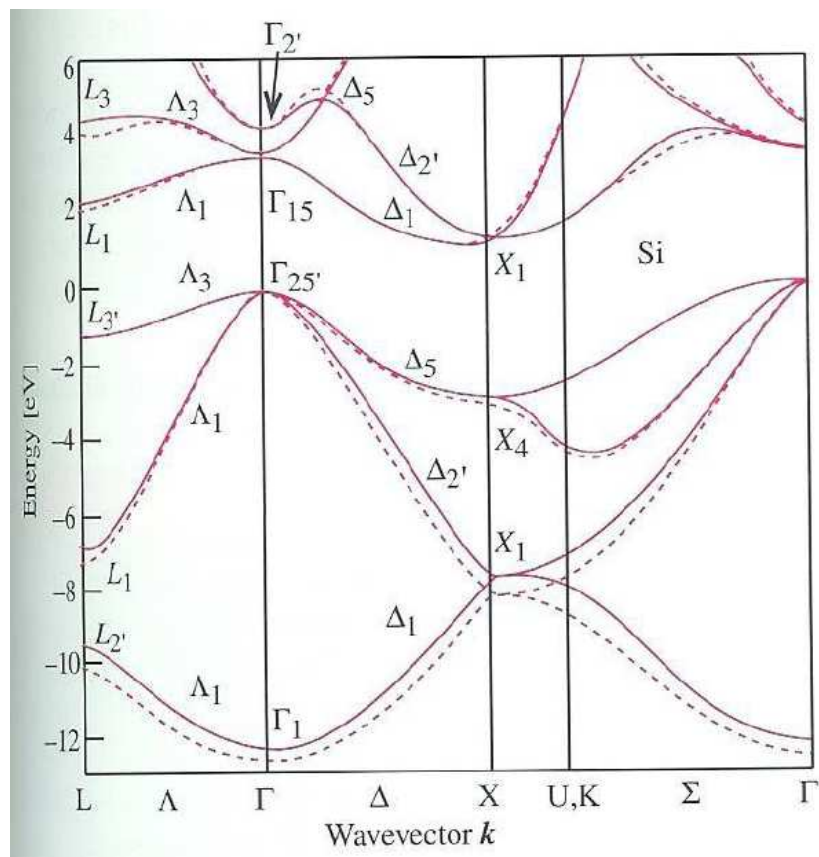
$$E_{\pm} = \begin{cases} \bar{V} + T_n + |V_n| + \Delta^2 T_n \left(\frac{2T_n}{|V_n|} + 1 \right) \\ \bar{V} + T_n - |V_n| - \Delta^2 T_n \left(\frac{2T_n}{|V_n|} - 1 \right) \end{cases}$$

考虑三维能带顶部和底部的 $E-k$ 关系并引入有效质量得到抛物线近似：

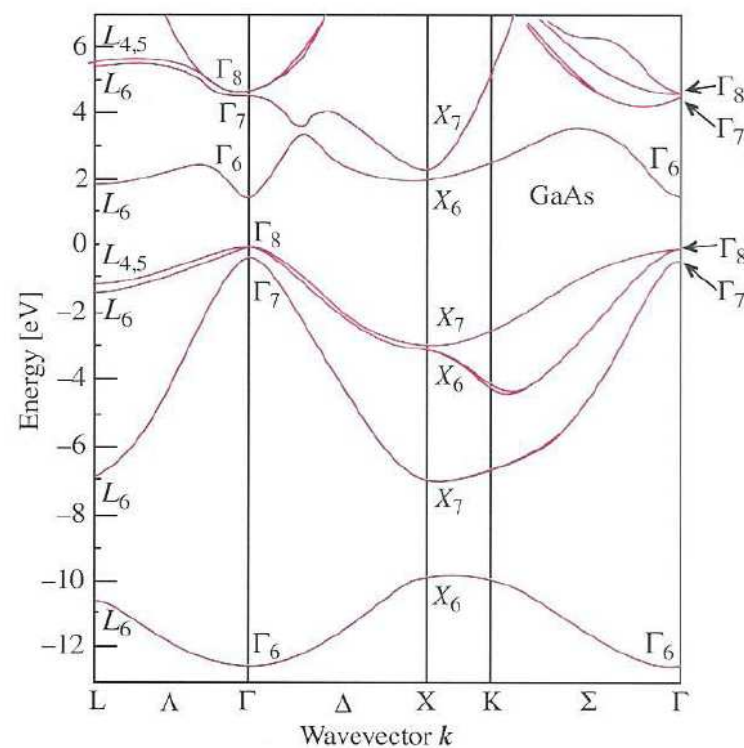
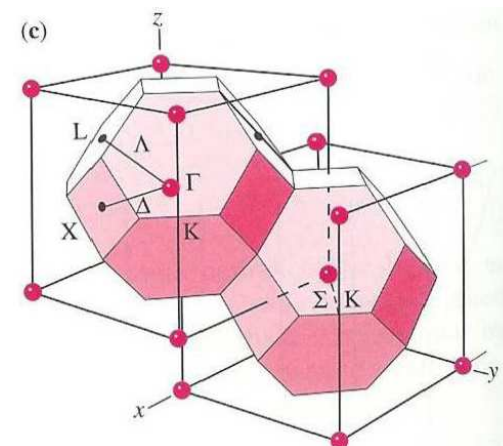
$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2 (k_x - k_{0x})^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2 (k_y - k_{0y})^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2 (k_z - k_{0z})^2}{2m_z^*}$$



Si和GaAs的真实能带



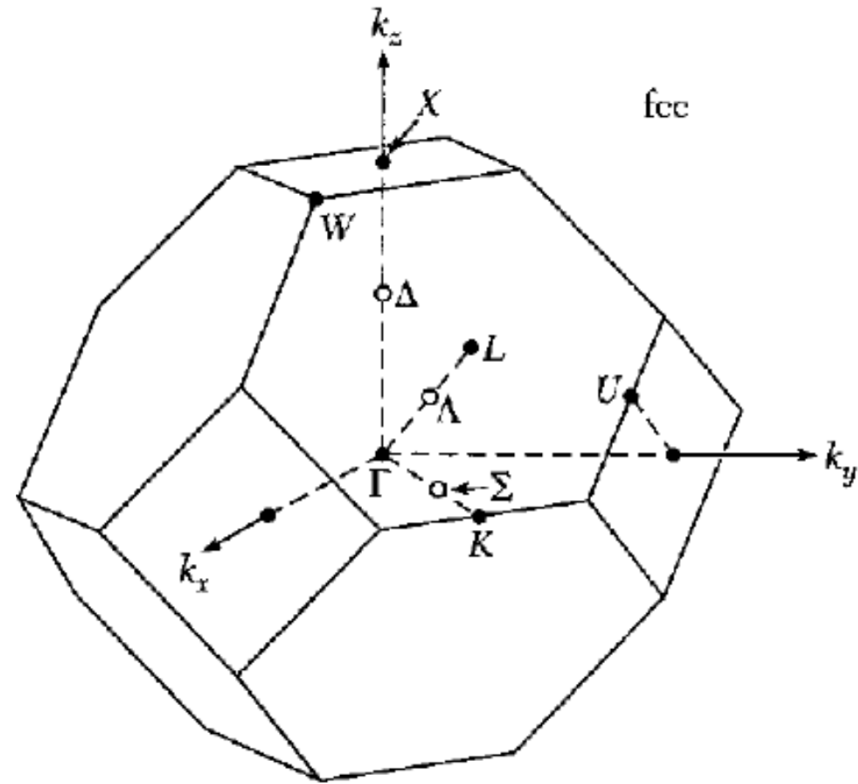
Si的能带——间接带隙



GaAs的能带——直接带隙

Si和Ge的导带底部的有效质量

- Si
 - 导带底：布里渊区的靠近X点 (100)方向
 - m_l : $0.98 m_0$
 - m_t : $0.19 m_0$
- Ge
 - 导带底：布里渊区的L点 (111)方向
 - m_l : $1.64 m_0$
 - m_t : $0.082 m_0$

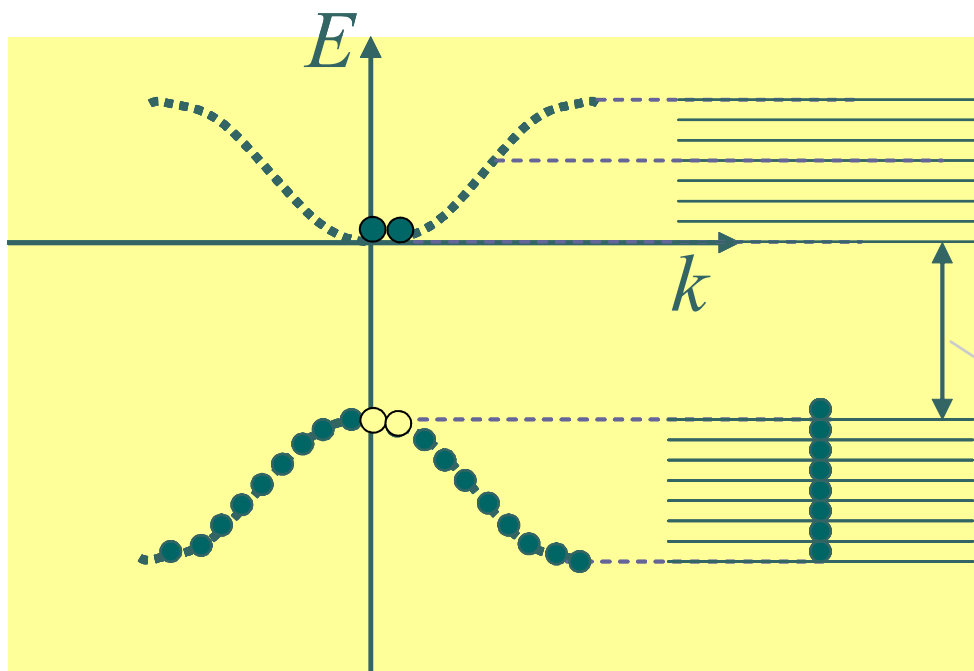


对称轴方向的有效质量称纵向有效质量 m_l
垂直于对称轴的称为横向有效质量 m_t

半导体的能带模型

最高的满带的电子容易被激发到上面的空带，
从而使两个带皆变成未满带，产生一定的导电性

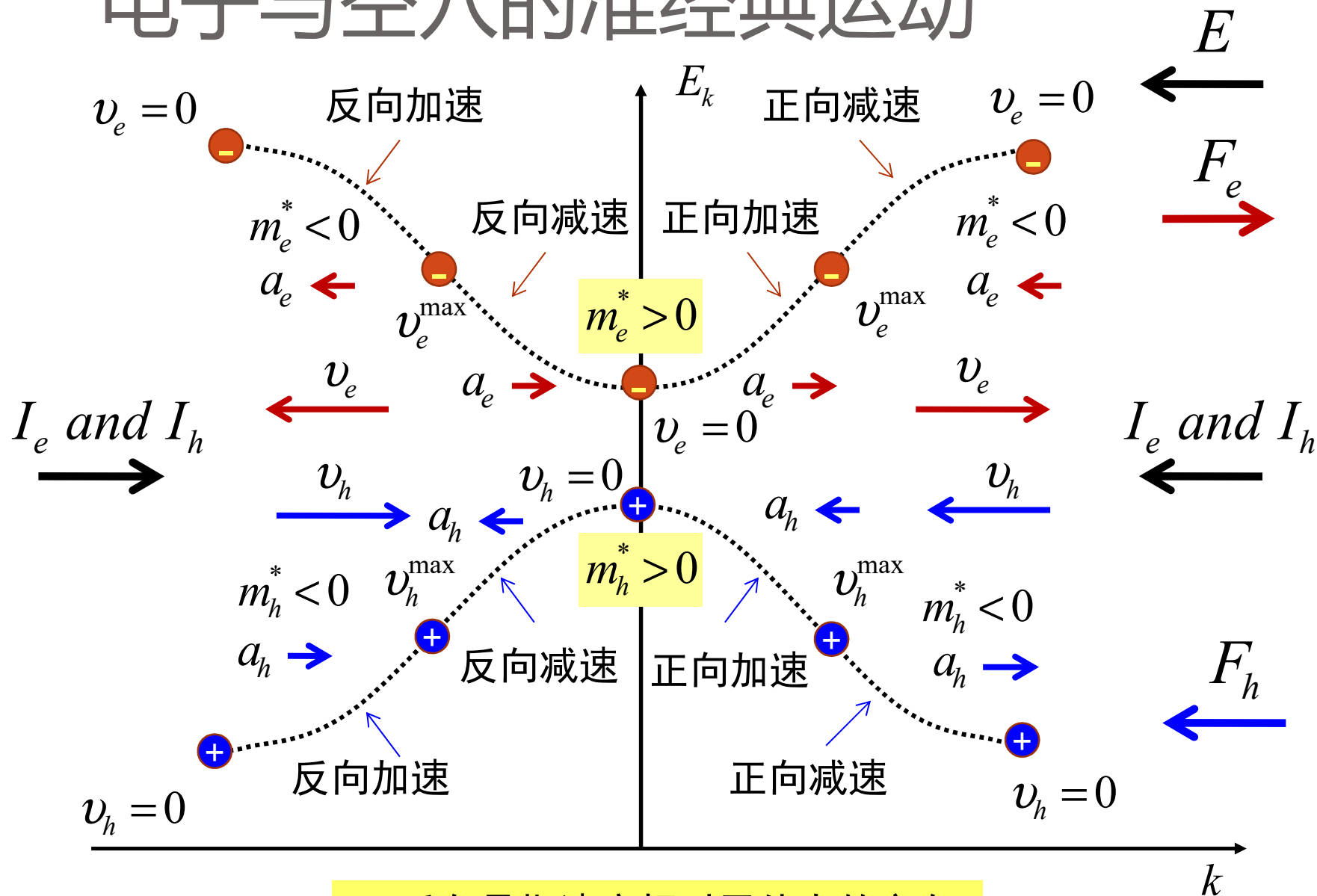
半导体



将导带中的电子
和价带中的空穴
近似成自由电子

禁带宽度 $E_g < 2\text{eV}$

电子与空穴的准经典运动



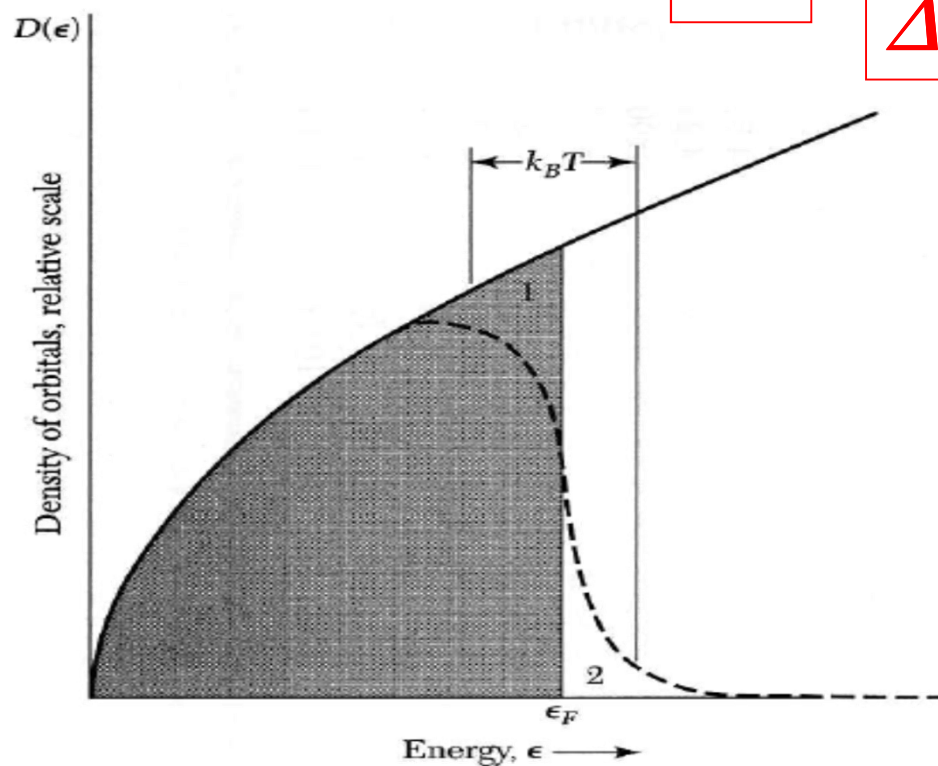
正/反向是指速度相对于外力的方向

能量标度下的状态密度

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

Diagram illustrating the equation with annotations:

- A red arrow points from m in the equation to a red box containing m^* .
- A red arrow points from E in the equation to a red box containing ΔE .



