

第一章 晶体结构 晶格

§1 晶格相关的基本概念

1. 晶体：原子周期排列，有周期性的物质。
2. 晶体结构：原子排列的具体形式。
3. 晶格：典型单元重复排列构成晶格。
4. 晶胞：重复性的周期单元。
5. 晶体学晶胞：反映晶格对称性质的最小单元。
6. 晶格常数：晶体学晶胞各个边的实际长度。
7. 简单晶格&复式晶格：原胞中包含一个原子的为简单晶格，两个或者两个以上的称为复式晶格。
8. 布拉伐格子：体现晶体周期性的格子称为布拉伐格子。（布拉伐格子的每个格点对应一个原胞，简单晶格的晶格本身和布拉伐格子完全相同；复式晶格每种等价原子都构成和布拉伐格子相同的格子。）
9. 基矢：以原胞共顶点三个边做成三个矢量， \mathbf{a}_1 ， \mathbf{a}_2 ， \mathbf{a}_3 ，并以其中一个格点为原点，则布拉伐格子的格点可以表示为 $\mathbf{a}_L = L_1\mathbf{a}_1 + L_2\mathbf{a}_2 + L_3\mathbf{a}_3$ 。把 \mathbf{a}_1 ， \mathbf{a}_2 ， \mathbf{a}_3 称为基矢。
10. 平移对称性：整个晶体按 9 中定义的矢量 \mathbf{a}_L 平移，晶格与自身重合，这种特性称为平移对称性。（在晶体中，一般的物理量都具有平移对称性）
11. 晶向&晶向指数：参考教材。（要理解）
12. 晶面&晶面指数：参考教材。（要理解）

立方晶系中，若晶向指数和晶面指数相同则互相垂直。

§2 金刚石结构，类金刚石结构（闪锌矿结构）

金刚石结构：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, α -Sn（灰锡）都属于这种晶格。

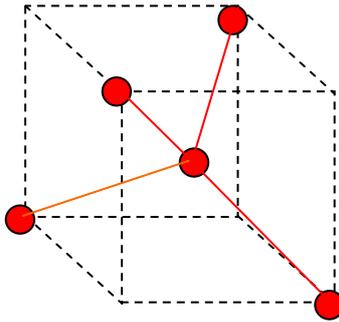
金刚石结构的特点：每个原子都有四个最邻近原子，它们总是处在一个正四面体的顶点上。

（每个原子所具有的最邻近原子的数目称为配位数）

每两个邻近原子都沿一个 $\langle 1,1,1 \rangle$ 方向，

处于四面体顶点的两个原子连线沿一个 $\langle 1,1,0 \rangle$ 方向，

四面体不共顶点两个棱中点连线沿一个 $\langle 1,0,0 \rangle$ 方向。



四面体结构示意图

金刚石结构的密排面： $\{1, 1, 1\}$ 晶面的原子都按六方形的方式排列。每两层 $\{1, 1, 1\}$ 原子层完全相同， $ABCABC \dots$

在这种结构中，关于任何两个相邻原子连线中点具有反演对称性。

类金刚石结构： GaAs, InSb, GaP 等化合物晶体的晶格是由两种不同原子组成的面心立方晶格套构而成的，称为类金刚石结构或闪锌矿结构，显然闪锌矿不再具有反演中心。

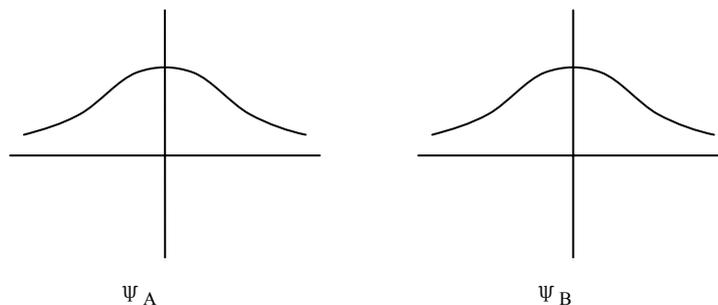
§3 共价结合

§3.1 晶体结合的四种基本方式

1. 离子结合：原子间交换电子，形成正负离子，之间相互库仑作用结合成固体。
2. 共价结合：相邻原子共用电子对形成共价键。（半导体中晶体普遍是共价结合，因此本节重点是共价结合。）
3. 金属结合：价电子共有化形成负电子云，正离子浸泡在电子云中。
4. 范德瓦尔结合：发生在饱和电子结构中，相互作用靠很弱的瞬时偶极矩。

§3.2 成键态与反键态(以 H_2 为例)

A, B 两原子相互靠近形成分子，两个价电子为 A, B 共有。



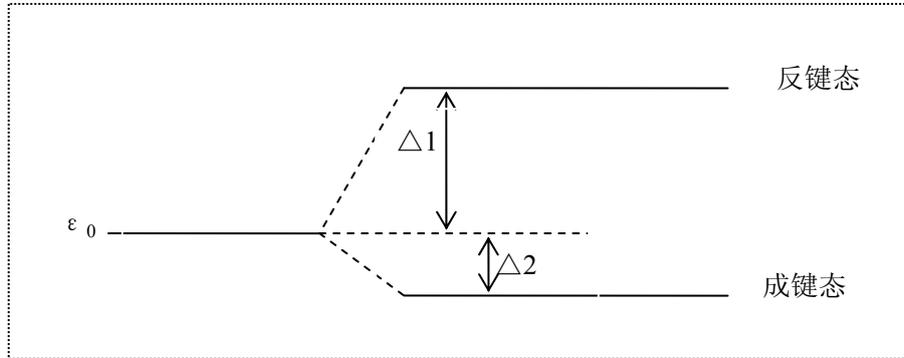
成键态： $\psi=C(\psi_A+\psi_B)$

反键态： $\psi=C'(\psi_A-\psi_B)$

其中 C 和 C' 为归一常数

成键态电子云集中在两原子核之间，同时受到两个原子核的库仑吸引作用，库仑能下降，故形成共价键。

反键态使能量升高 $\Delta 1$ ，成键态能量下降 $\Delta 2$ 且有 $\Delta 1 > \Delta 2$ ，只有未成对电子才能形成共价键。



§3.3 SP³ 杂化（以 Si 为例）

Si 的原子组态为： $(1S)^2 (2S)^2 (2P)^6 (3S)^2 (3P)^2$
 稳定电子 价电子

由 Si 原子组态可知，若不改组的话只能形成 2 个共价键，但实际上有 4 个共价键，成四面体，这是因为发生了 SP³ 杂化的缘故。即价电子的组态发生了如下改组： $(3S)^2 (3P)^2 \rightarrow (3S_1) (3P_x) (3P_y) (3P_z)$

组成了新的 4 个轨道态，实际上四个共价键是以 S 态和 P 态波函数线形组合为基础的，这样使得系统能量最低。

杂化的好处：①成键数增多，四个杂化态上全部是未成对电子。

②成键能力增强，电子云集中在四面体方向，电子重叠大，使能量下降更多，抵消杂化的能量，使总能量减小。

§4 晶格缺陷

晶格缺陷分 3 类：

- 点缺陷：间隙原子和空位。
- 线缺陷：位错。
- 面缺陷：层错。

点缺陷的类型：

- 弗兰克尔缺陷：原子热运动，少量原子离开格点位置进入间隙形成空位间隙原子对。
- 肖特基缺陷：单一空位的缺陷。
- 反肖特基缺陷：单一缺陷原子的缺陷。

第二章 半导体中的电子状态

§1 半导体基本能带

§1.1 布洛赫波

在晶体的周期场中，电子波函数的形式为 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ，其中 $\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})=\mu_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{a}_L)$ 其中 \mathbf{k} 称为简约波束，有波束的量纲，但要在一简约范围内取值。 $\hbar\mathbf{k}$ 与动量类似，在跃迁过程中守恒，且有 $\frac{d\hbar\mathbf{k}}{dt}=\mathbf{F}_{\text{外}}$ ，故称为准动量。

在晶体中 \mathbf{k} 取值在一定范围内，这范围称为简约布里渊区，下面以一维为例加以证明。设晶格周期为 α

$$\begin{aligned} \because \mu_{\mathbf{k}}(x) &= \mu_{\mathbf{k}}(x+n\alpha) \\ \therefore \psi_{\mathbf{k}}(x+\alpha) &= e^{i\mathbf{k}\alpha} \cdot e^{i\mathbf{k}x} \cdot \mu_{\mathbf{k}}(x+n\alpha) \\ &= e^{i\mathbf{k}\alpha} [e^{i\mathbf{k}x} \cdot \mu_{\mathbf{k}}(x)] \\ &= e^{i\mathbf{k}\alpha} \psi_{\mathbf{k}}(x) \end{aligned}$$

其中 $e^{i\mathbf{k}\alpha}$ 表示相邻原胞之间波函数位相差，因此 $-\pi \leq \mathbf{k}\alpha \leq \pi$ ，三维情形， $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 三个基矢有 $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}+\mathbf{a}_n)=e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_n}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ，其中 $n=1, 2, 3$ 。定义矢量 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ 分别等于

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \end{aligned}$$

则有 $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$ (δ_{ij} 函数表示，当 $i=j$ 时为 1，不等为 0)

故称 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ 为倒矢量，以 $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$ 为基矢组成晶格，称为倒格子。这样定义下有倒格子原胞的体积于原晶格原胞的体积相乘之积为常数 $(2\pi)^3$ 用 $\mathbf{K}n=n_1\mathbf{b}_1+n_2\mathbf{b}_2+n_3\mathbf{b}_3$ 表示倒格矢，则 \mathbf{k} 和 $\mathbf{k}+\mathbf{K}n$ 表示相同状态。因此简约布里渊区也称作不相差任何倒矢量，位相变化单值完备的区域。

对于金刚石结构的面心立方晶格，倒格子为体心立方，通常取倒格子中 $\mathbf{k}=0$ 原点做次近邻，近邻中垂面围成的区域，它称为维格纳-塞兹原胞。

§1.2 周期性边界条件

由于实际晶体包含的原子是有限的，故每个能带所包含的状态数是有限的，又由于边界条件的差异对大块晶体性质并无本质影响，故引入周期性边界条件来计算 \mathbf{k} 空间的取值密度。

- 一维：

设一维晶格总长度 $L=N\alpha$ (N 为包含原胞总数)

周期性边界条件为: $\psi_k(0) = \psi_k(L) = \psi_k(N\alpha)$

$\psi_k(0) = \mu_k(0) \quad \psi_k(N\alpha) = e^{ikN\alpha} \mu_k(N\alpha) = e^{ikN\alpha} \mu_k(0)$

所以得到 $e^{ikN\alpha} = 1$ 故有 $kN\alpha = 2n\pi$ (n 为整数)

因此 k 的可取值为 $k = (2n\pi) / N\alpha$, 取值密度 $g_k = N\alpha / 2\pi = L / 2\pi$

对一维, 简约布里渊区长度为 $2\pi/\alpha$, 因此布里渊区内包含的状态数为 $(2\pi/\alpha) \cdot (L/2\pi) = L/\alpha = N$ 正好等于原胞数 N

所以 k 空间的取值密度也可以用原胞总数除以布里渊区长度来计算(对于二维则除以布里渊区面积, 三维除以布里渊区体积)

● **三维:**

对于三维可以类似地求得 \mathbf{k} 空间的状态密度

$g_{\mathbf{k}} = (N_1\alpha_1 \cdot N_2\alpha_2 \cdot N_3\alpha_3) / (2\pi)^3$ (N_1, N_2, N_3 表示三个维度上的原胞数)

显然, 用倒格子原胞的体积 $(2\pi)^3/\Omega$ 乘以 \mathbf{k} 空间的密度 $g_{\mathbf{k}}$ 得到 \mathbf{k} 空间的状态数为 $N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$, 仍等于晶体所包含的原胞总数。

*注: 上面公式中 Ω 表示实际晶体原胞体积, 有 $\Omega = \alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3$

§2 电子准经典运动

§2.1 电子准经典运动的两个基本公式

$$\textcircled{1} \quad \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F}_{\text{外}}$$

$$\textcircled{2} \quad \mathbf{V} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

§2.2 加速度和有效质量

三维:
$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \right) = \frac{1}{\hbar^2} (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}}) \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

写成张量形式:
$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \left(\frac{1}{m} \right) \mathbf{F}, \text{ 其中 } \frac{1}{m} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_x \partial \mathbf{k}_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_x \partial \mathbf{k}_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_y \partial \mathbf{k}_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_y \partial \mathbf{k}_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_z \partial \mathbf{k}_x} & \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_z \partial \mathbf{k}_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}_z^2} \end{pmatrix}$$

$1/m$ 可对角化, 因此可以写成 $\mathbf{F}_{\alpha} = \left(\frac{d_{\mathbf{v}\alpha}}{dt} \right) \cdot m_{\alpha}$

$$\{m^*\} = \begin{pmatrix} \hbar^2 \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2 \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix} \quad \text{称为有效质量张量}$$

对于能带底 ($E_{\mathbf{k}}$ 最小处) $\left(\frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}\right)_{\mathbf{k}_0} = 0$ 设 $\mathbf{k}_0 = 0$ 在 $\mathbf{k} = 0$ 处泰勒展开有:

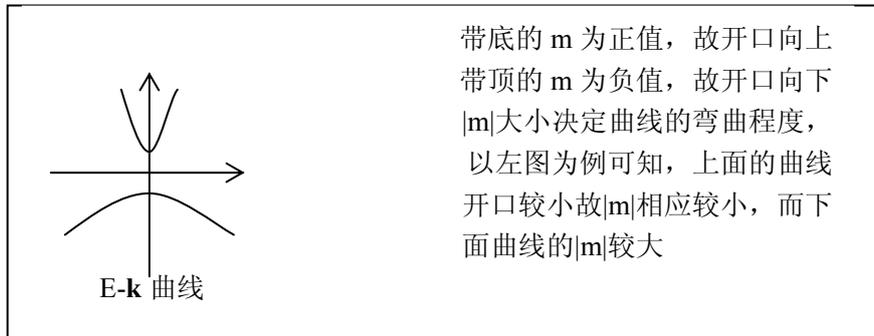
$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} k_x^2 + \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} k_y^2 + \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} k_z^2 \right)$$

$$= E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_x^*} + \frac{k_y^2}{m_y^*} + \frac{k_z^2}{m_z^*} \right)$$

\because 最小值处 $\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)_{\mathbf{k}_0} > 0 \therefore m_x, m_y, m_z$ 均为正值, 在满足上面抛物线性关系的能量范围内, 有效质量各个分量可以看作常数, 对立方对称性晶体 $m_x = m_y = m_z = m$, 可以写成:

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$$

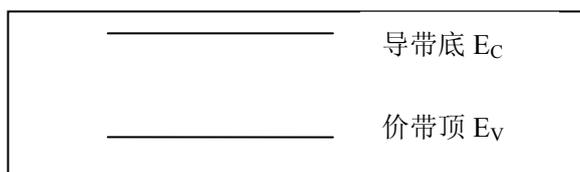
同理对于能带顶有: $E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$, 此时 m 为负值。



§3 导带的电子和空穴

§3.1 基本原理

1. 满带中电子不导电, 未填满能带在有外加场时产生电流。
2. 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(也叫能隙), 禁带宽度用 E_g 表示。可以用两条线代表导带底, 和价带顶; 能量值分别用 E_C 和 E_V 表示。

- 绝缘体，半导体和金属： E_g 在 1eV 附近的称为半导体，热激发时满带不满，空带不空，有一定的导电性； E_g 大于 10eV 的称为绝缘体，电子很少激发，因而几乎不导电，而金属中则存在半满带，因此具有良好的导电性能。
- 近满带的空穴：假想的粒子，等价于 $2N-1$ 个电子的总体运动。设空穴处有电子的时候，因为满带电流为 0，有

$$J(\mathbf{k}) + (-e)\mathbf{V}(\mathbf{k}) = 0$$

其中 $J(\mathbf{k})$ 表示 $2N-1$ 个电子的总电流

推出 $2N-1$ 个电子的总电流 $J(\mathbf{k}) = e\mathbf{V}(\mathbf{k})$

说明 $2N-1$ 个电子的总电流等效于带正电，速度为 $\mathbf{V}(\mathbf{k})$ 的粒子

$$\text{又因为 } \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{\mathbf{F}}{m^*} \text{ 故 } \frac{dJ_{\mathbf{k}}}{dt} = e \frac{(-e\mathbf{E})}{m^*} = -\frac{e^2\mathbf{E}}{m^*}$$

而由于空穴出现在价带顶， $m^* < 0$ ，故引入空穴有效质量 $m_n^* = |m^*|$ 为正，综上，把空穴等价成一个正电荷，正有效质量的粒子。

§3.2 常见半导体的能带结构，直接禁带与间接禁带半导体

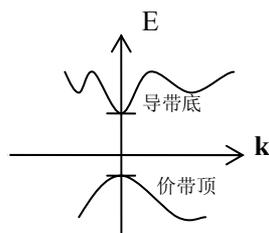
- 对于半导体材料来说， $E(\mathbf{k})$ 函数的不同决定了其许多重要物理性质的不同， $E(\mathbf{k})$ 函数一般有两种表示法：

