

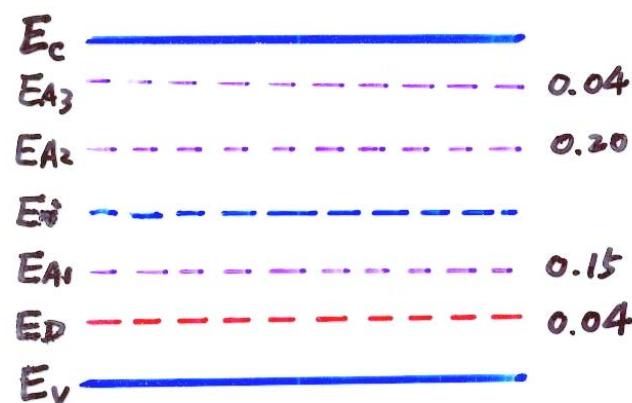
# 4.1 硅、锗晶体中的杂质能级<sub>9</sub>

## 4.1.5 深能级杂质

—当半导体中存在非 III, V 族杂质时，会引入深能级

- 特点：
1. 杂质能级离带边较远， $\Delta E_D$ ,  $\Delta E_A$  可与  $E_g$  相比拟；
  2. 多次电离  $\Rightarrow$  多重能级，还有可能成为两性杂质.

Ge 中的 Au (I 族元素)



五种带电状态：  $Au^+ \quad Au^0 \quad Au^- \quad Au^{2-} \quad Au^{3-}$

$E_D$	$E_{A1}$	$E_{A2}$	$E_{A3}$
-------	----------	----------	----------

1.  $Au^0 \rightarrow Au^+$  释放电子到导带， $\Delta E_D \approx E_g$  且  $\Delta E_D$  略小于  $E_g$  (共价键束缚，电离能很大)
2.  $E_{A1} < E_{A2} < E_{A3}$  (电子间库仑排斥)

## 深能级杂质的作用

1.  $\Delta E_D$ ,  $\Delta E_A$  较大，杂质电离作用较弱，对载流子（导电电子和空穴）浓度影响较小；
2. 对载流子的复合作用较大（复合中心），降低非平衡载流子的寿命.

