Ch 4 半导体中载流子统计分布（I）

参考资料：

1. 半导体物理导论，刘诺，Ch4
2. 半导体物理学，刘恩科，Ch3
3. 半导体物理基础，黄昆，Ch2：2.2，2.3,2.4

…

Key Questions in this Chapter

- How many electrons and holes are there in thermal equilibrium in a given semiconductor? 热平衡态半导体中载流子数量?
- How does the equilibrium electron (hole) distribution in the conduction (valence) band look like? 载流子在价带、导带中分布?
- How can one compute n_i? 如何计算载流子浓度?
- Where is the Fermi level in a given semiconductor? How does its location depend on doping level?

  如何确定费米能级位置?费米能级与掺杂浓度的关系?

内 容

- 能带中的态密度
- 载流子的热平衡状态
- 热平衡状态下，半导体中载流子的分布概率
- 半导体中载流子浓度的计算
- 本征半导体费米能级和载流子浓度的计算
- 半导体杂质载流子浓度的计算
- 简并半导体
- 非平衡载流子

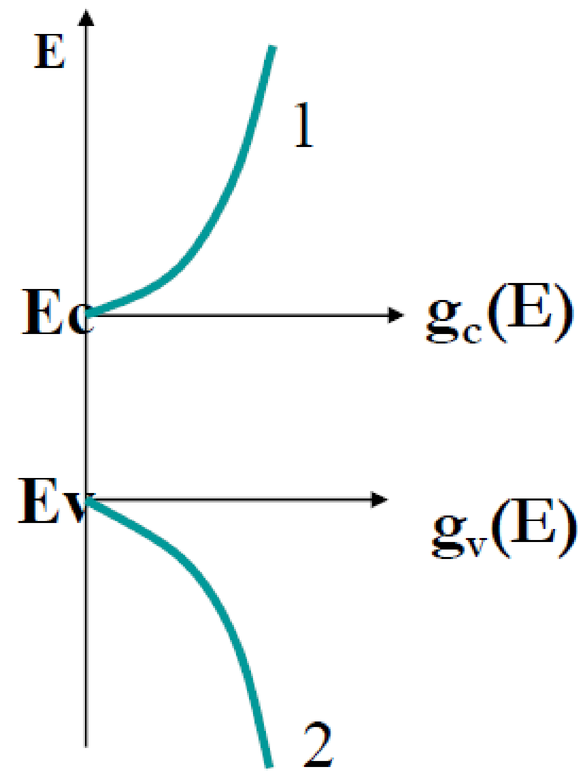
4.1 态密度的物理意义

- 允许电子存在的量子态（能级）是如何按能量大小分布的？

- 每一个确定的能量E有多少允许电子存在的量子态？

$$g_c(E) = 4\pi V\left(\frac{2m_n^*}{h^2}\right)^{3/2}\left[E(k) - Ec\right]^{1/2}$$

$$g_V(E) = 4\pi V\left(\frac{2m_{dp}^*}{h^2}\right)^{3/2}\left[E_V - E(k)\right]^{1/2}$$



4.2 热平衡状态

对于一个不受外界影响的系统，不论其初始状态如何，经过足够长的时间后，必将达到一个宏观性质不再随时间变化的稳定状态，这样的状态称为热平衡态，简称**平衡态**。

系统处于平衡态须同时满足两个条件：

1、系统与外界在宏观上无能量和物质的交换；

2、系统的宏观性质不随时间变化。换言之，系统处于热平衡态时，系统内部任一体元均处于**力学平衡**、**热平衡**(温度处处相同)、**相平衡**(无物态变化)和**化学平衡**(无单方向化学反应)之中。