- **E-k 图**：由于是四维图像，无法直接画出，故选等价对称方向，做出 E-k 曲线。
- **等能面**： $E_{\mathbf{k}} = \text{常数}$ ， \mathbf{k} 空间的曲面。

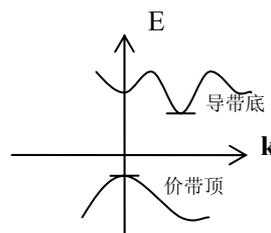
- 直接禁带半导体和间接禁带半导体：

对于半导体来说，我们最关心的是导带底和价带顶的性质，光照激发价带电子到导带形成电子空穴对，所吸收光子的 $\hbar\mu$ 要大于 E_g ，这被称作光吸收。有两种情况。

- **价带顶和导带底有相同的 \mathbf{k}** ，（如图甲）此时可以吸收光子跃迁，电子能量差等于光子能量，忽略光子的动量，近似有跃迁前后的 \mathbf{k} 相同，近似为竖直跃迁。这类半导体称为**直接禁带半导体**，常见的半导体中 InSb, GaAs, InP 等都属于直接禁带半导体。常用来做光学器件。
- **价带顶和导带底不在相同的 \mathbf{k}** ，（如图乙）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，电子能量差=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。这类半导体称为**间接禁带半导体**，常见半导体中 Ge, Si 等都属于间接禁带半导体。由于跃迁需要光子，声子二维作用，所以跃迁几率大大减小，复合几率小，因此常用来做电子器件。



图甲



图乙

- 轻重空穴带：Ge, Si 中的价带结构比较复杂，由四个带组成，价带顶附近有三个带，

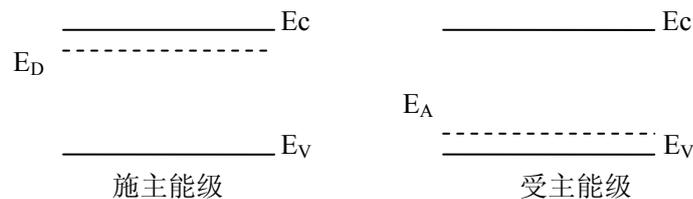
两个最高的带在 $k=0$ 处简并，分别对应重空穴带和轻空穴带。（曲率大者为轻空穴带）

4. 导带底附近的等能面：

- Si 中导带底附近的等能面：导带底 $\langle 1,0,0 \rangle$ 方向，位于 $(k_{x0}, 0, 0)$ 点，等能面是旋转椭球，共有 6 个等能面。
- Ge 中导带附近等能面 $\langle 1,1,1 \rangle$ 的端点，旋转椭球，共有 4 个旋转椭球（8 个半球）。
- 价带的有效质量各向异性，等能面不是椭球。

§4 杂质能级

1. **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。
2. **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） $E_i \approx (1/100)ev$ (在 Si 中)。杂质能级很接近导带底，称为浅能级杂质。
3. **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。
4. **n 型半导体**：主要依靠电子导电。
5. **受主**：能接受电子，并使自身带负电的杂质。
6. **浅能级受主杂质**：III 族元素，少一个电子，原子实多一个负电荷，形成束缚杂质能级，在禁带中释放一个空穴需要一定的能量，约为 $(1/100) ev$ ，称为浅受主能级。
7. **受主能级**：不占有电子时（即束缚空穴时）电中性，占据电子时带负电。



8. **p 型半导体**：主要依靠空穴导电。
9. **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。
10. **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。
11. **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。
12. **重掺杂**：浅能级杂质掺杂很高。
13. **类氢模型**：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 e^2/ϵ 代替 e^2 ，我们就可以得到杂质的电离能为：

$$\epsilon_i = \frac{me^4}{8\epsilon^2\epsilon_0^2h^2} \text{ 杂质的等效波尔半径为: } \alpha = \frac{h^2\epsilon\epsilon_0}{\pi e^2m} \text{ (氢原子的公式为 } \epsilon_H = \frac{m_0e^4}{8\epsilon_0^2h^2} = 136(ev)$$

$$\text{和 } \alpha = \frac{h^2\epsilon_0}{\pi e^2m_0} = 0.53A)$$

14. **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**。

第三章 电子和空穴的平衡统计分布

§1 费米分布函数及其性质

我们认为半导体中的电子为全同粒子，且遵守泡利不相容原理，其分布为费米分布

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{kT}}} \text{ 其中 } \begin{cases} E: \text{能级位置} \\ E_F: \text{费米能级} \\ k: \text{玻尔兹曼常数} = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K} \end{cases}$$

$f(E)$ 是能量为 E 的电子能级被占据的几率， $\sum_{\text{能级}} f(E_i) = N$ (电子总数)。

$1 - f(E)$ 是不被占据的几率，也可以看成是被空穴占据的几率，用 $f_p(E)$ 表示，有 $f_p(E) = 1 - f(E)$ 。

● 费米分布函数的性质：

- ◆ 在 E_F 处有 $f(E_F) = 0.5$
- ◆ 当 $E - E_F \gg kT$ 时，有 $f(E) \approx e^{-\frac{E-E_F}{kT}} \rightarrow 0$ 。
- ◆ 当 $E_F - E \gg kT$ 时，有 $f(E) \approx 1 - e^{-\frac{E_F-E}{kT}} \rightarrow 1$ 。
- ◆ 当 $T=0K$ 时，对于 $E < E_F$ 有 $f(E) = 1$ ，对于 $E > E_F$ 有 $f(E) = 0$ 。 $T \neq 0$ 时 $f(E)$ 在 E_F 附近 kT 范围内变化，反映了电子的热激发。

§2 利用费米函数求载流子浓度

半导体中载流子包括导带中的电子（浓度用 n 表示）和价带中的空穴（浓度用 p 表示）。有：

$$n = \sum_{j(\text{导带中的电子能级})} f(E_j) \qquad p = \sum_{i(\text{价带电子能级})} f_p(E_i)$$

§2.1 态密度 $g(E)$

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，则 E 到 $E+dE$ 内的状态数 $dN = g(E)dE$ 。则电子浓度 $dn = f(E)g(E)dE$ ，因此有 $n = \int_{\text{导带}} f(E)g(E)dE$ ，

故只要求得 $g(E)$ 即可求出载流子浓度。下面我们给出利用 $g(E) = dN/dE$ 来求 $g(E)$ 的一般步骤，并举例说明。

- 求 \mathbf{k} 空间的体积（用 \mathbf{k} 表示）进而利用 $g(\mathbf{k})$ 求得 $N-\mathbf{k}$ 关系。
- 利用 $E-\mathbf{k}$ 关系，导出 $\mathbf{k}=f(E)$ ，代入 $N-\mathbf{k}$ 表达式进而得到 $N-E$ 关系。
- 对 $N-E$ 表达式求导，得到 dN/dE ，即 $g(E)$ 。

例 1: 简单能带模型, $E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$, $\{m^*\}$ 各向同性。

a) : 由第二章的讨论可知, 单位体积晶体 (即 $V=1$) 计入自旋、反自旋两个状态, 在 \mathbf{k} 空间的态密度为 $g(\mathbf{k})=2/(2\pi)^3$ 。

由于 $\{m^*\}$ 各向同性, \mathbf{k} 空间等能面是球形, 体积是 $(4/3)\pi k^3$, 乘以 \mathbf{k} 空间态密度 $g(\mathbf{k})$ 得到: $N=(4/3)\pi k^3 \times 2/(2\pi)^3$

b) : 由 $E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$ 得到: $k = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}$ (其中 $\varepsilon=E-E_c$) 代入 N 的表达式,

$$\text{有 } N = \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{(2m)^{3/2}}{(\hbar)^3} \cdot \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot (\varepsilon)^{3/2}。$$

c) 对上面 N 的表达式求导得到: $\frac{dN}{dE} = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \varepsilon^{1/2}$, 即 $g(E) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \varepsilon^{1/2}$

(其中 $h = 2\pi\hbar$)

例 2: 对于有效质量并非各向同性的情况, 计算 $g(E)$ 。

对于有效质量各向异性的情况 \mathbf{k} 空间的等能面是椭球, 体积是 $(4/3)\pi k_x k_y k_z$ 而由 $E-k$ 关系可以得到 $k_i = \frac{\sqrt{2m_i \varepsilon}}{\hbar}$ (其中 i 分别取 x, y, z ; $\varepsilon = E - E_c$), 因此把例 1 结果中的

$(2m)^{3/2}$ 换成 $(8m_x m_y m_z)^{1/2}$ 即可。

再推广至有 S 个等价能谷的情况, 此时体积为 $(4/3)\pi k_x k_y k_z S$, 只需把例 1 结果中的 $(2m)^{3/2}$ 换成 $S(8m_x m_y m_z)^{1/2}$ 也可引入定义态密度有效质量 $m_d = (S^2 m_x m_y m_z)^{1/3}$ 则对于三维情况都有

有 $g(E) = \frac{4\pi(2m_d)^{3/2}}{h^3} \cdot \varepsilon^{1/2}$, 特别的, 对 S_i 来说, 有 6 个能谷, 等能面是旋转椭球,

有 $m_d = (6^2 m_L m_t^2)^{1/3}$, 对 Ge, $S=4$, $m_d = (4^2 m_L m_t^2)^{1/3}$ 。

例 3: 若在某半导体中形成二维电子气, 且 m 各向同性, 求 $g(E)$

对于二维情况, $g(\mathbf{k}) = 2/(2\pi)^2$, 若 m 各向同性, 则等能线是圆, 面积是 $2\pi k^2$ 因此 $N = 2\pi k^2$

$\times 2/(2\pi)^2$ 代入 $k = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}$ 得到 $N = \frac{4\pi(2m)}{h^2} \cdot \varepsilon$, 因此有 $g(E) = \frac{4\pi(2m)}{h^2}$ 是与 E 无关的常数。

§2.2 载流子浓度

◆ 导带电子浓度: $n = \int_{\text{导带}} g(E) f(E) dE$

两个近似:

① 玻尔兹曼统计近似: 室温下 $kT=0.026\text{eV}$ $E_c - E_v \gg kT$ 在此条件下有 $f(E) \approx e^{(E_c - E)/kT}$ 。

② 为了计算方便, 把积分上限延拓到 ∞ 。(因为随着 E 的增大, $f(E)$ 指数减小, E 趋近于 ∞ 时 $f(E)$ 很小, 可以忽略)

由上面两个近似, 得到:

$$n = \int_{E_C}^{\infty} e^{\frac{E_F - E}{kT}} \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot (E - E_C)^{1/2} dE \text{ 把常数提出积分式外得到}$$

$$n = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot e^{\frac{E_C - E_F}{kT}} \int_{E_C}^{\infty} e^{\frac{E - E_C}{kT}} (E - E_C)^{1/2} dE \text{ 设 } \xi = \frac{E - E_C}{kT}$$

$$\text{则上式} = \frac{4\pi(2mkT)^{3/2}}{h^3} \cdot \left(\int_0^{\infty} \xi^{1/2} e^{-\xi} d\xi \right) \cdot e^{\frac{E_C - E_F}{kT}} = N_C \cdot e^{\frac{E_C - E_F}{kT}}$$

其中 $N_C = 2 \cdot \frac{(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3}$ 称为有效导带密度，或导带等效态密度。上面的推导中用到了

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

◆ 同理可以由 $p = \int_{\text{价带}} g_v(E)[1-f(E)]dE$ (其中 $1-f(E) \approx e^{(E-E_F)/kT}$) 求得 $p = N_V e^{-(E_F - E_V)/kT}$

其中 $N_V = 2 \cdot \frac{(2\pi m_p kT)^{3/2}}{h^3}$ 称为价带等效态密度。

◆ 从上面的推导结论可以看出，半导体中的载流子浓度 n 和 p 都是 E_F 的函数，二者的乘积 $n \cdot p$ 却与 E_F 无关，对任一给定的半导体，在给定的温度下，电子空穴浓度的乘积总是衡定的。

$$\text{有 } n \cdot p = N_C N_V e^{-(E_C - E_V)/kT}$$

§3 本征载流子浓度

本征半导体：纯净的半导体中费米能级位置和载流子浓度只是由材料本身的本征性质决定的，这种半导体称为本征半导体。

本征激发：本征半导体中载流子只能通过把价带电子激发到导带产生，这种激发过程称为本征激发。

● 本征时由电中性条件得到 $n=p$ ，设此时的费米能级用 E_i 表示，则

$$N_C e^{-(E_C - E_i)/kT} = N_V e^{-(E_i - E_V)/kT}$$

$$\text{解此方程得到： } E_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{kT}{2} \cdot \ln \frac{N_V}{N_C}$$

$$\text{代入 } N_C、N_V \text{ 的表达式得到 } E_i = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3kT}{4} \cdot \ln \frac{m_p}{m_n}$$

由于空穴的有效质量要 m_p 大于电子的有效质量 m_n ，故 E_i 位于禁带中央偏向导带，但由于一般情况下第一项比第二项大得多，只有在温度较高的时候才考虑第二项的影响，所以一般情况下可以认为本征情况下费米能级位于禁带中央。

利用 E_i 的表达式即可求出本征载流子浓度 n_i 的表达式如下：（解的时候可以利用 $n=p$ 把 $n、p$ 的表达式相乘消去 E_i ，再开方即可得到 n_i ）

$$n_i = n = p = (N_C N_V)^2 e^{-\frac{E_C - E_V}{2kT}} = (N_C N_V)^2 e^{-\frac{E_g}{2kT}}$$

对于给定半导体, 室温下 n_i 是常数, 室温下 Si 的 $n_i = 1.5 \times 10^{10} \text{cm}^{-3}$, Ge 的 $n_i = 2.5 \times 10^{13} \text{cm}^{-3}$ 实际的半导体中总含有少量的杂质, 在较低温度下杂质提供的载流子往往超过本征激发, 但较高温度下, 本征激发将占优势, 把本征激发占优势的区域称为本征区。

对任何非简并 (简并的定义参考本章最后一节) 的半导体, 无论 E_F 的位置如何, 都有 $n \cdot p$ 等于常数。因此有: $n \cdot p = n_i^2$ 故可以利用 n_i 来表示载流子浓度 n 和 p 。表达式如下:

$$n = N_C e^{-(E_C - E_F)/kT} = N_C e^{-(E_C - E_i)/kT} \cdot e^{-(E_i - E_F)/kT} = n_i \cdot e^{-(E_i - E_F)/kT} = n_i \cdot e^{(E_F - E_i)/kT}$$

$$\text{同理可以得到: } p = n_i \cdot e^{(E_i - E_F)/kT}$$

由上面可以的两个公式可以看出, 若 E_F 在 E_i 上, 则 $n > p$ 半导体是 n 型; 反之 E_F 在 E_i 下, 则半导体是 p 型。

§4 非本征载流子浓度

在介绍非本征载流子浓度之前, 先介绍杂质能级的占有几率, 由于杂质上的电子状态并非互相独立, 电子占据施主能级的几率与费米分布函数略有不同。为 $f_D = \frac{1}{1 + \frac{1}{g_D} e^{\frac{E_D - E_F}{kT}}}$

其中 g_D 称为施主基态简并度, 对于类氢施主有 $g_D = 2$

类似地, 对于受主, 若以 $1 - f_A$ 表示空穴占据受主态的几率, 有

$$1 - f_A = \frac{1}{1 + \frac{1}{g_A} e^{\frac{E_F - E_A}{kT}}} \Rightarrow f_A = \frac{1}{1 + g_A e^{\frac{E_A - E_F}{kT}}} \text{ 同样称 } g_A \text{ 为受主基态简并度, 对于类氢受主}$$

有 $g_A = 2$ 。

§4.1 单一杂质能级情形

以施主杂质为例: 它的中性条件不再是 $n = p$ 而是

$$n = p + N_D - n_D \quad (N_D \text{ 是施主杂质浓度, } n_D \text{ 是施主杂质上电子浓度})$$

上式可以这样理解并记忆 (推荐使用第二种方法):

①价带向导带提供电子数为 p 杂质能级向导带提供电子数为 $N_D - n_D$, 故总电子数 $n = p + (N_D - n_D)$ 。

②导带有浓度为 n 的电子, 带浓度为 n 的负电荷, 价带有浓度为 p 的空穴, 带浓度为 p 的负电荷, 杂质能级为施主能级, 带有浓度为 $N_D - n_D$ 的正电荷, 由于半导体整体不带电, 所以正负电荷电量相等, 也可得到 $n = p + N_D - n_D$ 。

下面针对不同条件进行化简并计算:

一、弱电离情形:

弱电离情形相应于低温情形, 在低温条件下杂质大部分没有电离 $N_D - n_D \ll N_D$ 此时施主能级基本被电子占据, 费米能级必在 E_D 之上, 空穴浓度必定远远小于电子浓度, 电中性条件中可以略去 p , 变成 $n = N_D - n_D$ 。

代入 n 和 $N_D - n_D$ 的表达式:

$$\left\{ \begin{array}{l} n = N_C \cdot e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} \\ N_D - n_D = (1 - f_D)N_D = \frac{N_D}{1 + g_D e^{\frac{E_F - E_D}{kT}}} \approx \frac{N_D}{g_D} \cdot e^{-\frac{E_F - E_D}{kT}} \end{array} \right.$$