将导带中的电子
和价带中的空穴
近似成自由电子



将自由电子的质量替换为：
电子或空穴的有效质量
将自由电子的能量替换为：
与导带底或价带顶的能量差

导带底和满带顶附近的能态密度

如果导带底附近电子和价带顶附近空穴可以用简单的有效质量 m_e^* 和 m_h^* 来描述，就可以直接引用自由电子的能态密度公式分别写出单位体积中导带底和价带顶附近的能态密度：

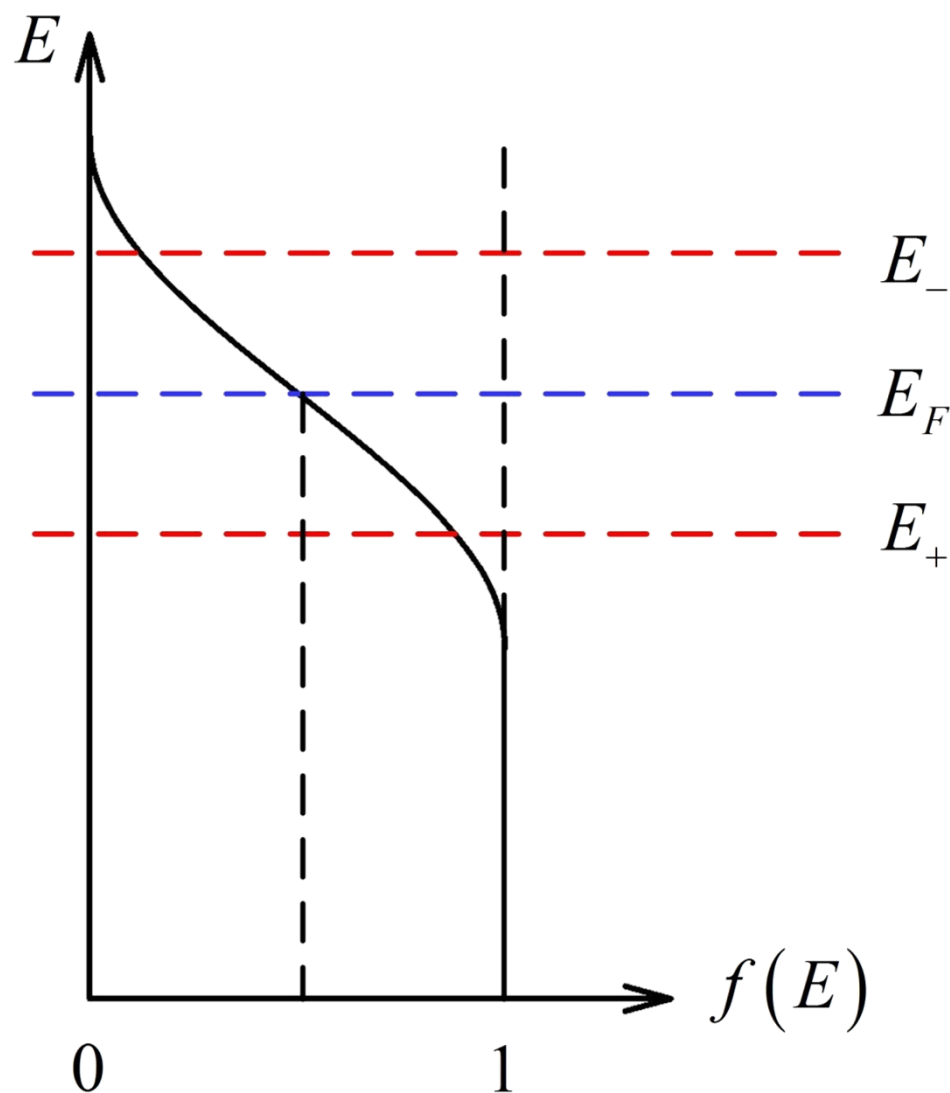
$$N_-(E) = \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{(E - E_-)} \quad E_- \text{ 导带底}$$

$$N_+(E) = \frac{4\pi(2m_+^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{(E_+ - E)} \quad E_+ \text{ 价带顶}$$



$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$

电子和空穴的浓度



电子的浓度:

$$n = \int_{E_-}^{\infty} f(E) N_-(E) dE$$

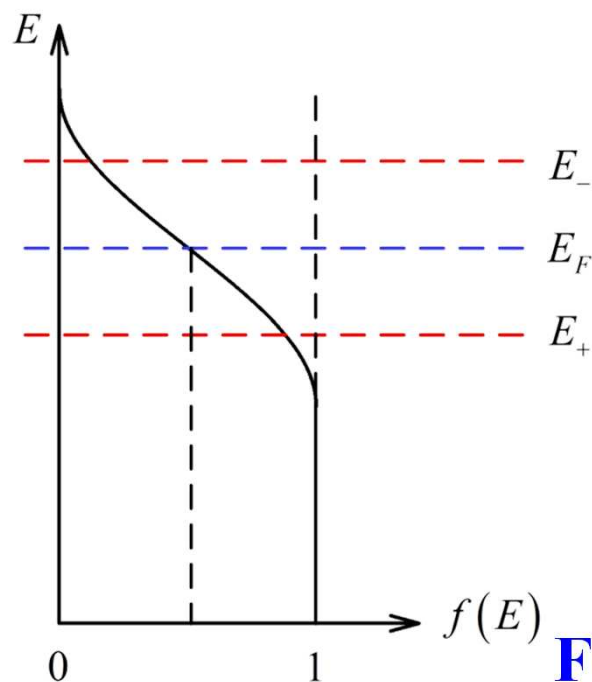
根据 E_F 的物理意义:

E_F 应在 E_- 与 E_+ 之间。

半导体中载流子的费米统计分布

根据 E_F 的物理意义, E_F 应在 E_- 与 E_+ 之间。

当 $E - E_F >$ 几个 $k_B T$ 时, $\exp[(E - E_F)/k_B T] \gg 1$, 有:



$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \approx \underline{e^{-(E-E_F)/k_B T}} \ll 1$$

$$E - E_F > E_- - E_F \gg k_B T$$

Fermi-Dirac分布过渡到经典**Boltzmann**分布, 且 $f(E)$ 随 E 的增大而迅速趋于零。

电子和空穴的浓度

由于电子和空穴的几率随能量 $E-E_-$ 和 E_+-E 按波尔兹曼规律迅速减少，电子和空穴主要集中在导带底或价带顶附近 $\sim k_B T$ 的范围内，因此可以用能态密度直接计算电子和空穴浓度

$$f(E) \approx e^{-(E-E_F)/k_B T}$$

电子：

$$n = \int_{E_-}^{\infty} f(E) N_-(E) dE$$

$$N_-(E) = \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \sqrt{(E - E_-)}$$

$$n = \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_F)/k_B T} \sqrt{(E - E_-)} dE$$

电子的浓度

$$\begin{aligned} n &= \int_{E_-}^{\infty} f(E) N_-(E) dE \\ &= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_F)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE \end{aligned}$$

电子的浓度

$$\begin{aligned}n &= \int_{E_-}^{\infty} f(E) N_-(E) dE \\&= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_F)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE \\&= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_-)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE\end{aligned}$$

电子的浓度

$$\xi = \frac{E - E_-}{k_B T}$$

$$n = \int_{E_-}^{\infty} f(E) N_-(E) dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_F)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_-)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} \int_0^{\infty} \xi^{1/2} e^{-\xi} d\xi$$

电子的浓度

$$\xi = \frac{E - E_-}{k_B T}$$

$$n = \int_{E_-}^{\infty} f(E) N_-(E) dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_F)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_-)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} \int_0^{\infty} \xi^{1/2} e^{-\xi} d\xi$$

$$= \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

$$\int_0^{\infty} \xi^{1/2} e^{-\xi} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

电子的浓度

$$n = \int_{E_-}^{\infty} f(E) N_-(E) dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_F)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_-)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} \int_0^{\infty} \xi^{1/2} e^{-\xi} d\xi$$

$$= \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

有效能级密度

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

电子的浓度

$$n = \int_{E_-}^{\infty} f(E) N_-(E) dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_F)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE$$

$$= \frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} \int_{E_-}^{\infty} e^{-(E-E_-)/k_B T} \sqrt{(E-E_-)} dE$$

这表明，在计算导带电子数时可以等效地用导带底能级 E_- 代替整个导带，导带的电子数就如同在导带底 E_- 处集中了 N_- 个能态所含有的电子数

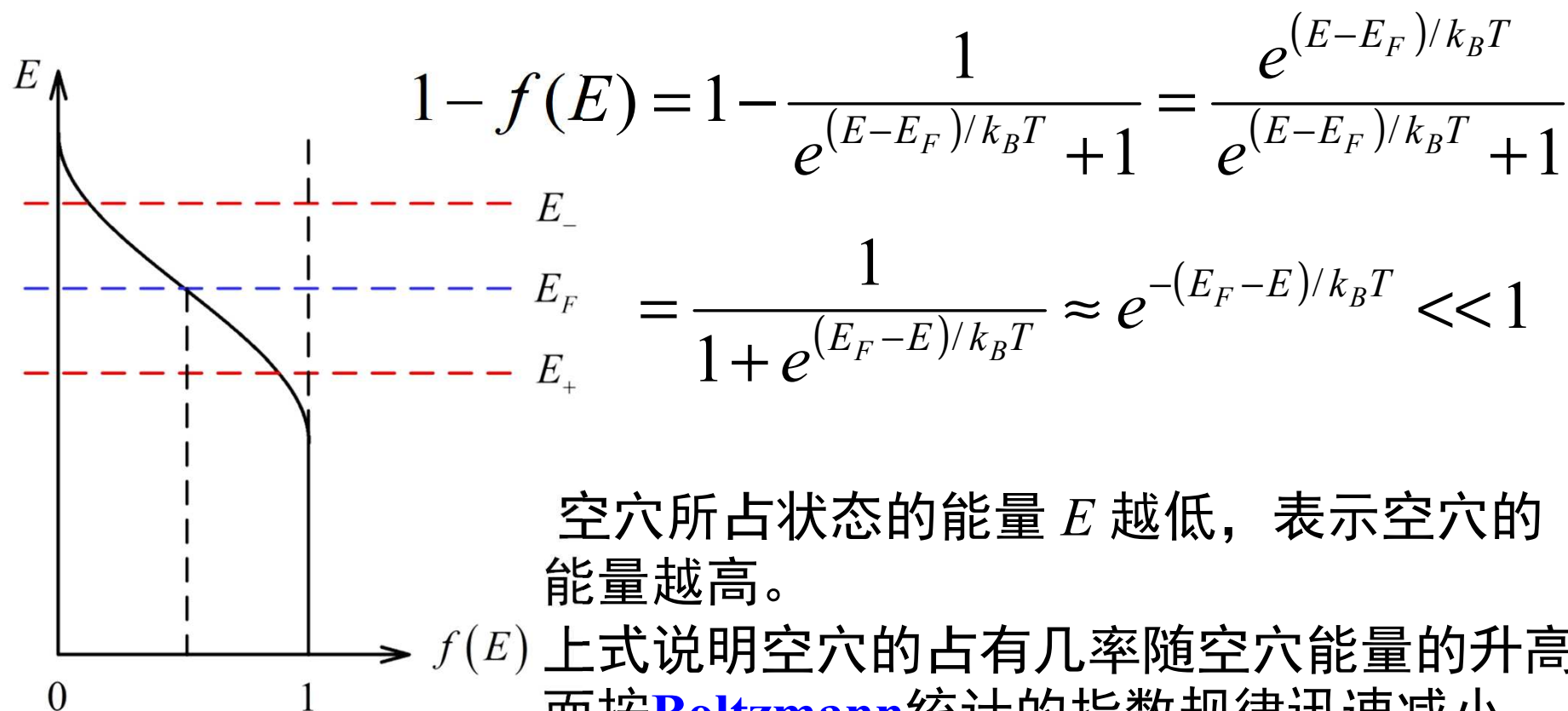
$$= \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_- - E_F)/k_B T} = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

有效能级密度

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

空穴的费米统计分布

价带中空穴的情况也很类似，价带能级被空穴占据的几率也就是不为电子占据的几率，即：



空穴所占状态的能量 E 越低，表示空穴的能量越高。

上式说明空穴的占有几率随空穴能量的升高而按Boltzmann统计的指数规律迅速减小

空穴的浓度

同理,

$$\begin{aligned} p &= \int_{-\infty}^{E_+} (1 - f(E)) N_+(E) dE \\ &= \frac{4\pi(2m_+^*)^{3/2}}{h^3} \int_{-\infty}^{E_+} e^{-(E_F - E)/k_B T} \sqrt{(E_+ - E)} dE \\ &= N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T} \end{aligned}$$

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$N_+ = \frac{2(2\pi m_+^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

这表明, 在计算价带空穴数时可以等效地用价带顶能级 E_+ 代替整个价带, 价带的空穴数就如同在价带顶 E_+ 处集中了 N_+ 个能态所含有的空穴数

半导体中的载流子浓度

导带中电子的浓度:

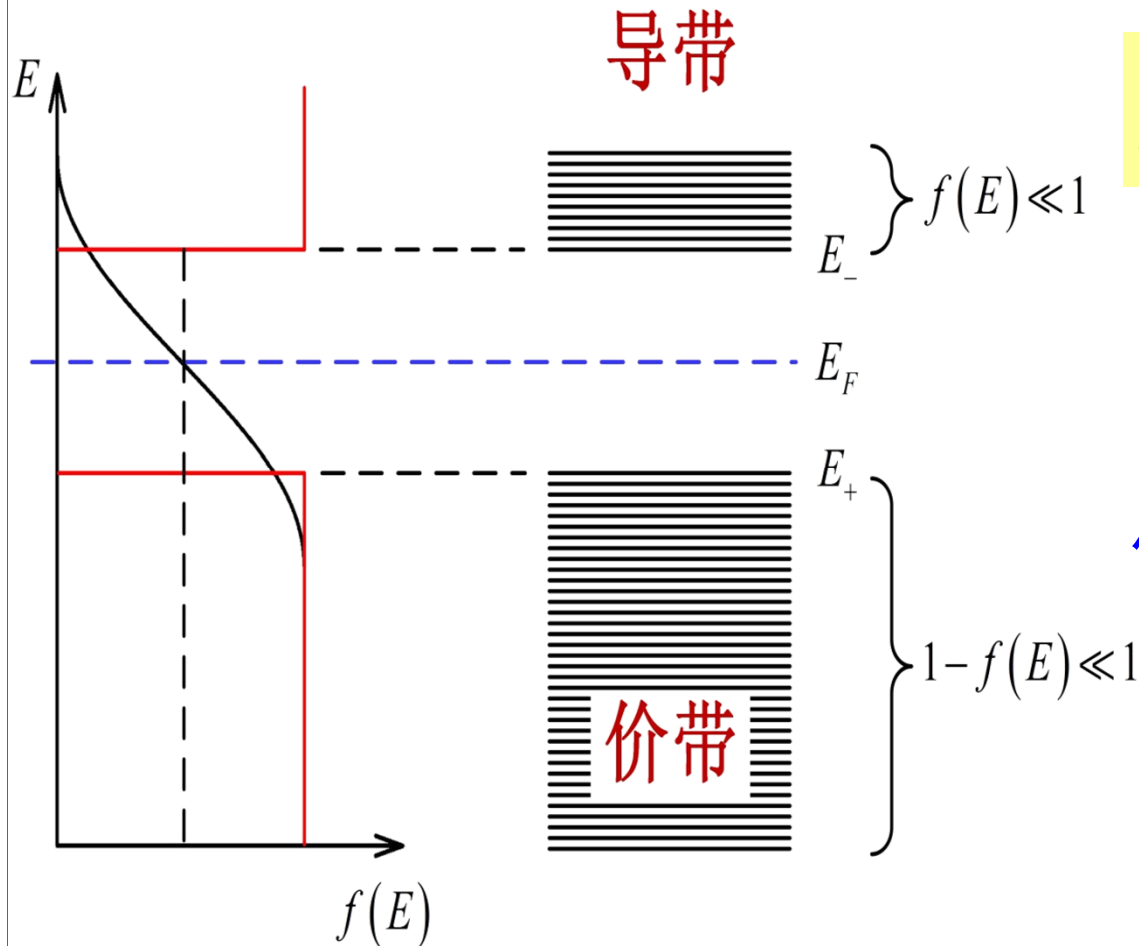
$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