# 第四章 半导体中杂质和缺陷能级

4.1 硅、锗晶体中的杂质能级

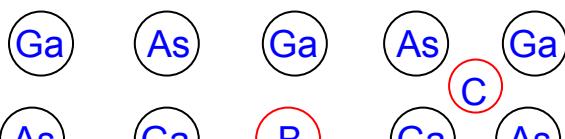
4.2 III—V族化合物中的杂质能级

4.3 缺陷、位错能级

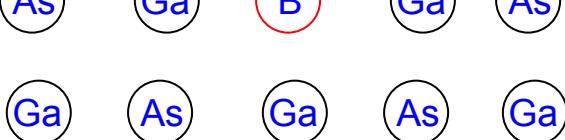
# 4.2 III—V族化合物中的杂质能级<sub>1</sub>

## 4.2.1 GaAs中的杂质

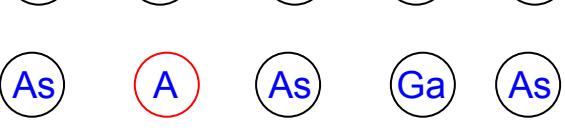
—闪锌矿结构，与金刚石结构类似



替位式杂质：取代 III 族、V 族位置



间隙式杂质：处于 4 个 III 族 (V 族)  
原子围成的正四面体



各族元素在 GaAs 中的杂质行为

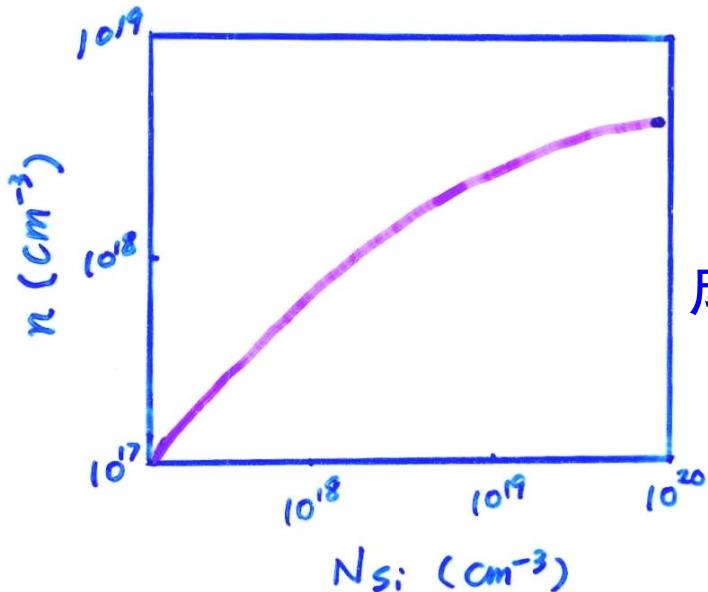
1. I 族 Ag, Au 受主

2. II 族 Be 取代 Ga 位，少 1 个价电子，受主（浅）

3. III 族 In 取代 Ga 位，既不缺少价电子，也不多余  
价电子——等电子杂质

# 4.2 III—V族化合物中的杂质能级<sub>2</sub>

## 4.2.1 GaAs中的杂质



4. IV 族 Si 既可以取代 Ga, 又可以取代 As —— 两性杂质

对于 GaAs 中的 Si, 首先倾向于成为施主, 逐渐小部分成为受主

杂质补偿  $\Rightarrow n$  饱和

5. V 族 P 取代 As 位 —— 等电子杂质

6. VI 族 Te 取代 As 位, 多 1 个价电子, 施主 (浅)

O 深施主 p 型 GaAs 中掺 O —— 半绝缘  
GaAs ( $\sim 10^7 \Omega \cdot \text{cm}$ )

