

# 半导体物理

复旦大学 微电子学系

13307130163

李琛

June 16, 2015

## Contents

<b>1</b>	<b>预备知识</b>	<b>6</b>
1.1	晶体结构 . . . . .	6
1.2	倒易点阵与晶体衍射 . . . . .	7
1.2.1	倒易点阵 . . . . .	7
1.2.2	晶体衍射 . . . . .	8
1.2.3	晶体结合 . . . . .	9
1.3	自由电子费米气体 . . . . .	9
1.3.1	一维情况 . . . . .	9
1.3.2	费米能 . . . . .	9
1.3.3	三维情况 . . . . .	10
<b>2</b>	<b>半导体中的电子状态</b>	<b>11</b>
2.1	能带的形成 . . . . .	11
2.2	半导体中的载流子运动及其有效质量 . . . . .	12

2.3	本征半导体的导电机构与空穴 . . . . .	12
2.3.1	本征半导体的导电机构 . . . . .	12
2.3.2	空穴 . . . . .	13
2.4	回旋共振与等能面 . . . . .	13
2.4.1	回旋共振 . . . . .	13
2.4.2	等能面方程 . . . . .	13
2.5	半导体能带结构 . . . . .	13
2.5.1	直接禁带与间接禁带半导体 . . . . .	13
2.5.2	硅和锗的能带结构 . . . . .	15
2.5.3	化合物半导体的能带结构 . . . . .	15
2.6	杂质与缺陷能级 . . . . .	16
2.6.1	杂质 . . . . .	16
2.6.2	缺陷与位错能级 . . . . .	17
<b>3</b>	<b>半导体中载流子的统计分布</b>	<b>18</b>
3.1	状态密度 . . . . .	18
3.1.1	三维情况下的自由电子气 . . . . .	18
3.1.2	状态密度 . . . . .	18
3.2	费米能级与载流子的统计分布 . . . . .	19
3.2.1	费米分布函数 . . . . .	19
3.2.2	导带电子和价带空穴浓度 . . . . .	19
3.3	本征半导体的载流子分布 . . . . .	20
3.3.1	本征载流子浓度 . . . . .	20
3.3.2	本征载流子的费米能级 . . . . .	20
3.4	杂质半导体的载流子分布 . . . . .	20
3.4.1	非补偿情形 . . . . .	20

3.4.2	补偿情形 . . . . .	21
3.5	简并半导体 . . . . .	21
3.5.1	简并的出现 . . . . .	21
3.5.2	简并半导体的载流子浓度 . . . . .	22
3.5.3	简并条件 . . . . .	22
4	输运现象	22
4.1	电导率 . . . . .	22
4.2	载流子的散射 . . . . .	22
4.3	迁移率、电阻率与杂质浓度和温度的关系 . . . . .	24
4.4	霍尔效应 . . . . .	25
4.5	*玻尔兹曼输运方程 . . . . .	25
5	非平衡载流子	27
5.1	非平衡载流子的注入与复合 . . . . .	27
5.1.1	载流子 . . . . .	27
5.1.2	非平衡载流子 . . . . .	27
5.1.3	准平衡态和准费米能级 . . . . .	27
5.2	复合理论 . . . . .	28
5.2.1	复合方式 . . . . .	28
5.2.2	直接复合 . . . . .	29
5.2.3	间接复合 . . . . .	29
5.3	陷阱效应 . . . . .	30
5.4	载流子扩散 . . . . .	30
5.5	其他内容 . . . . .	31
6	pn结	32

6.1	平衡pn结 . . . . .	32
6.1.1	pn结的形成 . . . . .	32
6.1.2	空间电荷区 . . . . .	32
6.1.3	平衡结中费米能级 . . . . .	33
6.1.4	pn结接触电势差 . . . . .	33
6.1.5	pn结载流子分布 . . . . .	34
6.2	pn结电流电压特性 . . . . .	34
6.2.1	平衡pn结静电特性 . . . . .	34
6.2.2	非平衡pn结能带图 . . . . .	36
6.2.3	理想pn结的J-V特性 . . . . .	36
6.2.4	非理想pn结 . . . . .	37
6.3	pn结电容 . . . . .	39
6.3.1	势垒电容 . . . . .	39
6.3.2	扩散电容 . . . . .	40
6.4	pn结击穿 . . . . .	40
6.4.1	雪崩击穿 . . . . .	40
6.4.2	齐纳击穿 . . . . .	41
6.4.3	两种击穿比较 . . . . .	41
6.5	隧道效应 . . . . .	41
7	<b>金半接触</b>	<b>43</b>
7.1	金半接触能级图 . . . . .	43
7.1.1	金属与半导体的功函数 . . . . .	43
7.1.2	接触电势差 . . . . .	43
7.1.3	表面态对接触势垒的影响 . . . . .	44
7.1.4	金半接触的静电特性 . . . . .	44

7.2	金半接触的整流输运理论 . . . . .	45
7.2.1	扩散电流 . . . . .	45
7.2.2	热电子发射电流 . . . . .	45
7.2.3	肖特基二极管与pn结二极管的比较 . . . . .	46
7.2.4	隧穿电流和镜像力的影响 . . . . .	46
7.3	少子注入与欧姆接触 . . . . .	46
7.3.1	少子注入 . . . . .	46
7.3.2	欧姆接触 . . . . .	46

# 1 预备知识

## 1.1 晶体结构

- **晶体** 原子周期性排列，有周期性的物质
- **晶体结构** 原子排列的具体形式
- **布拉菲格子** 体现晶体结构周期性的格子称为布拉菲格子
- **基矢** 以原胞共顶点的三条边作为三个矢量 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ，并以其中一个格点为原点，则布拉菲格子的格点可以表示为 $\vec{a} = L_1\vec{a}_1 + L_2\vec{a}_2 + L_3\vec{a}_3$ ，则称 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 为基矢
- **点阵** 让 $u, v, w$ 取遍所有整数值，由 $\vec{r} = \vec{r} + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ 所确定的一簇点 $\vec{r}$ 就定义了一个点阵
- **晶列** 点阵中所有阵点都位于一系列相互平行的直线上，这些直线系称为晶列
- **晶向与晶向指数** 晶列的方向即为晶向，晶向指数 $[mnp]$ 为晶向矢量在晶轴上投影的互质整数，同类晶向记为 $\langle mnp \rangle$

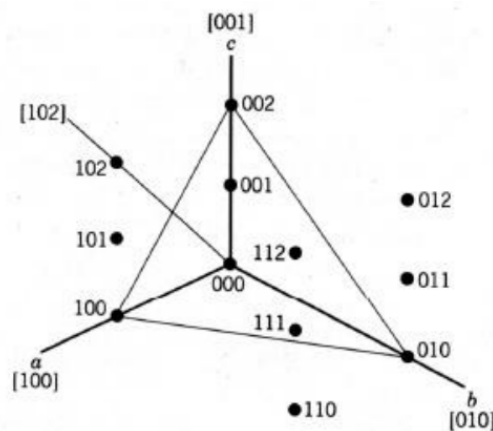


Figure 1: 晶格指数

- **晶面** 点阵中所有阵点全部位于一系列相互平行等距的平面上，这样的平面称为晶面
- **晶面指数** 晶面指数 $h, k, l$ 是晶面与三晶轴截距 $r, s, t$ 的倒数的互质整数，也称为密勒指数
- **简单与复式格子** 简单格子:基元只有一个原子的晶格 复式格子:基元包含两个或两个以上原子  
如果晶体由一种原子组成，但在晶体中原子周围的情况不同，这样的晶格也是复式格子（如单晶Si）

- **晶体的对称性** 晶体具有平移对称性和点对称性，对称操作可使晶体结构完全同自身重合。  
包括通过某一阵点轴的转动( $2p, 2p/2, 2p/3, 2p/4, 2p/6$ 或称为（一重、二重、三重、四重、六重）、某一镜面的反映( $m$ )、某一结点的反演( $i$ )( $n$ 重反演即为镜面反映后的 $n$ 重转动)。
- **原胞与晶胞** 原胞(primitive cell), 固体物理元胞: 基矢 $a, b, c$  构成的平行六面体。最小的重复单元，只反映周期性的特征  
晶胞，结晶学元胞: 能够最大限度反映晶格对称性质(周期性和对称性) 的最小单元，不一定最小。
- **金刚石结构与闪锌矿结构** 金刚石结构是一种由相同原子构成的复式晶格，它是由两个面心立方晶格沿立方对称晶胞的体对角线错开 $1/4$ 长度套构而成。常见的半导体中 $Ge, Si, \alpha-Sn$ （灰锡）都属于这种晶格。

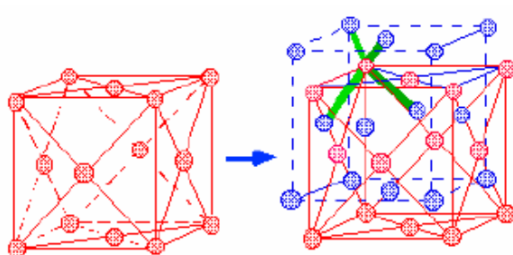


Figure 2: 金刚石结构

闪锌矿结构与金刚石结构的唯一区别是它含有两种不同的原子（ $GaAs, InSb, GaP$ 等化合物）。

## 1.2 倒易点阵与晶体衍射

### 1.2.1 倒易点阵

- 倒易点阵：与正点阵相对应的量纲为长度倒数的一个三维空间点阵。

•

$$\text{基矢 } \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \quad \Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

- $$\text{定义} \begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega} \\ \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega} \\ \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega} \end{cases}$$

则倒格矢  $K_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$

- 对于周期函数  $n(x) = n(x+a)$ ，进行傅里叶变换，得

$$n(x) = n_0 + \Sigma [C_p \cos(2\pi p x / a) + S_p \sin(2\pi p x / a)]$$

$$n(x) = \Sigma n_p \exp(i 2\pi p x / a)$$

倒点阵是正点阵的傅立叶变换

- 倒易点阵范例

简单立方的倒易点阵仍是简单立方，第一布里渊区是立方体

体心立方的倒易点阵仍是面心立方，第一布里渊区是正菱形十二面体

面心立方的倒易点阵仍是体心立方，第一布里渊区是截角八面体

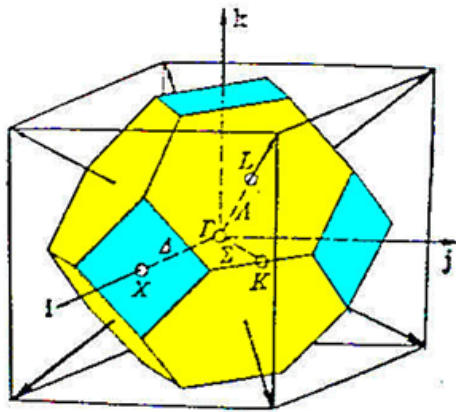


Figure 3: 面心立方第一布里渊区

### 1.2.2 晶体衍射

- 布拉格定律  $2d \sin \theta = n\lambda$
- 衍射条件  $2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0$



- **布里渊区** 布里渊区定义为倒易点阵中的维格纳-赛茨晶胞在倒易点阵的中央晶胞称为第一布里渊区

### 1.2.3 晶体结合

- **离子晶体** 结合力为正负电子间的静电库仑力
- **金属晶体** 结合力为原子实和电子云之间的静电库仑力
- **共价晶体** 结合力为具有很强方向性的共价键
- **分子晶体** 依靠范德华相互作用结合，键力源于瞬时电偶极矩的感应作用

## 1.3 自由电子费米气体

**自由电子费米气体** 是指自由的、无相互作用的、遵从泡利不相容原理的电子气。

### 1.3.1 一维情况

- **哈密顿算符**  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$  ,  
 $\hat{T}$ 为动能项,  $\hat{T} = \frac{p^2}{2m}$ ,  $p$ 为动量算子,  $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$ ,  $\therefore \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$   
 $\hat{V}$ 为势能项, 一般定态情况下可以忽略

