

# 平衡半导体

2019年11月28日 17:43

之前我们具有一定的量子力学和固体物理学的基础，而我们现在需要研究的半导体的平衡特性。由于费米-狄拉克分布函数的推导是起源于平衡状态，所以这里只能研究平衡状态下的半导体。这也是半导体物理学的起点，以及未确定平衡条件下所描述的才能描述出平衡时的平衡性。例如，半导体的外加电场的情况。

我们首先研究本征半导体，然后加入杂质原子，通过增加掺杂原子的数量就可以改变半导体的电学特性，掺杂原子的类型决定了空穴和电子，从而改变分布。

## 1. 半导体中载流子

半导体的载流子是导带中的电子和价带中的空穴，所以它们的浓度是一个重要的参数。我们之前在讨论费米-狄拉克函数时已经提到半径为 $r$ 的球面上单位能带的电子数目，即是一量子态的密度和分布函数的乘积。这里将进行严格的数学推导。

路修好了！该通车了！

### 1.1. 电子和空穴的平衡分布

散射力作用下和更复杂的相互作用下，我们成功地写出了 $1-D$ 分布描述了量子状态密度和电子密度的关系。 $1-D$ 由热力学、统计学直接推出，所以这是一个可靠的结论。和抛物线硬币一样可靠。但是，再可靠的结论也要经过实验检验。万事如意，他通了！

半导中我们研究的是电子数 $n$ 。

$$n(E) = g_c(E) f_F(E)$$

$n(E)$ 是半径为 $r$ 的球面上单位能带的电子数目，我们当然地辐射到整个导带的电子密度。所以要对导带的能带范围积分，就可以得到总电子浓度。

价带中在介绍空穴中曾提到过，在外力作用下（或者关于 $k$ 空间为周期函数的外力下），在价带中，我们考虑需要考虑空穴，即量子态被电子占有的概率 $p$ 。

$$p(E) = g_v(E) [1 - f_F(E)].$$

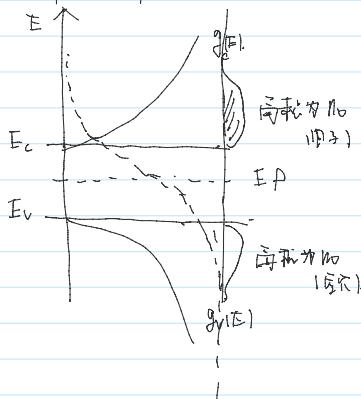
这里又要再次提一句烦外话，看丁是OK。既然所有的电子都在价带上，我们要算价带的尺寸，就可以知道有多少作用于 $z$ ？那么我们为什么不从这个思路来计算呢？这样明显方便得多。

这都是先有还是先有的蟹的问题。有时侯我们为了学习更多的知识，会放弃更多的知识。例如，我们为了学习半导体，忽略了解量子力学和统计学的知识，可能会有这个不必要的问题。我们所已知的理论和曾经的理论在半导体的研究中是完全正确的。所求的运动，而我们已知的运动，夹杂着，核外电子分布的周期性和波动性，都有一套完整的理论。所以不存在什么算符问题。影响半没有完整推导下 $1-D$ 分布，所以有可能不能用它，但不得不在温度正带中。这就是起半的代价，结论虽然真相后，却有些许的失望！！！

继续，

本讲半导体就是不含有杂质的半导体。我们都知道费米能级处于价带和导带之间的禁带中。以能带级分带原理和薛定谔方程。且在外力作用下，根据麦克斯韦方程，空穴可以迫使电子进入导带产生的。下面走成对称，

大概画一下



### 4.1.2. $n$ 方程和 $p$ 方程

先算导带。

$$n(E) = g_c(E) f_F(E)$$

设  $E - E_F \gg kT$ ，则  $f_F \rightarrow 0$  分布可以近似成麦克斯韦-玻尔兹曼分布。

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

量子态密度 $g_c(E)$

$$g_c(E) = \frac{4\pi(2m_e^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \sqrt{E-E_C}.$$

$$n(E) = \int_{E_C}^{\infty} \frac{4\pi(2m_e^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \sqrt{E-E_C} \cdot \exp^{-(E-E_F)/kT} dE.$$

这里上极限可以写成无限大因为  $f_F(E)$  在极限趋近于 0，即图。

我们希望用微分成积分结果来计算上式。（这里用初等函数计算）。

$$\int_0^{\infty} \eta^{\frac{1}{2}} \exp(-\eta) d\eta = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}.$$

$$\text{设 } \eta = \frac{E-E_F}{kT} \Rightarrow E = E_F + kT\eta \quad dE = kT d\eta. \quad \text{积分下限 } \frac{E_C-E_F}{kT} = 0, \text{ 上限 } \frac{E_S-E_F}{kT} = \infty.$$