如果系统不具备两个平衡条件之一的状态，都叫非平衡态。

系统处于平衡态，用于描写热平衡态下各种宏观属性的物理量叫做系统的状态参量。

通常用压强、体积、温度作为描述系统的状态参量。

- 热平衡态是一种理想状态；

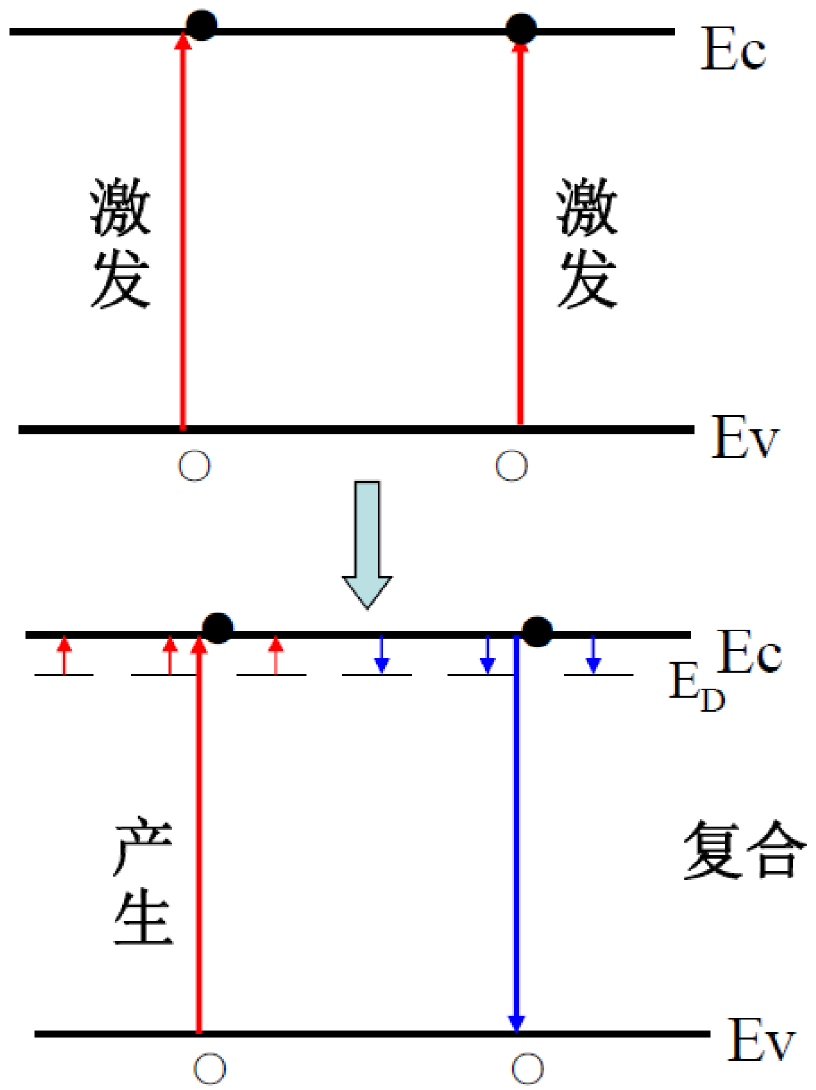
- 平衡态仅指系统的宏观性质不随时间变化，从微观的角度来说，组成系统的大量粒子仍在不停地、无规则地运动着，只是大量粒子运动的平均效果不变，这在宏观上表现为系统达到平衡，因此这种平衡态又称热动平衡态。