- **薛定谔方程**  $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$

- **一维情况下**

$$\hat{H}\psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} = \varepsilon\psi_n(x)$$

$$\text{解为 } \psi_n(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n}x\right), L = \frac{1}{2}n\lambda_n$$

$$\therefore \varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi^2}{L}\right)$$

- **简并度** 具有相同能量的轨道数目为简并度, 一维情况下的简并度为2

### 1.3.2 费米能

- **费米能**  $\varepsilon_F$  基态下最高被充满能级的能量
- 费米-狄拉克分布函数给出了理想气体处于热平衡状态时能量为  $\varepsilon$  的轨道被占据的几率

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1}$$

$\mu$ 为化学势,  $\mu$ 的选择需要总能计算出系统中粒子的总数, 即等于 $N$

- 当 $\varepsilon - \mu \gg kT$ 时, 简化为玻尔兹曼分布 $f(\varepsilon) \approx e^{-\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}$

### 1.3.3 三维情况

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)]$$

$$\therefore \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- 三维情况下 $N$ 个电子处在基态时, 每个被占据轨道可看做 $k$ 空间内一个球内的点
- 球面的能量为费米能, 费米面上波矢的大小为 $k_F$ , 最小体积元为 $\frac{2\pi^3}{L^3}$ , 即这个体积中只有一个允许波矢
- 轨道总数

$$N = 2 \times \left( \frac{4}{3} \pi k_F^3 \div \left( \frac{2\pi^3}{L^3} \right) \right) = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3, V = L^3$$

$$\therefore k_F = \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}, \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}, \text{仅与粒子浓度有关}$$

- 能态密度 单位能量间隔内的轨道数目

$$\text{能量} \leq \varepsilon \text{下, 包含的轨道总数 } N = \frac{V}{3\pi^2} \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\text{能态密度 } D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \left( \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}$$

## 2 半导体中的电子状态

### 2.1 能带的形成

- 近电子模型 能带电子仅仅受到离子实的周期性势场微扰
- 能带的起因
  - 考虑周期性势场后必须考虑布拉格衍射，此时电子的波函数是驻波而不是行波
  - 驻波使电子集聚在不同的空间区域内，具有不同的势能值
  - 纯粹行波的电荷密度为恒量，但平面波的线性组合却不是，因此电子势能也不同
  - 由于电子在正离子场内的势能为负值， $U(+) < U < U(-)$
  - 若 $U(+)$ 与 $U(-)$ 的能量相差 $E_g$ ，则能隙宽度为 $E_g$
- 布洛赫定理 对于周期性势场的薛定谔方程，解必定遵从以下形式：

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \text{ 其中 } u_{\vec{k}}(r) \text{ 具有晶体点阵的周期}$$

- 克隆尼克-彭奈模型即为一维周期性方阱势场

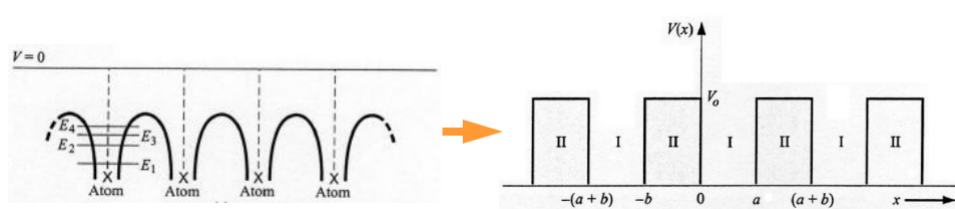


Figure 4: 克隆尼克-彭奈模型

- - 第一布里渊区内允许波矢总数= 晶体中初基晶胞数N
    - 同一能量电子可以有两个相反自旋取向
- ⇒ 每个能带具有2N个独立轨道
- 绝缘体和半导体只有一系列满带和一系列空带，不存在半满带，最上面的满带叫价带，最下面的空带叫导带。导带底与价带顶之间的能量间隙称为禁带。如果除了一个或两个能带几乎空着或几乎充满外，其余所有能带都充满，则晶体为半导体或半金属

## 2.2 半导体中的载流子运动及其有效质量

- 运动公式：

$$F = \frac{dP}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt}$$

$$V = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E(k)$$

$\hbar k$ 即为准动量

- 外场下晶体电子的运动：

$$dE = \frac{dE}{dk} \cdot dk = \hbar v dk$$

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left( \frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk^2} F$$

$$\text{令 } m^* = \frac{\hbar^2}{\left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)} \text{ 为电子有效质量}$$

$$\text{则 } a = \frac{F}{m^*}, \frac{1}{m^*} \text{ 为一三维可对角化的张量}$$

- 有效质量概括了半导体内部势场的作用, 晶体电子可近似为具有 $m^*$  的近自由电子。有效质量可以直接由实验确定
- 能带越窄,  $\left( \frac{d^2 E}{dk^2} \right)$  越小, 有效质量越大, “越胖越重”

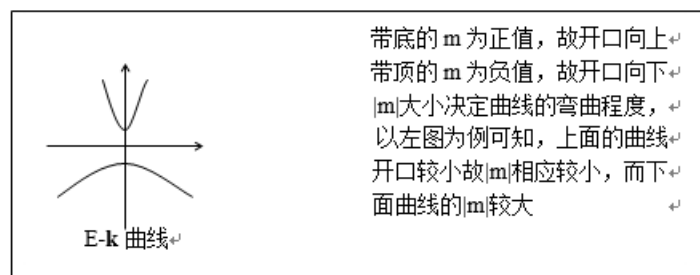


Figure 5: 能带与有效质量的关系

## 2.3 本征半导体的导电机构与空穴

### 2.3.1 本征半导体的导电机构

- 本征半导体在绝对零度时导带为空, 由一个能隙 $E_g$ 与价带隔开
- 温度升高时, 电子由价带被激发到导带, 电子与空穴都对电导率有贡献
- 半导体中有两种载流子, 而金属中只有一种

### 2.3.2 空穴

- 满带情况下电流为0, 因此引入空穴表示大规模电子的运动
- 空穴等价为一个正电荷, 正有效质量的粒子, 只出现在价带顶

## 2.4 回旋共振与等能面

### 2.4.1 回旋共振

磁场中的电子在k空间内沿垂直能量E的梯度的方向运动, 因此电子在等能面上运动。可以利用回旋共振来测量导带底或价带顶附近的等能面形状及有效质量。

角频率为  $\omega_c = eB/m^*$

$$\text{各向异性时, } \frac{1}{m^*} = \sqrt{\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* + m_y^* + m_z^*}}$$

### 2.4.2 等能面方程

通过泰勒展开求解

$$\begin{aligned} E(\vec{k}) &= E(\vec{k}_0) + \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \Big|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \\ \therefore E(\vec{k}) &= E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right] \\ \therefore \frac{k_x^2}{\frac{2m_x^*(E-E_C)}{\hbar^2}} + \frac{k_y^2}{\frac{2m_y^*(E-E_C)}{\hbar^2}} + \frac{k_z^2}{\frac{2m_z^*(E-E_C)}{\hbar^2}} &= 1 \end{aligned}$$

即等能面一般是椭球面

## 2.5 半导体能带结构

### 2.5.1 直接禁带与间接禁带半导体

- **直接禁带** 价带顶和导带底有相同的k, 此时可以吸收光子跃迁, 忽略光子的动量, 近似为竖直跃迁
- **间接禁带** 价带顶和导带底不在相同的k, 此时电子吸收光子跃迁要伴随着吸收一个声子, 由光子提供能量变化, 声子提供准动量变化, 电子能量=光子能量±声子能量, 忽略声子

能量近似有电子能量变化等于光子能量。而忽略光子动量，则有准动量变化等于声子准动量。此时跃迁不再是竖直跃迁。

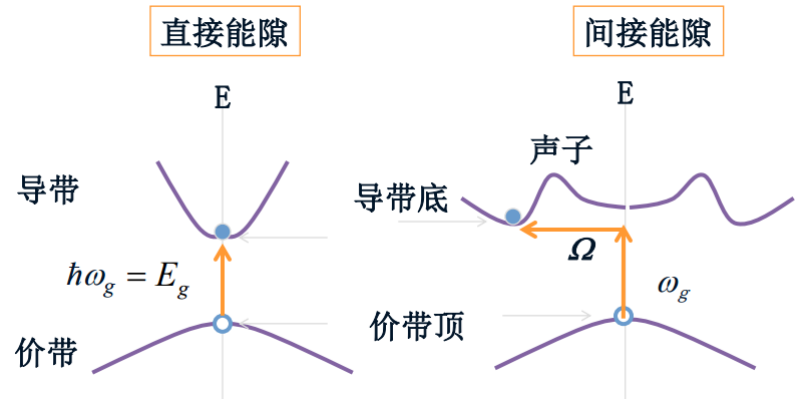


Figure 6: 直接禁带与间接禁带

## 2.5.2 硅和锗的能带结构

- 间接禁带半导体
- $m_l$  :沿[100]方向有效质量—纵有效质量  
 $m_t$  :垂直于[100]方向的有效质量—横有效质量
- Si
  - 导带极小值在[100] 方向上距布里渊区边界约1/6 处
  - 导带有6 个能谷
  - $m_l^* = 0.98m_0$     $m_t^* = 0.19m_0$
  - 价带共有三个态，重空穴，轻空穴，裂出空穴，其中轻空穴曲率大，重空穴由两个价带简并而成
  - 等能面是椭球面

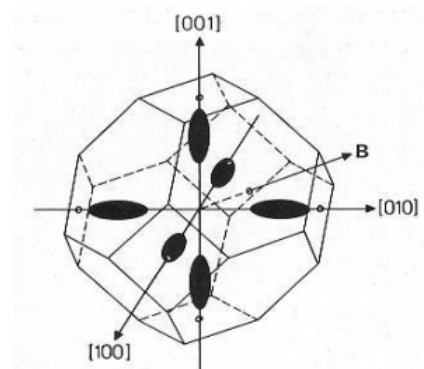


Figure 7: Si的能带

- Ge
  - 导带极小值在[111]方向的布里渊区边界上
  - 导带有8 个1/2 能谷
  - $m_l^* = 1.64m_0$     $m_t^* = 0.0819m_0$ ，强烈的各向异性
  - 等能面不是椭球

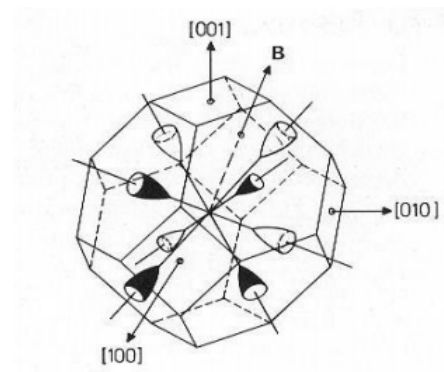


Figure 8: Ge的能带

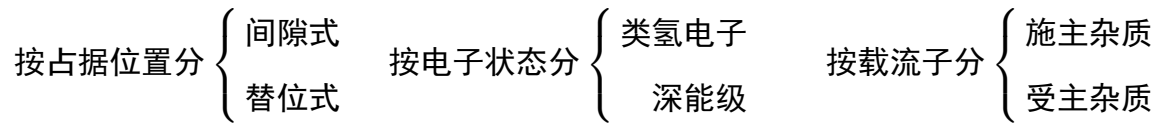
## 2.5.3 化合物半导体的能带结构

以GaAs为例

- 导带极小值在 $\Gamma$ 点-直接禁带半导体
- 导带底有效质量各向同性- 球形等能面
- 价带特点与Si 、 Ge 相同

## 2.6 杂质与缺陷能级

### 2.6.1 杂质



- **施主** 能向晶体提供电子，同时自身成为带正电的离子的杂质称为施主杂质
- **浅能级施主杂质** 一般是V族元素，比Si多一个价电子，原子实多一个正电荷，当电子束缚于施主中心时，其能量低于导带底能量，能级在禁带之中，与导带之差（称为电离能） $E_i \approx (1/100)\text{eV}$ （在Si中）。杂质能级很接近导带底，称为浅能级杂质。
- **施主能级** 占有电子时为中性，不占有电子时带正电。一般用 $E_A$ 表示
- **n型半导体** 主要依靠电子导电
- **受主** 能接受电子，并使自身带负电的杂质