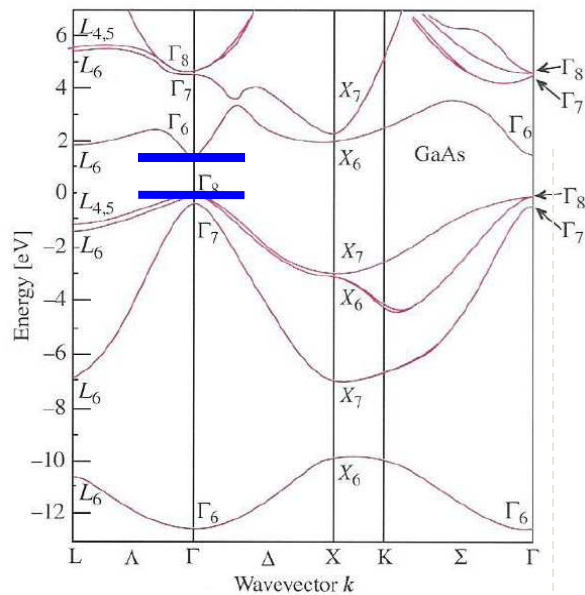
价带空穴的浓度:

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

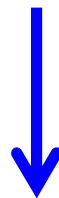
$$N_+ = \frac{2(2\pi m_+^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$



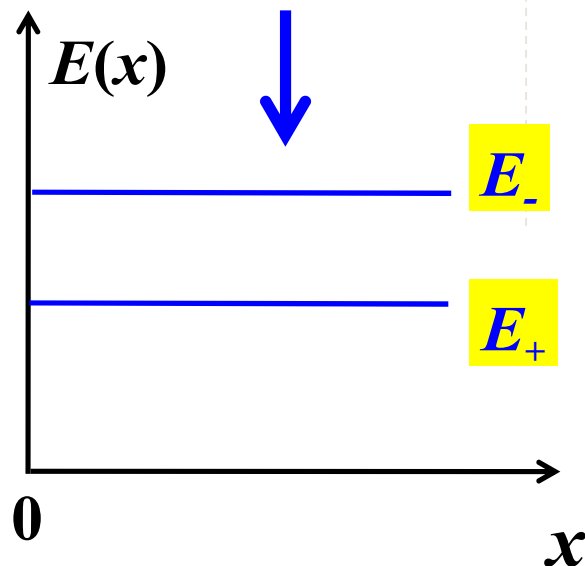
等效能级密度的意义



复杂的
能带结构



两个能级



导带底

价带顶

导带中电子的浓度:

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

价带空穴的浓度:

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$N_+ = \frac{2(2\pi m_+^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

带隙成为重要的参数

电子和空穴的浓度

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$



$$np = N_- N_+ \exp\left(-\frac{E_- - E_+}{k_B T}\right) = N_- N_+ \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right)$$

热平衡时：半导体中两种载流子浓度的乘积是一个仅与禁带宽度 E_g 及温度有关的量，而与半导体的费米能级 E_F **无关**。在一定温度下，导带中的电子越多，价带中的空穴就越少；反之亦然

电子和空穴的浓度

热平衡时电子与空穴浓度的乘积是常数：

$$np = N_- N_+ \exp\left(-\frac{E_- - E_+}{k_B T}\right) = N_- N_+ \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right)$$

问题：

仅有乘积还是不能确定电子和空穴的浓度

Solution:

寻找其它的限制条件

半导体中载流子的运输过程

- 载流子浓度与费米能级
- 本征激发
- 杂质与杂质激发
- 载流子的迁移
- 非平衡载流子和载流子的扩散

本征半导体

无杂质及缺陷的半导体称为本征半导体

载流子浓度完全取决于半导体本身的性质

- 电子受热激发，从价带跃迁到导带
- 价带产生空穴，导带产生电子
- 空穴数目等于电子数目
- 这种电子和空穴统称本征载流子

$$np = N_- N_+ \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right)$$

本征载流子浓度

$$n_i = n = p = (N_- N_+)^{1/2} e^{-E_g / 2k_B T}$$

半导体的本征热激发

- 本征载流子
 - 与温度有关，温度越高，数目越大
 - 与带隙宽度有关，一般半导体 $E_g < 2\text{eV}$
 - 根据载流子浓度与温度的关系，可以得到带隙

本征载流子浓度

$$n_i = n = p = (N_- N_+)^{1/2} e^{-E_g / 2k_B T}$$

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

$$N_+ = \frac{2(2\pi m_+^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

本征费米能级

$$n_i = n = p$$

本征费米能级 E_{Fi}

$$\begin{aligned} E_{Fi} &= E_- - k_B T \ln(N_- / n_i) \\ &= E_+ + k_B T \ln(N_+ / n_i) \end{aligned}$$

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

本征费米能级

$$n_i = n = p$$

本征费米能级 E_{Fi}

$$E_{Fi} = E_- - k_B T \ln(N_- / n_i)$$

$$= E_+ + k_B T \ln(N_+ / n_i)$$

$$= \frac{1}{2}(E_- + E_+) + \frac{1}{2}k_B T \ln(N_+ / N_-)$$

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

本征费米能级

$$n_i = n = p$$

本征费米能级 E_{Fi}

$$E_{Fi} = E_- - k_B T \ln(N_- / n_i)$$

$$= E_+ + k_B T \ln(N_+ / n_i)$$

$$= \frac{1}{2}(E_- + E_+) + \frac{1}{2} k_B T \ln(N_+ / N_-)$$

$$= \frac{1}{2}(E_- + E_+) + \frac{3}{4} k_B T \ln(m_+^* / m_-^*)$$

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+) / k_B T}$$

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F) / k_B T}$$

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

$$N_+ = \frac{2(2\pi m_+^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

例题

- $T=300\text{ K}$ 时，计算硅中本征费米能级相对于禁带中央的位置，已知硅的载流子有效质量为电子 $1.08m_0$ ，空穴 $0.56m_0$
- 解
 - 本征费米能级相对于禁带中央的位置为

$$\begin{aligned} E_{Fi} - E_{midgap} &= \frac{3}{4} kT \ln\left(\frac{m_+^*}{m_-^*}\right) = \frac{3}{4} \times 0.0259 \times \ln(0.56 / 1.08) \\ &= -0.0128\text{eV} = -12.8\text{meV} \end{aligned}$$

本征费米能级

$$n_i = n = p$$

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

本征费米能级 E_{Fi}

$$E_{Fi} = E_- - k_B T \ln(N_- / n_i)$$

$$= E_+ + k_B T \ln(N_+ / n_i)$$

$$= \frac{1}{2}(E_- + E_+) + \frac{1}{2} k_B T \ln(N_+ / N_-)$$

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

$$= \frac{1}{2}(E_- + E_+) + \frac{3}{4} k_B T \ln(m_+^* / m_-^*)$$

$$N_+ = \frac{2(2\pi m_+^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

在一般情况下，由于 $k_B T$ 较小，且 m_h^* 和 m_e^* 相差不大，所以，本征半导体的费米能 E_{Fi} 近似地在带隙的中间

本征半导体的载流子浓度

给定材料，本征载流子浓度完全依赖于温度

$$n_i = n = p = (N_- N_+)^{1/2} e^{-E_g / 2k_B T}$$

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

$$N_+ = \frac{2(2\pi m_+^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

$$E_{Fi} = \frac{1}{2}(E_- + E_+) + \frac{3}{4}k_B T \ln(m_+^* / m_-^*)$$

电子与空穴的浓度相同，无法选择载流子的类型
但是电子与空穴的导电性质并不同（有效质量）

半导体载流子浓度

一般性质——由热平衡时的费米统计分布决定

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

E_F 升高，电子浓度增高、空穴浓度降低，反之亦然

$$np = N_- N_+ \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right)$$

例题

- 计算给定费米能级的热平衡电子和空穴浓度。假设 $T=300\text{ K}$ ，硅的 N_c (N_-) 为 $2.8 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ ， N_v (N_+) 为 $1.04 \times 10^{19}\text{ cm}^{-3}$ ，硅的禁带宽度为 1.12 eV ，设费米能级比导带低 0.25 eV 。

- 解：

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

$$= 2.8 \times 10^{19} \exp(-0.25 / 0.0259) = 1.8 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$= 1.04 \times 10^{19} \exp(-(1.12 - 0.25) / 0.0259) = 2.7 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$$

半导体载流子浓度

一般性质——由热平衡时的费米统计分布决定

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

E_F 升高，电子浓度增高、空穴浓度降低，反之亦然

$$np = N_- N_+ \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right)$$

问题：

如何改变半导体材料中的热平衡时的载流子类型和浓度（本征半导体是难以做到这一点的）

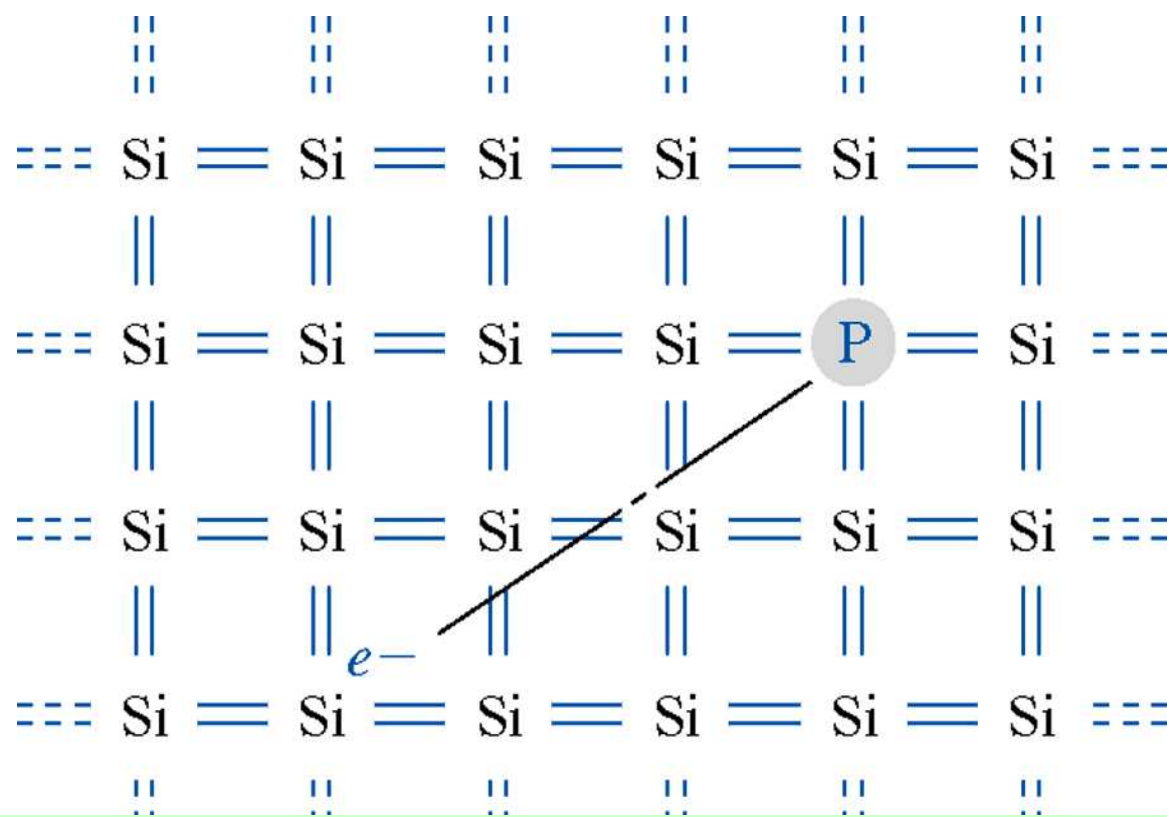
Solution: 掺杂

半导体中载流子的运输过程

- 载流子浓度与费米能级
- 本征激发
- 杂质与杂质激发
- 载流子的迁移
- 非平衡载流子和载流子的扩散

半导体中的杂质

半导体材料中的杂质使严格的周期性势场受到破坏，从而有可能产生能量在带隙中的局域化电子态——杂质能级



在Si或Ge中加入少量五价的P、As或Sb

半导体中的杂质

半导体材料中的杂质使严格的周期性势场受到破坏，从而有可能产生能量在带隙中的局域化电子态

——杂质能级

实际半导体中除去与能带对应的共有化状态以外，还存在一定数目的束缚状态。它们由杂质或缺陷（空位、间隙原子、位错引起的），即电子可以为适当的杂质或缺陷所束缚，束缚电子有确定的能级，这种杂质能级处在带隙之中

半导体中的杂质

- 能带

- 电子处于共有化状态（受到所有原子核的作用）
- 电子不具有稳定的束缚态

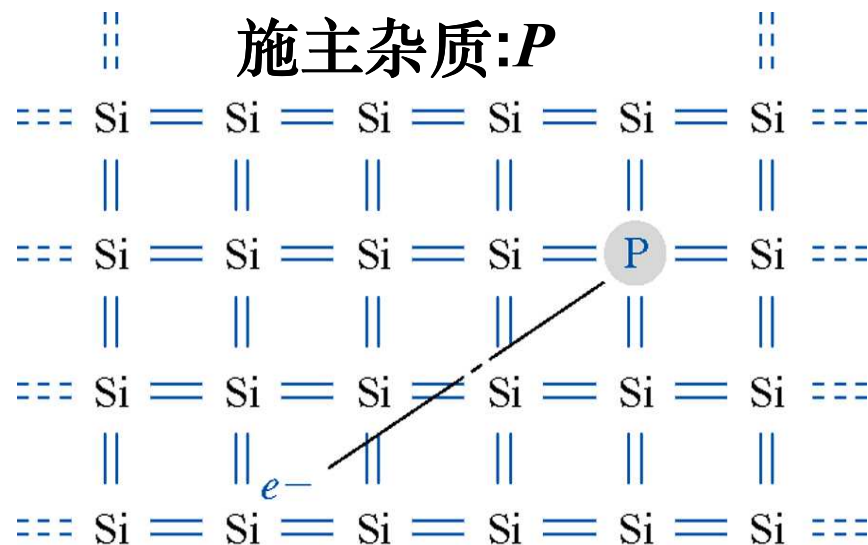
- 束缚态

- 由杂质或缺陷引起的
- 电子被束缚(在某些原子周围)，具有确定的能级
- 能级一般处于带隙之中

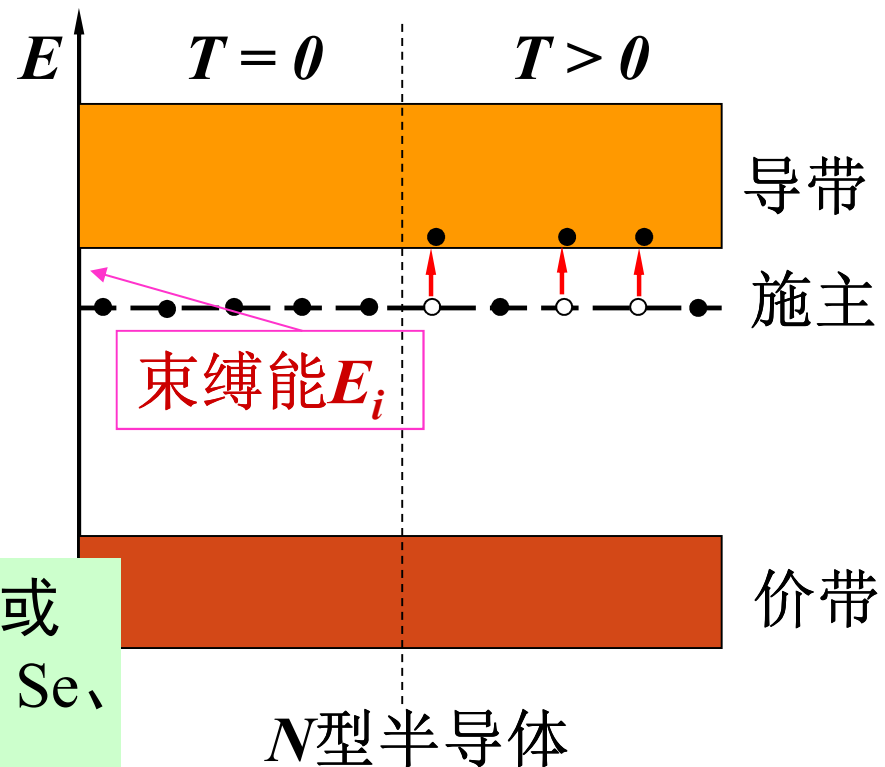
- 杂质能级对于半导体的性质有非常重要作用

施主杂质

- 施主——杂质在能隙中提供带有电子的能级
- 电子由施主能级激发到导带远比价带激发容易



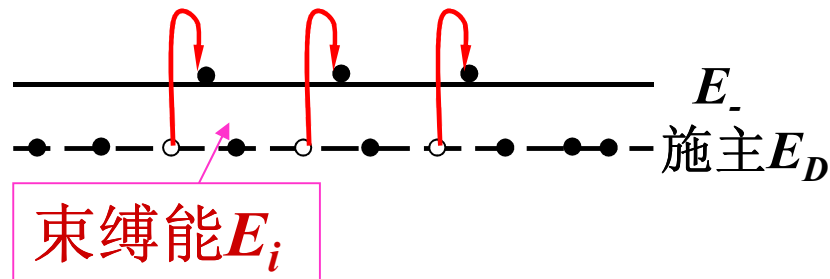
在Si或Ge中加入少量五价的P、As或Sb，或在GaAs中用VI族元素（S、Se、Te）替代As就形成N型半导体