(上式最后一步中由于 $E_F - E_D \gg kT$ 故省略了分母中的 “1”)

$$\Rightarrow N_C \cdot e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}} = \frac{N_D}{g_D} \cdot e^{-\frac{E_F - E_D}{kT}}$$

解得:
$$\left\{ \begin{array}{l} E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_D}{g_D N_C} \\ n = \left(\frac{N_D N_C}{g_D} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_D}{2kT}} \text{ 其中 } \varepsilon_D = E_C - E_D \end{array} \right.$$

同理对于单一受主能级弱电离时有:

$$\left\{ \begin{array}{l} E_F = \frac{E_A + E_V}{2} - \frac{kT}{2} \ln \frac{N_A}{g_A N_V} \\ p = \left(\frac{N_A N_V}{g_A} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon_A}{2kT}} \text{ 其中 } \varepsilon_A = E_A - E_V \end{array} \right.$$

二、中等电离和强电离情形

以上弱电离的表达式只适用于 E_D 或 E_F 低于 E_A 若干 kT 的情况, 但由于 N_C 也与温度

有关, 温度稍高时, $g_D \cdot N_C$ 将超过 N_D , $\ln \frac{N_D}{g_D N_C}$ 为负, E_F 随温度升高而下降 (由于

等效态密度上升), 更高时, E_F 可以接近 E_D 此时就是我们要讨论的中等电离情况。

此时 $\frac{1}{1 + g_D e^{\frac{E_F - E_D}{kT}}}$ 不再与 $\frac{1}{g_D} e^{-\frac{(E_F - E_D)}{kT}}$ 近似, 因此要解方程:

$$\frac{N_D}{1 + g_D e^{\frac{E_F - E_D}{kT}}} = N_C e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$$

为方便解此方程, 去分母后把方程看成

关于 $g_D e^{\frac{E_F - E_D}{kT}}$ 的二元一次方程, 为表述方便设 $\chi = \left(\frac{N_C}{g_D N_D} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_C - E_D}{2kT}}$

解得:
$$\left\{ \begin{array}{l} E_F = E_D + kT \ln \left(\frac{\sqrt{4 + \chi^2} - \chi}{2g_D \chi} \right) \\ n = N_D \left[\frac{\chi}{2} (\sqrt{4 + \chi^2} - \chi) \right] \end{array} \right.$$

当 $\chi \gg 1$ 时, 化简得到
$$\left\{ \begin{array}{l} E_F = E_D + kT \ln \frac{1}{g_D \chi^2} = E_C + kT \ln \frac{N_D}{N_C} \\ n = N_D \end{array} \right.$$

因为此时 $n = N_D$, 相当于杂质完全电离, 故 $\chi \gg 1$ 就是强电离条件。

当 $\chi \ll 1$ 时化简得到的结果与弱电离情形时的表达式相同。 $\chi \ll 1$ 是弱电离条件。

三、 向本征区过渡

以上一和二的讨论中，我们假定了本征激发可以忽略，但在温度进一步增高时，本征激发不能忽略，而由于此时完全电离，有 $n_D=0$ 故中性条件简化为 $n=p+N_D$ ，代入 $p=n_i^2/n$ 得到关于 n 的二次方程，解得：

$$n = \frac{1}{2} N_D \left[1 + \left(1 + \frac{4n_i^2}{N_D^2} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \text{ 温度很高时 } \frac{n_i}{N_D} \gg 1, \text{ 此时约化为 } n = n_i$$

可见掺杂浓度越高，向本征情况过渡的温度越高，可以由 $n_D = n_i$ 来确定是否向本征转变，把年 n (或 p) $\gg n_i$ 时称为非本征情形。

微电子做电路要求半导体处在弱电离范围内，这样器件中载流子浓度随温度变化小，性能稳定。T 升高到本征激发开始时，器件将失效；最高温度由 E_g 决定， E_g 大的半导体称为高温半导体。（常见如 SiC, GaN）

四、全温区的变化曲线

1) 载流子浓度全温区变化曲线 ($\ln n_i - 1/T$ 曲线)

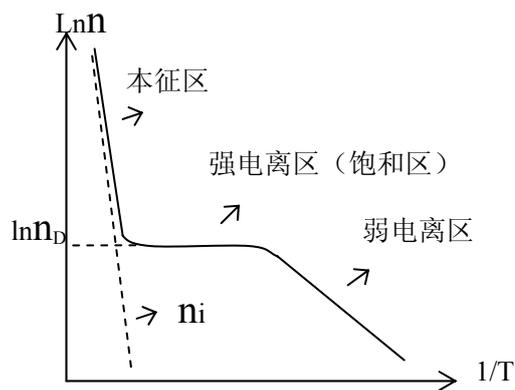
关于图像的解释：

在本征区 n 约化为 $n_i = (N_C \cdot N_V)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_g}{2kT}}$

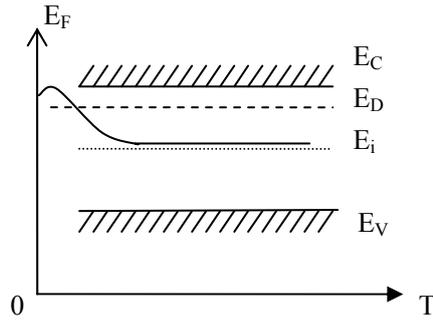
$$\ln n_i = \ln(N_C \cdot N_V)^{\frac{1}{2}} + \frac{-E_g}{2k} \cdot \frac{1}{T} \quad \text{斜率为 } -\frac{E_g}{2k} \text{。}$$

弱电离时 $n = n_D$ 曲线水平。

$$\text{弱电离时 } n_i = \left(\frac{N_D N_C}{g_D} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{E_D}{2kT}} \quad \text{斜率是 } -\frac{E_D}{2k}$$



2) 费米能级全温区变化曲线



温度较低时 (接近 0K) 杂质未电离, $E_F = \frac{E_C + E_D}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_D}{g_D N_C}$, 故 E_F 从 $(E_C + E_D)/2$

开始随温度升高而上升, 当 T 升高至某一值时 $\frac{N_D}{g_D N_C} < 1$ 后, E_F 开始随温度升高开始下

降, 当温度很高, 向本征区过渡时 E_F 开始接近 E_i 。

§4.2 补偿情形

补偿: 半导体中同时含有施主、受主杂质, 若施主杂质多于受主杂质 (或反之), 低温下, 施主 (受主) 上的电子 (空穴) 将首先填充受主 (施主) 能级, 这种情况称为补偿。浓度较小的杂质称为补偿杂质, ($N_{小}/N_{大}$) 称为补偿度。下面以 $N_D > N_A$ 情况为例进行讨论。

由于 $N_D > N_A$, 因此半导体是 N 型半导体, 载流子以电子为主。

电中性条件为: $n + N_A - p_A = p + N_D - n_D$ (p_A 表示受主能级上的空穴浓度)

上式可以这样理解并记忆:

①价带与施主向所提供的总电子数为 $p + N_D - n_D$, 它等于导带电子浓度 n 加上受主能级上的电子浓度 $N_A - p_A$ 。

②导带带有浓度为 n 的负电荷, 受主能级上带有浓度为 $N_A - p_A$ 的负电荷, 负电荷总量为 $n + N_A - p_A$; 而价带带有浓度为 p 的正电荷, 施主能级上带有浓度为 $N_D - n_D$ 的正电荷, 正电荷总量为 $p + N_D - n_D$; 正负电荷总量相等。

$\because N_D > N_A$, 因此 E_F 在 E_i 之上接近于 E_D , 故 p 和 p_A 很小, 可以忽略, 电中性条件化为 $n + N_A = N_D - n_D$, 下面针对不同情况化简计算。

一、当温度很低 $n \ll N_A$ 时

此时有 $N_A = N_D - n_D$ 把 $N_D - n_D = \frac{N_D}{1 + g_D e^{\frac{E_F - E_D}{kT}}}$ 代入, 解方程得到:

$$E_F = E_D + kT \ln \frac{N_D - N_A}{g_D N_A}, \quad n = N_C \cdot e^{-\frac{E_C - E_F}{kT}}$$

二、温度略高, 使得 $n \gg N_A$ 时

此时有 $n = N_D - n_D$ 与单一杂质时相同。

三、强电离时

此时 n_D 被忽略, $n = N_D - N_A$

四、一般情况下，电中性条件中每一项都不能忽略，此时可整理电中性条件得到

$$\frac{n(N_A + n)}{N_D - N_A - n} = \frac{N_C}{g_D} e^{-\frac{E_C - E_D}{kT}}$$

§4.3 多重能级杂质（主要是二重能级）

一、杂质在禁带上半部有二重能级

先发生第一重电离，此时与单一杂质相同，接着发生第二重电离。

二、杂质在禁带上半部有二重能级，但有受主杂质进行补偿

两种情况：

① $N_D < N_A < 2N_D$ 时，第一重能级上全部电子落入受主，第二重上部分电子落入受主。相当于浓度为 N_D 的，电离能为 ε_{D2} 的单重施主受浓度为 $N_A - N_D$ 的受主补偿。

② $N_A < N_D$ 相当于没有第二重能级，即第一重能级被 N_A 补偿。

三、禁带下半部分的施主能级，有受主满足 $N_D < N_A < 2N_D$

E_{D1} 能级上全部电子落入受主， E_{D2} 能级上部分落入，但将不起施主能级作用，而起受主作用。 E_{D2} 能级上有电子浓度为 $2N_D - N_A$ 。故有空穴 $N_D - (2N_D - N_A) = N_A - N_D$ ，相当于 N_D 个空穴，但有 $2N_D - N_A$ 个被补偿。

四、两性杂质（常见的如 Si 中的金 Au）

对 N 型，受主能级起作用；对 P 型，施主起作用。

以 Au 为例：

若 $N_{Au} > N_{杂质}$ ，起补偿作用。

若 $N_{Au} < N_{杂质}$ ，则杂质上多有电子（或空穴）都落入金的受主（施主）能级，使此处电子占有几率约为 0.5，将 E_F 钉扎在金的受主（或施主能级处）

§5 简并情形

E_F 在导带底（或价带顶）附近，或 E_F 进入导带（或价带）这两种情况统称为简并情形。

此时“玻尔兹曼近似”不再成立。

简并发生的原因：

①低温时， E_F 有接近 E_C 的时候。（参考费米能级全温区变化曲线）

②重掺杂（即掺杂浓度很高），此时杂质能级交叠，形成杂质带，能级展宽，使导带（或价带）与杂质带重叠，电离能为 0。

第四章 输运现象

§1 电导和霍尔效应的初级理论

§1.1 电导

● 简单分析

对载流子来说，电场使载流子加速，产生定向运动；而载流子之间的相互碰撞（也叫散射）使载流子失去定向运动；二者达到动态平衡产生平均速度 V_d ，有如下分析：

$$\therefore \mathbf{V} = \mathbf{V}_0 + \mathbf{a}t = \mathbf{V}_0 + \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot t$$

$$\therefore \mathbf{V}_d = \bar{\mathbf{V}} = \frac{\sum \mathbf{V}_i}{n} = \bar{\mathbf{V}}_0 + \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \bar{t}, \text{ 因为初始状态是无规律运动 } \bar{\mathbf{V}}_0 = 0$$

$$\therefore \mathbf{V}_d = \frac{e\mathbf{E}}{m} \cdot \bar{t} = \frac{e\bar{t}}{m} \cdot \mathbf{E}, \quad \bar{t} \text{ 称为平均自由运动时间, 用 } \tau \text{ 表示; 则 } \mathbf{V}_d = \frac{e\tau}{m} \cdot \mathbf{E}$$

● 动量弛豫分析

电场力使定向动量增加，单位时间增加动量 $ne\mathbf{E}$ ，散射使载流子失去定向动量，设散射几率为 P ，则单位时间失去 $nm\mathbf{V}_d \cdot P$ ，一般用 τ 表示 P 的倒数，在公式中用 $\frac{1}{\tau}$ 代替 P ；把 τ 称为动量弛豫时间。

$$\text{达到动态平衡, 系统动量变化率为 } 0, \text{ 即: } ne\mathbf{E} - nm\mathbf{V}_d \frac{1}{\tau} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{V}_d = \frac{e\tau}{m} \mathbf{E}$$

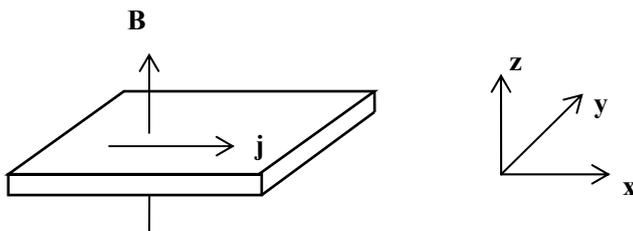
● 电导率与迁移率

电流密度 $\mathbf{j} = ne\mathbf{V}_d$ ，而由欧姆定律 $\mathbf{j} = \delta\mathbf{E}$ ， δ 称为电导率。

由上面的分析可知： \mathbf{V}_d 正比于 \mathbf{E} ，即 $\mathbf{V}_d = \mu\mathbf{E}$ ， μ 即称为迁移率，由 \mathbf{V}_d 的表达式可知

$$\mu = \frac{e\tau}{m}. \text{ 对半导体的电导率有 } \begin{cases} N \text{ 型: } \delta_n = ne\mu_n = \frac{ne^2\tau}{m_n} \\ P \text{ 型: } \delta_p = ne\mu_p = \frac{ne^2\tau}{m_p} \end{cases}$$

§1.2 霍尔效应



霍尔效应：如上图所示电流沿 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。

物理原因：以空穴为例，空穴的运动在磁场中受洛伦兹力，使运动发生偏转（-y 方向）产生横向电场，平衡洛伦兹力作用。

霍尔系数：横向电场正比于 $\mathbf{j}_x \cdot \mathbf{B}_z$ ，可写成 $E_y = R \cdot \mathbf{j}_x \cdot \mathbf{B}_z$ ；R 是比例系数，称为霍尔系数。

● 简单分析

以空穴为例：

$$e\mathbf{V}_d \mathbf{B} - e\mathbf{E}_y = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{E}_y = \mathbf{V}_d \cdot \mathbf{B}$$

$$\because \mathbf{j}_x = pe\mathbf{V}_d \quad \therefore \mathbf{E}_y = \mathbf{V}_d \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{pe} \mathbf{j}_x \cdot \mathbf{B} \Rightarrow R = \frac{1}{pe}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} N\text{型} & : \quad R = -\frac{1}{ne} \\ P\text{型} & : \quad R = \frac{1}{pe} \end{cases}$$

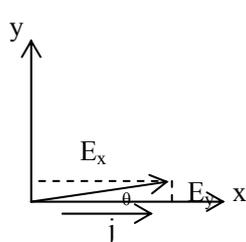
● 动量弛豫分析

也以空穴为例：先设 \mathbf{j}_x ， \mathbf{j}_y 均不为零， \mathbf{B}_z 沿正方向。由单位时间增加和失去的动量相等得：

$$\begin{cases} x\text{方向} : pe\mathbf{E}_x + pe\mathbf{V}_{dy}\mathbf{B}_z = \frac{pm\mathbf{V}_{dx}}{\tau} \\ y\text{方向} : pe\mathbf{E}_y - pe\mathbf{V}_{dx}\mathbf{B}_z = \frac{pm\mathbf{V}_{dy}}{\tau} \end{cases}$$

$$\text{由 } \mathbf{V}_{dy}=0 \Rightarrow \begin{cases} \mathbf{E}_y = \mathbf{V}_{dx} \cdot \mathbf{B}_z = \frac{1}{pe} \mathbf{j}_x \cdot \mathbf{B}_z \\ \mathbf{V}_{dx} = \frac{e\tau}{m} \mathbf{E}_x \end{cases}$$

- **霍尔角**：在有垂直磁场条件下，由前面分析可知，由于 y 方向存在电场，电流和电场不在同一方向上，如图（空穴为例）



$$\text{电场相对于电流的偏角 } \theta \text{ 有: } \operatorname{tg} \theta = \frac{\mathbf{E}_y}{\mathbf{E}_x}$$

$$\text{对 } \begin{cases} \text{空穴: } \operatorname{tg} \theta_p = \frac{e\mathbf{B}_z \tau}{m_p} \\ \text{电子: } \operatorname{tg} \theta_n = -\frac{e\mathbf{B}_z \tau}{m_n} \end{cases}$$

通常由于 θ 角很小，有 $\theta_p \approx \frac{e\mathbf{B}_z \tau}{m_p}$ ， $\theta_n \approx -\frac{e\mathbf{B}_z \tau}{m_n}$

§1.3 散射几率各向异性的情况

在上面的讨论中，我们假设各向同性的情况，此时 $P = \frac{1}{\tau}$ 中的动量弛豫时间 τ 等于简单分析中的平均自由运动时间。若散射几率各向异性，即 $P = P(\theta, \varphi)$ ，则上面讨论中的 P 应理解为 $\mathbf{P} = \iint P(\theta, \varphi)(1 - \cos \theta) d\Omega$ 此时的动量弛豫时间 $\tau = \frac{1}{\mathbf{P}}$ 不再等于平均自由运动时间。