在热平衡条件下，一切微观过程都在统计平均意义上保持着细致平衡；任何方向相反的两个微观过程，都以相等的速率进行，从而使物体的宏观性质保持不变。

一、半导体的热平衡

在一定的温度下，存在：

- 产生载流子过程–电子从价带或者杂质能级向导带跃迁；
- 复合过程–电子从导带回到价带或杂质能级上。



在平衡状态下，
产生数 = 复合数

热平衡状态（能量守恒与能量最小制约的结果）

二、热平衡时的载流子浓度

- 在热平衡下，半导体导带中的电子浓度和价带中的空穴浓度将保持一个稳定的统计平均值（与温度和杂质有关）。

- 载流子浓度取决于：

1. 允许电子存在的量子态是如何按能量分布的，或者说，每一个能量*E*有多少允许电子存在的量子态？（态密度）

2. 电子是按什么规律分布在这些能量状态的？（分布函数）

4.3 热平衡态时电子在量子态上的分布几率

费米子：自旋为半整数（n+1/2） 的粒子（如：电子、质子、中子 等），费米子遵从Fermi－Dirac统计规律，费米子的填充满足Pauli原理

玻色子：自旋为整数n的粒子（如：光子、声子等），玻色子遵从Bose－Einstein统计规律，玻色子不遵从Pauli原理

一、 Fermi能级和Fermi分布函数

1. Fermi能级

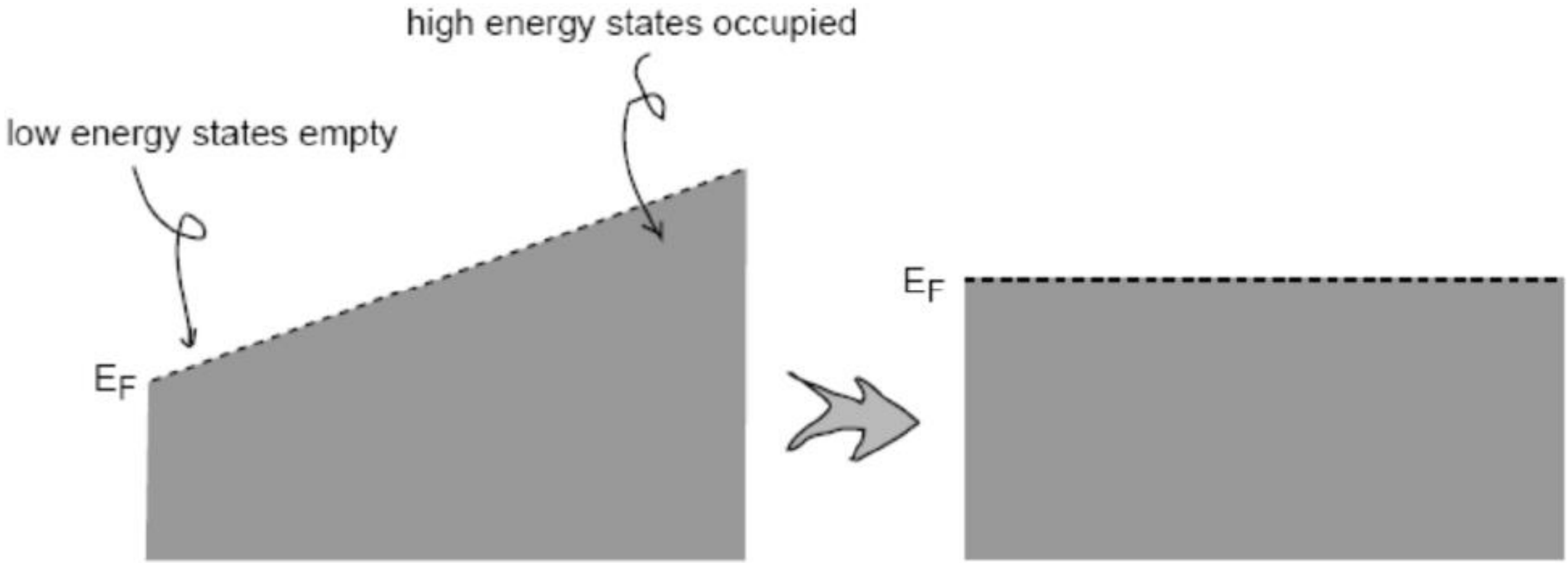
将半导体中大量电子的集体看作为一个热力学系统，由统计理论证明，**费米能级E_F是系统的化学势**：

$$E_F = \mu = \left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_T$$

μ代表系统的化学势；F为系统自由能。

费米能级E_F的意义： 当系统处于热平衡状态，也不对外界做功的情况下，系统中增加一个电子所引起的系统自由能的变化，等于系统的化学势，即系统的费米能级。处于热平衡状态的系统有统一的化学势，所以处于热平衡状态的电子系统有统一的费米能级。

Simple illustration



- In thermal equilibrium, E_F constant throughout system

2. 在导带和价带的Fermi分布函数

Fermi分布函数–电子占据能量E的几率

$$\boxed{f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}}$$

式中E_F具有能量量纲，称为**费米（Fermi）能级**

没有被电子占据的几率（对于半导体，或者被空穴占据的几率）为

$$\boxed{1-f(E)=\frac{1}{e^{-\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}}$$

$k\equiv Boltzmann\ constant\ =8.62\times10^{-5}\ eV/K$

$kT\equiv thermal\ energy\ =25.9\ meV\ @\ 300\ K$

Fermi 能级(E_F)的意义：

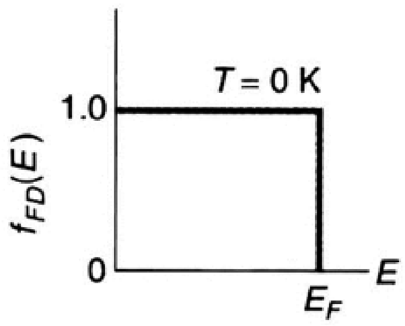
- 定义为在该能级上的一个状态被电子占据的几率正好是1/2；
- 代表了电子的填充能级高低.