7. 过渡族 Cr 深受主 n 型 GaAs 中掺 Cr —— 半绝缘  
GaAs

# 第四章 半导体中杂质和缺陷能级

4.1 硅、锗晶体中的杂质能级

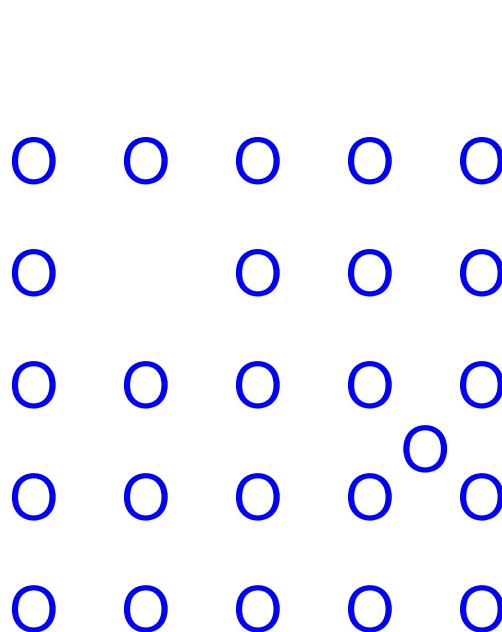
4.2 III—V族化合物中的杂质能级

4.3 缺陷、位错能级

# 4.3 缺陷、位错能级<sub>1</sub>

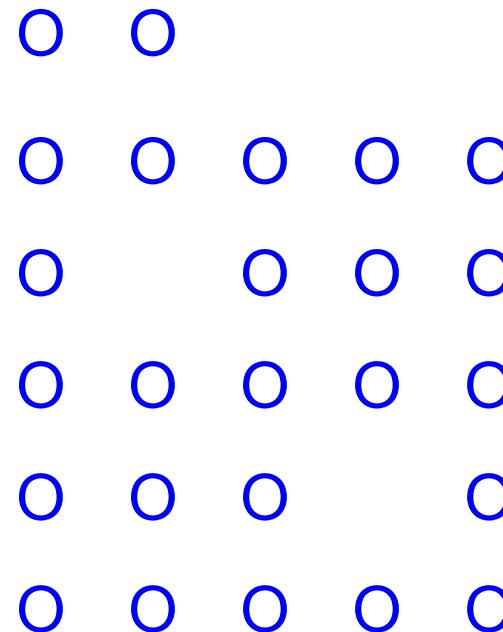
## 4.3.1 点缺陷

1. 杂质原子（替位式，间隙式）
2. 热缺陷（弗兰克尔缺陷，肖特基缺陷）



Frankel 缺陷

空位一间隙成对出现



Schottky 缺陷

只形成空位

—同时存在

—进入间隙需要较大能量，而且迁移容易，因此空位比间隙原子多得多

## 4.3 缺陷、位错能级<sub>2</sub>

### 4.3.1 点缺陷

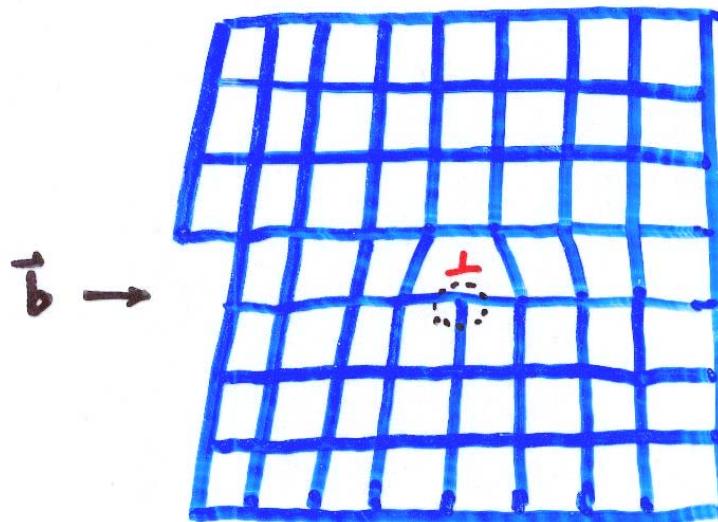
空位：不饱和键，倾向于接受电子——受主

间隙原子：4 个多余的价电子 —— 施主

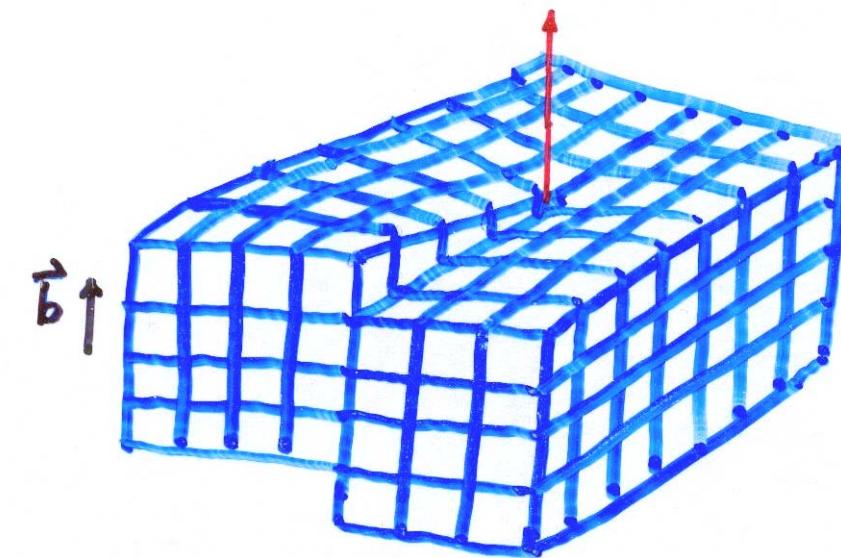
注意：对于 III-V 族 GaAs，除了热振动引起点缺陷外，还会由于 Ga, As 成分偏离正常的化学计量比（1:1），形成 Ga, As 空位。若 Ga 过多，则 As 空位；As 过多，则 Ga 空位。

# 4.3 缺陷、位错能级<sub>3</sub>

## 4.3.2 线缺陷一位错



滑移矢量  $\vec{b} \perp$  位错线



$\vec{b} \parallel$  位错线  
螺位错

Burgers 矢量 刃位错

位错产生的一排多余原子是不饱和键，有一个不成对的电子

若 失去电子 —— 施主  
俘获电子 —— 受主

# 半导体物理

主讲人：蒋玉龙

微电子学楼312室， 65643768

Email: [yljiang@fudan.edu.cn](mailto:yljiang@fudan.edu.cn)

<http://10.14.3.121>

# 第五章 半导体载流子的平衡态统计分布

5.1 状态密度

5.2 费米能级和载流子的统计分布

5.3 本征半导体中的载流子统计

5.4 杂质半导体中的载流子统计

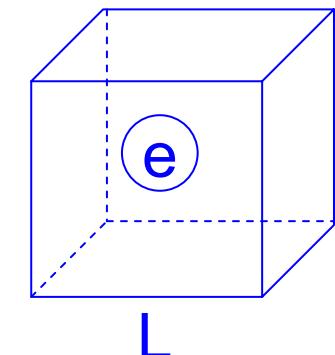
5.5 简并半导体

# 5.1 状态密度<sub>1</sub>

## 5.1.1 复习：三维情况下的自由电子气

— 三维情况下自由粒子的描述遵守薛定谔方程

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



— 考虑在边长L立方体中的电子状态

— 要求波函数是x, y, z的周期函数，周期为L

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$$

$$k_x, k_y, k_z = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots; \pm \frac{2n\pi}{L}$$