N型导电几乎完全依靠施主热激发到导带的电子

施主杂质能级的特点

- 束缚能很小（百分之几电子伏特）
 - 电子很容易摆脱施主束缚而跃到导带运动
 - 所需的最小能量即是电离能的绝对值



$$E_i = E_- - E_D$$

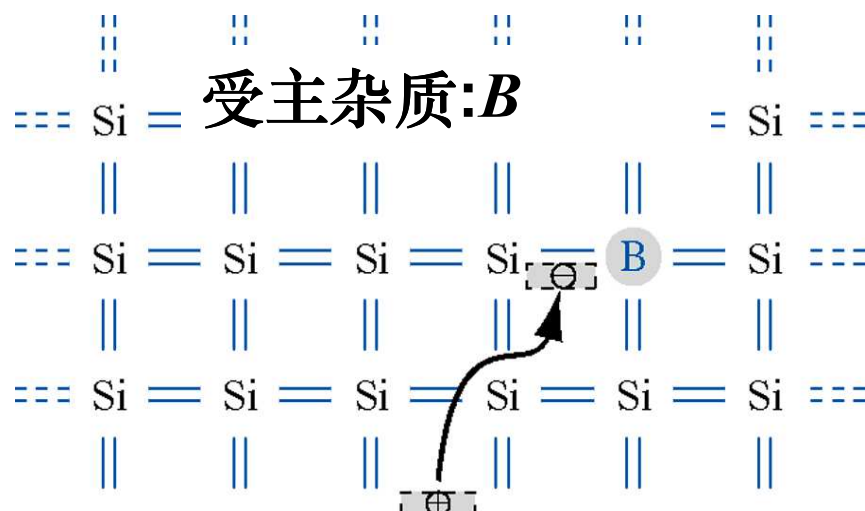
束缚能亦称为电离能

————— E_+

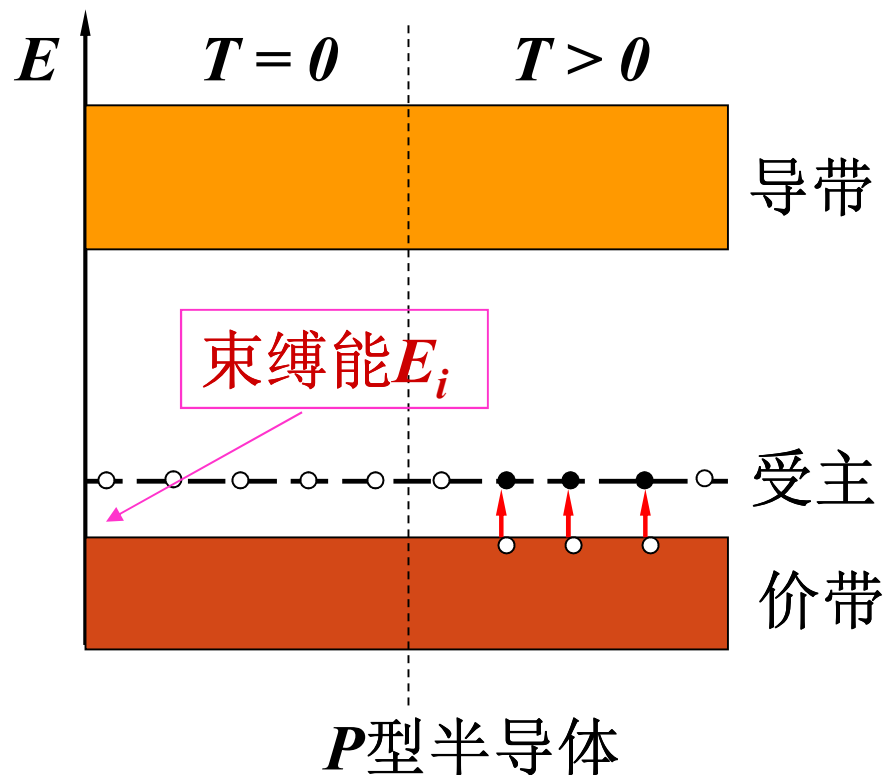
这里所指的施主电离实际上是电子摆脱施主的束缚而跃迁到导带中运动，因此，施主能级应在导带底 E_- 以下，其能量差就是施主的电离能 E_i ，即只要给施主电子以 E_i 大小的能量，就可以将它激发到导带中

受主杂质

- 受主——指杂质提供带隙中空能级的
- 电子由价带激发到受主能级比激发到导带容易

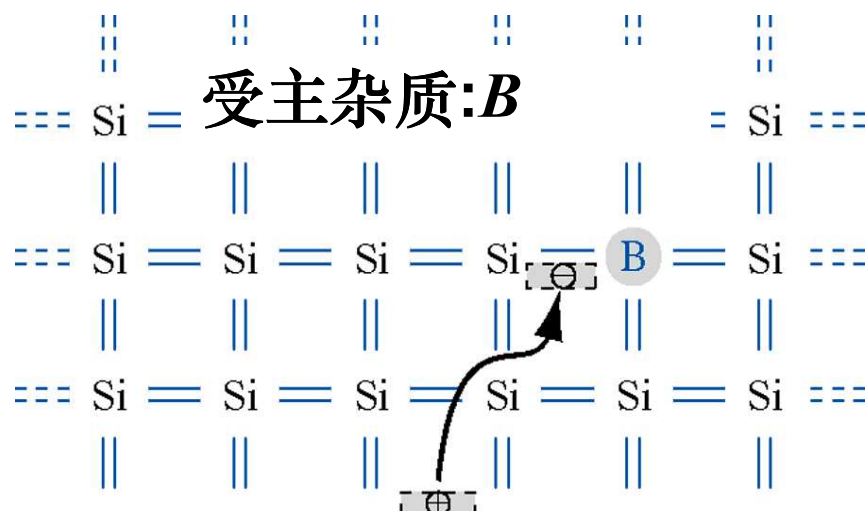


若在Si或Ge中掺入少量三价的B、Al、In等，或在GaAs中用II族元素（Zn、Be、Mg）替代Ga则形成P型半导体。

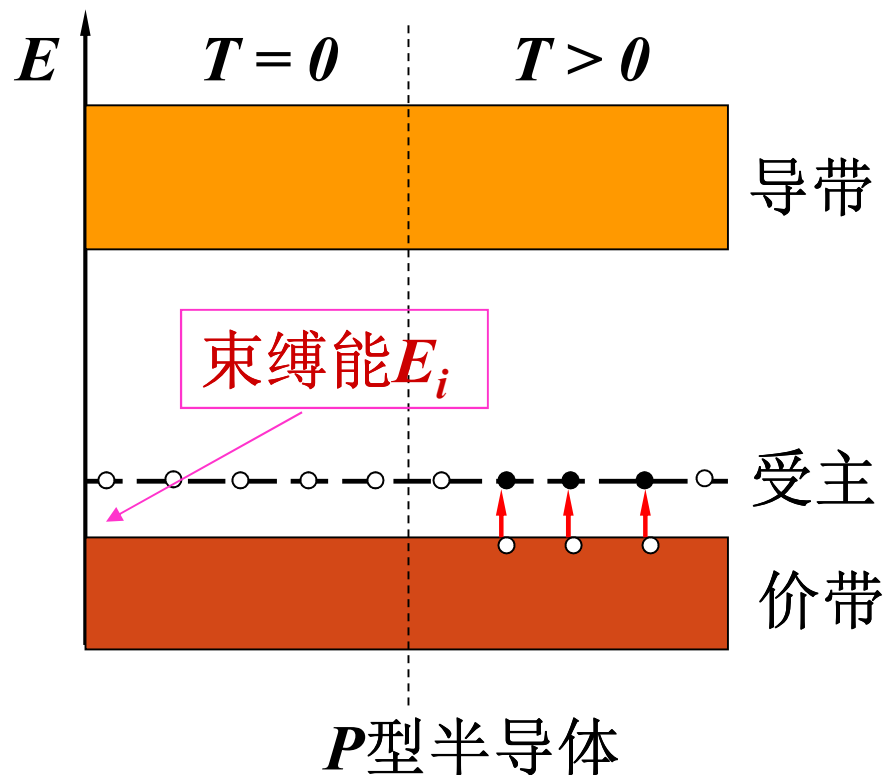


受主杂质

- 受主——指杂质提供带隙中空能级的
- 电子由价带激发到受主能级比激发到导带容易



若在Si或Ge中掺入少量三价的B、Al、In等，或在GaAs中用II族元素（Zn、Be、Mg）替代Ga则形成P型半导体。

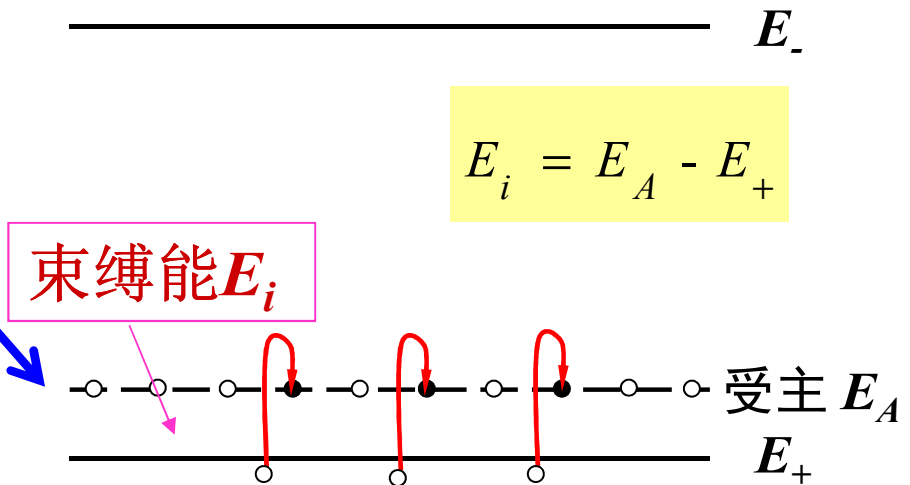


受主杂质能级的特点

- 以III族元素填充IV族元素晶体
 - 为了筹足4个共价键，必须加入1个电子，使得杂质处多一个负电荷，同时满带中失去1个电子，产生空穴；空穴围绕负电荷运动；即被杂质的负电荷所束缚

一个束缚的空穴相当于
图中所示的受主能级

在能带中这相当需要能量 E_i 才能使满带顶一个电子激发到受主能级而在满带顶 E_+ 留下一个自由空穴。



浅能级杂质

- 上述由替位杂质所形成的施主和受主
 - 能级靠近导带或价带，又称为浅能级杂质
 - 杂质能级对电子或空穴的束缚能很小
 - 电子很容易从施主能级跃迁或跃迁到受主能级
 - 载流子将以杂质跃迁产生为主

杂质或缺陷为什么能够形成施主或受主能级，以及它们如何束缚电子，其情况是很复杂的。不同材料、不同杂质，产生束缚态的具体原因可能很不相同

类氢杂质能级 —— 参考黄昆书 P334-337

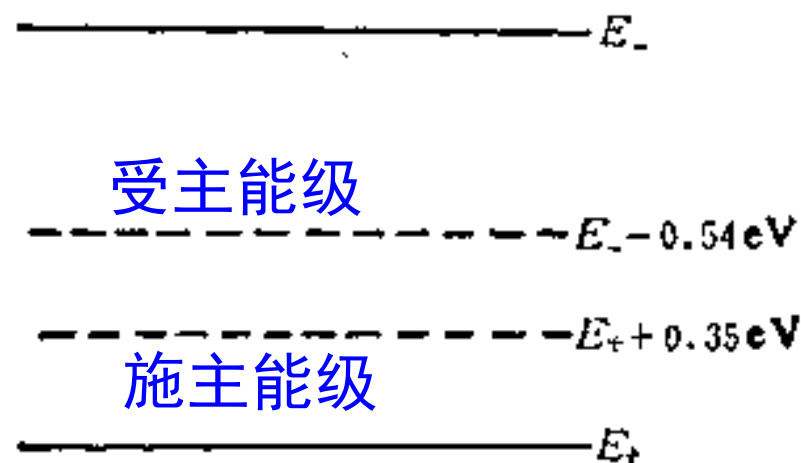
深能级杂质

- 大多数是多重能级
 - 如Au在硅中，有施主能级也有受主能级
 - 金为1价，施主能级靠近价带(!)，受主能级靠近禁带中部(!)
- 深能级杂质附加势作用距离短，1~2个原子
 - 深能级杂质和缺陷影响
 - 有效的复合中心，降低载流子寿命
 - 做补偿杂质，提高材料电阻率