能量对$f(E)$的影响：

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

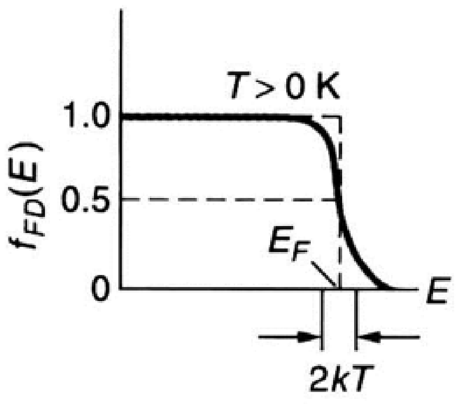
T=0K时

$E>E_F$	$f(E)=0$
$E=E_F$	$f(E)$值不定
$E<E_F$	$f(E)=1$



T>0K时

$E>E_F$	$f(E)<1/2$；	$E>>E_F$	$f(E)\to 0$
$E=E_F$	$f(E)=1/2$		
$E<E_F$	$f(E)>1/2$；	$E<<E_F$	$f(E)\to 1$

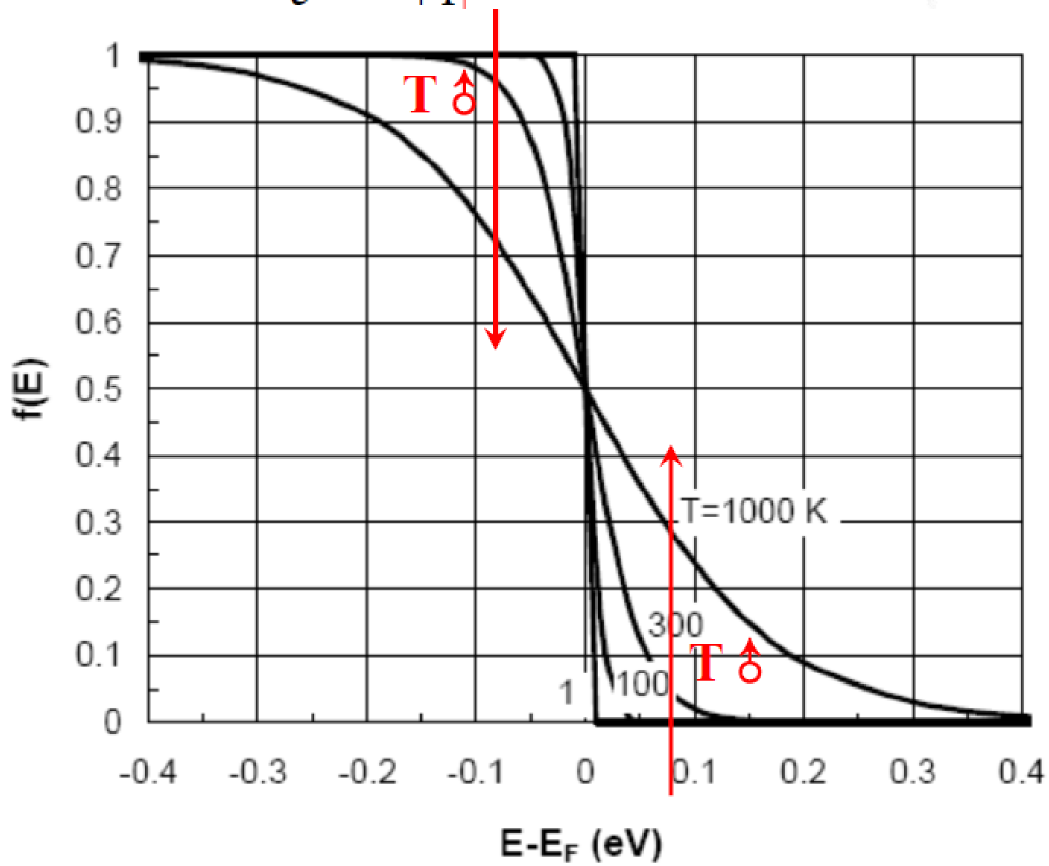


温度对$f(E)$的影响：

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1} \Rightarrow \begin{cases} E<E_F: f(E)=\dfrac{1}{e^{-\frac{|E-E_F|}{k_BT}}+1} \\ E>E_F: f(E)=\dfrac{1}{e^{\frac{|E-E_F|}{k_BT}}+1} \end{cases}$$

$$T\uparrow \Rightarrow e^{-\frac{|E-E_F|}{k_BT}}\uparrow \Rightarrow f(E)\downarrow$$

$$T\uparrow \Rightarrow e^{\frac{|E-E_F|}{k_BT}}\downarrow \Rightarrow f(E)\uparrow$$