$$\exp[ik_x(x + L)] = \exp[i2n\pi(x + L)/L] = \exp(ik_x x)$$

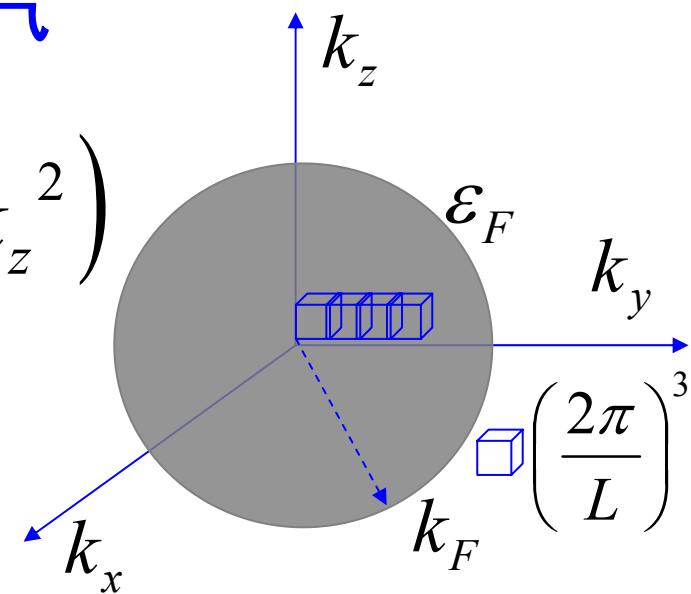
—  $\mathbf{k}$ 的分量是这个问题的量子数；此外，还要考虑自旋方向的量子数 $m_s$ 。

# 5.1 状态密度<sub>2</sub>

## 5.1.1 复习：三维情况下的自由电子气

$$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$k_x, k_y, k_z = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \dots; \pm \frac{2n\pi}{L}$$



—三维情况下电子每个允许状态可以表示为 **k** 空间中一个球内的点，它对应自旋相反的两个电子，二者的能量相同

—波矢分量  $k_x$ ,  $k_y$ ,  $k_z$  量子化的结果是：**k** 空间中的每个最小允许体积元是  $(2\pi/L)^3$ ，即这个体积中只存在一个允许波矢（电子态），由一组三重量子数  $k_x$ ,  $k_y$ ,  $k_z$  决定。

—考虑自旋后，**k** 空间的态密度为：

$$2 / \left( \frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{2V}{(2\pi)^3}$$

# 5.1 状态密度<sub>3</sub>

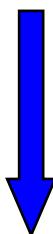
## 5.1.2 状（能）态密度的定义

—状态密度：单位能量间隔内的状态数目

$$g(E) = \frac{dZ}{dE}$$

K空间考虑自旋状态密度为

$$2 / \left( \frac{2\pi}{L} \right)^3 = \frac{2V}{(2\pi)^3}$$



E-k关系

按能量分布的状态密度

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

能量变化  
 $dE$

k状态变化  
 $dk$

k空间体积的变化  
 $d\Omega^*$

状态数的变化  
 $dZ$

# 5.1 状态密度<sup>4</sup>

## 5.1.2 状（能）态密度的定义

—例子：球形等能面

导带的E-k关系：

$$E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$$

球型等能面方程：

$$k^2 = \frac{(E - E_c)2m_n^*}{\hbar^2}$$

球体体积： $\Omega^* = \frac{4}{3}\pi k^3$

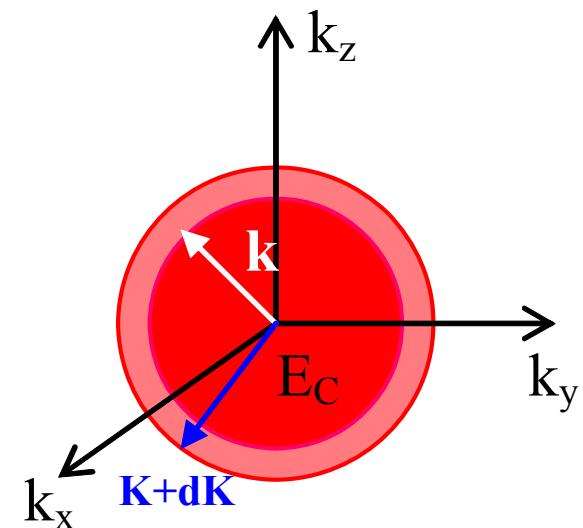
当能量从  $E \rightarrow E + dE$  时，球体半径从  $k \rightarrow k + dk$