(*注: 其中 d_{Ω} 表示极角为 θ , φ 的体积元)

§1.4 τ 和能量有关的情况

对于实际情况, τ 是能量的函数, 对于不同能量值的载流子来说, 散射几率或者说是动量弛豫时间是不相同的, 即 $\tau = \tau(E)$ 此时 $\mu = \frac{e\tau}{m}$ 中的 τ 应换成 τ 对能量的平均值 $\langle \tau(E) \rangle$

$$\langle \tau(E) \rangle = \frac{\int \tau(E)g(E)f(E)d_E}{n} \quad \text{其中 } g(E) \text{ 是能量态密度 } f(E) \text{ 是费米函数。}$$

$$\text{对霍尔系数 } R = \frac{1}{pe} \text{ 应改为 } R = \frac{1}{pe} \cdot \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} = \frac{r_H}{pe}, \quad \text{其中 } r_H = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2} \text{ 称为霍尔因子,}$$

当 τ 与 E 无关时有 $r_H=1$ 。

§1.5 电导率(δ)和霍尔系数(R)的应用

① 实验上通过霍尔系数的正负可以确定载流子类型。(P 型 R 为正, N 型 R 为负)

② 通过霍尔系数的大小可以确定载流子的浓度 (利用公式 $R = \frac{1}{pe}$), 若在饱和区, 载

流子浓度即掺杂浓度。

③ 可以测量 R 随温度的关系, 从而得到载流子浓度与温度的函数关系, 从而确定杂质的电离能。

④ 霍尔系数和电导率同时测量可以得到载流子的迁移率。(实际上 $|R \cdot \delta| = r_H \cdot \mu = \mu_H$ 称为霍尔迁移率)

§2 载流子的散射

载流子的散射: 我们所说的载流子散射就是晶体中周期场的偏离, 包括两种散射, 即电离杂质散射和晶格振动散射。

§2.1 电离杂质散射

◇ **定义:** 载流子受到电离杂质中心库仑作用引起运动方向的变化。

◇ **特点:** ① 散射几率 P 是各向异性的。

② 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, 此时迁移率由电离杂质散射决定, 由公式 $\mu = e\tau/m$ 得到 $\mu \propto T^{3/2}$

§2.2 晶格散射

格波: 晶格原子的本征运动称为格波。

在金刚石和闪锌矿结构的半导体中, 每个原胞有两个原子对应同一个 \mathbf{q} 值 (\mathbf{q} 表示格波

的波矢，方向是波传播的方向，大小等于波长分之 2π) 有六种震动方式：三个声学波和三个光学波。

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，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。

晶格散射对迁移率的影响：对于 Si, Ge 等半导体只考虑纵声学波对电子的散射。计算表明：纵声学波晶格散射的散射几率和温度的 $2/3$ 次方成正比，与电离杂质散射相反，有 $\mu \propto T^{-3/2}$ 。

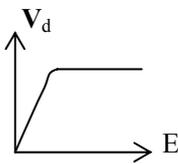
§2.3 迁移率与温度的关系&高电场下的迁移率

在同时存在几种散射机制时，总的散射几率应为各散射几率之和，由前面的分析可以得到： $P=P_I+P_L$ ，其中 P_I 和 P_L 代表电离杂质散射几率和纵声学波散射几率；对迁移率则有

$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_I} + \frac{1}{\mu_L}$ 其中 μ_I μ_L 分别表示电离杂质散射和晶格散射单独起作用时的迁移率，由于

$\mu_I \propto T^{3/2}$ $\mu_L \propto T^{-3/2}$ 故低温时迁移率 μ 正比于温度的 $3/2$ 次方，此时 $\mu \approx \mu_I$ ，温度高时迁移率 μ 反比于温度的 $3/2$ 次方，此时 $\mu \approx \mu_L$ 。

高电场下的迁移率



理论上由 $V_d = \mu E$ ， V_d 应随 E 线形增长，但实际测得曲线如左图：

即 E 很高的时候 μ 下降，最终漂移速度饱和，此时速度称为饱和漂移速度。

解释：高电下载流子漂移速度接近电子热运动速度，使载流子的有效温度增加，因此 μ 下降，使得 V_d 最终趋于饱和。

§3 电导的分布函数理论

在本章第一节中介绍的电导和霍尔效应的初级理论虽然简单，但是并不严格。较为严格的处理方法是求解载流子在外加电场下的非平衡分布函数。本章就介绍电导的分布函数理论，霍尔效应的分布函数理论在本讲义中不再讨论，有兴趣的话可以参考教材。

§3.1 非平衡分布函数

在没有外电场，半导体平衡时电子遵从费米分布函数， E 也是 \mathbf{k} 的函数，此时的分布函数为平衡分布用 f_0 表示。在 \mathbf{k} 点处体积元内的电子数 dn 有： $d_n = f_0[E(\mathbf{k})] \cdot \frac{2V}{(2\pi)^3} d_k$ 对于

单位体积晶体（即 $V=1$ ）计算电流的公式为： $j = -e \int \mathbf{V}(E) f_0[E(\mathbf{k})] \cdot \frac{2}{(2\pi)^3} d_k$

由于在 \mathbf{k} 和 $-\mathbf{k}$ 处有 $\mathbf{V}(\mathbf{k}) = -\mathbf{V}(-\mathbf{k})$, $E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k})$, 因此上面的求电流的积分为 0, 就是说明没有外场时电流为 0。

但是在有外场存在的条件下, 电子定向运动使分布函数偏离平衡分布, 而碰撞 (或称散射) 使电子失去定向运动; 动态平衡时达到非平衡分布函数 $f(\mathbf{k})$ 相应的电流有

$$j = -e \int \mathbf{V}(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) \cdot \frac{2}{(2\pi)^3} d_{\mathbf{k}} \text{ 只要求出 } f(\mathbf{k}) \text{ 即可。}$$

§3.2 玻尔兹曼积分微分方程

为求得存在外场时的分布函数 $f(\mathbf{k})$, 要解下面的玻尔兹曼积分微分方程。(与教材所给的方程形式上略有不同, 是忽略为 0 的项后得到的简化形式, 没有本质差别)

$$\nabla_{\mathbf{k}} f \cdot \frac{d_{\mathbf{k}}}{d_t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$$

等式的左边是漂移项, 等式的右边是碰撞项。

为解此方程引入弛豫时间近似, 用弛豫时间表示碰撞项, 即把等式右边的 $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c$ 换成 $-\frac{f - f_0}{\tau(\mathbf{k})}$ 其中 $\tau(\mathbf{k})$ 是弛豫时间。

在弱场近似的条件下 (即欧姆定律适用范围内), 求得电导率 δ 为一张量, 若各项同性, 有 $\delta = -\frac{2e^2}{(2\pi)^3} \int \tau v^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} d_{\mathbf{k}}$ (详细解法请参考教材)

与初级理论的 $\delta = \frac{ne^2}{m} \tau$ 比较, 有其中的 τ 对应于

$$-\frac{2}{3} \cdot \frac{\int \tau m v^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{1}{(2\pi)^3} d_{\mathbf{k}}}{2 \int f_0 \frac{d_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3}} \quad (\text{得到此式利用了 } 2 \int f_0 \frac{d_{\mathbf{k}}}{(2\pi)^3} = n)$$

写作 $\langle \tau \rangle$ 。再利用公式 $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2$ 把 $\langle \tau \rangle$ 中的积分换成关于 ε 的积分, 得到

$$\langle \tau \rangle = -\frac{2}{3} \cdot \frac{\int_0^\infty \tau \varepsilon^{\frac{3}{2}} \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{1}{(2\pi)^3} d_{\varepsilon}}{\int_0^\infty \varepsilon^{\frac{1}{2}} f_0 \frac{d_{\varepsilon}}{(2\pi)^3}}$$

第五章 过剩载流子

§1 过剩载流子及其产生与复合

过剩载流子：外界作用下（光照，pn 结注入等），可以使载流子浓度增加，把数量超过热平衡载流子浓度的载流子称为过剩载流子。

此时载流子浓度可以表示为：

$$\begin{cases} n = n_0 + \Delta n \\ p = p_0 + \Delta p \end{cases} \quad \text{其中 } \Delta n, \Delta p \text{ 称为过剩载流子, } p_0, n_0 \text{ 为热平衡载流子。}$$

通常情况下半导体中有 $\Delta n = \Delta p$ ，且大多数情况下有下面关系：

$$\underline{\text{少子热平衡浓度} \ll \text{过剩载流子浓度} \ll \text{多子热平衡浓度}}$$

§1.1 过剩载流子的复合

半导体热平衡时是动态平衡，载流子的产生率等于复合率；但当存在过剩载流子时，复合率要大于产生率，最后是载流子全部复合，达到平衡。因此存在过剩载流子时定义：

$$\text{净复合率} = \text{复合率} - \text{产生率}$$

过剩载流子的复合就是指净复合率。

值得注意的是，过剩载流子的净复合率可以为负数，表示产生率大于复合率，即对应载流子浓度未达到热平衡载流子浓度的情况。

§1.2 描述过剩载流子复合的参数 —— 寿命

通常过剩载流子的净复合率与过剩载流子的浓度成正比，一般把净复合率表达为：净复合率 = $\Delta n / \tau$ （或 $\Delta p / \tau$ ）即：

$$\frac{d_{\Delta n}}{d_t} = -\frac{\Delta n}{\tau} \quad \Rightarrow \quad \Delta n = (\Delta n)_0 e^{-t/\tau}, \quad \text{其中 } (\Delta n)_0 \text{ 表示初始时刻的过剩载流子浓度,}$$

“ τ ”实际上是过剩载流子的平均存在时间，称为寿命。下面证明。

$$\text{在 } d_t \text{ 时间内复合的载流子总数为： } \Delta n(t) \cdot \frac{1}{\tau} d_t, \quad (\text{即复合速率乘以时间})$$

$\therefore \Delta n(t) = (\Delta n)_0 \cdot e^{-t/\tau}$ ，这些 d_t 时间内复合的载流子的存在时间都是 t ，因此，平均存在时

$$\text{间为 } \frac{\int_0^{\infty} t \cdot (\Delta n)_0 e^{-t/\tau} \cdot \frac{1}{\tau} d_t}{(\Delta n)_0} = \tau \quad \text{证毕。}$$

又把 $1/\tau$ 记为 P 称为载流子的复合几率， τ 实际上是对材料和工艺敏感的。

*§ 光电导的衰变 —— 一种测量寿命的方法

光照产生电子空穴对，载流子浓度增加，因此电导率增加。

$$\Delta\delta = \Delta n e \mu_n + \Delta p e \mu_p = e \Delta n \cdot (\mu_n + \mu_p)$$

去掉光照光电导衰变有 $\Delta\delta = \Delta\delta(0) \cdot e^{-t/\tau}$ ，通过测量 $\Delta\delta(t)$ 即可求出 τ 。

§1.3 准费米能级

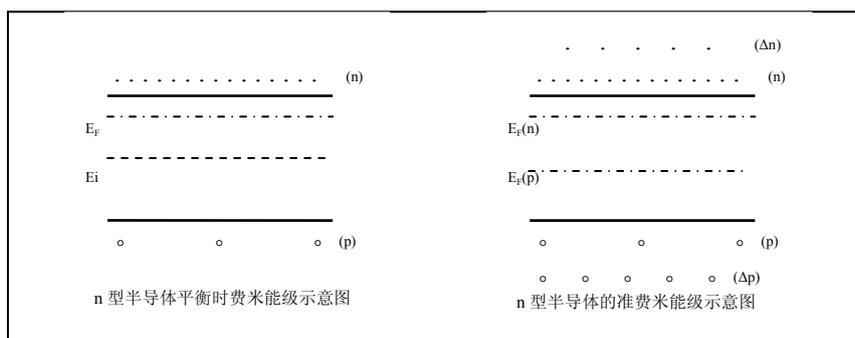
存在电子空穴对的时候，导带与价带之间处于非平衡状态， $n_0 \cdot p_0 = n_i^2$ 不再成立，因此不再存在统一的费米能级；但导带电子处于平衡状态，价带空穴也处于平衡状态，这种状态称为准平衡，导带和价带有各自不等的费米能级，称为**准费米能级**。

此时的导带电子之间可以用费米分布函数表示为 $n = N_C e^{-[E_c - E_f(n)]/kT}$

其中的 $E_f(n)$ 是导带电子的准费米能级；同理对价带空穴有

$$p = N_V e^{-[E_v - E_f(p)]/kT} \quad \text{其中 } E_f(p) \text{ 是价带空穴的准费米能级。}$$

对多子来说，过剩载流子数量可以忽略，因此多子的准费米能级与平衡时的费米能级 E_F 重合，但对少子，过剩载流子的存在使少子浓度变化显著，因此准费米能级变化也非常显著，如下图所示。



§2 载流子的复合理论

● 直接复合与间接复合

- ◆ **直接复合**：导带电子直接落入价带的空状态。
- ◆ **间接符合**：导带电子经过一个中间状态跃迁到价带的空状态。

§2.1 直接复合的唯象理论

直接复合的**复合率**用 R 表示，正比于 $(n \cdot p)$ ，可以写成 $R = r \cdot n \cdot p$ 。其中 r 称为直接复合系数。

直接复合的**产生率**用 G 表示，与 n 和 p 都无关，写成 $G = G_0$ 。在热平衡的时候，载流子的产生率和复合率相等，即有：

$$G = G_0 = R_0 = r \cdot n_0 \cdot p_0 = r \cdot n_i^2$$

则 净复合率 $= R - G = r(np - n_i^2)$

$$= r[(n_0 + p_0)\Delta n + (\Delta n)^2] \quad (\text{利用了 } n = n_0 + \Delta n, \quad p = p_0 + \Delta p, \quad \Delta n = \Delta p)$$

$$=r(n_0+p_0+\Delta n) \cdot \Delta n$$

由前面讨论的净复合率 $=\Delta n/\tau$ ，得到 τ 的表达式为：

$$\tau = \frac{1}{r(n_0+p_0+\Delta n)} \quad , \quad \text{对 N 型材料有 } n_0 \gg \Delta n \gg p_0, \quad \text{则有 } \tau = \frac{1}{rn_0}$$

§2.2 直接复合的微观机制

直接复合过程需要释放大约 E_g 大小的能量，有三种主要方式：

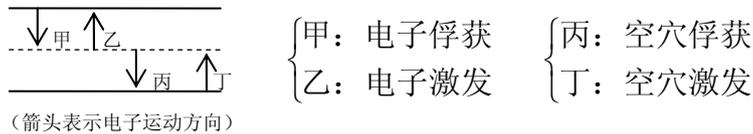
- 辐射跃迁过程**：通过发射光子使能量下降，电子落到价带复合。
- 发射声子的跃迁过程**：同时发射多个声子使能量下降，也称热跃迁。
- 俄歇跃迁**：将能量传给另外一个载流子，使另外电子上升到较高能量的跃迁。

在间接禁带半导体中，主要是间接复合；而在直接禁带半导体中以直接复合中辐射复合为主；俄歇过程只在窄禁带直接禁带半导体中占主要地位。因此常用的半导体 Ge, Si 中以间接跃迁为主，而 GaAs 以直接跃迁为主。

§2.3 间接复合的唯象理论（复合中心理论）

过剩载流子除了直接复合，还可以通过杂质或缺陷中心完成复合，在多数半导体中，这种过程是复合的主要过程。能有效地起复合作用的杂质或缺陷称为**复合中心**，半导体中有效复合中心通常是一些深能级杂质。

①四个基本过程：



1. 甲过程

把单位时间俘获电子数定义为电子俘获率，用 C_n 表示，有：

$$C_n = r_n \cdot n \cdot (N_t - n_t)$$

其中 N_t ：复合中心浓度； n_t ：俘获中心电子浓度； $(N_t - n_t)$ 即表示复合中心的空穴浓度； r_n ：电子俘获系数

即单位时间从导带俘获的电子数正比于导带电子浓度，正比于复合中心的空穴浓度，比例系数是 r_n

2. 乙过程

把单位时间激发的电子数定义为电子激发率，用 E_n 表示，有： $E_n = s_n \cdot n_t$

其中 s_n 是比例系数

3. 丙过程

类似定义空穴俘获率 C_p ，有： $C_p = r_p \cdot p \cdot n_t$ ， r_p 是空穴俘获系数

4. 丁过程

类似定义空穴激发率 E_p ，有： $E_p = s_p \cdot (N_t - n_t)$ ， s_p 是空穴激发系数

上述过程中定义的比例系数曰 r_n, s_n, r_p, s_p 可以认为是与 n, p 无关的常数，但 r_n 和 s_n, r_p 和 s_p

之间是相联系的，当热平衡时，甲、乙两过程平衡，即 $C_n=E_n$ ，丙、丁两过程平衡，即 $C_p=E_p$

$$\text{由 } C_n=E_n \Rightarrow r_n \cdot N_c e^{-\frac{E_c-E_F}{kT}} \cdot \frac{N_t e^{-\frac{E_t-E_F}{kT}}}{1+e^{-\frac{E_t-E_F}{kT}}} = s_n \frac{N_t}{1+e^{-\frac{E_t-E_F}{kT}}}$$