下限

$$\int_0^{\infty} \frac{4\pi(2m_e^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \cdot \sqrt{kT} \cdot \exp^{-(E_F-E_C)/kT} \cdot kT d\eta$$

$$= \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^* \cdot kT)^{\frac{3}{2}} \exp^{-(E_F-E_C)/kT} \int_0^{\infty} \eta^{\frac{1}{2}} \exp(-\eta) d\eta.$$

$$= \frac{4\pi}{h^3} (2m_p^* kT)^{\frac{3}{2}} \exp \left[ -\frac{(E_c - E_F)}{kT} \right] \int_0^\infty \eta^{\frac{1}{2}} \exp(-\eta) d\eta.$$

$$= 2 \left( \frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[ -\frac{|E_c - E_F|}{kT} \right]$$

定义

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

为有效状态密度，若假设  $m_p^* = m_0$ ，常温下  $T = 300 \text{ K}$  时， $N_c = 2.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ 。这个量级是比较典型的。

在价带中，式子有些许变化。

$$f_v(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_p^*)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_v - E} \quad 1 - f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp \frac{|E_F - E|}{kT}} \text{ 假设下为 } \exp \left[ -\frac{|E_F - E|}{kT} \right].$$

$$F_{ML} = P_0 = \int_{-E_F}^{E_F} \frac{4\pi}{h^3} (2m_p^*)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_v - E} \cdot \exp \left[ -\frac{|E_F - E|}{kT} \right] dE.$$

以同样忽略进行计算。

$$P_0 = 2 \left( \frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[ -\frac{|E_F - E_v|}{kT} \right]$$

从结果来看，有效状态密度和导带电子中的电子占有有效质量不同，虽然没有直接到有效状态密度，但失之毫厘吧。

### 1.3 本征载流子密度

本征半导体的费米能级被称为本征费米能级， $E_F = E_F^*$ ，费米能级有实际物理意义，即为化学势

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

$$n_i = P_0 = N_c v \exp \left[ -\frac{(E_F - E_v)}{kT} \right].$$

我们不以发现

$$\exp \left[ \frac{1}{kT} [ -|E_c - E_F| - |E_F - E_v| ] \right]$$

$$\Rightarrow \exp \left[ \frac{1}{kT} (E_v - E_c) \right] = \exp \left[ -\frac{E_v}{kT} \right].$$

这样可以约去  $E_F$  的作用。反向，利用上述忽略

$$n_i^2 = N_c N_v \exp \left[ -\frac{E_v}{kT} \right]$$

当温度恒定时，电子数同占有有效质量有关，同导带能级无关。

但是，我们用这种方法算出来的载流子浓度和实验结果不太吻合，原因可能在于半导体状态密度函数和有效质量。这两个都会有关，尾随尾随一端是模型以及导带隙和价带隙的平方函数正比，都会影响，但是误差大的情况，所以我们会以这样不确定性进行讨论。

在今先认为正确的科学在以后未必就是正确的。

### 1.4. 本征费米能级的位置

我们大概通过画图的方法，更直观分析出费米能级大概在禁带中央，下面更详细一下。

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

两边同取  $\ln$ 。

$$\ln N_c + -\frac{(E_c - E_F)}{kT} = \ln N_v + -\frac{(E_F - E_v)}{kT}$$

$$\Rightarrow 2E_F = (E_c + E_v) + kT \ln \frac{N_c}{N_v}.$$

有效状态密度  $N_c, N_v$  与有效质量有关。

$$N_v = 2 \cdot \left( \frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\Rightarrow E_F = \frac{1}{2} (E_c + E_v) + \frac{kT}{2} \ln \left( \frac{m_p^*}{m_n^*} \right).$$

第一项是禁带中央的位置，若  $m_p^* > m_n^*$ ，即靠近导带， $m_p^* < m_n^*$ ，则靠近价带。

## 2. 掺杂原子与能级

掺杂后半导体称为非本征半导体，由于本征阶段已经学习了模拟电子线路基础，所以在良性半导体中相对会省略。重点则放在一些概念名词的讲解上，我们课应该学完这些再学模型，但是国内并不好，这里可以看出来，即使是通信工程，理工大这种课更为严谨，但这不是不能用上，他难道不应该先讲量子力学？

### 2.1. 负性描述

在硅中掺杂V族元素，例如P，则会有一个施主原子，

$$(II) \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{+} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{+} \end{array} \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{+} \end{array} \quad E_c \\ \text{F}_d$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{+} \end{array} \quad E_L \quad (III)$$

在硅中掺杂V族元素，例如P，就会有一个施主原子。

$$(V) \quad \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{+} \end{array} \quad E_C \\ \text{---} \quad E_D \\ \text{---} \quad E_V$$

$$E_L \quad (\text{II})$$

$$\begin{array}{c} \text{---} \\ \text{+} \end{array} \quad E_D \\ \text{---} \quad E_U$$

$E_D$ 就负电荷能，在半导体中原子能级图和能带图简单描述一下。下面给出说明。  
原子如其他被束缚的电子形成更稳定的轨道区带，所以处于导带和价带之中，即禁带。当然，这里指的是杂质原子的禁带。  
对于掺杂的原子，由于是不同的，能带分布也是不同的。这里原子密度到掺杂原子的束缚，所以可以在禁带中。