球体体积从  $\Omega^* \rightarrow \Omega^* + d\Omega^*$

$$d\Omega^* = 4\pi k^2 dk$$

状态数从  $Z \rightarrow Z + dZ$

$$dZ = \frac{2V}{(2\pi)^3} d\Omega^*$$



能带极值在  $\vec{k}=0$ ，等能面为球面

$$dk = \frac{1}{k} \frac{m_n^*}{\hbar^2} dE$$

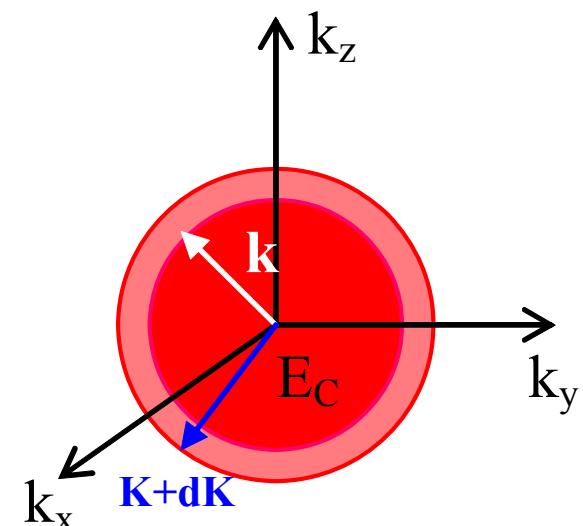
# 5.1 状态密度<sub>5</sub>

## 5.1.2 状（能）态密度的定义

—例子：球形等能面

$$k^2 = \frac{(E - E_c)2m_n^*}{\hbar^2}$$

$$\Omega^* = \frac{4}{3}\pi k^3 = \frac{4\pi}{3} \left[ \frac{2m_n^*(E - E_c)}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}}$$



$$d\Omega^* = \frac{2\pi}{\hbar^3} (2m_n^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} dE$$

能带极值在  $\vec{k}=0$ , 等能面为球面

$$dZ = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_n^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} dE$$

$$g(E) = \frac{dZ}{dE}$$

导带中单位能量  
间隔的状态数

$$g_c(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_n^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$$

# 5.1 状态密度<sub>6</sub>

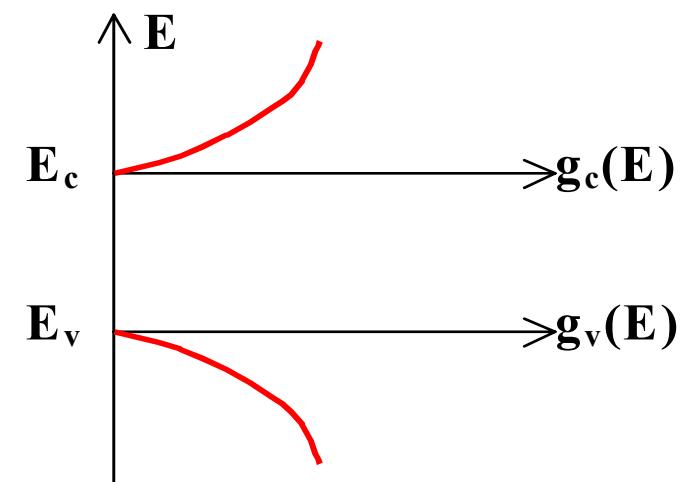
## 5.1.2 状（能）态密度的定义

—例子：球形等能面

价带中单位能量间隔的状态数

$$E(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*}$$

$$k^2 = \frac{(E_v - E)2m_p^*}{\hbar^2}$$

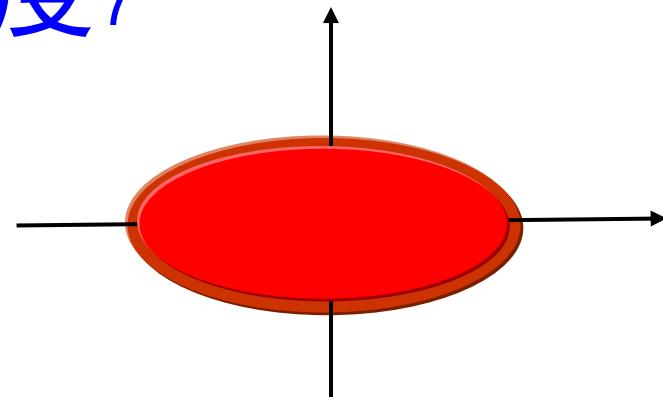


$$g_v(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_p^*)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