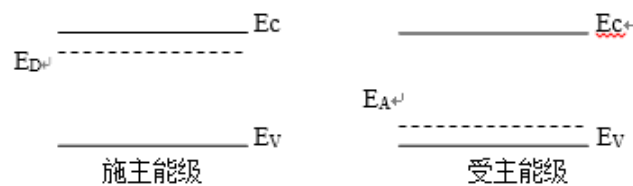


Figure 9: 施主与受主

- **深能级杂质** 杂质能级距离导带底和价带顶都很远，主要起复合中心作用
- **多重能级** 如Si中的Se和Te，代替Si多出两个电子，第二个电子的电离能更大
- **两性杂质** 既可以起施主作用，又可以起受主作用，如Si中的金Au在n型半导体中起受主作用，在p型半导体中起施主作用。
- **重掺杂** 浅能级杂质掺杂很高
- **类氢模型**

$$\text{氢原子的电离能为 } \varepsilon_H = \frac{m_0 e^4}{8 \varepsilon_0^2 h^2} = 13.6 \text{ meV} \text{ 和 } \alpha = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi e^2 m_0}$$

$$\text{有效质量 } \frac{1}{m^*} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right)$$



当V族原子（或III族原子）代替Si时，类似于氢原子，只需要作代换

用有效质量 $m^*$ 代替电子质量 $m_0$ , 用 $\frac{e^2}{\epsilon}$ 代替 $e^2$

我们就可以得到杂质的电离能为 $\epsilon_i = \frac{m^* e^4}{8\epsilon^2 \epsilon_0^2 h^2}$  等效波尔半径为 $\alpha = \frac{h^2 \epsilon \epsilon_0}{\pi e^2 m^*}$

$$E_n = -13.6 \times \frac{(m^*/m_0)}{\epsilon^2 n^2}$$

- **类氢杂质** 通常把能用类氢模型描述的杂质称为类氢杂质，它们是一些离导带很近的施主和离价带很近的受主杂质，称为浅能级杂质

## 2.6.2 缺陷与位错能级

- **点缺陷**
  - 杂质原子（替位，间隙）
  - 热缺陷
    - \* Frankel缺陷空位与间隙成对出现
    - \* Schottky缺陷只形成空位
- **线缺陷** 滑移矢量 $\vec{b}$ 
  - **刃位错**  $\vec{b} \perp$  位错线
  - **螺位错**  $\vec{b} \parallel$  位错线

### 3 半导体中载流子的统计分布

#### 3.1 状态密度

##### 3.1.1 三维情况下的自由电子气

$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), k_x, k_y, k_z = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \dots; \pm \frac{2n\pi}{L}$$

每个量子态占据体积为  $\frac{(2\pi)^3}{V}$   $\therefore$  再考虑自旋,  $k$ 空间能量状态密度为  $\frac{2V}{(2\pi)^3}$

##### 3.1.2 状态密度

- 为了描述能带电子状态的分布, 引入态密度  $g(E)$  表示单位能量间隔内的状态数

$$g(E) = \frac{dZ}{dE} = \frac{dZ}{d\Omega^*} \frac{d\Omega^*}{dk} \frac{dk}{dE}$$

- 状态密度汇总

– 一维  $L^* = 2k \rightarrow 2 \left( \frac{L}{2\pi} dL^* \right) \rightarrow dZ = \frac{2L}{h} \sqrt{\frac{2m_n^*}{E-E_0}} dE$

$$\rightarrow g(E) = \frac{2\pi}{h} \sqrt{\frac{2m_n^*}{E-E_0}}$$

– 二维  $S^* = \pi k^2 \rightarrow dZ = 2 \left( \frac{L}{2\pi} \right)^2 dS^*$

$$\rightarrow g(E) = \frac{4S\pi m_n^*}{h^2}$$

– 三维  $\Omega^* = \frac{4}{3}\pi k^3 \rightarrow dZ = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{h^3} (2m_n^*)^{3/2} (E-E_0)^{1/2} dE$

$$\rightarrow g(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_n^*)^{3/2} \sqrt{E-E_0}$$

- 状态密度有效质量

- 电子状态密度有效质量 导带极值在  $\vec{k} = \vec{k}_c$ , 等能面为椭球面

$$2m_{dn}^{3/2} = M(8m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/2} \Rightarrow m_{dn} = (M^2 m_l^* m_t^{*2})^{1/3}$$

– 空穴状态密度有效质量 重空穴与轻空穴在价带顶简并

$$(m_{dV}^*)^{3/2} = (m_{lh}^{3/2} + m_{hh}^{3/2}) \Rightarrow (m_{dV}^*) = (m_{lh}^{3/2} + m_{hh}^{3/2})^{2/3}$$

## 3.2 费米能级与载流子的统计分布

### 3.2.1 费米分布函数

- 费米分布函数  $f(E)$   $f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)}$
- 玻尔兹曼分布函数  $f(E)$  ( $E - E_f \gg kT$ )  $f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)}$
- 费米能级的物理意义 标志了电子填充水平
- $f_e(E) + f_h(E) = \exp\left(-\frac{E - E_f}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{E_f - E}{kT}\right) = 1$

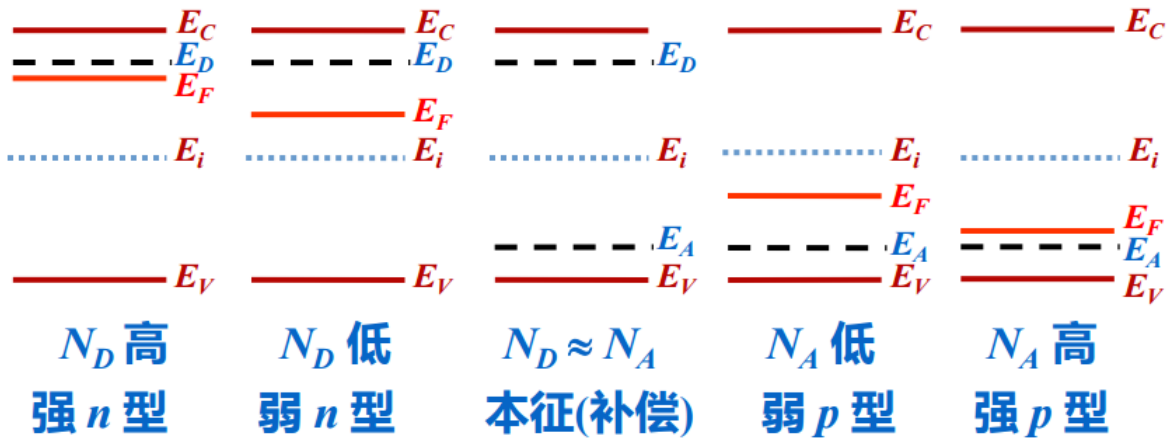


Figure 10: 不同半导体的费米能级

### 3.2.2 导带电子和价带空穴浓度

$$\text{导带有效状态密度 } N_c = \frac{2(2\pi m_{dn} kT)^{3/2}}{h^3}$$

$$\text{导带平衡电子浓度 } n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{k_B T}\right)$$

$$\text{价带有效状态密度 } N_v = \frac{2(2\pi m_{dp} kT)^{3/2}}{h^3}$$

$$\text{价带平衡电子浓度 } p = N_v \exp\left(-\frac{E_f - E_v}{k_B T}\right)$$

$$\therefore np = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{k_B T}\right) = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right), \text{浓度乘积与 } E_F \text{ 无关}$$

### 3.3 本征半导体的载流子分布

热激发产生的载流子

#### 3.3.1 本征载流子浓度

电中性条件:  $n \cdot p = n_i^2$

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

#### 3.3.2 本征载流子的费米能级

$$E_f = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right)$$

$$\frac{E_c + E_v}{2} \gg \frac{k_B T}{2} \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right), \therefore \text{本征费米能级 } E_i \text{ 基本上在禁带中线处}$$

### 3.4 杂质半导体的载流子分布

电子占据施主能级的几率

空穴占据受主能级的几率

$$f_D(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_f}{k_B T}\right)}$$

$$f_A(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_f - E_A}{k_B T}\right)}$$

#### 3.4.1 非补偿情形

$$n = p + n_D^+$$

即导带电子浓度 = 价带空穴浓度 + 电离施主浓度

$$N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{k_B T}\right) = N_v \exp\left(-\frac{E_f - E_v}{k_B T}\right) + \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{E_D - E_f}{k_B T}\right)}$$

非补偿情形	电中性条件	电子浓度	费米能级
低温弱电离区	$n_0 = n_D^+$	$n_0 = \left(\frac{N_D N_C}{2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_C - E_D}{2k_B T}\right)$	$E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_D}{2N_C}$
强电离区	$n_0 = n_D^+$	$n_0 = N_D$	$E_F = E_C + k_B T \ln \frac{N_D}{N_C}$
过渡区	$n_0 = p_0 + N_D$	$n_0 = N_D + \frac{n_i^2}{N_D}$	$E_F = E_i + k_B T \sinh^{-1}\left(\frac{N_D}{2n_i}\right)$
本征区	$n_0 = p_0 = n_i$	$n_0 = n_i$	$E_F = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_V}{N_C}$

### 3.4.2 补偿情形

若半导体中同时含有施主、受主杂质，且施主杂质多于受主杂质，低温下，施主杂质将首先填充受主杂质，称为补偿

$N_D > N_A$	电中性条件	电子浓度	费米能级
低温弱电离区	$n_0 = n_D^+ - p_A^-$	$N_A \gg n_0 :$ $n = \frac{N_C(N_D - N_A)}{2N_A} \exp\left(-\frac{E_C - E_D}{k_B T}\right)$ $N_A \ll n_0 :$ $n_0 = \left(\frac{N_D N_C}{2}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E_C - E_D}{2k_B T}\right)$	$E_F = E_D + k_B T \ln \frac{N_D - N_A}{2N_A}$ $E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_D}{2N_C}$
强电离区	$n_0 = N_D - N_A$	$n_0 = N_D - N_A$	$E_F = E_C + k_B T \ln \frac{N_D - N_A}{N_C}$
过渡区	$n_0 = p_0 + N_D - N_A$	$n_0 = \frac{N_D - N_A}{2} +$ $\frac{1}{2}[(N_D - N_A)^2 + 4n_i^2]^{1/2}$	$E_F = E_i + k_B T \sinh^{-1}\left(\frac{N_D - N_A}{2n_i}\right)$
本征区	$n_0 = p_0 = n_i$	$n_0 = n_i$	$E_F = E_i$