$\Rightarrow s_n = r_n \cdot n_1$ 其中 $n_1 = N_c e^{-\frac{E_c-E_t}{kT}}$ 表示费米能级位于复合中心能级时(即 $E_F=E_t$ 时)导带的电子浓度。同理有:

$$s_p = r_p \cdot p_1 \quad \text{其中 } p_1 = N_v e^{-\frac{E_t-E_v}{kT}} \text{ 表示费米能级位于复合中心能级时(即 } E_F=E_t \text{ 时)}$$

价带的空穴浓度。

②稳态(存在过剩载流子)

存在过剩载流子时电子的净复合率= C_n-E_n ；空穴的净复合率= C_p-E_p

稳态时有电子的净复合率与空穴的净复合率相同，称为电子空穴对的净复合率，即净复合率= $C_n-E_n=C_p-E_p$

由 $C_n-E_n=C_p-E_p$ 得到:

$$r_n \cdot n \cdot (N_t - n_1) - r_n \cdot n_1 \cdot n_t = r_p \cdot p \cdot n_t - r_p \cdot p_1 \cdot (N_t - n_1)$$

从中解得 $n_t = \frac{N_t(r_n \cdot n + r_p \cdot p_1)}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)}$ 代回到净复合率的表达式得到:

$$\text{净复合率} = C_n - E_n = \frac{N_t \cdot r_n \cdot r_p}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)} (n \cdot p - n_1 \cdot p_1)$$

$\because n_1 \cdot p_1 = n_i^2$ ，代入上式得到净复合率的最终表达式:

$$\text{净复合率} = \frac{N_t \cdot r_n \cdot r_p}{r_n(n + n_1) + r_p(p + p_1)} (n \cdot p - n_i^2)$$

由净复合率的表达式我们可以看出复合中心通常是深能级杂质，因为对浅施主能级杂质来说， n_1 很大；对浅受主能级杂质来说， p_1 很大。结果就是对于任何浅能级杂质来说，都能造成净复合率表达式中分母很大，从而导致净复合率很小，故一般情况下浅能级杂质不能起到复合中心的作用。(但由于 n_1 和 p_1 随温度下降而减小，故在极低温条件下，浅能级杂质也能起到复合中心的作用)

③小信号下的寿命

小信号即过剩载流子浓度远远小于多子浓度的情况，此时有:

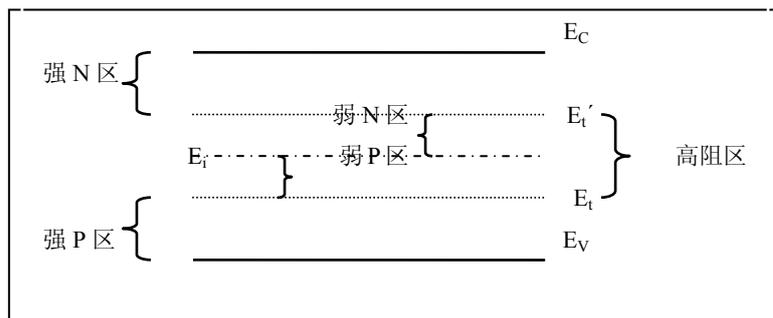
$$n \cdot p - n_i^2 = (n_0 + \Delta n) \cdot (p_0 + \Delta p) - n_i^2 \approx (n_0 + p_0) \cdot \Delta n$$

$$\text{净复合率} = \frac{\Delta n}{\tau} \text{ 则 } \tau = \frac{r_n(n_0 + n_1) + r_p(p_0 + p_1)}{N_t \cdot r_n \cdot r_p \cdot (n_0 + p_0)} = \frac{\frac{(n_0 + n_1)}{N_t \cdot r_p} + \frac{(p_0 + p_1)}{N_t \cdot r_n}}{n_0 + p_0}$$

根据 E_F 在禁带中的位置来对寿命进行化简:

设 E_t 位于禁带下半部， E_t' 是其关于 E_i 对称的能级，则 E_t 和 E_t' 把禁带分为 3 部分——

强 N 区、强 P 区和高阻区。如下图所示， E_i 又把中间的高阻区划分为弱 N 区和弱 P 区。下面分区进行说明。



E_F 所属区域	n_0, p_0, n_1, p_1 大小关系	化简的寿命
强 N 型区	$n_0 > p_1 > n_1 > p_0$	$\tau = \frac{1}{N_t r_p}$
高阻区	弱 N 型区	$\tau = \frac{1}{N_t r_n} \cdot \frac{p_1}{n_0}$
	弱 P 型区	$\tau = \frac{1}{N_t r_n} \cdot \frac{p_1}{p_0}$
强 P 型区	$p_0 > p_1 > n_1 > n_0$	$\tau = \frac{1}{N_t r_n}$

§3 载流子扩散

若载流子分布存在浓度梯度，则产生扩散流。对简单的一维扩散，有：

电子的扩散流： $J_n = -D_n \frac{d_n}{d_x}$ ，其中比例系数 D_n 称为电子扩散系数。

空穴的扩散流： $J_p = -D_p \frac{d_p}{d_x}$ ， D_p 称为空穴扩散系数。

对三维来说有扩散流公式：
$$\begin{cases} J_n = -D_n \nabla n \\ J_p = -D_p \nabla p \end{cases}$$

由扩散流所产生的电流为：
$$\begin{cases} \text{电子扩散电流: } -e(-D_n \frac{d_n}{d_x}) = eD_n \frac{d_n}{d_x} \\ \text{空穴扩散电流: } e(-D_p \frac{d_p}{d_x}) = -eD_p \frac{d_p}{d_x} \end{cases}$$

总电流为扩散电流和漂移电流之和，因此有：

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{总电子电流: } j_n = eD_n \frac{d_n}{d_x} + ne\mu_n E \\ \text{总空穴电流: } j_p = -eD_p \frac{d_p}{d_x} + pe\mu_p E \end{array} \right.$$

对于半导体中的少数载流子来说，其运动的主要形式是扩散运动，漂移流很小，可以略去；而对于多子来说，扩散流和漂移流都要考虑。

§3.1 一维稳定扩散（以 N 型半导体为例）

面光照产生过剩载流子 $(\Delta p)_0$ 向体内扩散，边扩散边复合，如光照稳定，可形成稳定分布 $\Delta p(x)$ ，达到稳定状态后有：积累速率=净复合速率

$$\because p=p_0+\Delta p, \text{ 而 } p_0 \text{ 是常数 } \therefore d_p = d_{\Delta p} \quad \therefore \text{扩散流为: } j = -D_p(d_{\Delta p}/d_x)$$

$$\text{故积累率 } A = -\nabla \cdot j = D_p \frac{d^2 \Delta p}{d_x^2}, \text{ 而复合率 } R = \Delta p/\tau, \quad (\text{其中 } \tau \text{ 为寿命})$$

$$\text{从而得到微分方程: } D_p \frac{d^2 \Delta p}{d_x^2} = \frac{\Delta p}{\tau}, \text{ 其通解为 } \Delta p(x) = A \cdot e^{-\frac{x}{L_p}} + B \cdot e^{\frac{x}{L_p}}$$

其中 $L_p = \sqrt{D_p \tau}$ ，称为扩散长度。代入边界条件：

1. $x \rightarrow \infty$ 时 $\Delta p = 0$ ，得到 $B = 0$
2. $x = 0$ 时 $\Delta p = (\Delta p)_0$ ，得到 $A = (\Delta p)_0$

综上，得出微分方程的解是 $\Delta p(x) = (\Delta p)_0 e^{-\frac{x}{L_p}}$ 扩散流为 $J_p = \frac{D_p}{L_p} (\Delta p)_0 e^{-\frac{x}{L_p}} = \frac{D_p}{L_p} \Delta p$ ，容易

求出 $x = L_p$ 处空穴浓度降为表面处的 $1/e$ ， L_p 代表过剩空穴深入样品的平均距离。

$\therefore J_p = \frac{D_p}{L_p} \Delta p$ 如同 Δp 以 $\frac{D_p}{L_p}$ 扩散速度运动的结果， \therefore 称 $\frac{D_p}{L_p}$ 为扩散速度。

§3.2 表面过剩载流子浓度 $(\Delta p)_0$

光产生率 G ：由于光照每秒产生的过剩载流子浓度。（由光源决定）

$$\text{稳定时 } G = (\Delta p)_0 \frac{D_p}{L_p} \Rightarrow (\Delta p)_0 = G / \left(\frac{D_p}{L_p} \right)$$

若考虑表面复合有： $G = (\Delta p)_0 \frac{D_p}{L_p} + S_p (\Delta p)_0$ ，其中第二项表示表面复合损失。

$$\text{则有 } (\Delta p)_0 = G / \left(\frac{D_p}{L_p} + S_p \right)$$

§3.3 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。（我们前面讨论的情况就是这种）

§4 本章其它相关内容

- 爱因斯坦关系（扩散系数与迁移率的关系）

公式： $D = \frac{kT}{e} \mu$

成立条件：平衡（即无电流）、非简并（推导时用到了非简并时电子浓度）

证明：平衡不均匀的半导体中，扩散电流与漂移电流相互抵消，即扩散流与漂移流之和为0。

设某点 $x=0$ 处的电子浓度为 n_0 ，把该点电势定为 0，则其它点电子浓度为 $n(x) = n_0 \cdot e^{\frac{eV(x)}{kT}}$ ，

∴ 扩散流为 $-\frac{eD_n}{kT} n(x) \frac{dv}{dx} = \frac{e}{kT} D_n \cdot n(x) \cdot E$ ，

∴ 扩散电流为 $(-e) \frac{e}{kT} D_n \cdot n(x) \cdot E$

由于扩散电流与漂移电流之和为零，有 $ne\mu_n E = ne(\frac{e}{kT} D_n) E$

故得到 $D_n = \frac{kT}{e} \mu_n$ ，同理有 $D_p = \frac{kT}{e} \mu_p$ ，综上，公式得证。

- 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。

- 陷阱效应

在半导体中，杂质和缺陷除了起施主、受主和复合中心的作用，在有些情况下，还能起陷阱作用：即陷阱中心能显著俘获并收容其中一种过剩载流子，这种情况下，代替 $\Delta p = \Delta n$ 有 $\Delta p = \Delta n + \Delta n_t$

Δn_t 表示为过剩载流子引起中心上的电子改变量。

第六章 pn 结

§1 pn 结及其伏安特性

基本特性：单向导电性，p 接 (+) 时称为正向导通，p 接 (-) 时称为反向截止。

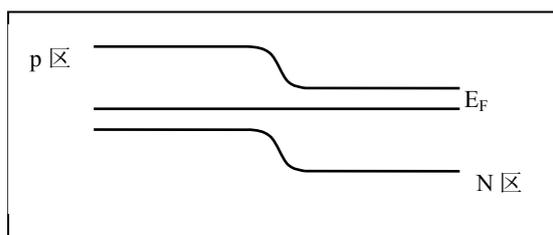
物理作用：pn 结正向注入过剩少数，反向抽取少数作用

§1.1 平衡 pn 结

pn 结实际上是一种非均匀半导体，因此热平衡时各处费米能级在同一水平上，这是依靠在界面附近形成空间电荷区和自建电场实现的。

①空间电荷区

对于 pn 结，n 区电子浓度高于 p 区，电子向 p 区扩散，同样 p 区空穴也要向 n 区扩散，使界面 n 型一侧带有正点，p 型一侧带负电，形成电场，称为自建场。从而阻止载流子向对方扩散，自建场使 n 区能带连同费米能级相对 p 区下降，直到使 E_F 水平，形成势垒。



自建势用 V_D 表示：

$$V_D = (E_{Fn} - E_{Fp})/e$$

$$= [(E_{Fn} - E_i) + (E_i - E_{Fp})]/e$$

$$\therefore n = n_i e^{\frac{E_F - E_i}{kT}}$$

$$\therefore E_{Fn} - E_i = kT \ln \frac{n_n^0}{n_i}, \quad \text{同理 } E_i - E_{Fp} = kT \ln \frac{p_p^0}{n_i}$$

因此得出 $V_D = \frac{kT}{e} \ln \frac{n_n^0 p_p^0}{n_i^2}$ ，(其中 n_n^0, p_p^0 表示平衡时 n 区和 p 区多子浓度)

在强电离温度范围内 $n_n^0 = N_D$ ， $p_p^0 = N_A$

②载流子的漂移和扩散运动的平衡

自建势的存在使平衡 pn 结中载流子的漂移运动相抵消，即在空间任何点，对电子，空穴都有漂移电流与扩散电流相抵消。

③广义欧姆定律

对于均匀半导体，有

$$j = ne\mu_n \left(-\frac{dv}{dx} \right) \quad \dots\dots \text{式①}$$

由于费米能级与带边之间距离恒定（均匀半导体，因此 E_F 相对 E_i 的位置恒定）因此上面①式等价于

$$j = n\mu_n \left(\frac{dE_F}{dx} \right) \quad \dots\dots \text{式②}$$

对于非均匀半导体，由于存在扩散电流，式(1.1)不再成立，但是可以证明，漂移电流和扩散电流之和仍可用式(1.1)表示，因此也称式(1.1)为广义欧姆定律表达式。下面是证明。

证明：非均匀半导体电流可以表示为 $j = n\mu_n \frac{dE_F}{dx} + eD_n \frac{dn}{dx}$

由于 $n(x) = N_c e^{-\frac{E_C(x) - E_F(x)}{kT}} \Rightarrow \frac{dn}{dx} = \frac{n}{kT} \cdot \left(-\frac{dE_C}{dx} - \frac{dE_F}{dx}\right)$

再代入 $D_n = \frac{kT}{e} \mu_n$ 得到 $j = n\mu_n \left(\frac{dE_F}{dx}\right)$ ，得证。

广义欧姆定律得一些推论

在电流密度恒定时，在载流子密度最低的区域费米能级变化最大。

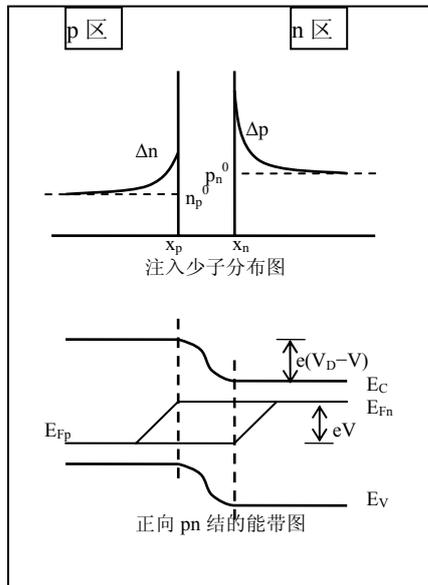
在 pn 结中，若加偏压，则电压将体现在与势垒相联系得高阻区。

§1.2 pn 结的伏安特性

pn 结的伏安特性概括起来就是**单向导电性**，若在 pn 结上加正向电压，电压将主要降在势垒区，使势垒降低，扩散电流将超过漂移电流而形成正向电流，由于这是驱使多子向对方流动，故可形成较大的正向电流；若施加反向电压，势垒增高，电场增强，漂移电流超过扩散电流形成反向电流，但由于这时是驱使少数流向对方，电流来源受到严重限制，因此反向电流通常很小。下面详细分析正反偏压下的情况。

① 正向偏压

正向偏压时，注入的少数载流子依靠在势垒两侧建立的少数载流子浓度梯度向纵深扩散，稳定注入下，



少数载流子电流与第五章中一维扩散问题相同，由于注入少数载流子存在，故势垒区附近不存在电子和空穴的统一费米能级（以后用 E_{Fn} 和 E_{Fp} 表示空穴和电子的准费米能级，用 E_{Fn} 和 E_{Fp} 表示很远时统一的费米能级）

在任一点，电流可以写作通过同一截面的电子电流和空穴电流之和，有 $j = j_p(x) + j_n(x)$

因此可以利用 x_p 点的电流来表示通过 pn 结的电流，即

$$j = j_p(x_p) + j_n(x_p)$$

假设电子和空穴通过空间电荷区时不发生复合，则有

$$j_p(x_p) = j_p(x_n) \quad \therefore j = j_p(x_n) + j_n(x_p)$$

由第五章一维扩散结论得到

$$j = \frac{eD_p}{L_p} \Delta p(x_n) + \frac{eD_n}{L_n} \Delta n(x_p)$$

由前面的推论可知费米能级主要变化在载流子浓度低的地方，又因为空间电荷区相对于电子空穴扩散长度很短，故可以认为准费米能级是在势垒区以外降落的，据此得到上面的能带图。

由能带图可知

$$n(x_p) = n_p^0 \cdot e^{\frac{eV}{kT}}, \quad p(x_n) = p_n^0 \cdot e^{\frac{eV}{kT}}$$

$$\therefore \Delta p(x_n) = p(x_n) - p_n^0 = p_n^0(e^{\frac{eV}{kT}} - 1), \text{ 同理 } \Delta n(x_p) = n_p^0(e^{\frac{eV}{kT}} - 1)$$

$$\text{因此得到 } j = e\left(\frac{D_p p_n^0}{L_p} + \frac{D_n n_p^0}{L_n}\right) \cdot (e^{\frac{eV}{kT}} - 1)$$

$$\text{设 } e\left(\frac{D_p p_n^0}{L_p} + \frac{D_n n_p^0}{L_n}\right) = j_0, \text{ 则 } j = j_0 \cdot (e^{\frac{eV}{kT}} - 1)$$