Cu: $3d^{10} 4s^1$

Ag: $4d^{10} 5s^1$

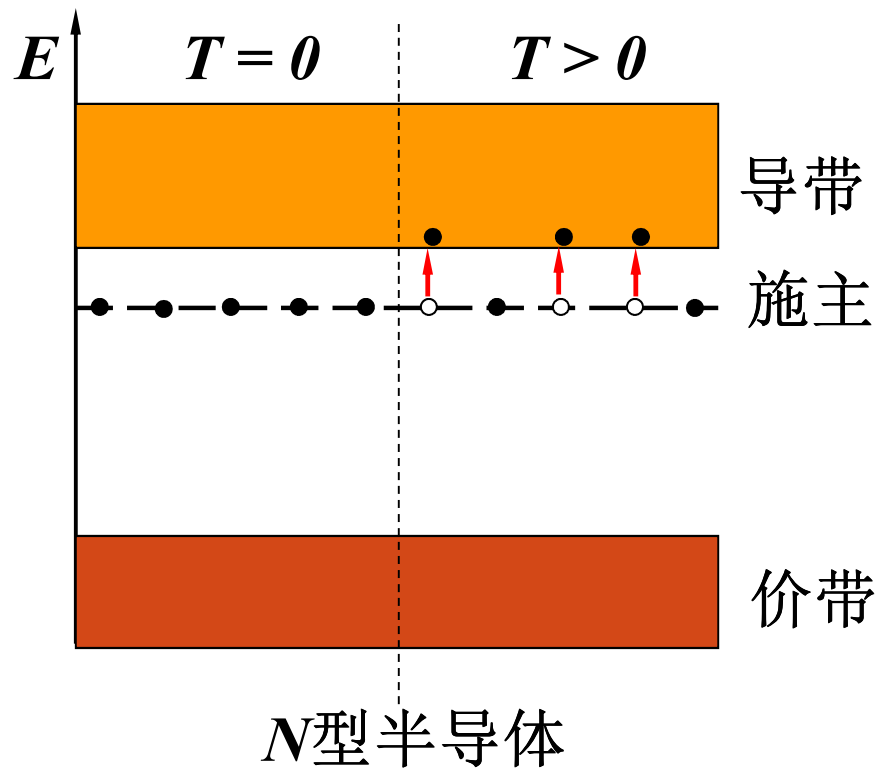
Au: $5d^{10} 6s^1$



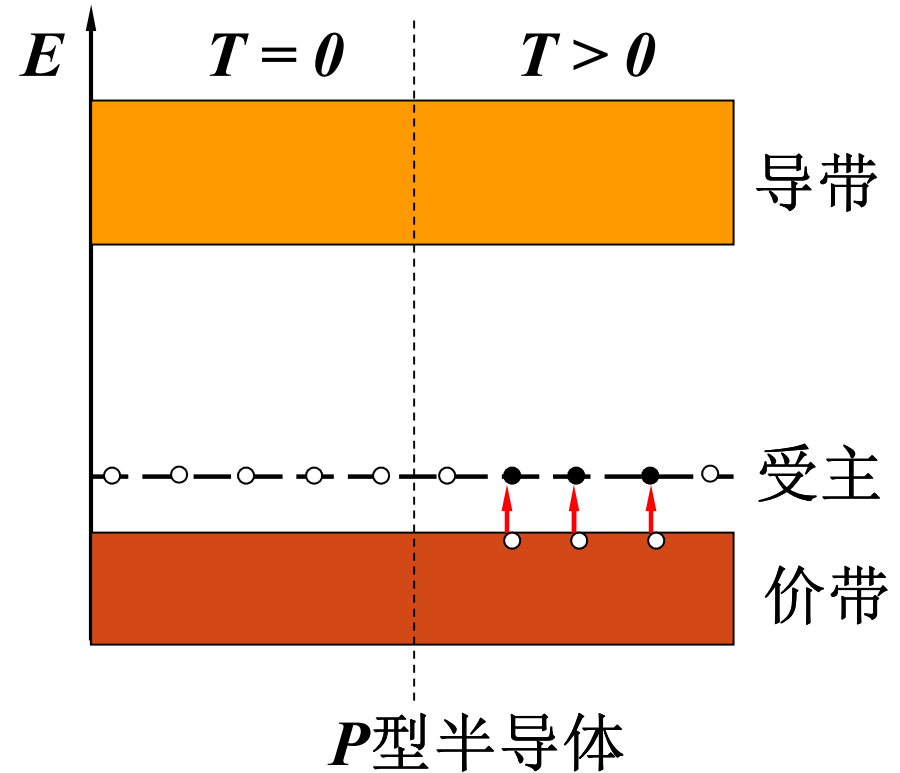
硅中金杂质的能级

非本征半导体

非本征半导体的费米能 E_F 及载流子浓度均与杂质原子有关。
在一定温度下，半导体中两种载流子的浓度并不相同。



主要依赖电子导电



主要依赖空穴导电

施主杂质激发

- 假设N型半导体只含一种施主，浓度 N_D ，能级 E_D

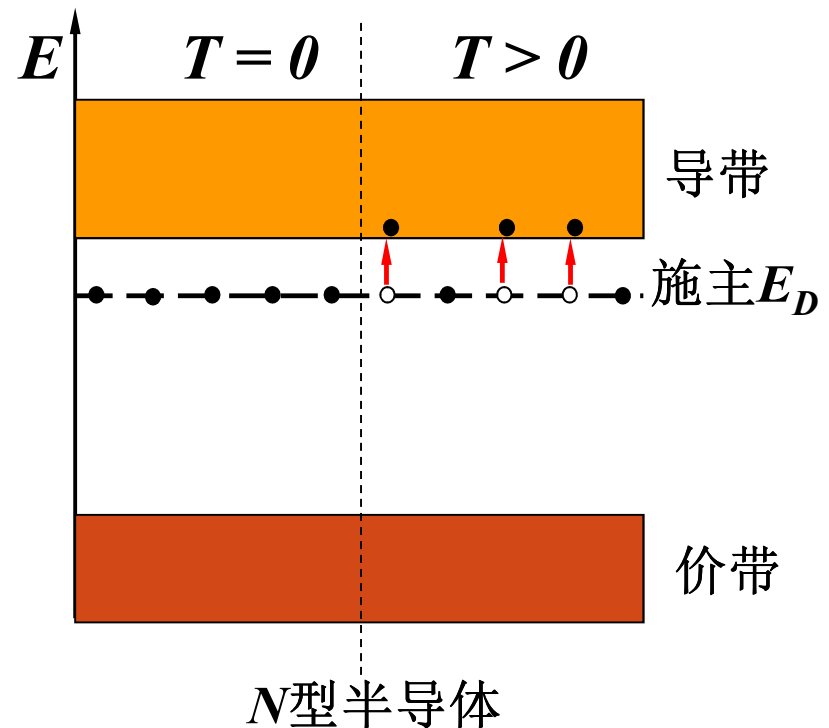
$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

由于掺杂， E_F 是未知数

- 在一般温度下，载流子主要为杂质激发的电子
- 假定导带中电子完全由施主提供

那么导带中电子数目显然与空的施主能级的数目相等

$$n = N_D [1 - f(E_D)] = N_D \left[\frac{e^{(E_D - E_F)/k_B T}}{e^{(E_D - E_F)/k_B T} + 1} \right] = N_D \frac{1}{1 + e^{-(E_D - E_F)/k_B T}}$$



施主杂质激发电子浓度

$$n = N_D \frac{1}{1 + e^{-(E_D - E_F)/k_B T}}$$

$$E_i = E_- - E_D$$

$$e^{E_F/k_B T} = \frac{n}{N_-} e^{E_-/k_B T}$$

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

$$N_- = \frac{2(2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}}{h^3}$$

$$n = N_D \frac{1}{1 + \frac{n}{N_-} e^{(E_- - E_D)/k_B T}}$$

$$n \left(1 + \frac{n}{N_-} e^{E_i/k_B T} \right) = N_D$$

$$\frac{1}{N_-} e^{E_i/k_B T} n^2 + n - N_D = 0$$

施主杂质激发电子浓度

$$\frac{1}{N_-} e^{E_i/k_B T} n^2 + n - N_D = 0$$

n 是正数，只能取正号的根

求解：

1. 当温度 T 很低时 $E_i \gg k_B T$

$$n \approx \frac{\left[4 \left(\frac{N_D}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T} \right]^{1/2}}{\left(\frac{2}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T}} = (N_- N_D)^{1/2} e^{-E_i/2k_B T}$$

少量施主电离激发电子

一般室温下热激发到导带的电子数也符合上式，
按指数关系随温度升高而增加（慎用！）

$$n = \frac{-1 + \left[1 + 4 \left(\frac{N_D}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T} \right]^{1/2}}{\left(\frac{2}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T}}$$

远大于1

施主杂质激发电子浓度

$$\frac{1}{N_-} e^{E_i/k_B T} n^2 + n - N_D = 0$$

求解：

$$n = \frac{-1 + \left[1 + 4 \left(\frac{N_D}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T} \right]^{1/2}}{\left(\frac{2}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T}}$$

2. 温度足够高 $E_i \ll k_B T$

远小于1

$$n = \frac{-1 + \left[1 + 2 \left(\frac{N_D}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T} + \dots \right]}{\frac{2}{N_-} e^{E_i/k_B T}} \approx N_D$$

施主几乎全部电离激发电子

N型半导体中的空穴浓度和费米能级

少数载流子浓度（空穴）

$$p = \frac{n_i^2}{n}$$

费米能级

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

$$\begin{aligned} E_F &= E_- - k_B T \ln(N_- / n) \\ &= E_{Fi} + k_B T \ln(n / n_i) \end{aligned}$$

本征半导体的费米能级

$$E_{Fi} = E_- - k_B T \ln(N_- / n_i)$$

施主杂质的浓度越高，
费米能级越靠近导带

受主杂质激发有类似结果

- 假设
 - 受主杂质能级 E_A ，电离能 E_i
 - 杂质浓度 N_A

- 类似地，杂质激发空穴浓度

$$p = \frac{-1 + \left[1 + 4 \left(\frac{N_A}{N_+} \right) e^{E_i/k_B T} \right]^{1/2}}{\left(\frac{2}{N_+} \right) e^{E_i/k_B T}}$$

在低温下 $E_i \gg k_B T$

$$p \approx (N_A N_+)^{1/2} e^{-E_i/2k_B T}$$

在高温下 $E_i \ll k_B T$

$$p \approx N_A$$

受主杂质时载流子浓度和费米能级

- 载流子浓度

- 多数载流子空穴浓度 $p = N_A$
- 少数载流子电子浓度 $n = \frac{n_i^2}{p}$

费米能级 $E_F = E_+ + k_B T \ln(N_+ / p)$

$$= E_{Fi} - k_B T \ln(p / n_i)$$

本征半导体的费米能级

$$E_{Fi} = E_+ + k_B T \ln(N_+ / n_i)$$

受主杂质的浓度越高，
费米能级越靠近价带

更一般情况下的结果

考虑施主和受主能级简并和电子自旋取向时引入施主和受主能级基态简并因子 g_D 和 g_A

$$n = \frac{-1 + \left[1 + 4 \left(\frac{g_D N_D}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T} \right]^{1/2}}{2 \left(\frac{g_D}{N_-} \right) e^{E_i/k_B T}}$$

$$p = \frac{-1 + \left[1 + 4 \left(\frac{g_A N_A}{N_+} \right) e^{E_i/k_B T} \right]^{1/2}}{2 \left(\frac{g_A}{N_+} \right) e^{E_i/k_B T}}$$

掺杂半导体和本征半导体

本征半导体： 费米能级 $E_{Fi} \approx \frac{1}{2}(E_+ + E_-)$

本征载流子浓度： $n_i = n = p = (N_- N_+)^{1/2} e^{-E_g/2k_B T}$

N型半导体： 费米能级 $E_F = E_{Fi} + k_B T \ln(n / n_i)$

载流子浓度：
$$n \approx \begin{cases} (N_- N_D)^{1/2} e^{-E_i/2k_B T}, & \text{low } T \\ N_D, & \text{high } T \end{cases}, \quad p = n_i^2 / n$$

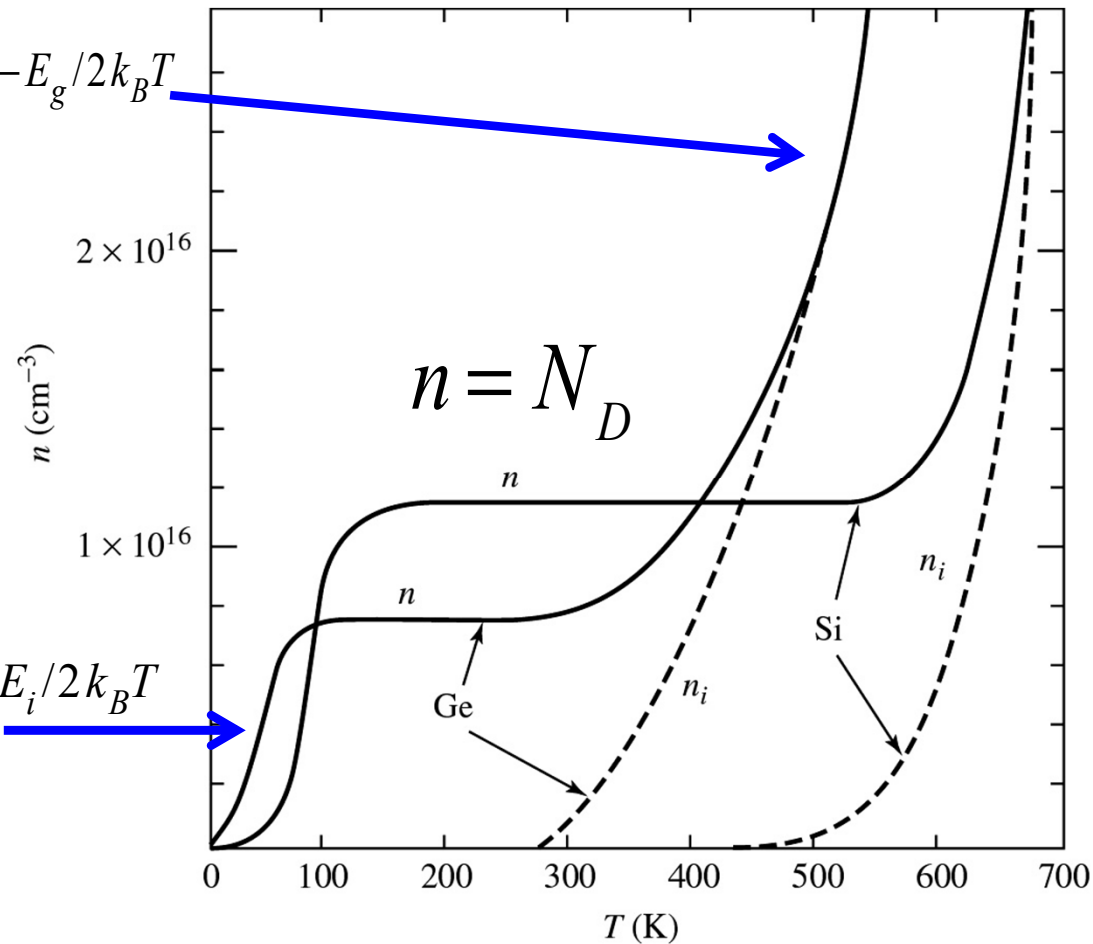
P型半导体： 费米能级 $E_F = E_{Fi} - k_B T \ln(p / n_i)$

载流子浓度：
$$p \approx \begin{cases} (N_A N_+)^{1/2} e^{-E_i/2k_B T}, & \text{low } T \\ N_A, & \text{high } T \end{cases}, \quad n = n_i^2 / p$$

载流子浓度与温度的关系

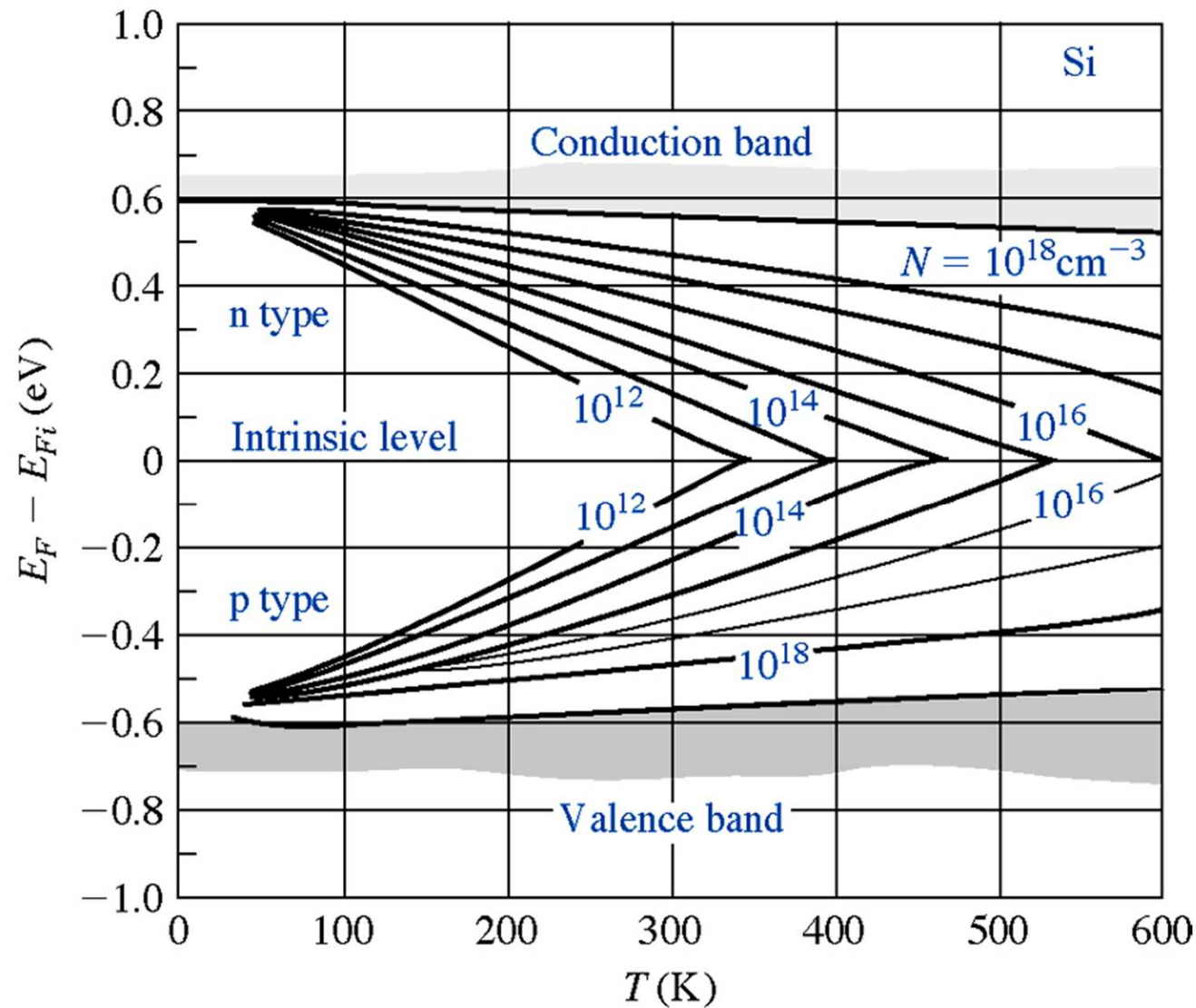
$$n = n_i = (N_- N_+)^{1/2} e^{-E_g/2k_B T}$$