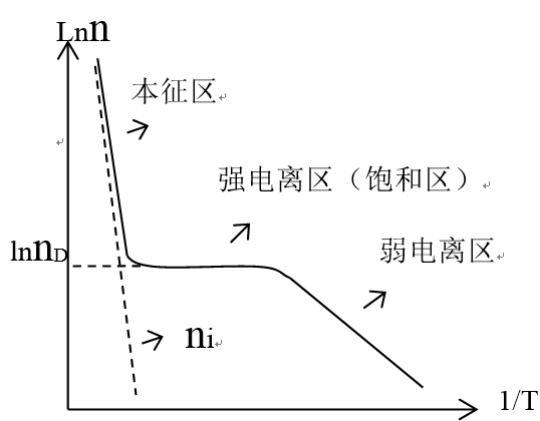


Figure 11: 浓度随温度变化曲线

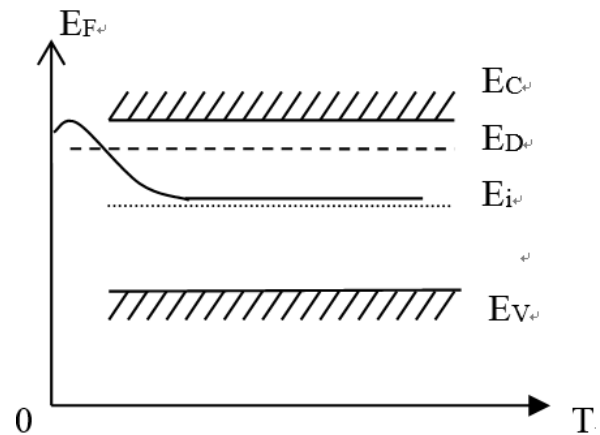


Figure 12: 费米能级随温度变化曲线

## 3.5 简并半导体

### 3.5.1 简并的出现

$E_f$  在导带底或价带顶附近，或  $E_f$  进入导带或价带称为简并情形  
此时玻尔兹曼近似不再成立。

### 3.5.2 简并半导体的载流子浓度

$$\text{费米积分 } F_{1/2}(\xi) = \int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{1 + \exp(x - \xi)} dx$$

$$n_0 = N_C \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left( \frac{E_f - E_c}{k_B T} \right) \quad p_0 = N_V \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left( \frac{E_v - E_f}{k_B T} \right)$$

### 3.5.3 简并条件

$$\begin{cases} \text{非简并} & E_C - E_f > 2kT \\ \text{弱简并} & 0 < E_C - E_f \leq 2kT \\ \text{强简并} & E_C - E_f \leq 0 \end{cases}$$

## 4 输运现象

### 4.1 电导率

- $\because V = V_0 + at = V_0 + \frac{eE}{m}t, \bar{V}_0 = 0$   
 $\therefore V_d = \bar{V}_0 = \frac{eE}{m}t$ , 即  $V_d = \frac{e\tau}{m}E$ ,  $\tau$  为平均自由运动时间
- $I = nvsq \rightarrow j = nqV_d$ , 又由欧姆定律  $j = \sigma E$   
 又  $V_d = \frac{e\tau}{m}E$ , 令迁移率  $\mu = \frac{e\tau}{m}$   
 则  $\sigma = nq\mu = nq\mu_n + pq\mu_p$

### 4.2 载流子的散射

- 若没有散射，在电场中的电子的速度会变得无穷大，也会发生bloch振荡。  
 载流子在运动中，由于晶格热振动和电离杂质以及其他因素的影响，不断遭到散射，电场不可能使之无限加速。  
 散射的根本原因：周期性势场被破坏。由于附加势场的作用，使能带中的电子发生在不同k状态间的跃迁。
- 平均自由时间
  - 实际上自由载流子在两次散射之间才真正是自由运动的，其连续两次散射间自由运动的平均路程称为平均自由程，而平均时间 $\tau$ 称为平均自由时间。
  - 令 $N(t)$ 为在 $t$ 时刻所有未受到散射的电子数， $P$ 为散射几率，即单位时间内受到散射的次数，则

$$N(t)Pdt = N(t) - N(t+dt) = -\frac{dN(t)}{dt} \cdot dt$$

$$\therefore N(t) = N_0 \exp(-Pt) = N_0 \exp(-t/\tau),$$

$$\text{平均自由时间 } \tau = \frac{1}{N_0} \int_0^\infty t P N_0 \exp(-Pt) dt = \frac{1}{P}$$

- 实际情况中， $\tau$ 为能量的函数，即 $\tau = \tau(E)$

$$\therefore \langle \tau(E) \rangle = \frac{\int \tau(E) g(E) f(E) dE}{n}, g(E) \text{ 是能量态密度, } f(E) \text{ 是费米函数}$$

-  $\tau$ 的物理意义 载流子的自由时间遵循统计分布，但简单地可以认为所有电子从时间 $t = 0$ 开始被加速“自由”地运动，平均来说当 $t = \tau$ 时，电子受到一次散射，因此

$$\therefore \bar{V}_d = -\frac{qE}{m_n^*} \tau_n \therefore \mu_n = \frac{e\tau_n}{m_n^*}, \sigma_n = \frac{ne^2\tau}{m_n^*}$$

## • 电导有效质量

以硅为例，

$$j = nq\mu_n E$$

$$\therefore \mu_n = \frac{1}{3}(\mu_l + 2\mu_t), \mu_l = \frac{q\tau}{m_l^*}, \mu_t = \frac{q\tau}{m_t^*}$$

$$\therefore \mu_n = \frac{e\tau_n}{m_{cn}^*}, \frac{1}{m_{cn}^*} = \frac{1}{3} \left( \frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right)$$

$$\mu_p = \frac{e\tau_p}{m_{cp}^*}, \frac{1}{m_{cp}^*} = \frac{(m_{cl}^*)^{1/2} + (m_{ch}^*)^{1/2}}{(m_{cl}^*)^{3/2} + (m_{ch}^*)^{3/2}}$$

## • 电离杂质散射

散射几率 $P$ 和杂质浓度大体成正比，和能量的 $3/2$ 次方成反比

由于能量与温度成正比，因此在温度较低时，电离杂质有较强的散射作用 $\mu_i \propto \frac{T^{3/2}}{N_i}$

$N_i$  越大，散射几率越大

$T$  越高，载流子平均热运动速度越大，散射几率越小。

## • 晶格散射

格波：晶格原子的本征运动称为格波。

声学波：长波极限下，同一原胞两个不等价原子振动方向相同。

光学波：长波极限下，同一原胞两个不等价原子振动方向相反。

声子：格波能量量子化，作为玻色子处理，引入“声子”表示晶格振动能量量子化的单元，即晶格振动能量的量子。

对于Si, Ge等半导体只考虑纵声学波对电子的散射 $\mu_s \propto T^{2/3}$

$T$  越高，散射几率越大。

晶格振动波

{	声学波	横TA
		纵LA
	光学波	横TO
		纵LO

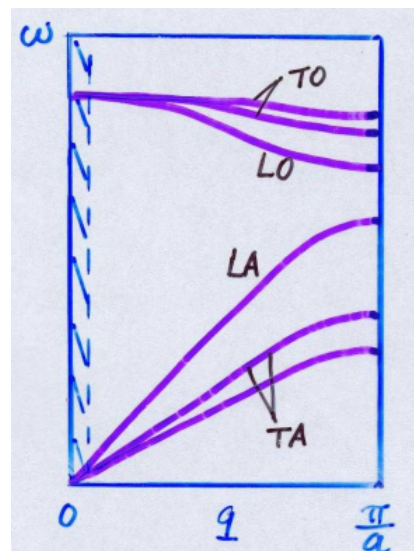


Figure 13: 晶格振动波

### 4.3 迁移率、电阻率与杂质浓度和温度的关系

- 当几种散射机构同时存在时,  $P = \Sigma P_i \rightarrow \frac{1}{\tau} = \Sigma \frac{1}{\tau_i} \rightarrow \frac{1}{\mu} = \Sigma \frac{1}{\mu_i}$
- 同时考虑多种散射,

$$\mu = q \frac{\tau}{m_{nc}^*} = \frac{q}{m^*} \frac{1}{AT^{3/2} + \frac{BN_i}{T^{3/2}}}$$

- 随着温度升高

$$\begin{aligned} \mu &\approx \mu_N \propto N_n^{-1} && \text{中性杂质散射} \Rightarrow \\ \mu &\approx \mu_I \propto T^{3/2}/N_I && \text{电离杂质散射} \Rightarrow \\ \mu &\approx \mu_S \propto T^{-3/2} && \text{声学杂质散射} \Rightarrow \\ \mu &\approx \mu_O \propto \exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T} - 1\right) && \text{光学杂质散射} \end{aligned}$$

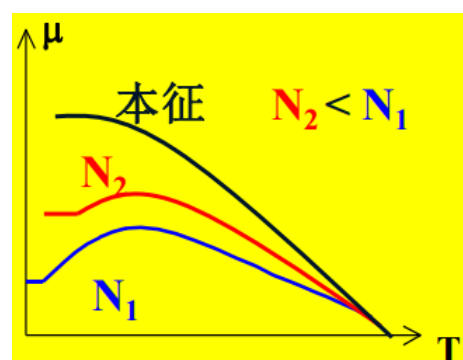


Figure 14: 迁移率与浓度的关系

- 低电场下,  $V_d$  与  $E$  成线性关系, 但强电场下,  $V_d$  趋向于饱和。其解释是, 在强电场下漂移速度趋向于热运动速度, 相当于电子的有效温度增加, 而在高温下以光学杂质散射为主, 温度升高  $V_d$  趋向于饱和。



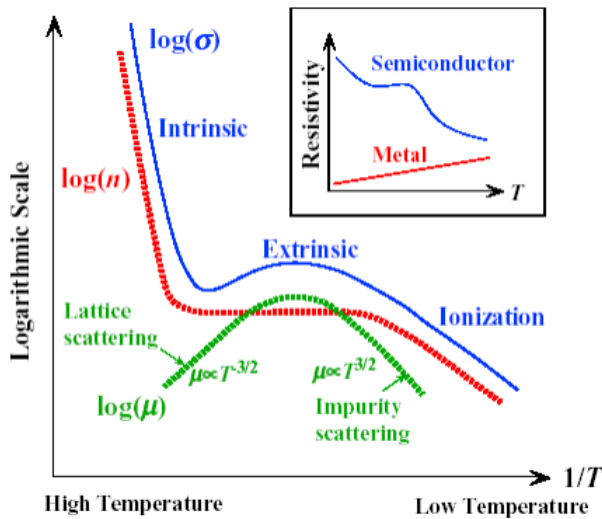


Figure 15: 迁移率、电导率与温度的关系

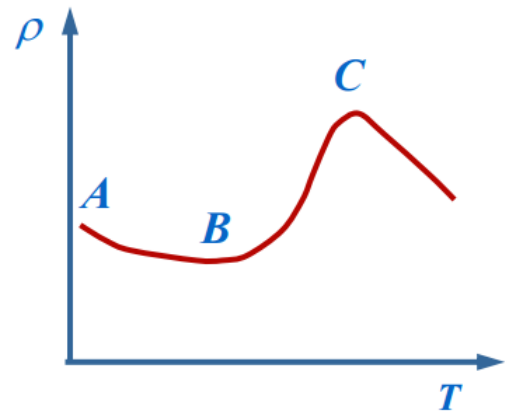


Figure 16: 电阻率与温度的关系

#### 4.4 霍尔效应

- 电流沿x方向，在垂直于电流的z方向施加磁场B，那么在垂直于电流和磁场的y方向上将出现横向电场，这个效应称为霍尔效应。
- 做漂移运动的载流子，在垂直磁场作用下，受洛伦兹力产生偏转，在样品两侧产生电荷积累。横向电场所引起的漂移电流( $qE_H$ )和洛伦兹力产生的霍尔偏转电流( $qV_x B_z$ )抵消。
- 横向电场 $E_y$ 正比于 $j_x \cdot B_z$ ，可写成 $E_y = R \cdot j_x \cdot B_z$ ； $R$ 是比例系数，称为霍尔系数。

$$\because eV_d B - eE_y = 0 \therefore V_d B = E_y$$

$$\because j_x = n - eV_d \therefore E_y = V_d \cdot B = -\frac{1}{ne} j_x \cdot B \Rightarrow R = -\frac{1}{ne} \frac{1}{pe}$$