特点：

- 状态密度与能量呈抛物线关系
- 有效质量越大，状态密度也就越大
- 仅适用于能带极值附近

# 5.1 状态密度<sub>7</sub>



## 5.1.2 状(能)态密度的定义

—例子：椭球形等能面（导带）

—导带极值在  $\vec{k} = \vec{k}_0$ ，等能面为椭球面

$$E(\vec{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right]$$

椭球的等能面方程：

$$\frac{(k_x - k_{x0})^2}{2m_x^*(E - E_0)} + \frac{(k_y - k_{y0})^2}{2m_y^*(E - E_0)} + \frac{(k_z - k_{z0})^2}{2m_z^*(E - E_0)} = 1$$

椭球的半轴：

$$r_i = \sqrt{2m_i^*(E - E_c)} / \hbar \quad i = x, y, z$$

椭球的体积：

$$\Omega^* = \frac{4}{3}\pi r_x r_y r_z = \frac{4\pi}{3\hbar^3} (8m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/2} (E - E_c)^{3/2}$$

能量变化  $dE$  引起的体积变化：

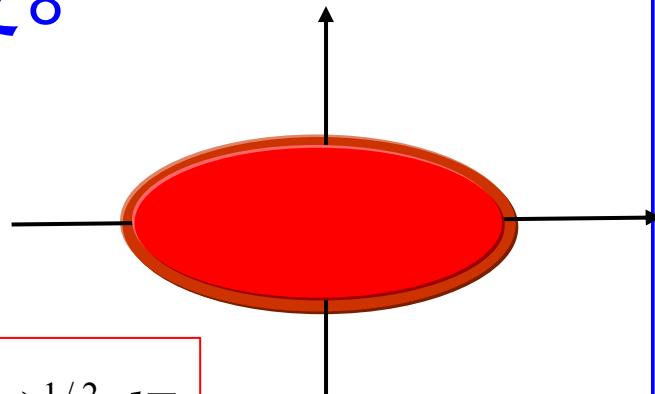
$$d\Omega^* = \frac{2\pi}{\hbar^3} (8m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/2} (E - E_c)^{1/2} dE$$