$$n \approx (N_- N_D)^{1/2} e^{-E_i/2k_B T}$$



在足够高的温度下，由满带到导带的电子激发（本征激发）将成为主要的

费米能级与温度和掺杂浓度的关系



简并与非简并半导体

非简并半导体

- 杂质浓度与半导体原子浓度相比小的多
- 施主电子或受主空穴之间不存在相互作用
- 杂质在半导体中引入分离的杂质能级

简并半导体

杂质浓度增加，原子之间相互作用加强
分离能级将分裂为能带而展宽

杂质浓度增加到与有效状态密度相比拟

以施主为例，费米能级将进入导带，为 n 型简并

波尔兹曼分布近似将不适用，必须使用费米-狄拉克分布

费米 - 狄拉克积分——不要求

- 非简并:

$$n = N_- e^{-(E_- - E_F)/k_B T}$$

$$p = N_+ e^{-(E_F - E_+)/k_B T}$$

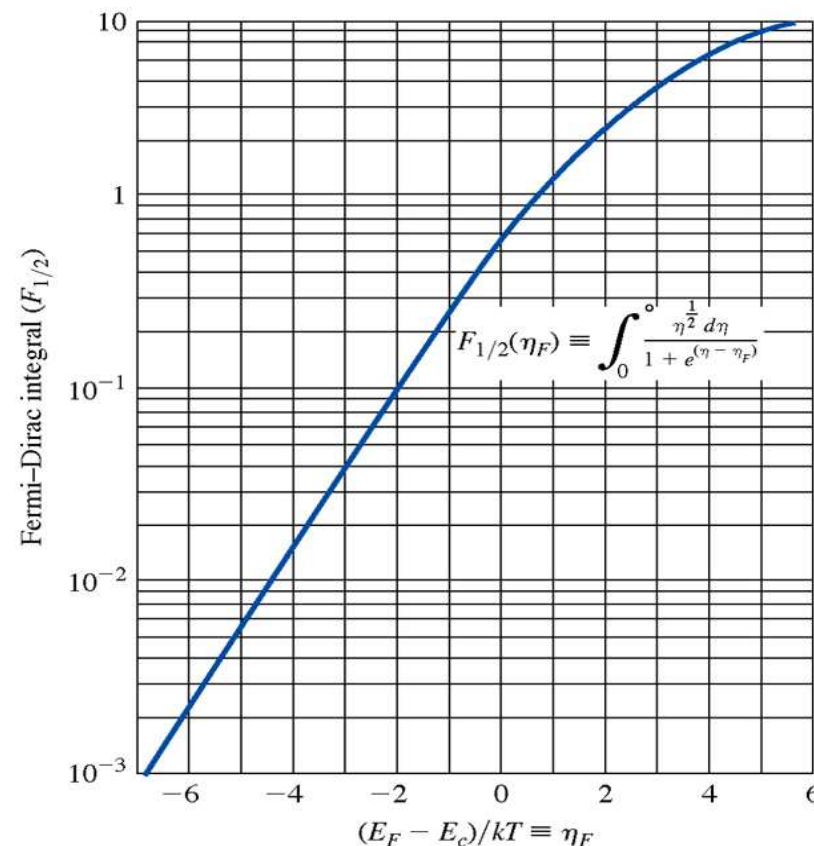
- 简并:

$$n = N_- \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_-}{k_B T} \right)$$

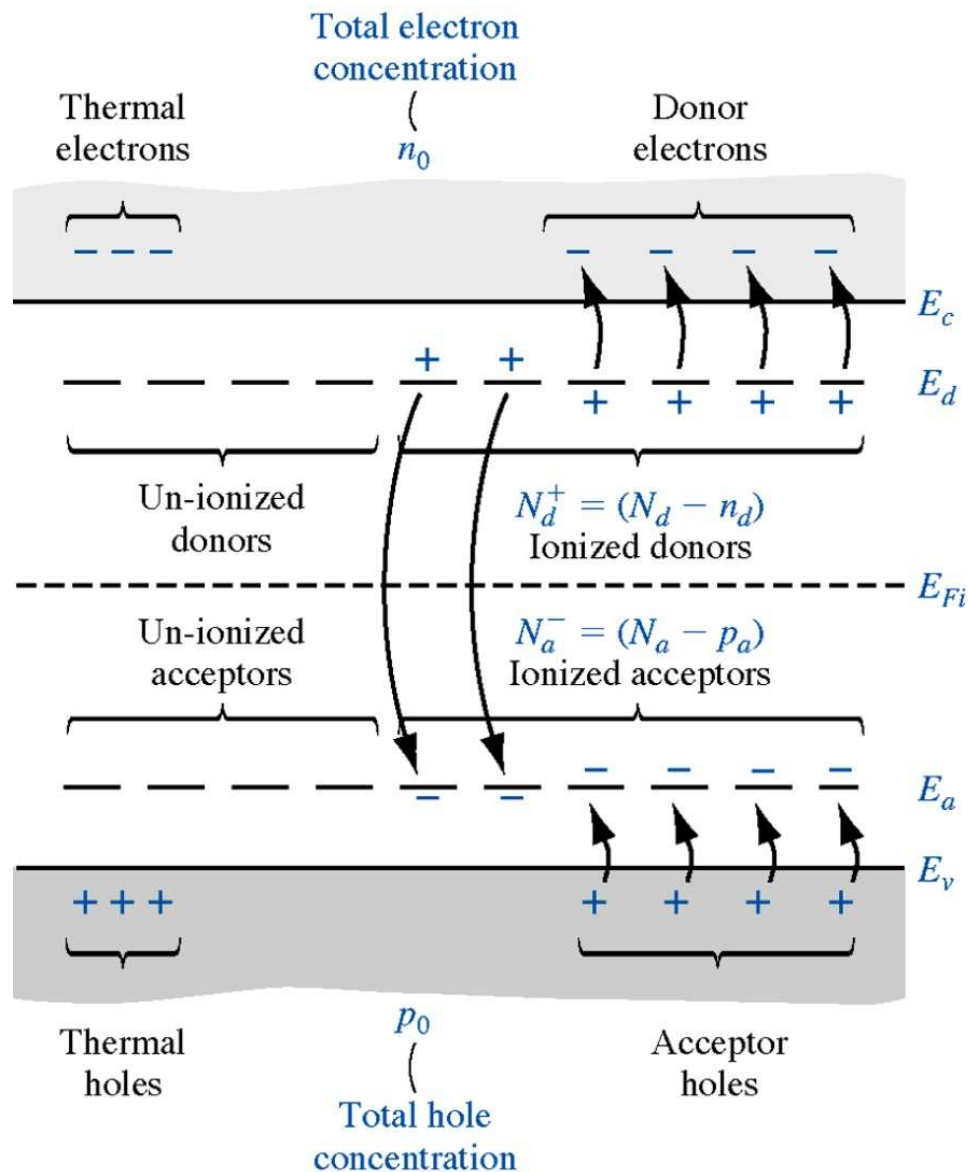
$$p = N_+ \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left(\frac{E_+ - E_F}{k_B T} \right)$$

- 费米积分（查表或数值求解）

$$F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_-}{k_B T} \right) = F_{1/2}(\xi) = \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{1 + e^{x-\xi}} dx$$



补偿半导体



补偿半导体

Compensate semiconductor 是掺杂半导体中的一种，即在半导体中既掺有施主又掺有受主的半导体

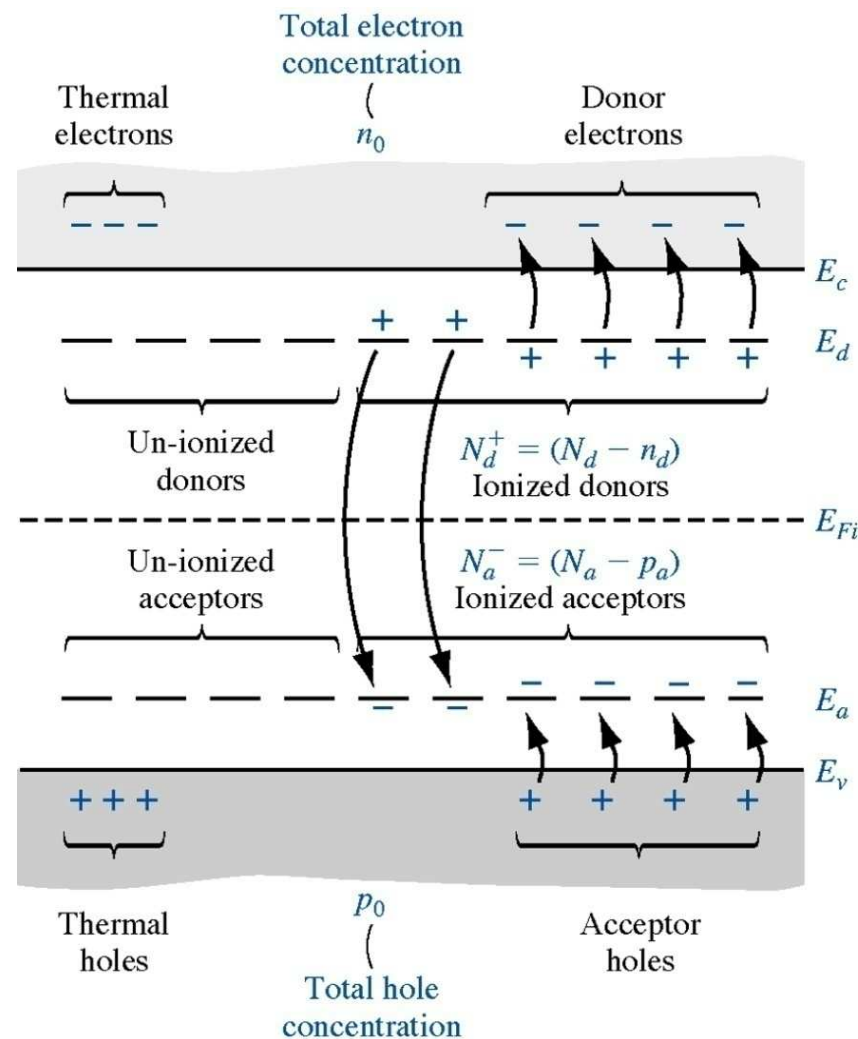
既有施主也有受主，
载流子浓度究竟为多少？

补偿半导体中的载流子浓度

- 热平衡条件下，半导体处于电中性状态，净电荷密度为零

- $n_0 + N_a^- = p_0 + N_d^+$

- $n_0 + (N_a - p_a) = p_0 + (N_d - n_d)$



补偿半导体

补偿半导体中的载流子浓度

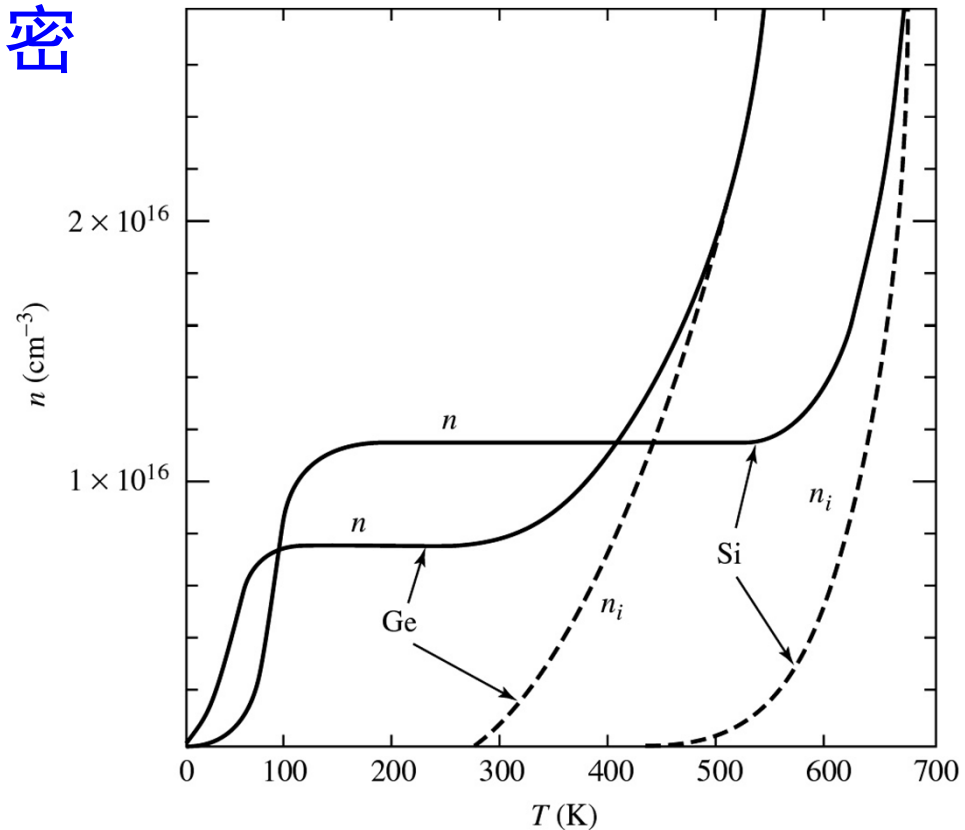
- 热平衡条件下，半导体处于电中性状态，净电荷密度为零

- $n_0 + N_a^- = p_0 + N_d^+$
- $n_0 + (N_a - p_0) = p_0 + (N_d - n_0)$

- 完全电离条件下

- $n_0 + N_a = p_0 + N_d$
- 利用 $p_0 = n_i^2 / n_0$
- 计算 n 型半导体时

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



载流子浓度
由掺杂与热激发共同决定

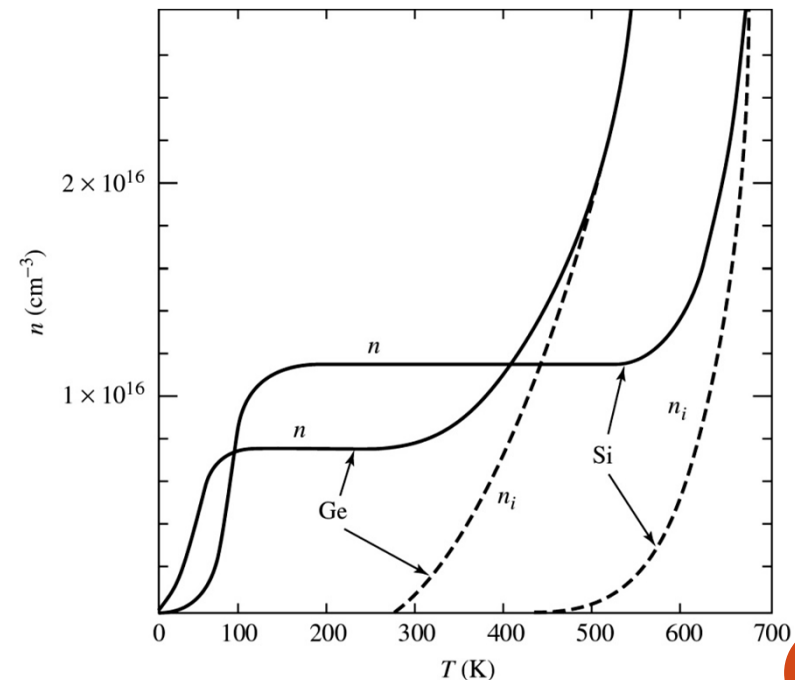
例题

n型硅的施主浓度分别为 $1 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$ 时， 计算温度为300K时电子和空穴浓度 n_0 和 p_0

(已知 $T=300\text{K}$ 时硅的本征载流子浓度 $n_i = 1.5 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$)

$$n_0 = \frac{N_d}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d}{2}\right)^2 + n_i^2} = 2.0811 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$$

$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = 1.0811 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$$



补偿半导体中的载流子浓度

- 施主杂质大于受主杂质浓度

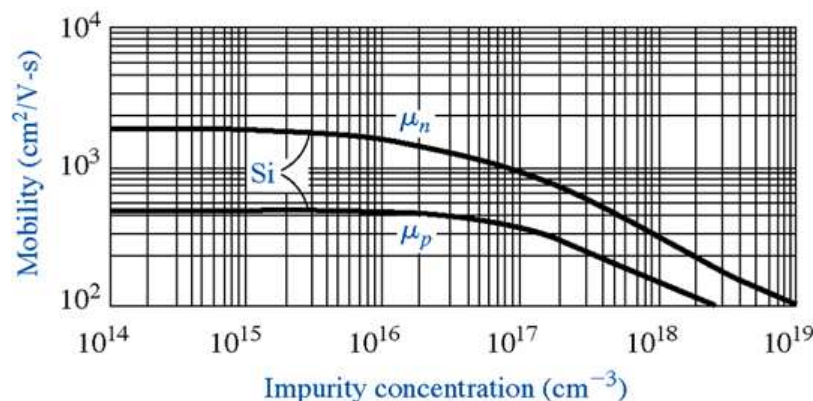
- $N_D - N_A \gg n_i$
- 则 $n = N_D - N_A$, $p = n_i^2/n$