P在这里提供了电子，称为施主杂质原子。

同样，掺入Ⅲ族元素，如B原子，则会提供空穴。与掺杂V族元素不同，Ⅲ族中失去一个电子后是满的，电子能量更趋近于导带，而Ⅴ族元素，有更强的吸引力，所以会趋近于价带。（根本原因是什么？）

这里B原子接受电子，称为受主杂质原子。

产生施主原子称为N型（Negative）半导体，受主则为P型（Positive）。

## 2.2. 中高能。

激发放射主量子进入导带下升高的能量，即为中高能。我们前面介绍固体中电子简介说过金属进入导带后即可认为是自由电子。所以中高能可以看成是施主杂质原子的电子所在能级的能量E。

之前我们用薛定谔方程近似计算电子原子的能量。但当时涉及的三维谐振子的解题方法不成熟，所以直接绕过了。我们用角量子数和有效质量推广了下。

$$E = \frac{-m^2 e^4}{2(m\hbar)^2 (4\pi\epsilon)^2}$$

简玻尔模型对氢原子适用。但这样主要是根据对应原理。他指出量子力学在宏观领域仍然成立，且经典力学已经被实验所检验，也是正确的。由此有了波尔模型。我们用波尔模型不仅能算出半径，也能算出能级。同样简并氢原子能后推广对施主杂质原子。波尔理论的优缺点及其对于他的核小恩格，对应原理。

下面来领略一下简并模型。

首先，我们认为电子和离子间的库仑引力等于轨道电子的向心力，这就是经典力学的结论。

$$\frac{\theta^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{mv^2}{r_n}$$

这里要说明一下，因为光电效应和康普顿散射已经得到证实，所以加上他的对应原理，就会推导到角动量的量子化。很多人（包括圣经教材）认为这是一个假设，让其是波尔对应原理下的必然推导结果。

$$mr\omega_n = n\hbar$$

于是得到V。

$$V = \frac{n\hbar}{mr_n}$$

代入向心力公式

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{m}{r_n} \cdot \frac{\hbar^2}{m^2 r_n^2}$$

得出  $r_n$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 m^2 \hbar^2}{m_e e^2}$$

将其代入计算3量子化的半径，代入角速度方程。

$$V = \frac{n\hbar}{m_e} \cdot \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n^2}$$

当n=1时，波尔模型时氢原子的半径成为玻尔半径。

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0.53 \text{ Å}$$

现在我们将其结论不如推导的推广到普遍情形。 $m \rightarrow m^*$ ， $\epsilon_0 \rightarrow \epsilon = s_0 \epsilon_0$

$$\frac{r_n}{a_0} = n^2 \epsilon + \left( \frac{m}{m^*} \right)$$

例如硅中， $n=1$ 时的最简能级为 $\epsilon_1$ 。 $\epsilon_1 = 11.7$   $m^*/m = 0.26$ 。于是

$$\frac{r_1}{a_0} = 4.5 \rightarrow r_1 = 23.9 \text{ Å}$$

这个半径大约是硅晶格常数的四倍。硅中的每个晶胞中含有八个原子，所以施主电子尚未束缚束缚于施主原子。

束缚电子的能级为

$$E = T - V$$

其中T表示电子动能，V表示电子势能。其中动能为 $T = \frac{1}{2} m^* v^2$

将 $V^2$ 代入。

$$T = \frac{1}{2} m^* \cdot \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0 r_n^2)^2} = \frac{m^* e^4}{2(m\hbar)^2 \cdot (4\pi\epsilon_0)^2}$$

势能和束缚电场的势能

$$T = \frac{1}{2} m^* \left( \frac{e}{4\pi \epsilon_0 n \hbar} \right)^2 = \frac{2|n|^2 \cdot |4\pi \epsilon_0|}{}$$

势能和束缚电场的势能

$$V = \frac{-e^2}{4\pi \epsilon_0 r_n} = \frac{-m^* e^4}{|n|^2 (4\pi \epsilon_0)^2}$$

所求能量为

$$E = T + V = \frac{-m^* e^4}{8\pi \epsilon_0^2 |n|^2}$$

在真空中，处于最低状态的能量是  $E = -13.6 \text{ eV}$ ，而硅中为  $E = -2.8 \text{ mV}$ （当然不是最低能量状态）。

这一数值远大于禁带宽度。  
那么对于半价层半导体，我们大概可以知道一下该半级，毕竟这是一个半价层半导体，和杂质相互作用也多，所以禁带的误差一定会比较大。但实验和理论都证明，微带级是差不多的。