#### 4.5 \*玻尔兹曼输运方程

•

$$\therefore \frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_d (\text{漂移项}) + \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_s (\text{碰撞项}),$$

$$\text{稳态时 } \frac{\partial f}{\partial t} = 0$$

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_d = -\nabla_r f \cdot v - \nabla_k f \cdot \frac{dk}{dt}$$

$$\therefore \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_s = \nabla_r f \cdot v + \nabla_k f \cdot \frac{dk}{dt}$$

即为玻尔兹曼输运方程

- 对于均匀半导体,  $\nabla_r f = 0$ ,  $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_s = \nabla_k f \cdot \frac{dk}{dt}$
- 为解此方程引入弛豫时间近似, 设

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_s = -\frac{f - f_0}{\tau}$$

$$\therefore -\frac{f - f_0}{\tau} = \nabla_k f \cdot \frac{dk}{dt}$$

- 弱电场下, 求得 $\sigma$ 为一张量, 各项同性时,

$$\sigma = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int_{\tau} v^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} dk$$

## 5 非平衡载流子

### 5.1 非平衡载流子的注入与复合

#### 5.1.1 载流子

- 载流子产生率 $G(\text{generation})$  载流子复合率 $R(\text{recombination})$
- 平衡态 $G_0 = R_0$  热平衡下 $G_{n0} = G_{p0} = R_{n0} = R_{p0}$

#### 5.1.2 非平衡载流子

- 非简并半导体处于平衡态  $n_0 p_0 = N_v N_e \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right) = n_i^2$
- 非平衡状态 对半导体施加外界作用, 使半导体处于与热平衡状态偏离的状态。在非平衡状态下, 载流子浓度比平衡状态多出一部分( $\Delta n = \Delta p$ )
- 小注入 对于n型半导体,  $\Delta n \ll n_0, \Delta p \gg p_0$  (小注入)  
 $\Delta n > n_0, \Delta p \gg p_0$  (大注入)
- 光注入引起的附加电导率  $\Delta\sigma = \Delta n q \mu_n + \Delta p q \mu_p = \Delta p q (\mu_n + \mu_p)$
- 复合率 $P$  单位时间内的净复合消失掉的电子-空穴对数目。

$$\frac{d\Delta p(t)}{dt} = -P\Delta p(t) \implies \Delta p(t) = \Delta p_0 e^{(-Pt)}$$

$$\text{令 } P = 1/\tau \quad \Delta p(t) = \Delta p_0 e^{(-t/\tau)}$$

$$\text{非平衡载流子的平均寿命 } \bar{t} = \frac{\int_0^\infty t d\Delta p(t)}{\int_0^\infty d\Delta p(t)} = \tau \quad \text{其中 } \Delta p(\tau) = \frac{\Delta p_0}{e}$$

#### 5.1.3 准平衡态和准费米能级

- 准平衡 =  $\left\{ \begin{array}{l} \text{电子子系统与晶格平衡} \rightarrow E_F^n \\ \text{空穴子系统与晶格平衡} \rightarrow E_F^p \\ \text{但电子子系统与空穴子系统不平衡} \end{array} \right.$
- 非平衡时没有统一 $E_F$

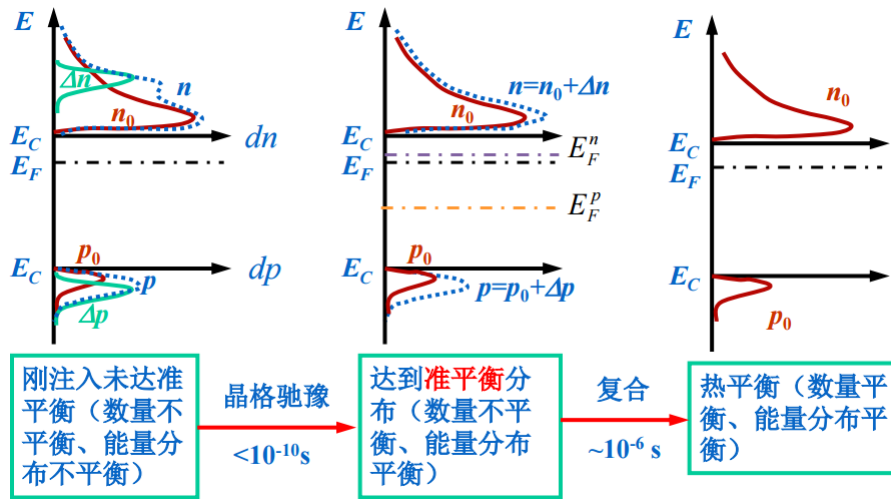


Figure 17: 非平衡状态的费米能级

$$n = n_0 + \Delta n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f^n}{k_B T}\right) = n_0 \exp\left(\frac{E_f^n - E_f}{k_B T}\right)$$

$$p = p_0 + \Delta p = N_v \exp\left(-\frac{E_f^p - E_v}{k_B T}\right) = p_0 \exp\left(\frac{E_f - E_f^p}{k_B T}\right)$$

$$np = n_i^2 \exp\left(-\frac{E_f^n - E_f^p}{k_B T}\right)$$

- n型半导体中， $E_f^n$ 与 $E_F$ 很接近，而 $E_f^p$ 与 $E_F$ 可以有显著差别， $E_f^n - E_f^p$ 反映了系统偏移热平衡的程度

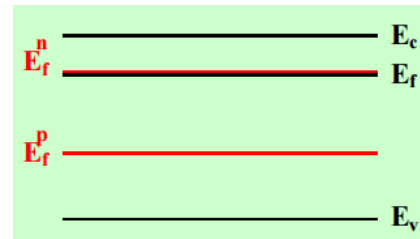


Figure 18: 费米能级图

## 5.2 复合理论

### 5.2.1 复合方式

- 按能量交换方式分，分为 辐射复合(光子复合(E - 光子)) 与非辐射复合(声子复合(E - 声子)，俄歇复合(E - 电子))
- 按复合过程分，分为直接复合与间接复合

### 5.2.2 直接复合

- 导带电子直接落入价带的空状态
- 复合率  $R \propto np$ , 令  $R = rnp$ , 其中  $r$  为电子-空穴复合几率, 只与  $T$  有关
- 产生率  $G = G_0$ , 只与  $T$  有关
- 热平衡时,  $G = G_0 = R_0 = rn_0p_0 = rn_i^2$
- 净复合率  $U_d = R - G = r(np - n_i^2) = r(n_0 + r_0)\Delta p + r\Delta p^2 = r\Delta p(n_0 + p_0 + \Delta p)$
- 又由  $U_d = \Delta p/\tau$ , 得  $\tau = \frac{1}{r(n_0 + p_0 + \Delta p)}$   
 小注入时,  $(n_0 + p_0) \gg \Delta p$ ,  $\tau = \frac{1}{r(n_0 + p_0)}$   
 又如果是n型半导体,  $n_0 \gg p_0$ ,  $\tau = \frac{1}{rn_0}$

### 5.2.3 间接复合

- 间接复合的四个基本过程

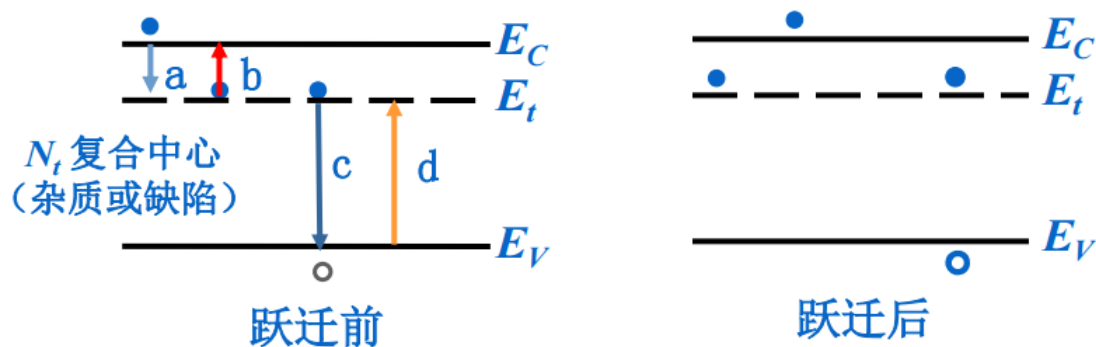


Figure 19: 间接复合的四个基本过程

- 甲: 复合中心从导带得到电子 电子俘获率  $= r_n n (N_t - n_t)$
- 乙: 导带从复合中心得到电子 电子发射率  $= s_- n_t$
- 丙: 价带从复合中心得到电子 空穴俘获率  $= r_p p n_t$
- 丁: 复合中心从价带得到电子 空穴发射率  $= s_+ (N_t - n_t)$
- 稳态时, 满足  $E_t$  上的电子数  $n_t$  不变  
 $a + d = b + c$ , 复合率  $U = a - b = c - d$
- $s_-, s_+$  均为常数, 可用平衡时参数求得

- 热平衡时,

$$a = b, c = d$$

$$s_- n_t = r_n n_0 (N_t - n_t), n_t = \frac{N_t}{1 + \exp\left(-\frac{E_t - E_F}{k_B T}\right)}$$

$$\therefore s_- = r_n n_1, n_1 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_t}{k_B T}\right)$$

$$s_+ = r_p p_1, p_1 = N_V \exp\left(-\frac{E_t - E_V}{k_B T}\right)$$

代入稳态条件  $a + d = b + c$ , 得

$$n_t = N_t \frac{r_n n + r_p p_1}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)}, \quad U = \frac{N_t r_n r_p (np - n_i^2)}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)}$$



Figure 20: 费米能级与掺杂的关系

### 5.3 陷阱效应

- 杂质能级能显著俘获并收容一种过剩载流子
- 此时  $\Delta p = \Delta n + \Delta n_t$ , 其中  $\Delta n_t$  为过剩载流子引起的中心上电子改变量
- 陷阱的作用: 增加少子寿命
- 有效的陷阱: 在  $N_t$  较低的情况下,  $\Delta n_t \gg \Delta n$
- 成为陷阱的条件:  $\Delta n_t = N_t \frac{n_1}{(n_0 + n_1)^2} \Delta n$

### 5.4 载流子扩散

- 若载流子分布存在浓度梯度, 则产生扩散流
- 扩散流公式 
$$\begin{cases} J_n = -D_n \nabla n \\ J_p = -D_p \nabla p \end{cases}$$

- $$\begin{cases} \text{总电子电流 } j_n = eD_n \frac{dn}{dx} + ne\mu_n E \\ \text{总空穴电流 } j_p = eD_p \frac{dp}{dx} + ne\mu_p E \end{cases}$$

- 一维稳定扩散

- 稳定状态：积累速率  $A$  = 净复合速率  $U_d$

- $p = p_0 + \Delta p$ ,  $p_0$  是常数,  $j = -D_p \frac{d\Delta p}{dx}$

$$A = -\nabla \cdot j = D_p \frac{d^2 \Delta p}{dx^2}, U_d = \frac{\Delta p}{\tau}$$

得到微分方程  $D_p \frac{d^2 \Delta p}{dx^2} = \frac{\Delta p}{\tau}$

通解为  $\Delta p(x) = A \cdot e^{-\frac{x}{L_p}} + B \cdot e^{-\frac{x}{L_p}}$ , 其中  $L_p = \sqrt{D_p \tau}$ , 为扩散长度

- 代入边界条件 
$$\begin{cases} \lim_{x \rightarrow \infty} \Delta p = 0 \rightarrow B = 0 \\ \lim_{x \rightarrow 0} \Delta p = (\Delta p)_0 \rightarrow A = (\Delta p)_0 \end{cases}$$