- 受主杂质大于施主杂质浓度

- $N_A - N_D \gg n_i$
- 则 $p = N_A - N_D$, $n = n_i^2/p$

- 总的杂质浓度

- $N_{doping} = N_A + N_D$



载流子的迁移率
由总的掺杂浓度决定

由于补偿半导体中掺有两种杂质，所以会产生杂质的补偿作用，从而其中能够参加导电的多数载流子，就只有由那些未被补偿的杂质来提供；因此补偿半导体中有效的载流子浓度很小，故电阻率很高。虽然补偿半导体的电阻率很高，但它不同于未掺杂的本征半导体

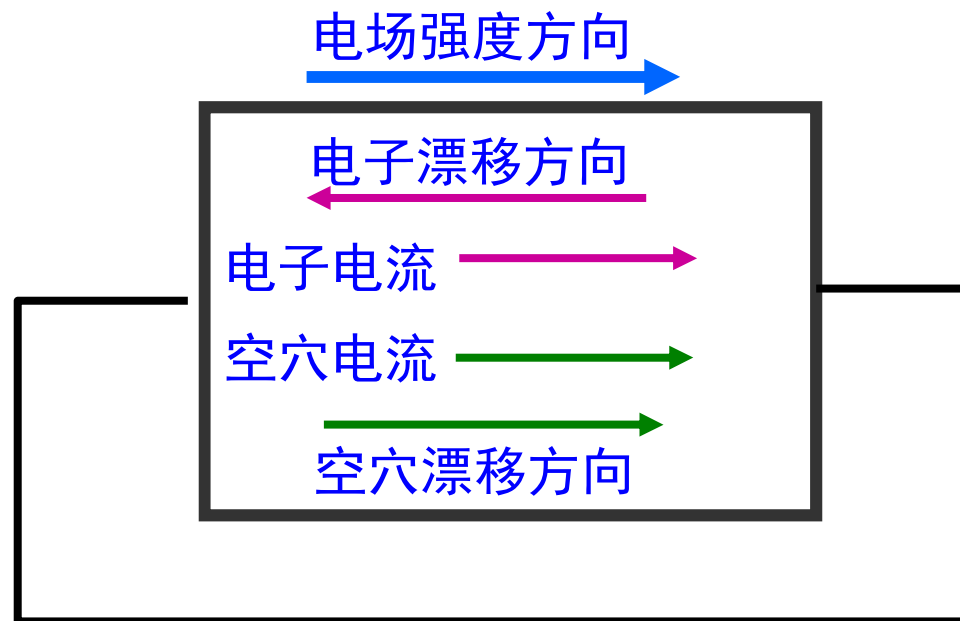
半导体中载流子的运输过程

- 载流子浓度与费米能级
- 本征激发
- 杂质与杂质激发
- 载流子的迁移
- 非平衡载流子和载流子的扩散

半导体中载流子的迁(漂)移运动

载流子的漂移运动是电场加速和散射的结果

半导体导带底的电子与价带顶的空穴
可以看成是分别具有有效质量 m_e^* 和 m_h^* 的自由粒子



电子漂移电流+空穴漂移电流

载流子的迁移率

迁移率：单位电场下载流子的平均漂移速度

电导率： $\sigma = nq\mu$ **迁移率**

欧姆定律： $j = \sigma E$ $j = nq(\mu E)$

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m^*} = nq \frac{q\tau}{m^*} = nq\mu$$

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

**决定于有效质量
以及平均弛豫时间**

半导体的导电特性

载流子的漂移运动是电场加速和散射的结果

半导体导带底的电子与价带顶的空穴
可以看成是分别具有有效质量 m_e^* 和 m_h^* 的自由粒子

欧姆定律： σ 为电导率：

μ_-, μ_+

$$\sigma = nq\mu_- + pq\mu_+$$

$$j = nq(\mu_- E) + pq(\mu_+ E) = nq\bar{v}_- + pq\bar{v}_+$$

分别是电子迁移率和空穴迁移率

μE 表示在电场作用下电子沿电场方向迁移的平均速度

$$\sigma \approx \begin{cases} nq\mu_- & (n\text{型}) \\ pq\mu_+ & (p\text{型}) \end{cases}$$

对于掺杂半导体，一般只需要考虑多子导电

半导体中的迁移率

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m^*}$$

迁移率与电子或空穴的加速过程和碰撞过程有关

$$\mu_- = \frac{q\tau_{cn}}{m_-^*} \quad \mu_+ = \frac{q\tau_{cp}}{m_+^*}$$

决定于有效质量
以及平均弛豫时间

在实际问题中，迁移率是表征半导体材料的重要参数。

Ge和Si的迁移率 $\mu \sim 10^3 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 的数量级；

有些金属化合物半导体（如GaAs、InSb等），电子的有效质量仅为电子质量的1/100左右，迁移率可达 $\sim 10^5 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ 。

Si: $\mu_- 1350 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, $\mu_+ 480 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$

Ge: $\mu_- 3900 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, $\mu_+ 1900 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$

GaAs: $\mu_- 8500 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$, $\mu_+ 400 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$

半导体中的迁移率

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m^*}$$

迁移率与电子或空穴的加速过程和碰撞过程有关

$$\mu_- = \frac{q\tau_{cn}}{m_-^*} \quad \mu_+ = \frac{q\tau_{cp}}{m_+^*}$$

决定于有效质量
以及平均弛豫时间

在低温下，杂质的散射是主要的。温度升高时载流子热运动的速度增大，电离杂质的散射作用相应减弱，从而使迁移率增大。

理论计算结果表明：

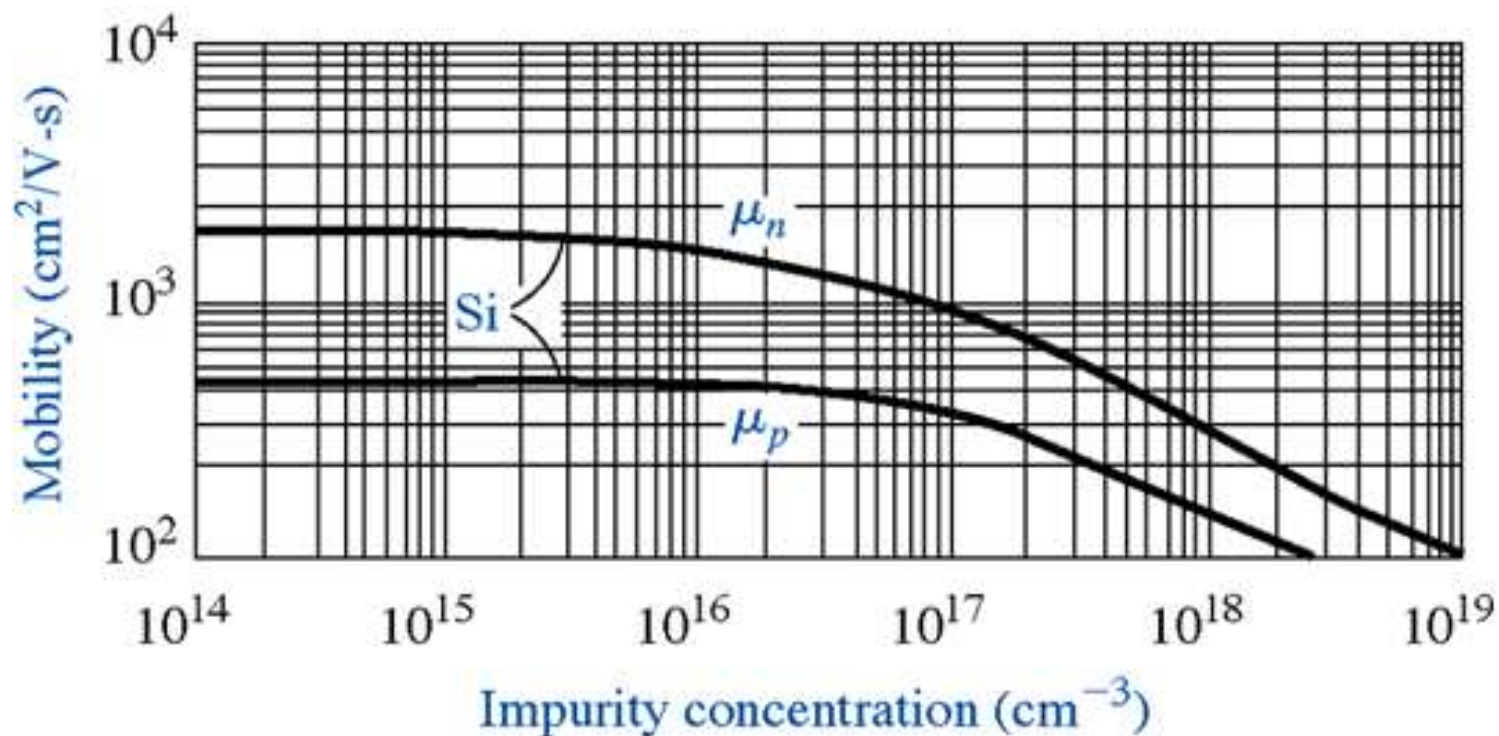
$$\mu \propto T^{3/2}$$

在较高温度下，晶格的散射是主要的，温度升高，声子的散射增大，因而迁移率随温度的升高而下降。理论计算表明。对于简单能带，由晶格振动所限制的迁移率与温度的关系为

$$\mu \propto T^{-3/2}$$

补偿半导体中的迁移率

载流子的迁移率由总的掺杂浓度决定



- 总的杂质浓度 $N_{doping} = N_A + N_D$

半导体的电导率

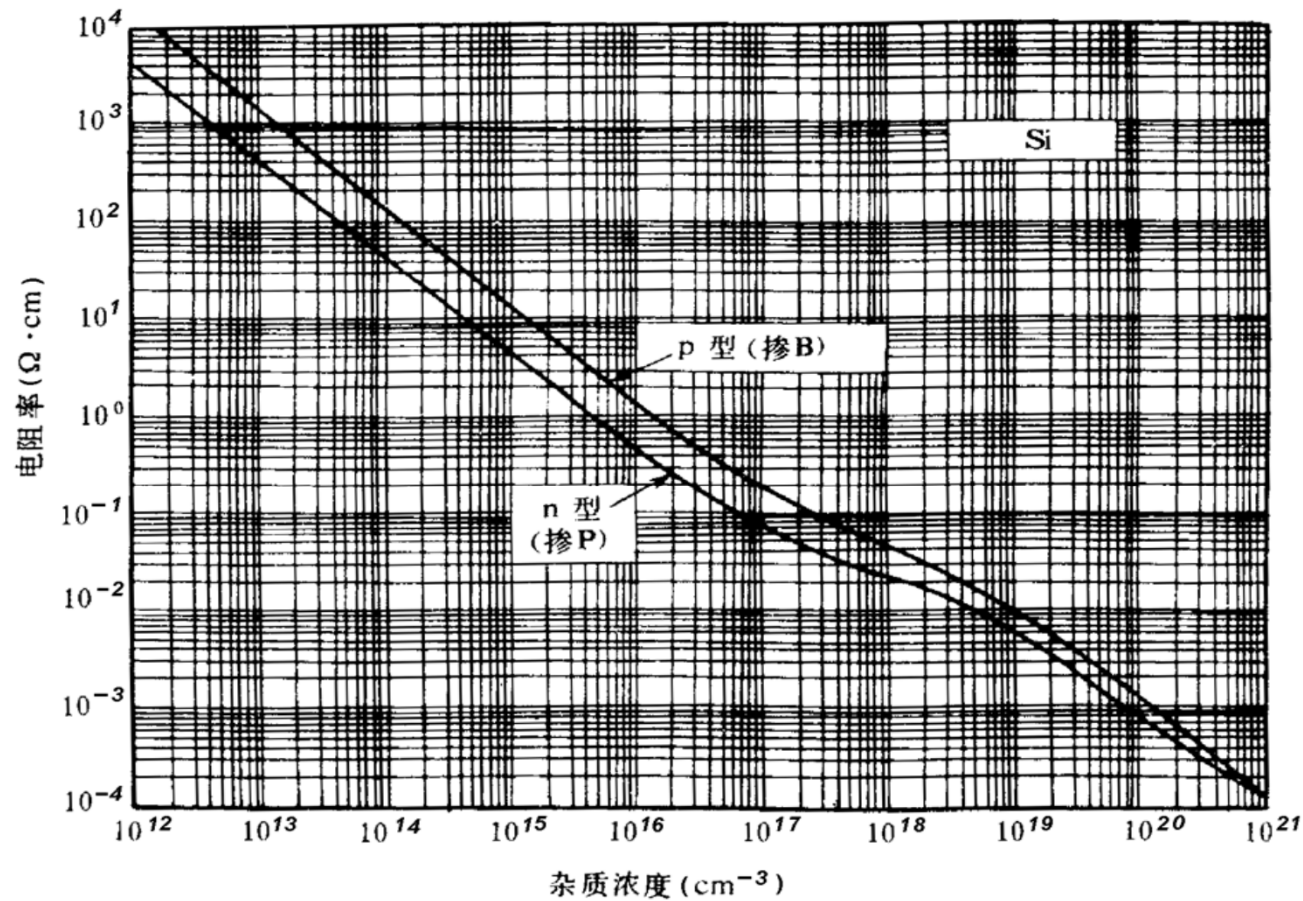
$$\sigma = \underline{n}q\mu_- + \underline{p}q\mu_+$$

载流子浓度

半导体的电导率 σ 除了与迁移率有关外，还与载流子的浓度有关。而载流子的浓度随温度的升高以指数形式增加（饱和区除外）。因此除饱和区外，电导率主要以指数形式随温度的升高而迅速增大，表现出很强的热敏性。这与金属的电导率有明显不同。因为金属的载流子（电子或空穴）浓度与温度无关，温度升高时，传导电子的迁移率因与声子的碰撞更加频繁而减小，所以金属的导电率温度系数为负，温度升高，电导率下降。

半导体的电导率与电阻率

电阻率：
$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{q(\mu_n + \mu_p)}$$



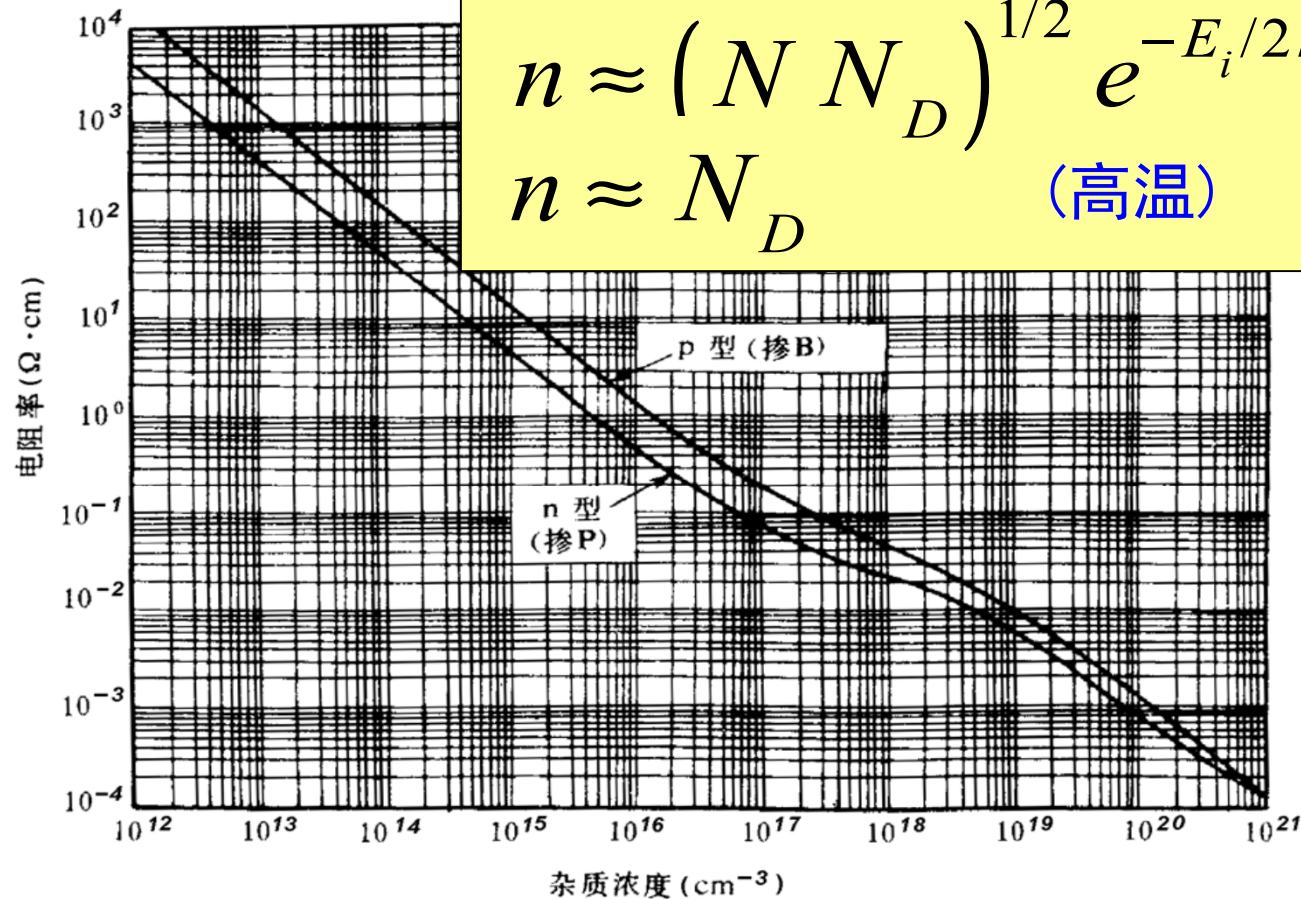
Si 的电阻率与掺杂浓度关系

半导体的电导率与电阻率

电阻率: $\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{q(\mu_n n + \mu_p p)}$