杂质		Si 电离能 (eV)
施主	磷	0.34
施主	砷	0.45
受主	硼	0.04
受主	氯	0.66

这里要说明，电离能只能为正，因为讨论的是负的电荷，电子需要吸收能量才能被电离，电离能必须理解为对电子吸力。

### 2.3 II-V族半导体

在介绍 P 型时，曾经给出过硅和砷化镓的 E-EF 关系图。从图中我们能看到，GaAs 的价带顶和导带顶在 k=0 处，称为直接半导体，如果电子从价带进入导带，会吸收能量，所以可以做发光器件。Si 从价带顶到导带底会移动不仅会吸收能量，位置也会发生变化，也就是说电子的轨道会发生改变，称为间接半导体。用外光电效应都可以知道。

以 GaAs 为代表的半导体叫 II-V 族半导体。注意，其中 As 是 V 族元素，而 Ga 是 III 族元素。

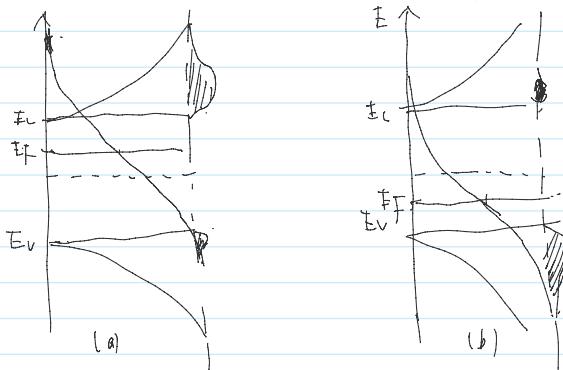
那么 II 族元素亲和度比杂质原子高，VI 族元素则是施主杂质，而 IV 族元素会因代换半径不足造成 V 族原子表现不同的特性。被称为双性杂质。若在砷化镓中掺杂 Si，则 Si 主要会表现成施主杂质，而掺杂 Ge，主要会表现出受主杂质。

## 3. 非本征半导体

非本征半导体有一种载流子会起主导作用，电子或空穴，从而改变价带或导带中载流子的浓度，我们知道半导体材料中服从下一分布，即当陷阱浓度一定时载流子浓度随能级变化。

### 3.1 电子和空穴平衡状态与分布

元在本征半导体中，载流子的浓度取决于电子和空穴的相对浓度，参考载流子的浓度图。



当掺入施主杂质时，导带中的电子浓度会多于价带中的空穴浓度，所以对应于图(a)即费米能级高于禁带的中间位置。

当掺入受主杂质时，价带的空穴浓度会多于导带中的电子浓度，所以对应于图(b)即费米能级低于禁带的中间位置。

前面提到的公式计算了 n 和 p 的一般表达式

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

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

为了和本征半导体相联系，我们推导出热平衡状态下电子浓度和空穴浓度之外另一种表达形式：假设本征费米能级为  $E_{F0}$ ；

$$E_{F0} = \frac{1}{2} (E_c + E_v) + \frac{3}{4\pi k} \ln \left( \frac{m^*}{m_e} \right)$$

其中载流子浓度为  $N = 2 \left( \frac{2\pi m^* k T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$

再引入他能级的方法根据平衡选择  $\rightarrow E_{F1} - E_{F0}$  或  $\times 10^3 \text{ eV} \times \frac{E_{F1}}{E_{F0}}$ ，这里选择 +

$$n_0 = N_c \exp \left[ -\frac{(E_c - E_{F0} + E_{F1} - E_{F0})}{kT} \right]$$

$$= N_c \exp \left[ -\frac{(E_c - E_{F1})}{kT} \right] \exp \left[ -\frac{(E_{F1} - E_{F0})}{kT} \right]$$

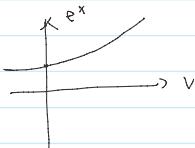
$$n_0 = n_i \exp \left[ -\frac{(E_{F1} - E_{F0})}{kT} \right] \quad \text{，其中 } n_i \text{ 是本征半导体电子浓度。}$$

$$p_0 = p_i \exp \left[ -\frac{(E_F - E_{F1})}{kT} \right] \quad \text{，其中 } p_i \text{ 是本征半导体的空穴浓度。}$$

通过分析可以清楚的看到费米能级是如何影响载流子浓度的。

可以看出，当  $E_F > E_{F1}$  时， $n_0 > p_0$

通过分析可以清楚的看到费米能级是否影响载流子浓度的。



可以看出当  $E_F > E_C$  时,  $n_0 > p_0$

当  $E_F < E_C$  时,  $n_0 < p_0$ .

### 3.2 $n_0$ 和 $p_0$ 的表达式。

在本讲中导出了通过一般通用表达式得到了

$$n_i = N_c N_V \exp\left[-\frac{E_F}{kT}\right].$$

而这里则可以改写为

$$p_0 n_0 = N_c N_V \exp\left[-\frac{E_F}{kT}\right].$$

这里要如何理解呢?