- $\therefore \Delta p(x) = (\Delta p)_0 \cdot e^{-\frac{x}{L_p}}$

## 5.5 其他内容

- 爱因斯坦关系（扩散系数与迁移率的关系） $D = \frac{kT}{e} \mu$

成立条件:平衡, 非简并

- 双极扩散:两种载流子扩散和漂移运动的差异, 会使电场分布发生一定的变化, 电场的变化可通过漂移影响两种载流子的运动, 并使两种过剩载流子保持同步, 不过当两种载流子数量相差悬殊的情况下, 电场分布的变化对于少子运动产生的影响可以忽略不计。

- 丹倍效应:由双极扩散中, 由于两种载流子的扩散系数不同, 在有过剩载流子时, 样品中将存在电场, 称为丹倍电场, 该电场在光照表面和背面建立电势差, 称为丹倍电势差, 这种效应即丹倍效应。

来源: 电子与空穴不同步, 电子比空穴快

作用: 降低电子扩散, 加速空穴扩散

## 6 pn结

### 6.1 平衡pn结

#### 6.1.1 pn结的形成

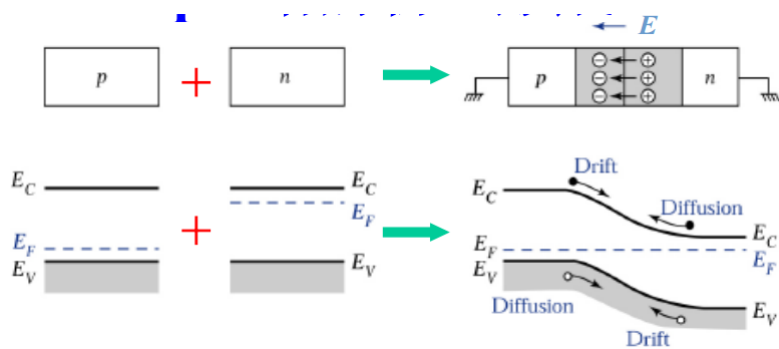


Figure 21: pn结的形成

- 突变结 载流子浓度高，较浅

$$x < x_j, N(x) = N_A - N_D; \quad x > x_j, N(x) = N_D$$

$$N_A \gg N_D \rightarrow p^+ - n \text{ 结} \quad N_D \gg N_A \rightarrow n^+ - p \text{ 结}$$

- 缓变结 载流子浓度低，较深  $N_D - N_A = \alpha_j(x - x_j)$

#### 6.1.2 空间电荷区

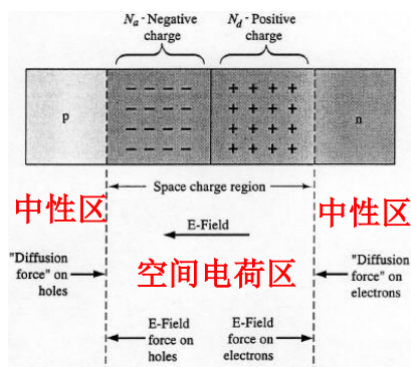


Figure 22: pn结的结构

载流子浓度梯度  $\Rightarrow$  扩散  $\Rightarrow$  破坏电中性  $\Rightarrow$  自建电场  $\Rightarrow$  漂移电流  $\Rightarrow$  动态平衡  $\Rightarrow$  零净电流

$$J_n = J_{n,diff} + J_{n,drift} = 0, J_p = J_{p,diff} + J_{p,drift} = 0$$



### 6.1.3 平衡结中费米能级

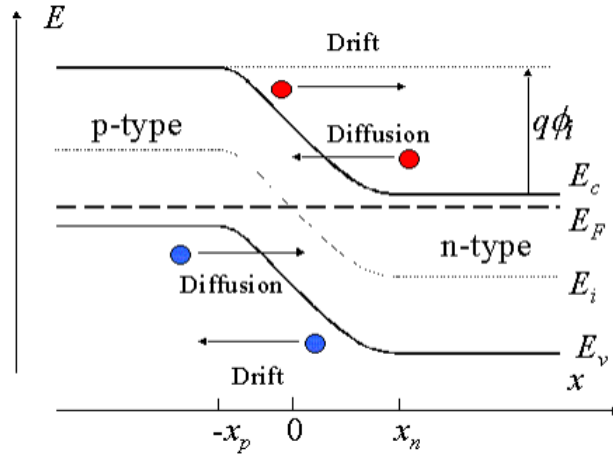


Figure 23: 平衡pn结能带图

平衡结中费米能级为一条直线，推导如下：

$$\because n_0 = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{kT}\right), E = -\frac{dV(x)}{dx} = \frac{1}{q} \frac{dE_i}{dx}$$

$$\therefore \frac{dn_0}{dx} = \frac{n_0}{k_B T} \left( \frac{dE_F}{dx} - \frac{dE_i}{dx} \right)$$

$$\therefore \frac{dn_0}{dx} = -\frac{n_0}{k_B T} \left( \frac{dE_F}{dx} - qE \right)$$

$$\because J_n = qn_0\mu E + qD_n \frac{dn_0}{dx}, \frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_B T}{q}$$

$$\therefore J_n = qn_0\mu E - qD_n n_0 \frac{qE}{kT} + n_0 \frac{qD_n}{kT} \frac{dE_F}{dx} = 0$$

$$\therefore \frac{dE_F}{dx} = 0, \text{得证}$$

### 6.1.4 pn结接触电势差

$$\because qV_D = E_{F(n)} - E_{F(p)}$$

$$\begin{cases} E_{F(n)} = E_i + kT \ln(N_D/n_i) \\ E_{F(p)} = E_i - kT \ln(N_A/n_i) \end{cases}$$

$$\therefore V_D = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_A N_D}{n_i^2}\right)$$

对于Si,  $V_D \approx 0.7V$  对于Ge,  $V_D \approx 0.3V$

### 6.1.5 pn结载流子分布

$n_{n0}$ :电中性n型区的电子浓度  $p_{p0}$ :电中性p型区的空穴浓度

$n_{p0}$ :电中性p型区的电子浓度  $p_{n0}$ :电中性n型区的空穴浓度

$$n(x) = n_{p0} \exp\left(\frac{qV(x)}{kT}\right), p(x) = p_{p0} \exp\left(-\frac{qV(x)}{kT}\right)$$

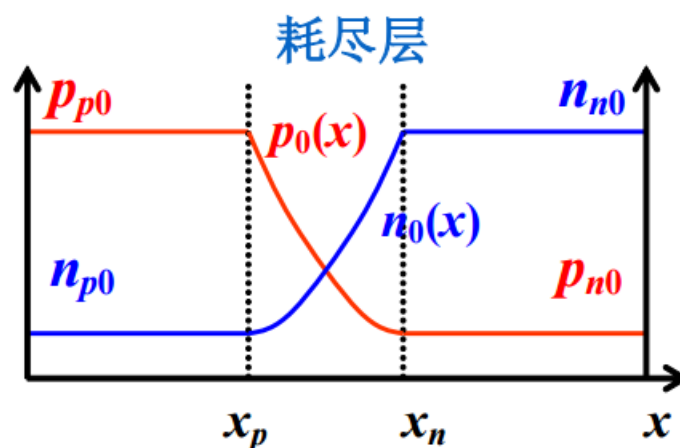


Figure 24: 平衡pn结载流子分布

耗尽层近似 势垒区中全部载流子被耗尽，可忽略

## 6.2 pn结电流电压特性

### 6.2.1 平衡pn结静电特性

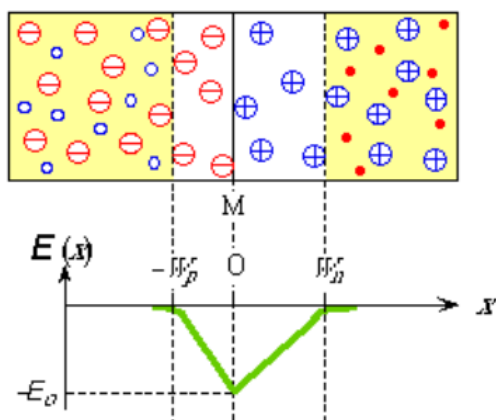


Figure 25: pn结电场分布

思路:

利用耗尽层近似求出空间电荷密度 $\rho(x)$

利用泊松方程积分 $\rho(x)$ 求出 $E(x)$

对 $E(x)$ 积分求出 $V(x)$

由玻尔兹曼统计得到 $n(x)$

对于突变结 $p^+n$

电荷分布

$$\rho(x) = q(N_D + N_A + p - n) = \begin{cases} \rho(x) = -qN_A, -x_p \leq x \leq 0 \\ \rho(x) = qN_D, 0 \leq x \leq x_n \end{cases}$$

泊松方程

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_0\epsilon_r} = -\frac{dE}{dx}$$

边界条件

$$E(-x_p) = E(x_n) = 0$$

$$V(-x_p) = 0, V(x_n) = V_D$$

$$\therefore E(x) = \int \frac{\rho(x)}{\epsilon_0\epsilon_r} dx$$

$$E_p(x) = -\frac{qN_A}{\epsilon_0\epsilon_r}(x + x_p), E_n(x) = -\frac{qN_D}{\epsilon_0\epsilon_r}(x_n - x)$$

$$\therefore V(x) = -\int E(x) dx$$

$$V_p(x) = \frac{qN_A}{\epsilon_0\epsilon_r}(x + x_p)^2, V_n(x) = V_D - \frac{qN_D}{\epsilon_0\epsilon_r}(x - x_n)^2$$

$x = 0$ 处, 电场强度最大

$$E_M = -\frac{qN_A}{\epsilon_0\epsilon_r}x_p = -\frac{qN_D}{\epsilon_0\epsilon_r}x_n$$

$$\therefore \frac{x_n}{x_p} = \frac{N_A}{N_D} \quad (\text{正负电荷总量相等})$$

$x = 0$ 处,  $V_p(x) = V_n(x)$

$$V_D = \frac{qN_A}{2\epsilon_0\epsilon_r}x_p^2 + \frac{qN_D}{2\epsilon_0\epsilon_r}x_n^2$$

$$\therefore x_D = x_p + x_n, \frac{x_n}{x_p} = \frac{N_A}{N_D}$$

$$\therefore x_D = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r(N_A + N_D)V_D}{qN_A N_D}}$$

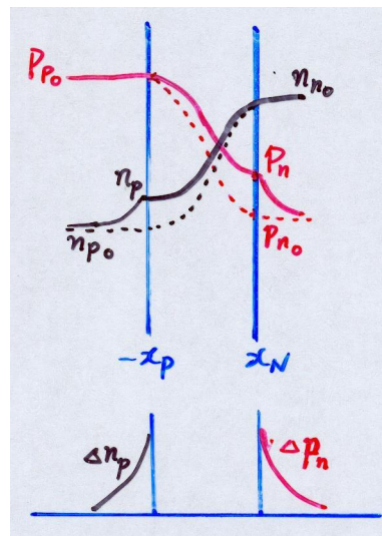
$$p^+n : X_D = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r V_D}{qN_D}} \approx x_n; \quad n^+p : X_D = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r V_D}{qN_A}} \approx x_p$$