# 5.1 状态密度。

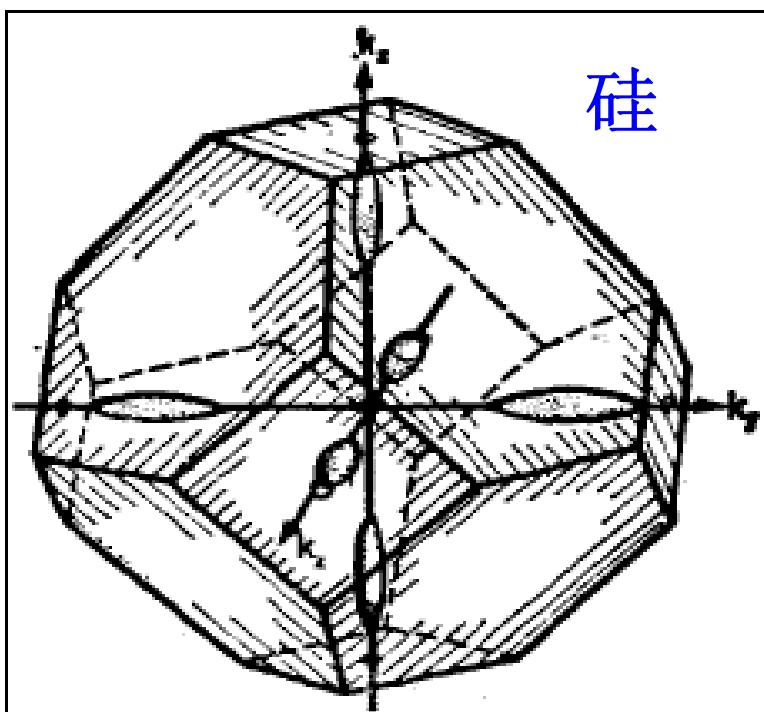
## 5.1.2 状（能）态密度的定义

—例子：椭球形等能面（导带）

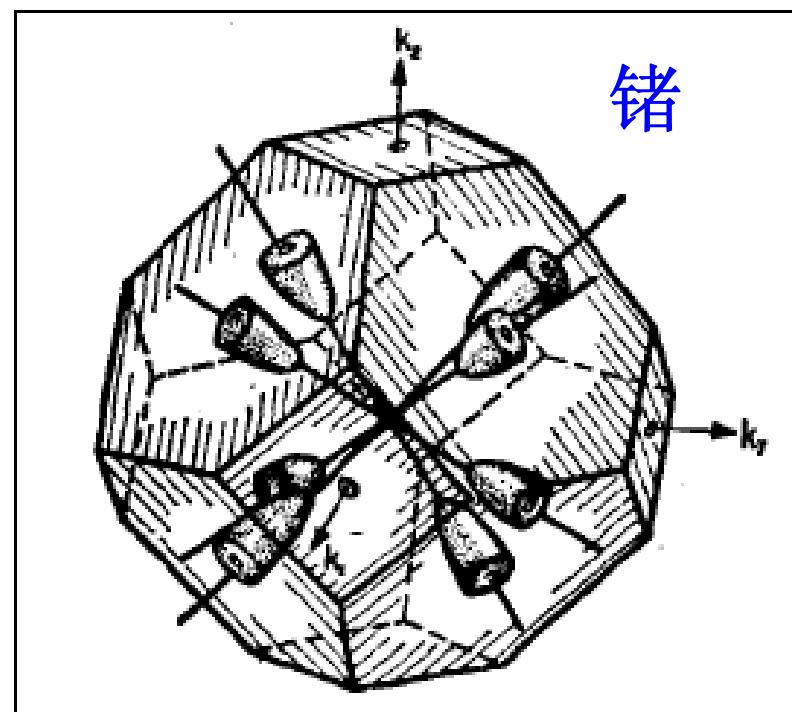
$$dZ = \frac{2V}{(2\pi)^3} d\Omega^* = \frac{4\pi V}{h^3} (8m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/2} (E - E_c)^{1/2} dE$$



考虑多个极值的情况



硅



锗

# 5.1 状态密度<sub>9</sub>

## 5.1.2 状（能）态密度的定义

—例子：椭球形等能面（导带）

**M个极值：**  $dZ = \frac{2MV}{(2\pi)^3} d\Omega^* = \frac{4\pi MV}{h^3} (8m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/2} (E - E_c)^{1/2} dE$

令  $(2m_{dn})^{3/2} = M(8m_x^* m_y^* m_z^*)^{1/2}$   $g_c(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_{dn})^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$

$$m_{dn} = (M^2 m_l^* m_t^{*2})^{1/3}$$

电子状态密度有效质量

Si:  $m_l^* = 0.98m_0, m_t^* = 0.19m_0, M = 6$

$$m_{dn} = 1.08m_0$$

Ge:  $m_l^* = 1.64m_0, m_t^* = 0.082m_0, M = 4$

$$m_{dn} = 0.56m_0$$

# 5.1 状态密度<sub>10</sub>

## 5.1.2 状（能）态密度的定义

一例子：硅与锗的价带，极值在k=0，分重空穴和轻空穴两支能带

重空穴能带的状态密度

$$g_{vh}(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_{ph}^*)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

轻空穴能带的状态密度

$$g_{vl}(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_{pl}^*)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

价带的总状态密度：

$$g_v(E) = g_{vl}(E) + g_{vh}(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_{dp})^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

$$(m_{dp})^{3/2} = (m_{pl}^*)^{3/2} + (m_{ph}^*)^{3/2}$$

空穴状态密度有效质量

$$\text{Si : } m_{ph}^* = 0.49m_0, m_{pl}^* = 0.16m_0$$

$$m_{dp} = 0.59m_0$$

$$\text{Ge : } m_{ph}^* = 0.28m_0, m_{pl}^* = 0.044m_0$$

$$m_{dp} = 0.37m_0$$

# 5.1 状态密度<sub>11</sub>

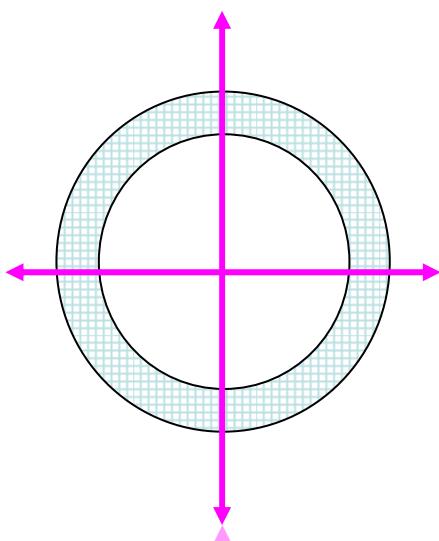
## 5.1.3 状（能）态密度的汇总

一维

$$E(k) = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$$

$$L^* = 2k$$

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



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

$$S^* = \pi k^2$$

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

$$dZ = 2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^2 dS^* = \frac{4S\pi k}{(2\pi)^2} dk$$