$N_c$  和  $N_V$  都是从  $G_0$  和  $G_V$  变形而来, 而载流子浓度则是从上空间推来的。其中蕴含着一层博士叶变换的关系, 所以  $n_0$ ,  $p_0$  的浓度是上空间的结果。同时也是在单坐标下相加的结果。换句话说, 这也是量子数独立的一个经典结果, 合成公式看似很简单, 但却十分重要。

但是需要注意的是, 加和的电流结果和载流子浓度的取系选择往往并不D分布认为被本的费米分布的前提下, 若  $E_F$  不能远大于  $E_C$ , 则这个等式是不成立的。

严格来说, 对于半导体器件中并不存在本征载流子浓度, 但是, 我们仍然可以将其看作一个常数参数。

### 3.3 费米狄拉克积分。

下面讨论一下很多情况下或者不成主心的情况下, 那么费米能级很可能会影响到导带中, 或者价带中, 和载流子是需要严格算

$$n_0 = \int_{E_C}^{\infty} G_0(E) f_F(E) dE.$$

$$p_0 = \int_{-\infty}^{E_F} G_V(E) [1 - f_F(E)] dE.$$

$$\begin{aligned} &= \int_{E_C}^{\infty} \frac{4\pi (2m_F^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \sqrt{E-E_C} \cdot \frac{1}{1 + \exp[-(E-E_F)/kT]} dE \\ &= \frac{4\pi (2m_F^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_{E_C}^{\infty} \frac{\sqrt{E-E_C}}{1 + \exp[-(E-E_F)/kT]} dE \quad \text{先将系数移到积分外面.} \\ &= \frac{4\pi (2m_F^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_{-\infty}^{E_F} \frac{\sqrt{EV-E}}{1 + \exp[-(E-E_F)/kT]} dE \end{aligned}$$

为了计算有效状态密度, 我们同样将变量代换

$$\eta = \frac{E - E_C}{kT} \quad dE = kT d\eta$$

$$\eta' = \frac{EV - E}{kT} \quad dE = -kT d\eta.$$

$$\frac{4\pi (2m_F^*)^{\frac{3}{2}}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{kT^2 \sqrt{\eta}}{1 + \exp[\eta - \eta']} d\eta. \quad \text{其中 } \eta' = \frac{EV - E}{kT}. \quad \int_0^{\infty} \frac{-kT^2 \sqrt{\eta'}}{1 + \exp[\eta' - \eta]} d\eta' = \eta' F_2(\eta').$$

那么, 可以定义上两个积分分布费米一狄拉克积分。

$$F_2(\eta') = \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\eta}}{1 + \exp[\eta - \eta']} d\eta$$

这个积分目前积不出来, 也能通过图表求解, 如图所示。

如果  $|\eta'| \gg 1$ , 则费米能级主要在导带中, 同理若  $\eta' \ll 0$ , 则就在价带中。

### 3.4 简单的非均匀半导体。

我们在讨论向导带中加入杂质时, 其实暗含了如下假设:

假设掺杂的杂质原子与杂质原子之间没有相互作用, 能级则不会分裂, 这样半导体称为非简并半导体。

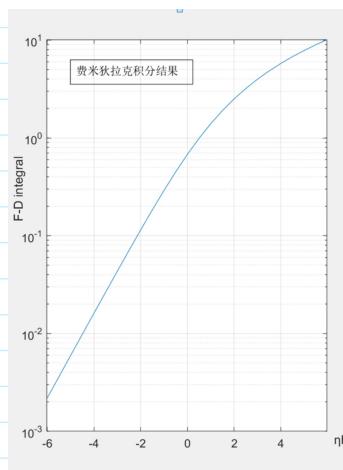
若浓度增加, 则杂质原子间距逐渐减小, 将达到施主原子开始相互作用的临界点(这时能级则开始分离的能带, 半导体以及绝缘体带, 则有可能与导带带或价带带相交叠, 这种情况发生在多子在导带或价带中, 多子的有效状态密度可限制施主浓度的时候, 会产生交叠, 当多子有效状态密度等于多子浓度时, 根据

$$n_0 = N_c \exp[-(E_C - E_F)/kT] \quad p_0 = N_V \exp[-(E_F - E_V)/kT]$$

$$\text{其中 } N_c = 2 \cdot \left( \frac{2\pi m_F^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad N_V = 2 \cdot \left( \frac{2\pi m_V^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

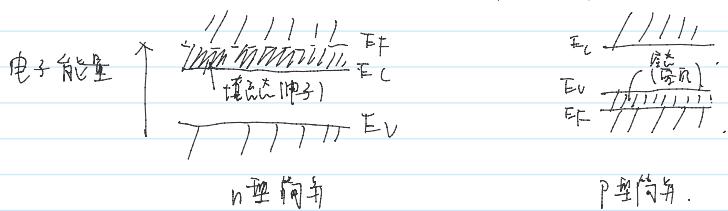
若  $n_0 > N_c$  或  $p_0 > N_V$ , 则  $E_C - E_F < 0$ ,  $E_F - E_V < 0$ 。