对于线性缓变结的求解思路相同

### 6.2.2 非平衡pn结能带图

正偏压下，势垒降低，变窄；反偏压下，势垒升高，变宽  
一般只考虑正偏压：

- 势垒高度降低为 $q(V_D - V)$
- $I_{diff} > I_{drift}$ ，少子注入p区和n区



- 不存在统一费米能级

Figure 26: 正偏压下浓度的变化

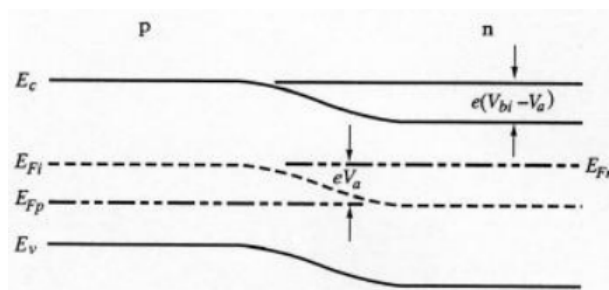


Figure 27: 正偏压下能带图

### 6.2.3 理想pn结的J-V特性

前提条件：

- 小注入条件：注入的少子浓度比平衡多子浓度小得多
- 突变耗尽层条件：耗尽层中载流子浓度非常小，外加电压和接触电势差多数降在耗尽层上

- 通过耗尽层的电子和空穴电流为常量，不考虑载流子在耗尽层中的产生和复合
- 忽略扩散区和中性区的电场和电压
- 玻尔兹曼边界条件：在耗尽层两端，载流子分布满足玻尔兹曼统计分布

$$J = J_p(x_n) + J_n(x_n)$$

若通过空间电荷区不发生复合,  $J = J_p(x_n) + J_n(x_p)$

$$\text{又由一维稳定扩散情况 } J = \frac{qD_p}{L_p} \Delta p(x_n) + \frac{qD_n}{L_n} \Delta n(x_p)$$

解连续性方程, 得  $\Delta p(x_n) = p_{n0}(e^{\frac{qV}{kT}} - 1)$ ,  $\Delta n(x_p) = n_{p0}(e^{\frac{qV}{kT}} - 1)$ ,

$$\text{令 } J_s = \left( \frac{qD_p p_{n0}}{L_p} + \frac{qD_n n_{p0}}{L_n} \right), \text{ 得到shockley equation } J = J_s \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right]$$

Law of Junction:

$$p_{\text{zone}} = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_{Fp}}{k_B T}\right), n_{\text{zone}} = n_i \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_i}{k_B T}\right)$$

在p区、n区、空间电荷区都适用

PS:空间电荷区中

$$\because qV = E_{Fn} - E_{Fp} \therefore pn = n_i^2 \exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right)$$

#### 6.2.4 非理想pn结

- 势垒区的产生与复合

复合率

$$U = \frac{N_t r(np - n_i^2)}{n + p + 2n_i}, np = n_i^2 \exp\left(\frac{E_F^n - E_F^p}{k_B T} = n_i^2 \exp(qV/k_B T)\right)$$

- 正偏压下,  $n = p = n_i^2 \exp(qv/2k_B T)$

$$\therefore U = \frac{n_i}{2\tau} \frac{\exp\left(\frac{qV}{k_B T} - 1\right)}{\exp\left(\frac{qV}{2k_B T} - 1\right)} = \frac{n_i}{2\tau} \exp\left(\frac{qV}{2k_B T}\right)$$

$$\therefore J_r = \int_{-x_p}^{x_n} qU dx = \frac{qn_i X_D}{2\tau} \exp\left(\frac{qV}{2k_B T}\right)$$

$$\text{又扩散电流 } J_{fd} = \frac{qD_p n_i^2}{L_p N_D} \exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right)$$

$$\therefore \frac{J_{fd}}{J_r} \propto \frac{2n_i L_p}{N_D X_D} \exp\left(\frac{qV}{2k_B T}\right)$$

小电压时，复合电流起主要作用；大电压时，扩散电流起主要作用

J-V经验公式

$$J_f \propto \exp\left(\frac{qV}{mk_B T}\right), \text{理想因子 } m: 1 \sim 2$$

- 反偏压下  $n \approx p \approx 0$ ,

$$\therefore U = \frac{n_i}{2\tau}$$

$$\therefore J_G = \int_{-x_p}^{x_n} qU dx = \frac{qn_i}{2\tau} X_D$$

$$\frac{J_{rd}}{J_G} = 2 \frac{n_i}{N_D} \frac{L_p}{X_D} \quad \text{室温下 } J_G \gg J_{rd}$$

温度升高，少子寿命降低，禁带宽度变小，都会导致  $J_G$  增加，即反向电流增加

• 大注入条件

$$n_{n0} = N_D = n_i$$

$$J_p = q\mu_p p_n(x_n)E(x_n) - qD_p \frac{d\Delta p_n(x)}{dx}$$

$$J_n = q\mu_n n_n(x_n)E(x_n) + qD_n \frac{d\Delta n_n(x)}{dx}$$

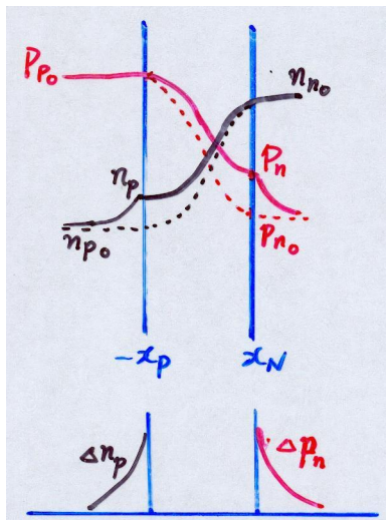
$$\text{内建电场 } J_n = 0, E(x_n) = -\frac{D_n}{\mu_n} \frac{1}{n_n(x_n)} \frac{d\Delta n_n(x)}{dx}$$

$$\therefore J_p = -qD_p \left[1 + \frac{p_n(x_n)}{n_n(x_n)}\right] \frac{d\Delta p_n(x)}{dx} = -2qD_p \frac{d\Delta p_n(x)}{dx}$$

$$\therefore p_n n_n = n_i^2 \exp(qV/k_B T), p_n \approx n_n$$

$$\therefore p_n(x_n) = n_i \exp(qV/2k_B T)$$

$$\therefore J_f = 2qD_p \frac{n_i}{L_p} \exp(qV/2k_B T)$$



在  $p^+n$  结的大注入条件下，电子的扩散电流与漂移电流大小相等，方向相反而相互抵消；

在正向电流密度中，空穴扩散电流和空穴 穴电流是扩散电流的两倍。  
漂移电流大小相等，方向相同，使得总空

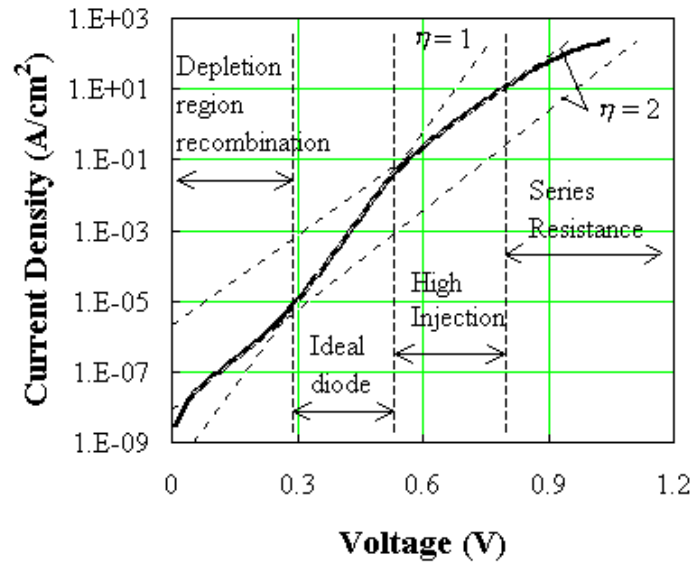


Figure 29: 非理想pn结总结

## 6.3 pn结电容

### 6.3.1 势垒电容

产生原因：空间电荷区厚度发生变化突变结：

$$\therefore |Q| = AqN_Ax_p = AqN_Dx_n \quad X_D = \sqrt{\frac{2\epsilon_0\epsilon_r(N_A + N_D)V_D}{qN_AN_D}} \quad x_n = \frac{N_A}{N_A + N_D}X_D$$

$$\therefore |Q| = Aq \left[ \frac{2\epsilon_0\epsilon_r}{q} \frac{N_AN_D}{N_A + N_D} (V_D - V) \right]^{1/2}$$

$$\therefore C_T = \frac{dQ}{dV} = A \left[ \frac{\epsilon_0\epsilon_rq}{2(V_D - V)} \frac{N_AN_D}{N_A + N_D} \right]^{1/2} = \frac{A\epsilon_0\epsilon_r}{X_D}$$

若为突变结，令 $N_B$ 为轻掺杂浓度

$$C_T = A \sqrt{\frac{q\epsilon_0\epsilon_rN_B}{2(V_D - V)}}$$

若考虑势垒区的载流子作用

$$C_T = 4C_T(0) = 4A \sqrt{\frac{q\epsilon_0\epsilon_rN_AN_D}{2(N_A + N_D)V_D}}$$

对于线性缓变结，思路相同，只是 $X_D$ 不同

$$C_T = \frac{dQ}{dV} = A \left[ \frac{q\alpha_j \epsilon_0^2 \epsilon_r^2}{12(V_D - V)} \right]^{1/3} = \frac{A\epsilon_0 \epsilon_r}{X_D}$$

无论杂质如何分布，在一定反向偏压下的微分电容，都可以等效为一个平行板电容器的电容。

### 6.3.2 扩散电容

在正向偏压下，空间电荷区外扩散长度范围内存贮有过剩载流子 $\Delta n \Delta p$ ，这些电荷的存贮量是随正向偏压增加的，这部分电容效应成为扩散电容。

对于N区

$$\begin{aligned} \Delta p(x) &= p_{n0} \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \exp\left(-\frac{x - x_n}{L_p}\right) \\ \therefore Q_p &= Ae \int_{x_n}^{\infty} \Delta p(x) dx = AqL_p p_{n0} \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \\ \therefore C_{dp} &= \frac{dQ_p}{dV} = A \frac{q^2 L_p p_{n0}}{kT} \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) \\ \text{P区 } C_{dn} &= \frac{dQ_n}{dV} = A \frac{q^2 L_n n_{p0}}{kT} \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) \\ \therefore C_d &= C_{dp} + C_{dn} = \left[ Aq^2 \frac{(n_{p0}L_n + p_{n0}L_p)}{kT} \right] \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) \end{aligned}$$

## 6.4 pn结击穿

### 6.4.1 雪崩击穿

在高反偏的p-n结势垒区中电场很强，载流子在强电场下将获得很大的动能，会发生碰撞电离而激发出新的电子-空穴对，并持续下去

估算击穿电压：即为E-x关系图所围成面积

$$\text{突变结: } V_{BR} = \frac{1}{2} E_c \cdot X_D = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r}{2q} \frac{E_c^2}{N_B}$$

$$\text{缓变结: } V_{BR} = \left( \frac{32\epsilon_0 \epsilon_r E_c^3}{9\alpha_j q} \right)^{1/2}$$

**雪崩击穿具有正的温度系数** 随着温度的增加，半导体晶格振动加强，载流子与晶格碰撞几率增加，从而因碰撞而损失的能量也就增加。因此要达到碰撞所需的能量，必须有更强的



电场。

### 6.4.2 齐纳击穿

在两边都重掺杂的pn结中是主要的击穿机制。当反向偏压很高时，p区的价带顶高于N区的导带底。当价带电子所需越过的势垒宽度 $d = E_g/qE$ 时，价带电子可以直接隧穿到导带

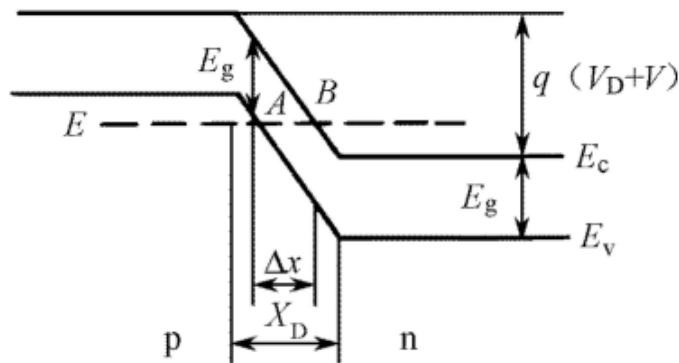


Figure 30: 齐纳击穿

$$\text{隧穿几率 } P = \exp \left[ -\frac{8\pi}{3} \left( \frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{1/2} E_g^{1/2} \Delta x \right]$$

$$\text{其中 } \Delta x = \frac{E_g}{q} \left( \frac{2\epsilon_0\epsilon_r}{q} \frac{1}{N_{eff}V_r} \right)^{1/2}, N_{eff} = \frac{N_D N_A}{N_D + N_A}$$