例 1

试计算： 量子态能量E比费米能级E_F分别高或低$5k_BT$时电子占据该量子态的几率是多少？

解： 根据Fermi-Dirac分布有：

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

$E-E_F>5k_BT$时：

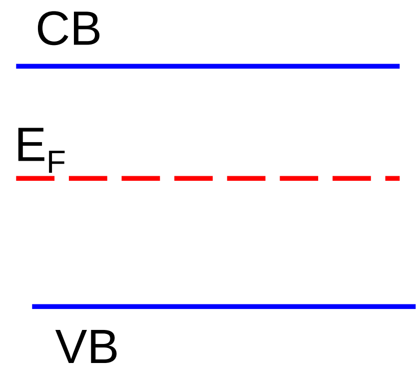
$$f(E)<\frac{1}{1+e^{5}}=0.007$$

$E_F-E>5k_BT$时：

$$f(E)>\frac{1}{1+e^{-5}}=0.993$$

二、 Boltzmann分布

1. 电子的Boltzmann分布



当**$E-E_F>>k_BT$**时，$e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}>>1$

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}\approx e^{\frac{E_F-E}{k_BT}}=f_B(E)$$

电子的量子Fermi分布f(E) ⟹ 电子的经典Boltzmann分布$f_B(E)$

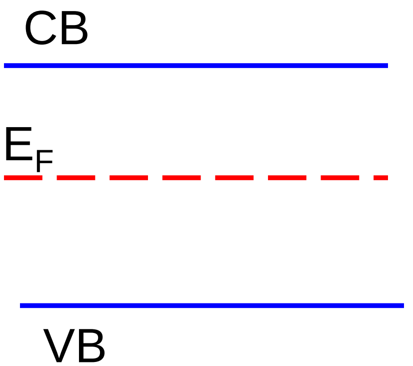
- 电子占据导带中能级的概率：随能量升高按e指数迅速下降。
- 从导带底向上，越高的能级上电子越稀少；
- 导带中，电子是集中在导带低附近的。

2. 空穴的Boltzmann分布

当E_F-E>>k_BT时，同理

$$f_p(E)=1-f(E)=\frac{1}{e^{-\frac{E-E_F}{k_BT}}+1}\approx e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}$$

空穴的经典Boltzmann分布



- 空穴占据价带中能级的概率：随能量的下降按e指数迅速下降。
- 从价带顶向下，越低能级上空穴越稀少；
- 价带中，空穴是集中在价带顶附近的。

玻尔兹曼分布的合理性

1. 玻尔兹曼分布符合电子能带图，即高能态电子占据的几率小，电子填充能带时是按照泡利原理和能量最低原理的；

2. 对一般半导体，E_g~1eV，T不太高，杂质浓度不太高，E_F多数位于禁带之中，而且(E_C-E_F)或(E_F-E_V)远远大于kT，导带电子和价带空穴浓度都远小于能带中的状态密度，也就是说对导带电子和价带空穴都满足使用玻尔兹曼分布的条件，根本不存在两个电子或空穴争占同一状态的情况。因此，不考虑泡利原理的玻尔兹曼分布既简化了问题也符合实际情况。

小结： 一般半导体（E_g~1eV）,在室温（kT~0.0259eV），导带中的电子和价带中的空穴分布都满足使用玻尔兹曼分布条件

简并半导体和非简并半导体

满足： $E-E_F \gg kT$

或$E_F-E \gg kT$

称为**非简并半导体**

其它称为**简并半导体**。

内容

- 能带中的态密度
- 载流子的热平衡状态
- 热平衡状态下，半导体中载流子的分布概率
- 半导体本征载流子浓度的计算
- 半导体杂质载流子浓度的计算
- 简并半导体