费米能级会进入导带或者价带中, 这就不能用被本的D分布了, 而要用下D。



电子能量  $\downarrow$   $\frac{1}{E_F - E_C}$

$E_C \downarrow$   $\frac{1}{(E_F - E_V)}$



## 4. 施主和受主的统计分布.

量子力学也是门统计学，我们这里也用统计学的方法讨论施主和受主的状态。

### 4.1 根本分布函数.

假设有n个电子和g个空穴，对应n个能级。

对于施主能级来说，有两个电子态，即它们的能级相同且根据泡利原理，两个施主能级，所以只有一个量子态会被占据。那么根本分布就不应该是T-D分布了，因为不再起离散作用了。

在根本分布函数中， $\frac{P(S_n)}{P(C_A)}$  中， $P(S_n)$  的根本分布变为1，因为量子态只会有一个被占据。

$$F_{\text{根本}} = \frac{n_d}{N_d} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp[-(E_d - E_F)/kT]} \quad \text{其中 } E_d \text{ 为施主电子能级, } N_d \text{ 为施主原子浓度}$$

$\frac{1}{2}$  也称为  $\frac{1}{g}$ ， $g$  为简并因子，简单理解上节所讲一样，反、非奇数变化态。

那么  $n_d + N_d^+ = N_d$ ，其中  $N_d^+$  是净施主杂质浓度。

若对受主原子进行相似分析。

$$\frac{P_n}{N_a} = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp[-(E_a - E_F)/kT]}, \quad N_a^- + P_n = N_a$$

对于硅和砷化镓，受主能级的基态简并因子值取4。

对于施主，若掺杂B，则为  $n=2, l=0, m=0, s=\pm\frac{1}{2}$ ，所以  $g$  为2。

对于受主，若掺杂P或S，因为  $g=4$ ，由于在光激励过程中吸收率  $n=2$ ，所以速率过大被捕获。

### 4.2 完全电离和束缚态

假设  $E_d \gg E_F$ ，即电子数相对较少时，可以用玻尔兹曼分布。

$$n_d \approx \frac{N_d}{\frac{1}{2} \exp[-(E_d - E_F)/kT]} = 2N_d \exp[-(E_d - E_F)/kT]$$

由于这是简单的半导体，所以导带中也可以用玻尔兹曼分布。

$$n_o = N_o \exp[-(E_c - E_F)/kT]$$

我们想知道施主能级上相对电子数，即

$$\frac{n_d}{n_d + n_o} = \frac{2N_d \exp[-(E_d - E_F)/kT]}{2N_d \exp[-(E_d - E_F)/kT] + N_o \exp[-(E_c - E_F)/kT]}$$

约等于

$$\frac{n_d}{n_d + n_o} = \frac{1}{1 + \frac{N_o}{2N_d} \exp[-(E_c - E_F) - (E_d - E_F)]/kT} = \frac{1}{1 + \frac{N_o}{2N_d} \exp[-(E_c - E_d)/kT]}$$

而  $E_c - E_d$  就是电离能。

在室温状态下，这个比例约为0.4%，非常小，绝大多数都已经电离，称为完全电离状态，这种状态称为完全电离状态。

在受主原子中同样也这样。

而  $T=0$  K 时，由于最低能级不变，不发生电离， $E_d < E_F$ 。

由于是简并状态， $E_F < E_c, E_F > E_v$ ，所以杂质能级  $E_F$  不变， $E_d < E_F < E_c$  或  $E_a > E_F > E_L$ 。

节上把这里的序号弄错了，不知道什么原因。这时正极态则称为束缚态，这样借用量子力学的根概念。

## 5. 体中性状态

在高耗尽状态，半导体处于电中性状态，电子分布在不同的能级状态中产生正负电荷，但净空间密度为0。

前面已经介绍到电子密度和空穴密度是掺杂浓度的函数，那么同时引入两种掺杂，就会形成补偿半导体，其结果是必然的。

### 5.1 补偿半导体

当  $N_d > N_a$  时，形成3n型补偿半导体。

当  $N_d = N_a$  时，形成完全补偿半导体。

当  $N_d < N_a$  时，形成3p型补偿半导体，那么电子和空穴个数相同，因此有了保证半导体中性特征，在后面有证明。假设补偿半导体的结果是必然的。

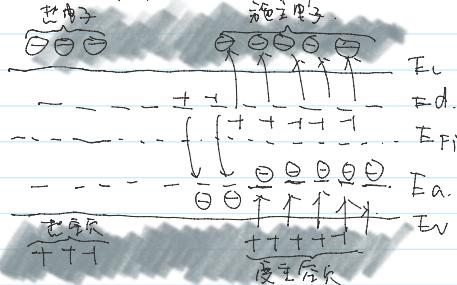
### 5.2 平衡电子和空穴密度。

先给出补偿半导体的能量示意图。

W表示耗尽层.

## J.2. 平衡电荷和空穴浓度.

先给出补偿半导体的能带示意图.



热电子不参与电中性.

那么由中性的条件.

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

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

(这样式子中  $n_0$ ,  $p_0$ ,  $N_a$ ,  $N_d$  我们都得到了他们之间的根本关系.