- j_0 还有几种等价表达式，在上面 j_0 的表达式中代入 L_p, L_n 的表达式 $L = \sqrt{D\tau}$ ，就得

$$\text{到 } j_0 = e\left(\frac{L_p p_n^0}{\tau_p} + \frac{L_n n_p^0}{\tau_n}\right)$$

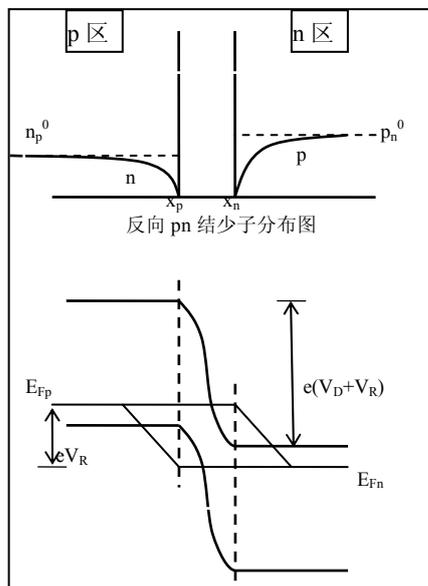
$$\text{又由于 } p_n^0 \cdot n_n^0 = p_p^0 \cdot n_p^0 = n_i^2, \therefore j_0 \text{ 又可以写作 } j_0 = e\left(\frac{L_p}{\tau_p n_n^0} + \frac{L_n}{\tau_n p_p^0}\right) n_i^2$$

这个表达式体现了温度，禁带宽度对 j_0 的影响。 $\therefore n_n^0$ 和 p_p^0 在通常的强电离条件下取决于掺杂浓度，是常数，而 $n_i^2 = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{kT}}$ ，可以看出，禁带越宽 j_0 越小，温度越高 j_0 越大。

- 几个实际的近似
 1. pn 结一般情况下往往是一边掺杂浓度远高于另一边，因此 j_0 的表达式中常常只有一项起作用。
 2. 正向偏压下 ($e^{\frac{eV}{kT}} - 1$) 中 $e^{\frac{eV}{kT}}$ 很大，则式中的“1”可以省略，近似有 j 随 V 指数增长。

另外要指出的是：一般正向情况下，空间电荷区电压不会超过 V_D ，在 V 接近 V_D 时，势垒已经近于拉平，这时加在空间电荷区以外的电压不可忽略。

② 反向偏压



$$\text{反向偏压时 } j = e\left(\frac{D_p p_n^0}{L_p} + \frac{D_n n_p^0}{L_n}\right) \cdot (e^{\frac{eV}{kT}} - 1) \text{ 仍然成}$$

立，只是式中的 V 在此时为负数，反向偏压下，准费米能级的降落仍在空间电荷区以外，只是在反偏下势垒升高，空间电荷区少数子欠缺，由于少数子扩散区 $\Delta p, \Delta n$ 为负值，将有载流子不断产生，并输运到势垒边界，由空间电荷区的强电场扫入对方，因此反向电流实际上是少数子扩散区的产生电流。在 $|eV| \gg kT$ 条件下 ($e^{\frac{eV}{kT}} - 1$) ≈ -1 ，因此反向饱和电流将稳定在 j_0 值上。

综上所述我们可以看到，反向电流很小是由于受有限

的产生速率限制，如果在扩散长度范围内提供少子，将使反向电流增加。（这就是双极晶体管的原理）

③空间电荷区的复合电流

在前面的讨论中我们略去了空间电荷区复合，实际上总电流的表达式应为

$$j = j_n(x_p) + j_p(x_n) + j_r$$

其中 j_r 表示复合电流，有 $j_r = e \int_{x_p}^{x_n} R \cdot dx$ ，近似有 $j_r = R_{\max} e \delta$ ，

其中“ δ ”为等效厚度，“ R_{\max} ”是空间电荷区复合率的最大值，对应于 $n = p$ 时的复合率（即

$n = p$ 的时候复合率最大），有近似公式 $R_{\max} \approx \frac{n_i}{2\tau} e^{\frac{eV}{2kT}}$ ，因此有 $j_r \propto e^{\frac{eV}{2kT}}$ ，而 j_p 和 j_n 都正

比于 $e^{\frac{eV}{kT}}$ ，得出复合电流在小电压下起主要作用，通常试验上有经验公式 $j = j_0 e^{\frac{eV}{nkT}}$ ，其中

“ n ”为理想因子。另外 $j_r \propto n_i$ ， j_p 和 j_n 都正比于 n_i^2 ，因此有： $\frac{j_r}{j_n} \propto \frac{1}{n_i}$ ，因此 n_i 小时（对

应于宽禁带材料）空间电荷区复合作用大。

④pn 结电流转换机制

N 型半导体中电子电流为主，P 型半导体中空穴电流为主，pn 结电流即从电子电流转化为空穴电流的过程，通过复合实现电流的转换。

n 区电子漂移电流注入到 p 区边界，少子扩散电流边扩散边复合，扩散电流减少，与空穴复合转化为空穴电流。

§2 pn 结电容

pn 结包含两种电容效应：势垒电容和扩散电容。利用 pn 结的电容效应可以十分有效地测量深能级参数。下面分别进行详细介绍。

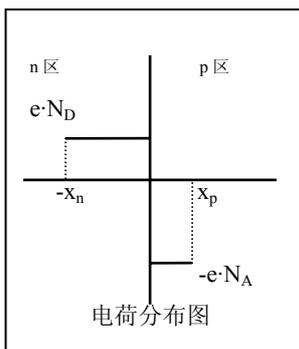
§2.1 势垒电容

势垒电容：外加电压可以改变势垒高度，使空间电荷区厚度发生变化而产生的电容效应。

◆ 势垒电容的计算：以突变结为例，计算步骤如下

突变结：pn 结两侧施主，受主都为均匀掺杂，即固定掺杂浓度只在界面处突变。

为简化计算，我们引入“耗尽近似”，即认为势垒区载流子均已耗尽（空间电荷区载流子浓度趋于零）得到电荷分布如下图：



$$\text{电荷分布为 } \rho(x) \begin{cases} = e \cdot N_D & (-x_n < x < 0) \\ = -e \cdot N_A & (0 < x < x_p) \end{cases}$$

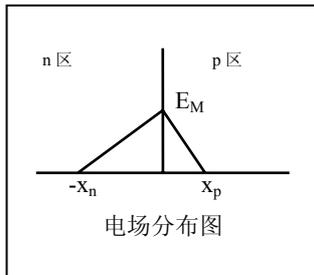
由电中性条件得到： $eN_D x_n = eN_A x_p$ （即结两侧所带正负电量之和为 0）

从而有 $\frac{x_n}{x_p} = \frac{N_A}{N_D}$ ，把空间电荷区厚度（ $x_n + x_p$ ）用 d 表示，即 $d =$

(x_n+x_p) 则存储电荷 $|Q|=eN_Dx_n=eN_Ax_p=ed \cdot \frac{N_A \cdot N_D}{N_A + N_D}$, 其中 $\frac{N_A \cdot N_D}{N_A + N_D}$ 称为约化浓度, 用

N^* 表示, 故 $|Q|=edN^*$, 由于电场分布 $\frac{dE}{dx} = \frac{\rho}{\epsilon\epsilon_0}$, 而 $\rho(x)$ 在两侧为常数, 因此 $E(x)$ 在两侧均

为线性变化, 得到电场分布如下图所示:



不难求得 $E_M = \frac{eN_Dx_n}{\epsilon\epsilon_0} = \frac{eN_Ax_p}{\epsilon\epsilon_0}$, 而 $-x_n, x_p$ 两点电势差 ΔV

等于两点之间对电场的积分, 因此等于电场分布图中阴影的面积。由此得到 $\Delta V = \frac{1}{2}d \cdot E_M = \frac{1}{2} \frac{eN^*}{\epsilon\epsilon_0} d^2$, 导出 $d = \left(\frac{2\epsilon\epsilon_0\Delta V}{eN^*}\right)^{\frac{1}{2}}$ 而由

前面所述, pn 结空间电荷区压降为 V_D-V , 即上式中的 $\Delta V=(V_D-V)$, 得到 $d = \left(\frac{2\epsilon\epsilon_0(V_D-V)}{eN^*}\right)^{\frac{1}{2}}$, 代入 $Q = -eN^*d$, 得

到 $Q = -[2e\epsilon\epsilon_0N^*(V_D-V)]^{\frac{1}{2}}$, 代入电容公式 $C = \frac{dQ}{dV}$ 得到突变结电容表达式:

$$C = \left(\frac{e\epsilon\epsilon_0N^*}{2(V_D-V)}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{\epsilon\epsilon_0}{\left(\frac{2\epsilon\epsilon_0(V_D-V)}{eN^*}\right)^{\frac{1}{2}}} = \frac{\epsilon\epsilon_0}{d}$$

● 几个讨论

- (a) dQ/dV 表达式中含有 V , 即 C 是 V 的函数 $C(V)$, 称为微分电容。
- (b) $C = \epsilon\epsilon_0/d$ 实际可类似平行板电容得出, V 越大时, d 越小, 电容越大。
- (c) 对单边突变结 (即一侧掺杂浓度显著高于另一侧) 则高浓度一侧电荷区厚度很小 N^* 可以用低浓度一侧掺杂浓度代替 (由 N^* 的表达式也可看出)
- (d) 若 pn 结类型为线性缓变结 $\rho=G \cdot x$, 其中 G 为常数, 此时有 $x_n=x_p=d/2$, $C(V) = \epsilon\epsilon_0/d$

仍然成立但可求得此时 $d = \left(\frac{12\epsilon\epsilon_0(V_D-V)}{G}\right)^{\frac{1}{3}}$ 此时电容 $C(V) = \left[\frac{\epsilon^2\epsilon_0^2G}{12(V_D-V)}\right]^{\frac{1}{3}}$

与 $(V_D-V)^{\frac{1}{3}}$ 成正比

(d 的求法与突变结过程类似, 只是 ρ 的表达式不同)

§2.2 扩散电容

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 $\Delta n, \Delta p$ (可参见本章§1.2 的正向偏压下的注入少数分布图); 显然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。

扩散电容的计算:

与过剩少子相对应, 为保持电中性, 存在过剩多子分布因此总存储电荷 $Q_D=Q_p+Q_n$, 对 p

$$\text{型区 } Q_p = \int_0^{\infty} \Delta n(x_p) e^{-\frac{x}{L_n}} \cdot dx = \Delta n(x_p) \cdot L_n = n_p^0 L_n (e^{\frac{eV}{kT}} - 1)$$

$$\text{同理 } Q_n = p_n^0 L_p (e^{\frac{eV}{kT}} - 1), \text{ 所以总存储电荷 } Q_D = e(n_p^0 L_n + p_n^0 L_p) \cdot (e^{\frac{eV}{kT}} - 1)$$

$$\text{由此得到扩散电容 } C_D = \frac{dQ_D}{dV} = \frac{e^2}{kT} (n_p^0 L_n + p_n^0 L_p) \cdot e^{\frac{eV}{kT}}$$

从扩散电容的表达式可以看出, C_D 随正向偏压指数增加, 故反偏时极小。另外扩散电容与势垒电容的关系是并联关系, 总电容与等效电阻之间也是并联关系。

§3 光生伏特效应与隧道效应

§3.1 光生伏特效应

原理: 入射光源激发电子空穴对, 在距势垒区一个扩散长度范围内产生的少子可被势垒区强电场抽到对方, 形成光致电流, 显然这个电流与反向电流方向一致。若断路, 则形成一定的

正向电压使正向电流与光致电流抵消, 使伏安特性变为 $I = A j_0 (e^{\frac{eV}{kT}} - 1) - I_L$ 。(使图像向下平移)

应用: 太阳能电池, 光电二极管

§3.2 pn 结中的隧道效应与隧道二极管

除了前面的 pn 结电流转换机制外, 还存在另一种不同的电流机制, 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, 而隧穿所需要的时间是微不足道的, 因此基于此效应得隧道二极管高频性能很好。

注: 隧道二极管也称江崎二极管, 其伏安特性有负阻区。

第七章 半导体表面层和 MIS 结构

MIS 结构: 金属 (M) — 绝缘体 (I) — 半导体 (S) 结构。

§1 表面感生电荷层

若垂直半导体表面存在电场, 半导体表面内侧将形成感生电荷层来屏蔽电场, 由于半导体中体电荷密度较小, 电荷层将有一定厚度。表面感生电荷层分为三类: 积累层、耗尽层和反型层。

积累层: 吸引多子形成。

耗尽层: 排斥多子, 电荷层由电离杂质构成。

反型层: 电场除了产生耗尽层外, 仍吸引显著数量少子至表面。

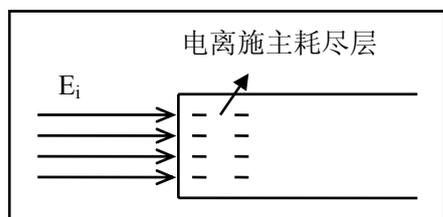
在许多实际问题中都涉及到耗尽层和反型层, 下面着重讨论。

§1.1 耗尽情形

首先引入表面势的定义, **表面势**: 在耗尽层中, 电场引起电势变化使能带弯曲, 形成势垒, 半导体表面 ($x=0$ 处) 相对于体内 ($x>d$ 处, d 表示耗尽层厚度) 的电势差称为表面势, 用 V_s 表示。

下面以 p 型半导体, $E_i>0$ 的情形为例进行讨论。

(注意: 本章中 E_i 表示外加电场, 本征费米能级用 E_{Fi} 表示)

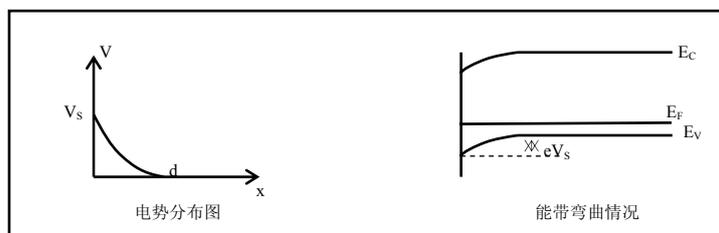


$E_i>0$, 在 p 型半导体表面排斥多子形成耗尽层, 认为耗尽近似成立, 在上述耗尽层内电场电势分布和能带弯曲的情况和突变 pn 结中 p 型一侧空间电荷区完全相同。

表面势 V_s 对应于 pn 结中 $(V_D - V)$;

掺杂浓度 N_A 对应于 pn 结中 N^*

$$\text{则根据 pn 结公式有 } d = \left(\frac{2\epsilon_s \epsilon_0 V_s}{e N_A} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad Q_B = -e N_A d = -(2\epsilon_s \epsilon_0 N_A V_s)^{\frac{1}{2}}$$



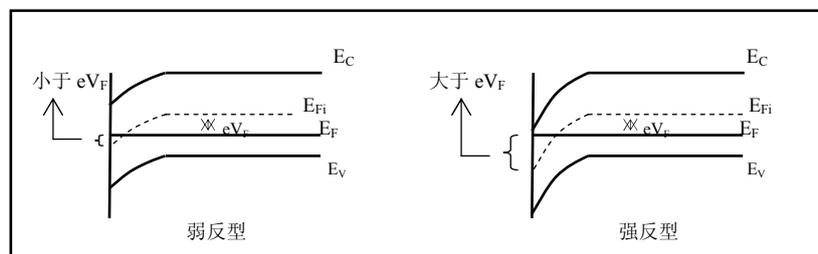
§1.2 反型情形

仍以 p 型半导体 $E_i>0$ 的情形为例, 若 E_i 较大, 则电势产生较大弯曲, 使表面处 E_F 高

于 E_{Fi} 时, 则表面电子浓度超过空穴, 引起**反型**。若以 eV_F 表示体内 E_{Fi} 与 E_F 之差, 即 $eV_F = E_{Fi} - E_F$, 则反型条件是 $V_S > V_F$ 。

强反型: 当 V_S 足够大, 以致表面处电子浓度增加到可与体内多子浓度相比拟时, 表面反型载流子的影响不可忽略, 成为强反型。一般**强反型的条件**是 $e > 2e$ 。

我们把 $2V_F > V_S > V_F$ 的情形称为弱反型, 能带图如下。



$$\text{由 } p_0 = n_i e^{\frac{E_{Fi} - E_F}{kT}} = n_i e^{\frac{eV_F}{kT}} \text{ 得到 } V_F = \frac{kT}{e} \ln \frac{p_0}{n_i} = \frac{kT}{e} \ln \frac{N_A}{n_i}$$