N型:

$$n \approx (N N_D)^{1/2} e^{-E_i/2k_B T} \text{ (低温)}$$
$$n \approx N_D \text{ (高温)}$$



Si 的电阻率与掺杂浓度关系

半导体与金属的电导率比较

- 载流子

- 金属：电子，浓度变化很小
- 半导体：电子、空穴，浓度随掺杂、温度变化

电导率公式（由玻耳兹曼方程决定）

金属：主要决定于费米能级附近电子弛豫时间

$$\sigma = \frac{nq^2\tau(E_F)}{m^*}$$

半导体：弛豫时间为电子的平均弛豫时间

$$\sigma = \frac{nq^2}{m^*} \frac{\langle v^2 \tau(v) \rangle}{\langle v^2 \rangle} = nq\mu$$

μ 为载流子迁移率

思考：费米能级随温度的变化

金属：随温度升高而降低 $E_F \approx E_F^0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{k_B T}{E_F^0} \right)^2 \right]$

本征半导体：随温度升高而？

P型半导体：随温度升高而？

N型半导体：随温度升高而？

半导体中载流子的运输过程

- 载流子浓度与费米能级
- 本征激发
- 杂质与杂质激发
- 载流子的迁移
- 非平衡载流子和载流子的扩散
 - 在PN结部分详细介绍

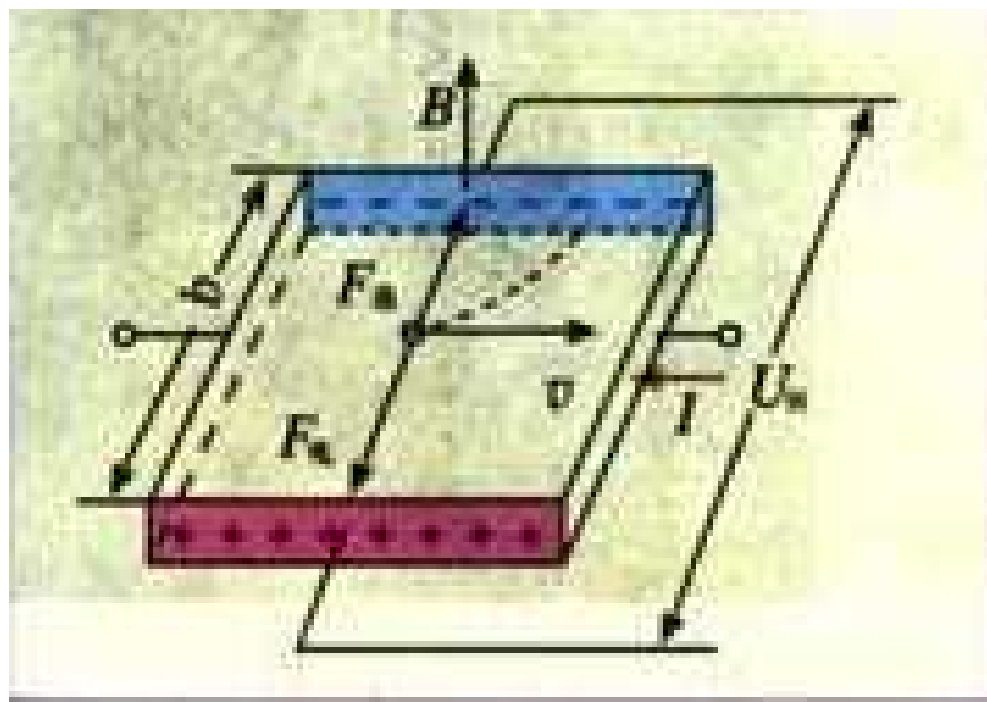
固体的电特性

- 金属中电子输运过程
- 半导体中的输运过程
- 固体间接触的电特性
- 霍尔效应

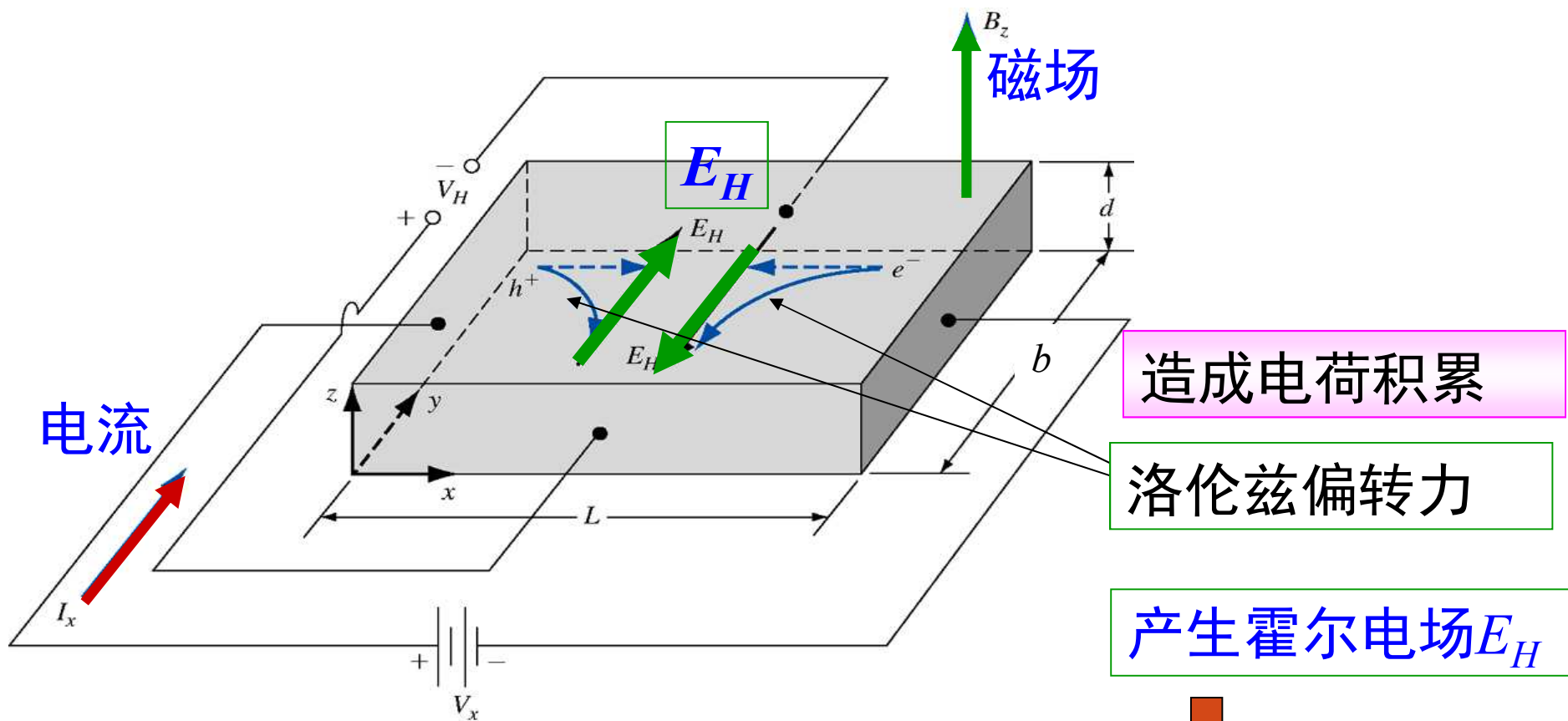
黄昆 书 P275
(第6章, 第7章)
韦丹 书 P154
(第6章)

霍尔效应

霍尔效应是磁电效应的一种，这一现象是美国物理学家霍尔（A.H.Hall, 1855—1938）于1879年在研究金属的导电机构时发现的。当电流垂直于外磁场通过导体时，在导体的垂直于磁场和电流方向的两个端面之间会出现电势差，这一现象便是霍尔效应。这个电势差也被叫做**霍尔电势差**。



霍尔效应



载流子受到磁场的洛伦兹偏转力：

$$F = qv \times B$$

稳定时， E_H 恰足以抵消磁场的偏转力

霍尔电场与霍尔电压

- 稳定状态下，载流子受力平衡：

$$qE_H = q v_x B_z \quad E_H \text{ 为霍尔电场}$$

霍尔电压 $V_H = E_H \times b$, b : 样品宽度

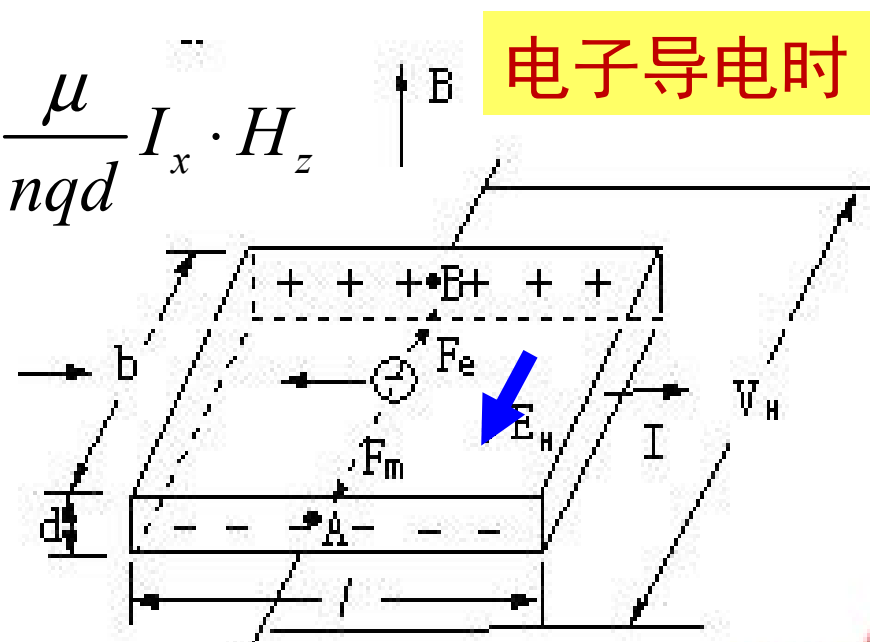
$$B_z = \mu H_z \quad j_x = -nqv_x$$

$$V_y = E_y b = v_x B_z b = -\frac{\mu b}{nq} j_x H_z = -\frac{\mu}{nqd} I_x \cdot H_z$$

霍尔电阻 $R_{xy} = \frac{V_y}{I_x} = -\frac{\mu H_z}{nqd}$

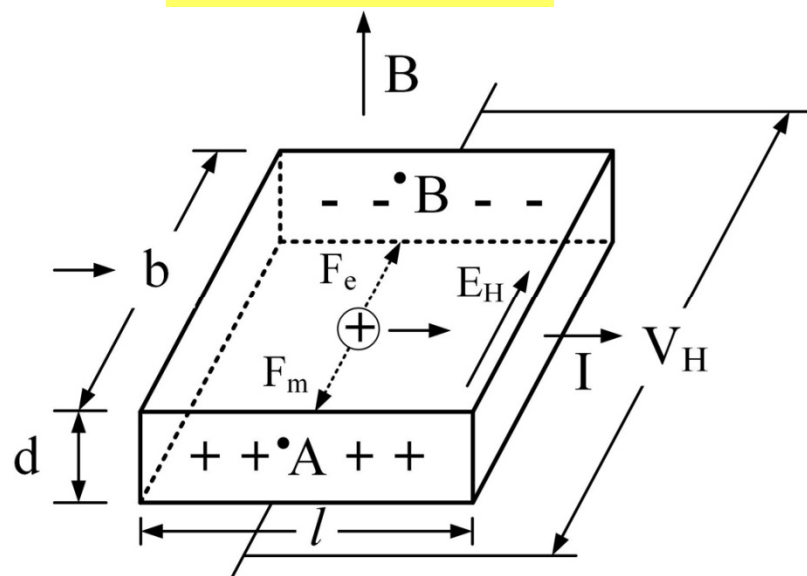
霍尔电导 $j = \sigma E$ $\sigma_{xy} = -\frac{nq}{B}$

Discovered by Edwin Hall in 1879



空穴和电子的霍尔电场

空穴导电时



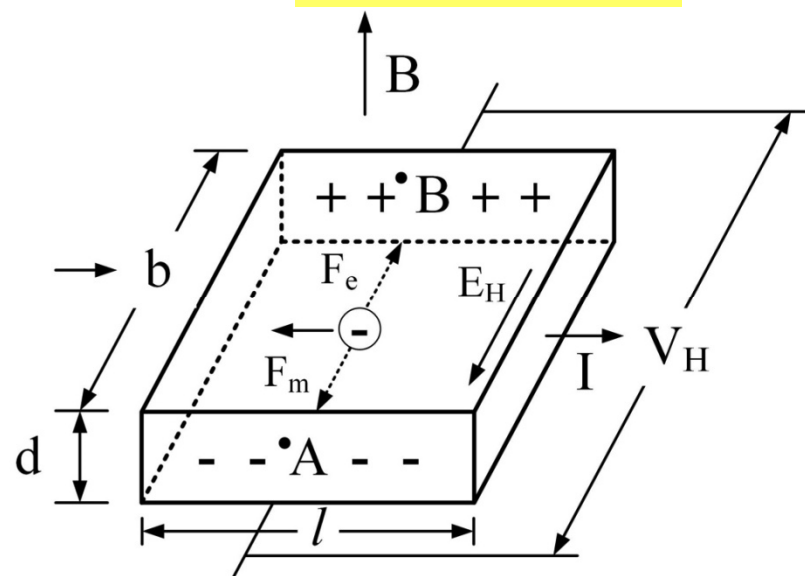
$$E_H = \frac{1}{pq} j_x B_z$$

$$j_x = pqv_x$$

霍尔系数:

$$R = \frac{1}{pq} = -\frac{1}{nq}$$

电子导电时



$$E_H = -\frac{1}{nq} j_x B_z$$

$$j_x = -nqv_x$$

霍尔电场的方向可用来判断导电载流子的类型
其数值可用以计算载流子浓度

霍尔效应

- 在霍尔效应发现约100年后，德国物理学家K.Klitzing (1943-)等在研究极低温度和强磁场中的半导体时发现了量子霍尔效应，这是当代凝聚态物理学令人惊异的进展之一，为此获得了1985年的诺贝尔物理学奖。
之后，美籍华裔物理学家崔琦(Daniel Chee Tsui, 1939-) 和美国物理学家R. B. Laughlin (1950-), H. L. Stormer (1949-)在更强磁场下研究量子霍尔效应时发现了分数量子霍尔效应，这个发现使人们对量子现象的认识更进一步，他们为此获得了1998年的诺贝尔物理学奖。
- 2013年，清华大学薛其坤院士带领的团队首次在实验上观察到了“反常量子霍尔效应”