### 6.4.3 两种击穿比较

	雪崩击穿	齐纳击穿
掺杂浓度	低; $N \uparrow, E_B \uparrow$	高; $N \uparrow, E_B \downarrow$
$E_g$	$E_g \uparrow, E_B \uparrow (V_{BR} > 6E_g/q)$	$E_g \uparrow, E_B \uparrow (V_{BR} < 4E_g/q)$
温度关系	$T \uparrow, E_B \uparrow$	$T \uparrow, E_g \downarrow, E_B \downarrow$
隧道长度	d大利于雪崩击穿	d小利于齐纳击穿

## 6.5 隧道效应

- 简并半导体的费米能级可以在导带顶上，也可以在价带底下
- 江崎二极管结一边的导带电子直接通过隧道效应穿透到对面的价带（或相反），这个过程称为pn结中的隧道效应，这种效应只涉及到两个带中多子数量的变化，不会造成载流子的非平衡积累

- 江崎二极管具有负阻区

## 7 金半接触

### 7.1 金半接触能级图

#### 7.1.1 金属与半导体的功函数

- 功函数 真空能级 $E_0$ 和费米能级 $E_F$ 之差  $W = E_0 - E_F$
- 半导体的亲和能 $\chi$  真空能级 $E_0$ 和导带底 $E_C$ 之间的能量差  $\chi = E_0 - E_C$   
Si的电子亲和能: 4.05eV
- 金属的功函数和半导体的亲和能是固定的, 但是半导体的功函数会随掺杂浓度不同而改变

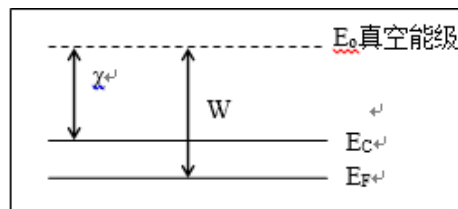


Figure 31: 功函数示意图

#### 7.1.2 接触电势差

- $D$ 很大时接触电势差:  $\phi_{ms} = \phi_m - \phi_s = \frac{1}{q}(W_m - W_s)$
- $D = 0$ 时, 肖特基势垒  $q\phi_{ns} = W_m - \chi$ ,  $qV_D = W_m - W_s$
- 阻挡层: 高阻, 整流 反阻挡层: 低阻, 欧姆
- N型  $\begin{cases} \text{整流} & W_m > W_s \\ \text{欧姆} & W_m < W_s \end{cases}$  P型  $\begin{cases} \text{整流} & W_m < W_s \\ \text{欧姆} & W_m > W_s \end{cases}$

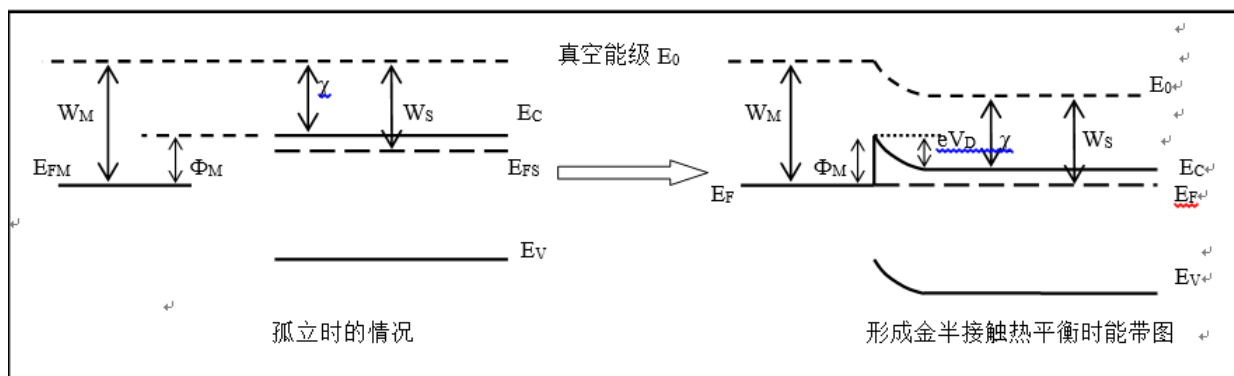


Figure 32: 金半接触能带图

- 金属-n型半导体的SBH:  $\phi_{Bn} = W_m - \chi$   
金属-p型半导体的SBH:  $\phi_{Bp} = E_g + \chi - W_m$   
 $\phi_{Bn} + \phi_{Bp} = E_g$ , 对同一种金属, 理想情况下n型半导体接触的表面势垒和p型半导体接触的表面势垒高度之和等于禁带宽度

### 7.1.3 表面态对接触势垒的影响

- 表面态产生原因: 原子周期性排列的终止
- 钉扎效应 在半导体表面, 费米能级的位置由表面态费米能级 $E_{Fs}$ 决定, 而与半导体的掺杂浓度无关
- 费米能级钉扎效应 如果表面态密度无限大, 尽管有电子流入表面态, 但是 $E_{Fs}$ 仍不变。金属和半导体的费米能级都钉扎在 $E_{Fs}$ 上。

$$q\phi_{ns} \approx \frac{2}{3}E_g \quad qV_D \approx \frac{2}{3}E_g - (E_C - E_F)$$

### 7.1.4 金半接触的静电特性

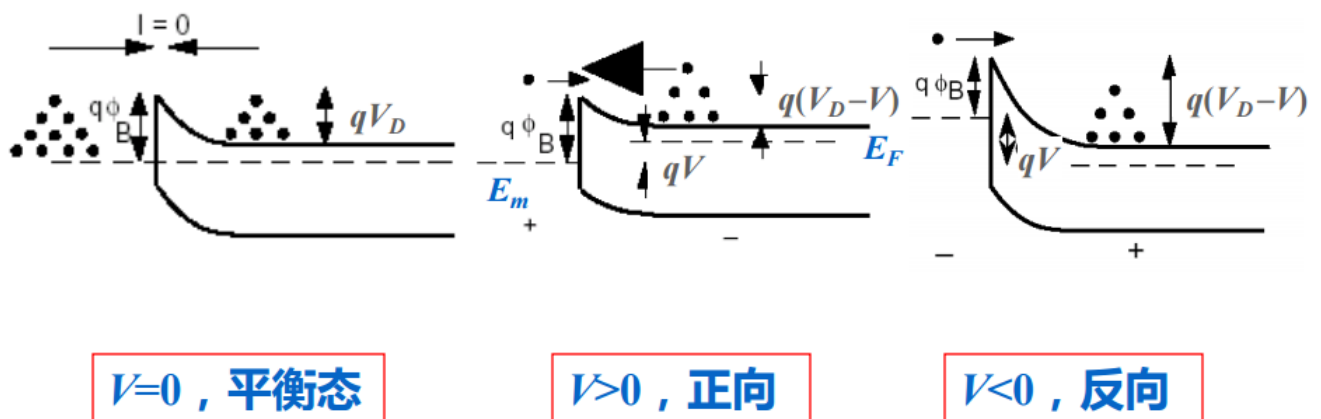


Figure 33: 外偏压下金半接触能带图

前提假设: 耗尽层近似,并用泊松方程求解

$$\frac{d^2V}{dx^2} \begin{cases} -\frac{qN_D}{\epsilon_0\epsilon_r} & 0 \leq x \leq x_d \\ 0 & x > x_d \end{cases}$$

$$E(x) = \frac{qN_D}{\epsilon_0\epsilon_r}(x - x_d)$$

$$V(x) = \frac{qN_D}{2\epsilon_0\epsilon_r}(x - x_d)^2, x_d = \left(\frac{2\epsilon_0\epsilon_r}{qN_D}V_D\right)^{1/2}$$

肖特基势垒电容 加反向偏压时也可当平行板电容处理

$$C_T = A \left[ \frac{\epsilon_0\epsilon_r q N_D}{2(V_D - V)} \right]^{1/2}$$

## 7.2 金半接触的整流输运理论

### 7.2.1 扩散电流

- 适用于势垒宽度 $\gg$  电子平均自由程即 $l_n \ll d$
- 同时考虑势垒区扩散和漂移电流

$$J = J_{SD} \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right]$$

$$J_{SD} \propto T^{-1/2} \exp(\phi_B/k_B T)$$

实验中一般 $J_{SD} \propto T^2 \exp(\phi_B/k_B T)$ 即热电子发射

### 7.2.2 热电子发射电流

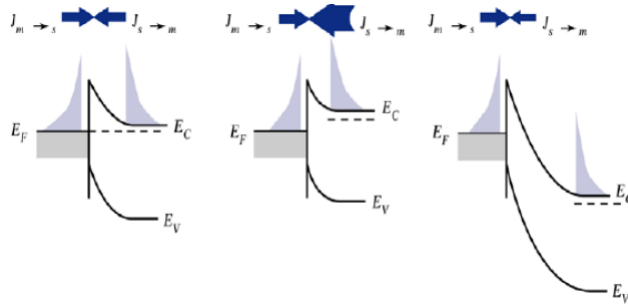


Figure 34: 热电子发射

- 适用于势垒宽度 $\ll$  电子平均自由程即 $l_n \gg d$
- 同时考虑势垒区扩散和漂移电流
- 半导体至金属的电流 $j_{S \rightarrow M}$ 随电压变化, 而金属至半导体的电流 $j_{M \rightarrow S}$ 由于金属一侧势垒

恒定而不随电压改变，且当没有外加电压(即 $V = 0$ )时有 $j_{S \rightarrow M} + j_{M \rightarrow S} = 0$

$$j_{S \rightarrow M} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\phi_B}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{qV}{k_B T}\right)$$

$A^*$  is Richardson Constant

$$j_{M \rightarrow S} = j_{S \rightarrow M}(V = 0) = A^* T^2 \exp\left(-\frac{\phi_B}{k_B T}\right)$$

$$J = j_{M \rightarrow S} + j_{S \rightarrow M} = J_0 \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right]$$

### 7.2.3 肖特基二极管与pn结二极管的比较

- 较小的开启电压
- 较大的反向电流
- 较低的击穿电压
- 多子器件，载流子无存储，多用于高频

### 7.2.4 隧穿电流和镜像力的影响

- **镜像力** 镜像力使势垒高度降低,在反向电压较高时比较重要

$$q\Delta\phi = \frac{q^2 N_D}{\epsilon_0 \epsilon_r} x_m x_d = \frac{1}{4} \left[ \frac{2q^7 N_D}{\pi^3 \epsilon_0^3 \epsilon_r^3} (V_D - V) \right]^{1/4}$$

- **隧道效应** 隧道效应引起势垒降低，反向电流增大  
推导采用了WKB近似

$$q\Delta\phi = \left[ \frac{2q^3 N_D}{\epsilon_0 \epsilon_r} (V_D - V) \right]^{1/2} x_c, x_c \text{为临界厚度}$$

## 7.3 少子注入与欧姆接触

### 7.3.1 少子注入

$$\text{少子注入比 } \gamma = \frac{J_p}{J} = \frac{J_p}{J_p + J_n}$$

### 7.3.2 欧姆接触

当半导体高掺杂时，势垒很薄，这时电子隧穿效应为主，此时金半接触表现出电阻性质，称为欧姆接触.此时 $J \propto V$