反型载流子主要分布在半导体表面一个很窄的范围内, 通常把这一反型电荷薄层称为导电沟道, 在反型导电沟道和体内导电区之间隔着一个近乎于绝缘的耗尽层。

强反型条件下, 随着能带弯曲, 沟道中电子数增强地十分迅速, 这时对外电场的屏蔽主要依靠表面的反型载流子, 因此在达到强反型后, V_S 及耗尽层电荷 Q_B 变化都不显著, 可以认为在 $V_S = 2V_F$ 时耗尽层宽度 d 和相应的 Q_B 达到最大, 同样类似 pn^+ 结有

$$d_M = \left(\frac{4\epsilon_0 \epsilon_s V_F}{e N_A} \right)^{\frac{1}{2}} \quad Q_{BM} = -(4\epsilon_0 \epsilon_s e N_A V_F)^{\frac{1}{2}}$$

§2 MIS 电容

同 pn 结一样, 由于电荷层的厚度随 MIS 结构上的电压变化, 因此它的电容也是随着偏压变化, 故只能定义微分电容 $C = \frac{dQ_G}{dV}$, 其中 Q_G 是栅电极上电荷的面密度, C 是单位面积

的微分电容。是 V 的函数。栅电极电荷 Q_G 与半导体表面层电荷 Q_S 大小相等, 符号相反。

§2.1 理想 MIS 结构的 C-V 特性

理想条件: 假设在绝缘层中和绝缘层与半导体的界面不存在电荷, 也不存在界面态, 并且栅电压 $V=0$ 时半导体中不存在电场, 能带是平直的。

以下仍以 p 型为例说明。

外加电压 V_G 在 MIS 结构中有两部分压降, 即绝缘层压降 V_i 和感生电荷层压降 V_S , 且 $V_G = V_i + V_S$, 因此系统电容可以认为是氧化层电容 C_i 与半导体表面层电容 C_S 串联得到, 即

$$\text{有 } \frac{1}{C} = \frac{1}{C_i} + \frac{1}{C_S} = \frac{d_i}{\epsilon_i \epsilon_0} + \frac{d_s}{\epsilon_s \epsilon_0}, \text{ 下面进行讨论。为方便查看, 现把下面推导将要用到的符}$$

号予以解释:

d_s	→ 耗尽层厚度
d_i	→ 绝缘层厚度
ϵ_i	→ 绝缘层相对介电常数
ϵ_s	→ 半导体相对介电常数
Q_s	→ 半导体表面电荷
Q_B	→ 耗尽层电荷

① 积累情形（均以 p 型为例）

积累情形下 $V_G < 0$ 表面能带向上弯曲，表面多子积累，且积累集中于表面，厚度 d_s 可以

忽略，根据 $\frac{1}{C} = \frac{d_i}{\epsilon_i \epsilon_0} + \frac{d_s}{\epsilon_s \epsilon_0}$ ，此时电容 $C \approx C_i = \frac{\epsilon_0 \epsilon_i}{d_i}$

② 耗尽情形

当 $V_G > 0$ 时，表面电荷 Q_s 由耗尽层电荷 Q_B 构成（即此时 $Q_s = Q_B$ ），电压增加 ΔV 时半导体充电将在电荷区进行，此时有：

$\frac{1}{C} = \frac{d_i}{\epsilon_i \epsilon_0} + \frac{d_s}{\epsilon_s \epsilon_0}$ 其中只有 d_s 是未知数，下面求 d_s 关于 V_G 的表达式：在本章 1.1 节中介绍

了 $d_s = \left(\frac{2\epsilon_s \epsilon_0 V_s}{e N_A} \right)^{\frac{1}{2}}$ 因此我们的任务就是求 V_s 关于 V_G 的表达式。在本节最开始我们知道了

$V_G = V_i + V_s$ 其中 $V_i = -Q_s/C_i$ 而耗尽时有 $Q_s = Q_B = -N_A \cdot e \cdot d_s$ ，由此得到：

$V_G = \frac{(2\epsilon_s \epsilon_0 N_A e V_s)^{\frac{1}{2}}}{C_i} + V_s$ ，为写法简便，我们设常数 $V_0 = \frac{\epsilon_s \epsilon_0 N_A e}{C_i^2}$ ，则

$V_G = \sqrt{2V_0 V_s} + V_s$ ，把它看成是关于 $\sqrt{V_s}$ 的一元二次方程，解得

$$\sqrt{V_s} = \frac{\sqrt{2V_0}}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{2V_G}{V_0}} - 1 \right) \text{ 代入到 } d_s \text{ 中得到 } d_s = \frac{\epsilon_s \epsilon_0}{C_i} \left(\sqrt{1 + \frac{2V_G}{V_0}} - 1 \right)$$

代入到 $\frac{1}{C} = \frac{1}{C_i} + \frac{d_s}{\epsilon_s \epsilon_0}$ 整理后得到最终表达式： $C = \frac{C_i}{\sqrt{1 + \frac{2V_G}{V_0}}}$

由此可以看出，在耗尽情形下 C 随着 V_G 增大而减小。

③ 强反型情形

当 V_G 大于一定的阈值电压 V_T 时，使得 $V_s > 2V_F$ ，表面达到强反型，此时充电将主要在反型层进行，而反型层分布在半导体表面很窄的区域内，因此系统电容又回到 C_i ，下面求阈值电压 V_T ，即当 $V_s = 2V_F$ 时的 V_G 。

当 $V_s = 2V_F$ 时，半导体表面开始进入强反型，此时氧化层压降为 $-\frac{Q_{BM}}{C_i}$ ，半导体表面压降

为 $2V_F$ ，故此时的 V_G 即 V_T 有

$$V_T = \frac{-Q_{BM}}{C_i} + 2V_F = \frac{1}{C_i} (4\epsilon_s \epsilon_0 e N_A V_F)^{\frac{1}{2}} + 2V_F = 2[(V_0 V_F)^{\frac{1}{2}} + V_F]$$

$Q_S = Q_B + Q_n$ ，其中 Q_n 表示反型层电荷，即 Q_B 只能最大屏蔽 V_T 大小的栅压，其余 $V_G - V_T$ 的栅压将由 Q_n 来屏蔽，故有 $Q_n = -C_i(V_G - V_T)$

④ 平带电容和德拜长度

在 $V_G = 0$ 的平带附近或在小的负偏压时，测得的实际电容略小于 C_i ，表明积累层中电荷变化也有一定厚度，存在与 C_i 串联的半导体电容 C_{SFB} ，此时对于总平带电容 C_{FB} 有

$$\frac{1}{C_{FB}} = \frac{1}{C_i} + \frac{1}{C_{SFB}}$$

在此条件下，耗尽近似不再成立，表面的空穴分布有 $P = P_0 e^{\frac{eV(x)}{kT}}$ ，故电荷分布

$$\rho(x) = e(P - P_0)$$

由泊松方程有 $\frac{d^2 V}{dx^2} = -\frac{e(P - P_0)}{\epsilon_s \epsilon_0}$

$$\text{在小信号条件下 } P = P_0 e^{\frac{eV(x)}{kT}} \approx P_0 - P_0 \frac{eV}{kT} \quad \therefore P - P_0 \approx -\frac{eP_0 V}{kT}$$

$$\therefore \text{泊松方程写作 } \frac{d^2 V}{dx^2} = \frac{e^2 P_0}{\epsilon_s \epsilon_0 kT} V \text{ 根据边界条件 } \begin{cases} x \rightarrow \infty, V \rightarrow 0 \\ x = 0, V = V_s \end{cases} \text{ 得出解为 } V = V_s e^{-\frac{x}{L_D}}$$

式中 $L_D = \sqrt{\frac{\epsilon_s \epsilon_0 kT}{e^2 P_0}}$ 称为德拜长度。

把 V 的表达式代入 $\rho(x)$ 得 $\rho(x) = -\frac{e^2 P_0}{kT} V_s e^{-\frac{x}{L_D}}$ 可见屏蔽电荷分布在约 L_D 的长度内，由

$$\text{此得到平带时半导体电容 } C_{SFB} = -\frac{dQ_s}{dV_s} = \int_0^\infty \frac{d\rho}{dV_s} dx = \frac{\epsilon_0 \epsilon_s}{L_D} \text{ 从而得到 MIS 结构平带时电容}$$

$$C_{FB} = \frac{1}{\frac{d_i}{\epsilon_i \epsilon_0} + \frac{L_D}{\epsilon_s \epsilon_0}} = \frac{C_i}{1 + \frac{\epsilon_i L_D}{\epsilon_s d_i}}$$

讨论平带电容的意义：可以确定非理想 MIS 电容的平带时的电压。(详细方法见本章§3 节)

⑤ 高频特性

强反型条件下，表面反型层电子来源于产生电流，需要产生时间 τ ，在高频条件 ($\omega\tau \gg 1$) 时，一个周期中反型层中载流子数量来不及变化，充电实际将在电荷区边缘进行，而在强反型条件下，耗尽层厚度近似不变为 d_M ，总电容为耗尽层最小电容 C_{Dm} 和绝缘层电容 C_i 串联而成，有：

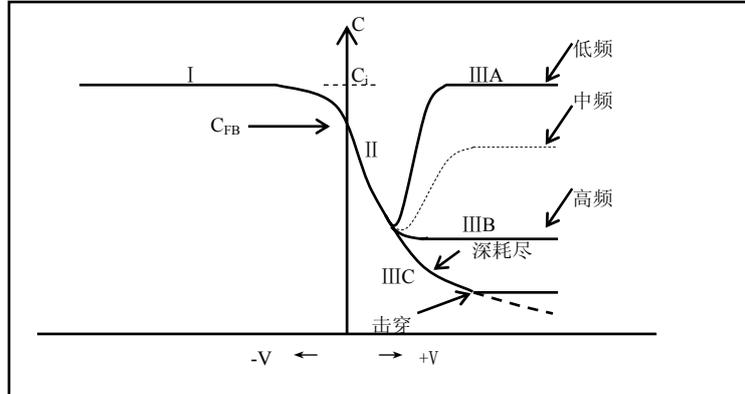
$$C = \frac{1}{\frac{1}{C_i} + \frac{1}{C_{Dm}}} = \left(\frac{d_i}{\epsilon_i \epsilon_0} + \frac{d_M}{\epsilon_s \epsilon_0} \right)^{-1} \text{ 而低频条件下 } (\omega\tau \ll 1), \text{ 原讨论仍成立, 即 } C = C_i, \text{ 如果}$$

不高不低时，C 的值介于上述两情况之间。

⑥深耗尽情形（偏压变化很快的情形）

由于 V_G 变化很快，扫描到 $V_G > V_T$ 时， V_G 上升反型层电子来不及产生，耗尽层厚度 d 继续增大，随着 V_G 上升 C 下降。

综合上述 6 种情形得到 C-V 特性图如下：



§2.2 实际 MIS 结构的 C-V 特性

理想的 MIS C-V 特性中忽略了功函数的影响，绝缘层中的电荷以及绝缘层和半导体交界处界面态的影响，下面进行分析。

①功函数的影响

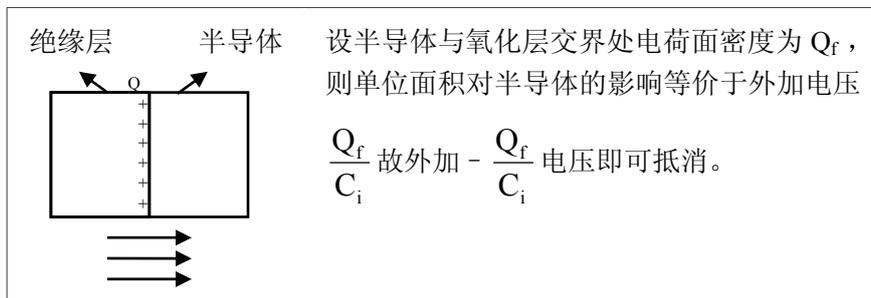
功函数：真空中静止电子能量 E 与费米能级 E_F 之差，用 W 表示。

功函数差导致金半接触的电势差：电子从 E_F 高的材料流向 E_F 低材料，使金属表面、半导体表面分别带有异性电荷，使能带弯曲直至 E_F 水平，形成接触电势差 $V_M - V_S = (W_M - W_S)/e$ 。

功函数的影响：如同天然加有电压 $(W_S - W_M)/e$ ，故需要加偏压 $V_{MS} = (W_M - W_S)/e$ 才能使半导体能带恢复平带，故用 $V - V_{MS}$ 来代替理想下的结果即可，相当于使 C-V 图像向右平移 V_{MS} （在实际上 V_{MS} 常常是负的，因此功函数实际上使图像向左平移）

②绝缘层中的电荷的影响

固定在半导体表面的电荷的影响如下图



而对于以 $\rho(x)$ 分布在氧化层中的电荷，它等效于绝缘层半导体界面的面密度为 Q'_{ox} 的电荷，

其中 $Q'_{ox} = \int_0^{d_i} \rho(x) \frac{x}{d_i} dx$ ，即在金属电极上加偏压 $-\frac{Q'_{ox}}{C_i}$ 即可消除。

③平带电压的影响

综合①，②可见，功函数和绝缘层中电荷的影响都只使 C-V 曲线平移变换，设平带电压

$V_{FB} = V_{MS} - \frac{Q_f}{C_i} - \frac{Q_{ox}}{C_i}$ ，即平带时所对应得不是 $V_G = 0$ ，而是当 $V_G = V_{FB}$ 时达到平带，图

像相应向右平移 V_{FB} ，相应的阈值电压 $V_T = V_{FB} + 2V_F - \frac{Q_{BM}}{C_i}$ 。

在前面我们曾经讨论平带电容的意义，在实际中，首先测得实际 C-V 曲线，之后在曲线中找到对应于 C_{FB} 时的电压，即为平带电压。

④ 界面态及其电容

界面态：绝缘层和半导体界面处的电子能级称为表面态，又称界面态。能级处于禁带之中，是一个连续分布的界面态， $N_{it}(E)$ 为界面态密度的分布函数。

界面态分类：施主型（得电子时为中性）、受主型（得电子时带负电，不占有电子时为中性）

界面态的电容效应：

界面态电容与表面电容是并联的，故有 $\frac{1}{C} = \frac{1}{C_i} + \frac{1}{C_s + C_{it}}$ ，其中 C_{it} 表示界面态电容，有界

面态电容公式 $C_{it} = e^2 N_{it}(E_F)$ ，下面给出此公式的推导作为参考。

界面态电容的推导：
 当 V_S 变化 ΔV_S 时，界面态上电荷变化 $\Delta Q = e N_{it}(E_F) \cdot \Delta E_F$ ，
 而 $\Delta E_F = e \cdot \Delta V_S$
 $\therefore \Delta Q = e^2 N_{it}(E_F) \cdot \Delta V_S$
 $\therefore dQ = e^2 N_{it}(E_F) \cdot dV_S$
 即 $C_{it} = e^2 N_{it}(E_F)$

另外，由于界面态充放电时间比较长，故高频时影响并不明显。

界面态的来源：在 SiO_2-Si 系统中主要是 Si 表面原子的不饱和键，通常可用 H 处理或 Cl 处理使其与 O, H, Cl 原子结合来减少界面态。

⑤ SiO_2-Si 系统中电荷的实际研究

实际上氧化层中电荷分为可动电荷和固定电荷，可用实验方法通过测量 C-V 曲线来测定固定电荷和可动电荷，下面进行介绍。

可动电荷：加温下在外电场作用下容易移动的正离子。（常见的如 SiO_2 中的 Na^+ ）

测定方法：

- a) 首先在升温条件下（ $200^\circ C$ ）对 MIS 结构加负偏压，可把 SiO_2 中可动离子 Na^+ 驱至金属和 SiO_2 界面（次处理成为**温度偏压处理**或称 **BT 处理**）这是可动电荷对平带电压无贡献，此时有

$$V_{FB}^{(1)} = V_{MS} - \frac{Q_f}{C_i} \quad (Q_f \text{ 表示固定电荷密度})$$

- b) 升温施加正偏压可将可动电荷驱至 SiO_2-Si 界面，此时有：

$$V_{FB}^{(2)} = V_{MS} - \frac{Q_f}{C_i} - \frac{Q_{ox}}{C_i} \quad (Q_{ox} \text{ 表示可动电荷密度})$$

3. 综上，用 $V_{FB}^{(1)} - V_{FB}^{(2)} = \frac{Q_{ox}}{C_i}$ ，推出 $Q_{ox} = C_i \cdot \Delta V_{FB}$ ，若已知 V_{MS} ，也可进一步求得 Q_f