我们认为是在完全电离条件下(室温下通常就可以) 则  $N_a$  和  $p_0$  等于零

$$n_0 + N_a = p_0 + N_d$$

另外, 根据  $n_0 \cdot p_0$  乘积  $n_0 p_0 = n_i^2 \Rightarrow p_0 = \frac{n_i^2}{n_0}$

$$n_0 + N_a = \frac{n_i^2}{n_0} + N_d$$

$$n_0^2 - (N_d - N_a)n_0 - n_i^2 = 0$$

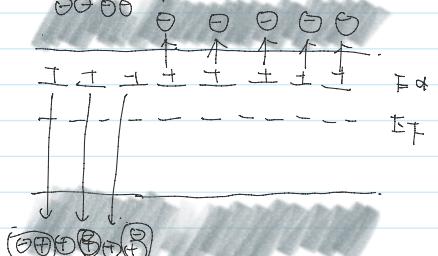
解一下这个方程.

$$n_0 = \frac{(N_d - N_a) \pm \sqrt{(N_d - N_a)^2 + 4n_i^2}}{2} = \frac{N_d - N_a}{2} + \sqrt{\frac{(N_d - N_a)^2}{4} + n_i^2}$$

取正号因为浓度不能为负. 在此条件下,  $N_d - N_a = 0$ .  $n_0 = n_i$ .

根据解的形式, 只当  $N_d > N_a$  时, 式子才有意义. 所以只适用于型和完全补偿半导体. 随着施主原子的加入, 增加的并不超过本征载流子浓度. 同时, 补偿中的空穴浓度将等于本征载流子浓度. 而且, 随着施主原子的加入, 中子侧会有效剂量. 状态中重新分布. 少部分施主电子与本征空穴复合. 所以少部分载流子空穴的浓度降低了. 而本征载流子浓度也不等于施主浓度. 加上本征电子浓度. 即  $n_0 = n_i + N_d$  (即使完全电离).

图示一个半正.



这里举一个例子. 计算给定掺杂深度条件下, 本征半导体中平衡载流子浓度和空穴浓度,

假设  $T=300K$ , 本征载流子浓度为  $N_i = 5 \times 10^{13} cm^{-3}$ ,  $N_a = 0$ . 本征载流子浓度为  $n_i = 2.4 \times 10^{13} cm^{-3}$ .

代入公式:

$$n_0 = \frac{N_d}{2} + \sqrt{\frac{(N_d)^2}{4} + N_i^2} < N_d + N_i = 5.97 \times 10^{13} cm^{-3}$$

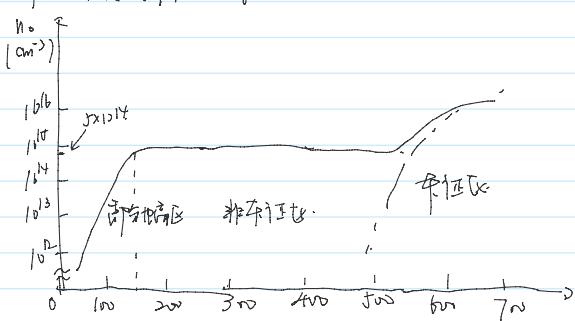
$$p_0 = \frac{n_i^2}{n_0} = 6.67 \times 10^{12} cm^{-3}$$

这里掺杂深度和本征载流子浓度数据差不多, 中子浓度变化会受到本征载流子浓度的影响.

希望电子进入价带(少部分)

半正载流子浓度.  $n_i^2 = N_a N_v \exp \frac{-E_g}{kT}$ . 所以它是温度的指数函数. 当温度上升时,  $n_i$  增大. 所以从半正半导体将占主导地位. 最终半导体会失去他的非半正特性. 因为掺杂浓度为  $\times 10^{14} cm^{-3}$  时电子浓度与温度的关系. 随着温度增加.

半正浓度将降低为主导地位.



这里计算一下掺杂度主原子多于施主原子的情况, 同样假设完全电离.

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

$$\Rightarrow n_0 + (N_a - p_0) = p_0 + (N_d - n_0)$$

$$\Rightarrow n_0 + N_a = p_0 + N_d. \quad n_0 = \frac{n_i^2}{p_0}$$

$$\Rightarrow p_0^2 - (N_a - N_d)p_0 - n_i^2 = 0$$

$$\Rightarrow p_0 = \frac{N_a - N_d}{2} + \sqrt{\frac{(N_a - N_d)^2}{4} + n_i^2}$$

$$\rightarrow n_0 = \frac{n_i^2}{p_0}$$

## 6. 费米能级位置.

前面章节关于费米能级的位置已经讨论了不少.

$$半正费米能级 E_F = \frac{1}{2} (E_L + E_V) + \frac{3}{4} kT \ln \frac{N_p}{N_n}$$

而非半正半导体中, 由于  $n_0 \neq p_0$ , 所以不能用杂质半导体一种来描述费米能级位置.

$$n_0 = N_c \exp \left[ -\frac{|E_C - E_F|}{kT} \right] \quad p_0 = N_v \exp \left[ -\frac{|E_F - E_V|}{kT} \right]$$

$$\rightarrow n_i \exp \left[ -\frac{|E_F - E_F|}{kT} \right] \quad p_0 = n_i \exp \left[ -\frac{|E_F - E_F|}{kT} \right]$$

我们现在有了  $n_0$  和  $p_0$  的数学表达式, 所以我们就可以求出半正半导体/非半正能级位置.