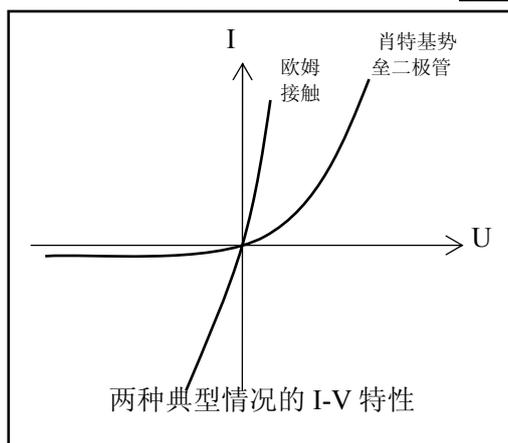
第八章 金属半导体接触和异质结

§1 金属半导体接触

金半接触：在经过清洁处理的半导体表面淀积金属薄层形成金半接触，常用金属 Al 和 Au

两种典型情况：① 半导体掺杂浓度低，表现出单向导电性，称为肖特基势垒二极管。

② 半导体掺杂浓度高，表现出电阻特性，成为欧姆接触。



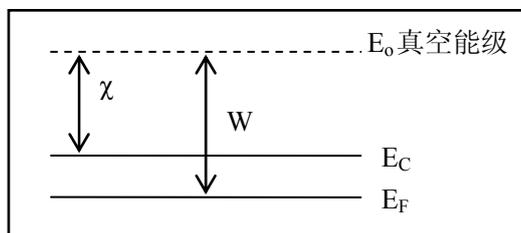
§1.1 肖特基势垒

在半导体表面不存在表面态的理想情况，界面附近的能带情况决定于金属和半导体功函数，以及半导体的亲和能。

功函数（用 W 表示）定义：真空能级 E_0 和费米能级 E_F 之间的能量差，即 $W = E_0 - E_F$

半导体亲和能（用 χ 表示）定义：真空能级 E_0 和导带底 E_C 之间的能量差，即 $\chi = E_0 - E_C$

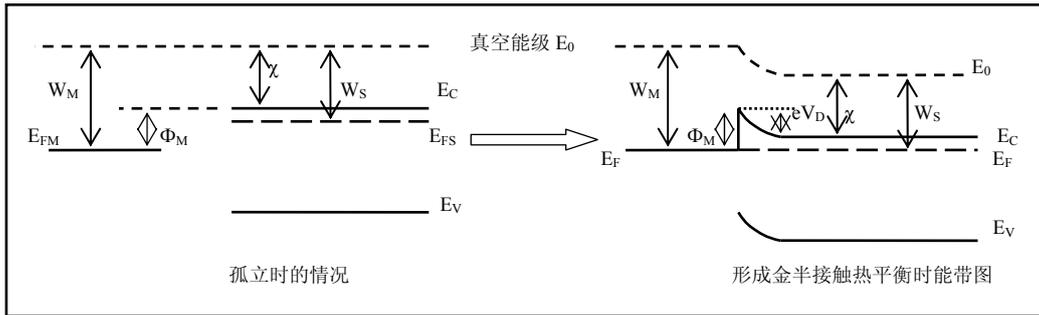
金属的功函数和半导体的亲和能对同种材料来说是确定不变的，但半导体的功函数随掺杂不同而变化。如下图所示。



下面以金属-N型半导体为例，假设没有界面态，进行说明，一般有 $W_M > W_S$ 。

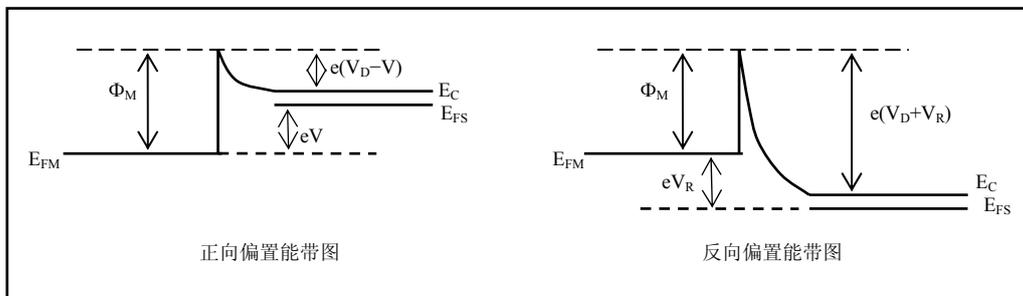
此时的金半接触中，由于 $W_M > W_S$ ，半导体内电子向金属转移，在半导体表面形成空间电荷区，使能带弯曲（真空能级也随之弯曲），热平衡时达到 E_F 水平，类似单边突变结，得到下面的金半接触能带图。

在画图中需要注意：要保持真空能级连续且平行于能带边缘，还要体现 W_M 和 χ 是不变的，另外要保证费米能级 E_F 是水平的。



图中 Φ_M 代表金属中电子面临的势垒高度，称为金半接触的势垒高度，有 $\Phi_M = E_C(\text{表面}) - E_F$ 半导体中电子的势垒高度即自建势，有自建势 $eV_D = \Phi_M - [E_C(\text{体内}) - E_F]$

势垒高度阻碍金属和半导体之间进行电子交换，因此相应得空间电荷层又称为阻挡层，这显然是一个高阻层。加在“金-半”之间的外电压，主要降落在高阻层上，它通过调节空间电荷区的厚度来吸收外电压，结果是半导体中的势垒高度随外加电压而变化，而 Φ_M 却保持不变，通常是把半导体中势垒降低的偏置称为正向，对于金属和 n 型半导体的接触，这相当于金属接正极，半导体接负极。



肖特基势垒的单向导电性：正向偏置下，由于半导体中的电子势垒降低，其中能越过势垒流向金属的电子显著增加，而 Φ_M 不变，金属中能流向半导体的电子数并不发生变化，结果形成一股较大的正向电流；反向偏置下，由于半导体中势垒升高，由半导体流向金属的电子流显著减少，流过势垒的电流主要由金属向半导体的电子流构成，这个电流实际上很小。

● 空间电荷区和势垒电容

金半接触的电容效应与单边突变结类似，有：

$$\text{空间电荷区宽度: } d = \left(\frac{2\epsilon_s \epsilon_0 (V_D - V)}{eN} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{电荷: } Q = eNd = [2\epsilon_s \epsilon_0 (V_D - V)eN]^{\frac{1}{2}}$$

$$\text{电容: } \frac{dQ}{dV} = \frac{\epsilon_s \epsilon_0}{d} = \left[\frac{\epsilon_s \epsilon_0 eN}{2(V_D - V)} \right]^{\frac{1}{2}}$$

可以利用金半接触的电容特性测量半导体的杂质浓度及其分布，下面介绍具体方法：

①均匀半导体：N 是常数， $\frac{1}{C^2}$ 与 $(V_D - V)$ 线形关系，有 $\frac{1}{C^2} = \frac{2}{\epsilon_s \epsilon_0 eN} (V_D - V)$ ，斜率中

只有变量 N，故只需测得曲线的斜率即可计算出 N，而由截距可以计算 V_D

又由 N 可以计算 $E_i - E_{Fn}$ ，进一步可由 $eV_D = \Phi_M - [E_C(\text{体内}) - E_F]$ 计算得到 Φ_M 。

②非均匀掺杂：N 是关于 x 的函数 $N(x)$ ，当空间电荷区厚度增加 d_x 时，附加的电荷 $N(x)ed_x$

产生电场有 $Ned_x/\epsilon_s\epsilon_0$, 引起的压降 $d_v = \frac{xeN(x)}{\epsilon_s\epsilon_0} d_x = \frac{eN(x)}{2\epsilon_s\epsilon_0} d_{x^2}$, 下面求 d_{x^2} 。

因为 $C=\epsilon_s\epsilon_0/x$ 故 $x^2=(\epsilon_s\epsilon_0/C)^2$, 因此有 $d_{x^2} = \epsilon_s^2\epsilon_0^2 \cdot d(\frac{1}{C^2})$ 带入 d_v 表达式, 得到

$d_v = \frac{\epsilon_s\epsilon_0 eN(x)}{2} \cdot d(\frac{1}{C^2})$, 由此可以通过任意位置 $d_v-d(\frac{1}{C^2})$ 的斜率求得该点的浓度 $N(x)$ 。

§1.2 热电子发射理论

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 $j_{M \rightarrow S} + j_{S \rightarrow M} = 0$

可以推得: $j_{S \rightarrow M} = A^* T^2 \exp(-\Phi_M/kT) \exp(eV/kT)$

其中 $A^* = \frac{4\pi\epsilon_0 k^2 m}{h^3}$ 称为里查孙常数。

而 $j_{M \rightarrow S} = -j_{S \rightarrow M}(V=0) = -A^* T^2 \exp(-\Phi_M/kT)$

热发射电子电流 $j = j_{M \rightarrow S} + j_{S \rightarrow M} = A^* T^2 \exp(-\Phi_M/kT) (e^{\frac{eV}{kT}} - 1)$

特点讨论: ①多子电流, 不存在少子的存储, 故高频性能好。

②相同自建势时, 肖特基二极管比 pn 结导通电压低。

§1.3 巴丁模型

a) 肖特基模型与实际情况的矛盾

对于 N 型半导体, 由肖特基模型, 若 $W_M > W_S$ 则表面形成势垒, 若 $W_M < W_S$ 则表面形成势阱, 从而形成电子积累层, 不形成阻挡层。但实际上 $W_M < W_S$ 时也形成势垒, 且此时 Φ_M 大体上与功函数 W 无关(不敏感)

b) 巴丁模型的基本假设

假设半导体表面存在着高密度表面态, 金属与半导体之间有一很小的间隙 δ , 该间隙为原子尺度, 表面态中电荷在间隙 δ 产生电势差, 对势垒高度有钉扎作用(钉扎作用)

c) 分析

如前面假设, 则系统分为 3 个子系统: 金属, 表面态, 半导体, 设它们费米能级分别为 E_{FM} , $(E_F)_S^0$, E_{FS} 。设 E_{FM} 和 E_{FS} 都高于 $(E_F)_S^0$, 则半导体和金属中的电子都流入表面态, 用 $\Delta(E_F)_S^0$ 表示表面态费米能级的变化, 则表面态电荷 $Q_{it} = -eD \cdot \Delta(E_F)_S^0$, 其中 D 是表面态密度。

- 当 D 很大时 $\Delta(E_F)_S^0$ 就很小, 趋近于 0, 这时 E_{FM} 和 E_{FS} 都被 $(E_F)_S^0$ 所钉制, 钉扎势垒高度 $\Phi_M = E_C - (E_F)_S^0$ 与 W_M 无关, 这种情形称为巴丁极限。
- 当 D 为有限态密度时 $\Phi_M = E_C - (E_F)_S^0 - \Delta(E_F)_S^0$, 在一定程度上依赖 W_M 。

§1.4 欧姆接触

在金半接触中有三种电流机制: 热电子发射(多子)、少子扩散和隧穿电流。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。

§2 异质结

异质结：两种不同半导体材料构成的结。

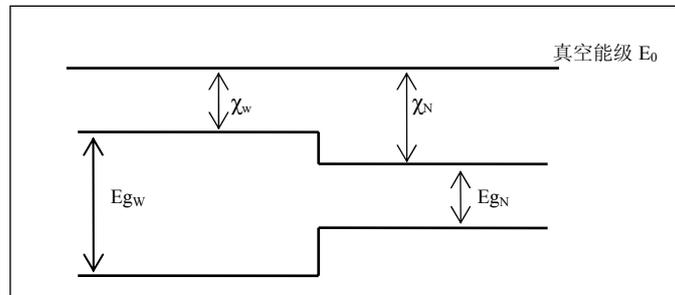
异质结的分类：同型异质结：导电类型相同，如 nN 结， pP 结

异型异质结：导电类型不同（也叫异质 pn 结），如 nP 结， pN 结

异质结的形成条件：要有相同的晶体结构还要有相近的晶格常数。

§2.1 异质结的能带图

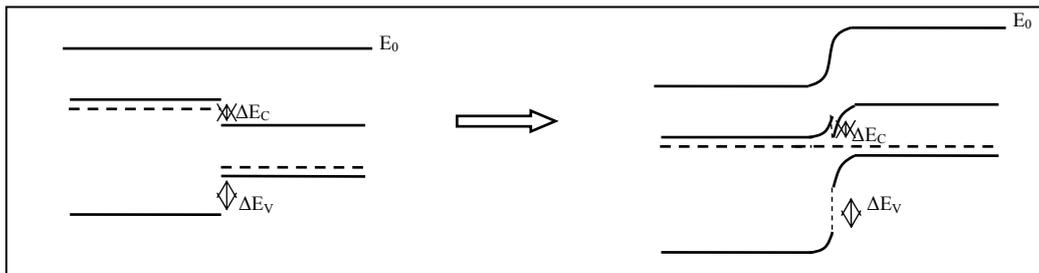
对于不同材料，最主要的不同有两个，亲和能 χ 不同，禁带宽度 E_g 不同。在以下讨论中，宽禁带用“W”标注，窄禁带用“n”标注。在实际中常用到的一种典型情况为 $\chi_w < \chi_n$ ，且 $\chi_w + E_{gw} > \chi_n + E_{gn}$ ，我们也以这种情况为例进行讨论，能带图如下。



导带底之差： $\Delta E_C = \chi_n - \chi_w$

价带顶之差： $\Delta E_V = (E_{gw} + \chi_w) - (E_{gn} + \chi_n)$

下面以宽带为 N 型窄带是 P 型为例进行分析，如下图。



● 能带图要满足的两个要求：

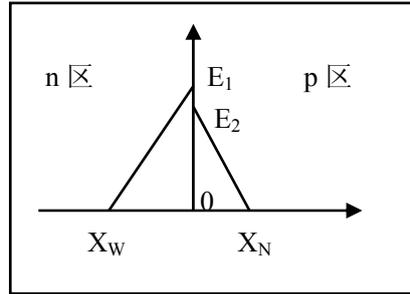
- ① 两侧费米能级要相同(即两侧费米能级水平)
- ② 真空能级必须连续且平行于能带边缘，因此 ΔE_C 和 ΔE_V 不变。

§2.2 空间电荷区和电容

设 n 区为正宽度 X_w ，p 区为负宽度为 X_n 设两侧介电常数分别为 ϵ_w ， ϵ_n 根据界面($x=0$ 处)电位移矢量连续有： $\epsilon_w \cdot E_1 = \epsilon_n \cdot E_2$ ，(E_1 、 E_2 意义如图)。根据电中性有 $N_D \cdot X_w = N_A \cdot X_n$ 。

$$\text{从而得到：宽带一侧 } V_{DW} = \frac{1}{2} X_w \cdot \frac{e N_D X_w}{\epsilon_w \epsilon_0}$$

窄带一侧 $V_{DN} = \frac{1}{2} X_N \cdot \frac{e N_A X_N}{\epsilon_N \epsilon_0}$



得到自建势 $eV_D = e(V_{DW} + V_{DN})$, 与 pn 结类似的得到

$$\text{空间电荷区宽度 } X = X_W + X_N = \left[\frac{2\epsilon^* \epsilon_0 (V_D - V)}{eN^*} \right]^{\frac{1}{2}}$$

其中 $\epsilon^* = \frac{\epsilon_N \epsilon_W (N_A + N_D)}{\epsilon_W N_D + \epsilon_N N_A}$ 称为约化介电常数, $N^* = \frac{N_A \cdot N_D}{N_A + N_D}$ 称为约化杂质浓度

对电容 C, 有 $\frac{1}{C} = \frac{1}{C_W} + \frac{1}{C_N}$ 或表达成 $C = \frac{\epsilon^* \epsilon_0}{X}$ 。

§2.3 异质结的电流

两种极限情况: 1. 电子发射电流 (与金半接触相似), 对应于尖峰高于导带底情况。
2. 过剩少子扩散电流 (与 pn 结相似) 对应于尖峰低于导带底情况。



下面讨论扩散电流

设平衡时 p 区 (窄带) 的电子浓度 n_N^0 , n 区电子浓度 n_W^0 。

$$\text{电子电流 } j_n = e \frac{D_n}{L_n} \cdot \Delta n_N (\text{边界}) = e \frac{D_n}{L_n} \cdot n_N^0 (e^{\frac{eV}{kT}} - 1) = e \frac{D_n}{L_n} \cdot \frac{n_{iN}^2}{N_A} (e^{\frac{eV}{kT}} - 1)$$

$$\text{空穴电流 } j_p = e \frac{D_p}{L_p} \cdot \Delta p_W (\text{边界}) = e \frac{D_p}{L_p} \cdot p_W^0 (e^{\frac{eV}{kT}} - 1) = e \frac{D_p}{L_p} \cdot \frac{n_{iW}^2}{N_D} (e^{\frac{eV}{kT}} - 1)$$

值得注意的是 $\frac{j_n}{j_p} = \frac{\frac{D_n \cdot n_{iN}^2}{L_n \cdot N_A}}{\frac{D_p \cdot n_{iW}^2}{L_p \cdot N_D}}$, 而 $n_i^2 = N_C N_V e^{-E_g/kT}$, 故

$\frac{j_n}{j_p} \approx \frac{N_D}{N_A} \cdot \frac{n_{iN}^2}{n_{iW}^2} = \frac{N_D}{N_A} \cdot e^{\Delta E_g/kT}$ 正比于 $e^{\Delta E_g/kT}$, 因此可利用此特性来提高少子注入比。

§2.4 异质结的应用

异质结通常有两大应用, 一是上节中提到的提高少子注入比; 二是调制掺杂技术, 可在窄带一侧形成二维电子气。

本讲义基本按照当年韩汝琦教授授课笔记整理而来, 参考书是叶老师的半导体物理上册, 希望师弟师妹们都能学好半导体物理, 同时祝愿中国的微电子事业能早日腾飞。

仓促敲成电子版, 错误在所难免, 欢迎大家修改完善。

某师兄