### 6.1 故障推导.

半正半导体的能带图. 价带（FV）和导带（Fd）之间有一个禁带（Eg）. 本征载流子浓度为  $n_i = N_c = N_v$ .

我们现在有了  $N_d$  和  $P_0$  的数学表达式，所以我们就可以求出非平衡半导体中费米能级位置。

### 4.1 费米推导

利用电中性条件和  $P_0 n_0 = N_i^2$  这两个空间电中性条件，我们可以将  $P_0$  和  $n_0$  转化为已知的  $N_d$ ,  $N_a$  和  $N_i^2$ 。这样方程中将没有未知数，自然可以求解。

首先求出  $E_c - E_F$ :

$$E_c - E_F = kT \ln \frac{N_c}{N_0}$$

考虑主能带半满时，处于非平正态，那么  $N_d \gg n_i$ ，根据

$$n_0 = \frac{N_d - N_a}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_d - N_a}{2}\right)^2 + P_0^2} \quad \text{则 } n_0 \approx N_d - N_a$$

$$E_c - E_F = kT \ln \frac{N_c}{N_d - N_a}$$

所以，随着施主杂质浓度增加，费米能级向上移动。这也和之前能带半满时一致，这里当然讨论的是简单半满。

面向还可以推导：

$$E_F - E_F^i = kT \ln \left( \frac{n_0}{m} \right)$$

由电中性条件给出， $n_0$  与载带密度有关。

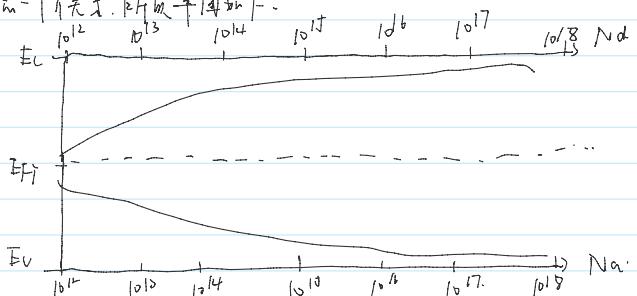
### 4.2 费米能级和温度的关系

我们这里再研究一下。费米能级和导带底是怎样的关系，即直接计算  $E_c - E_F$  或  $E_F - E_V$ 。

$$\begin{aligned} E_c - E_F &= kT \ln \left( \frac{N_d}{[N_d N_a \exp(-\frac{E_F}{kT})]^{1/2}} \right) = N_d \cdot kT \ln \left[ \frac{\exp(-\frac{E_F}{kT})}{2 \left[ \frac{2\pi m^* kT}{h^2} \right]^{1/2} \cdot 2 \left[ \frac{2\pi m^* kT}{h^2} \right]^{1/2}} \right]^{1/2} \\ &= N_d \cdot kT \ln \left[ \frac{1}{2} \cdot \exp(-\frac{E_F}{2kT}) \cdot \left( \frac{h^2}{2\pi kT} \right)^{-1/2} \cdot (m^* m^*)^{-1/4} \right]. \end{aligned}$$

我们主要研究的材料材料是非平衡状态公式比较复杂，我们需要计算一大段的多项式阶数。因此用图即可。

所以大概就是关于  $N_d$  和  $E_F$  的关系，所以本图如下：



如图所示，随着浓度增加，逐渐靠近。

我们再来讨论一下温度。

把指数项用泰勒公式展开一下。

$$\exp(-\frac{E_F}{2kT}) \approx 1 + \frac{E_F}{2kT} + \frac{E_F^2}{4(kT)^2} \dots$$

所以  $N_d - N_F$  基本和  $kT$  成  $N_d - N_F \sim (kT)^{1/2}$  关系

更近的图型过于复杂，这里直接看图3。

高温度下，非平衡特性开始消失， $E_F \rightarrow E_F^i$ 。

当温度很小时，出现新特点，不能假设为波尔兹曼分布，同时时，能级位于图上成  $E_F$ 。

下，因为破坏规则，是最佳能量状态，所以  $E_F > E_F^i$  或  $E_F < E_F^i$

### 4.3 费米能级应用

由于温度下，费米能级会趋于一个值，这个值不受费米能级不变，而是当两种不同的半导体相结合后，会向无序方向发展。

最后达到平衡的最大值。那是因为两种材料将会有相同的费米能级，我们已经学习了模电，那么就简单讨论一下 P型和 N型。