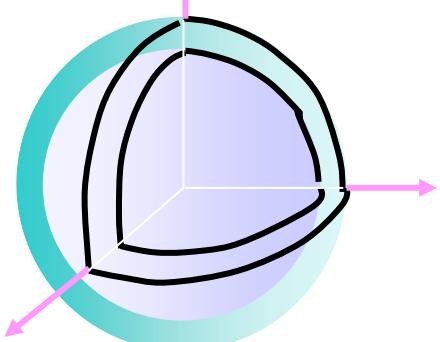
$$\Omega^* = \frac{4}{3}\pi k^3$$

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

$$dZ = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{\hbar^3} (2m_n^*)^{3/2} (E - E_0)^{1/2} dE$$

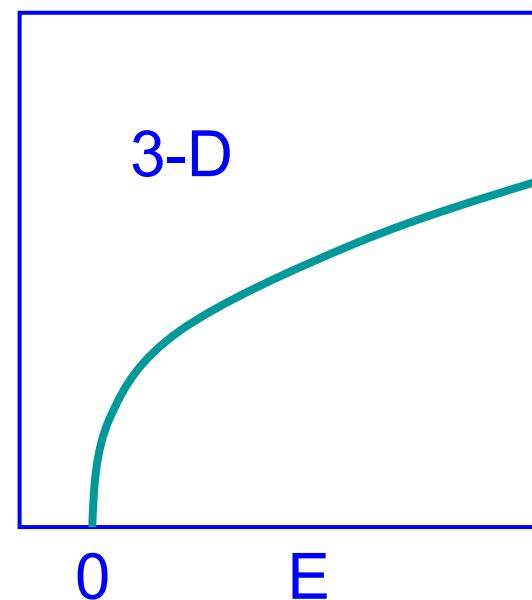
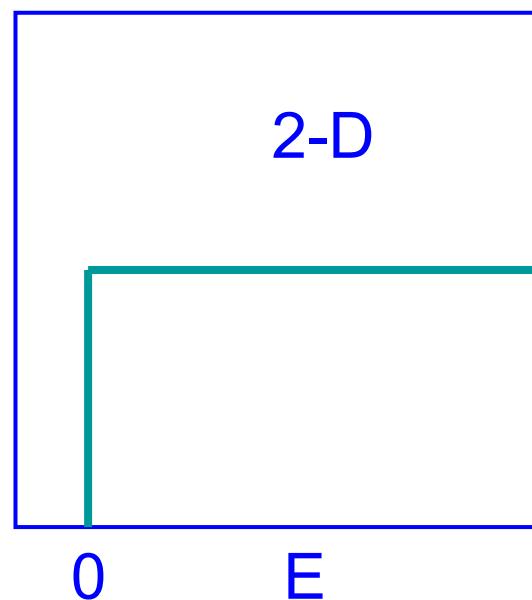
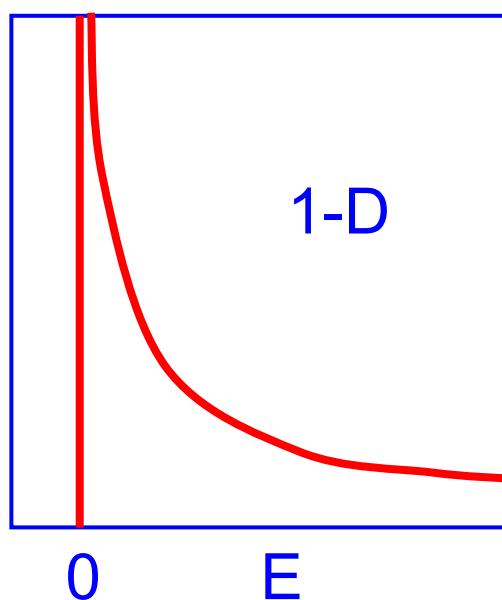
二维

三维



# 5.1 状态密度<sub>12</sub>

## 5.1.3 状（能）态密度的汇总



$$g_{1D} \propto E^{-1/2}$$

$$g_{2D} \propto E^0$$

$$g_{3D} \propto E^{1/2}$$

# 第五章半导体载流子的平衡态统计分布

5.1 状态密度

5.2 费米能级和载流子的统计分布

5.3 本征半导体中的载流子统计

5.4 杂质半导体中的载流子统计

5.5 简并半导体

# 5.2 费米能级和载流子的统计分布<sub>1</sub>

## 5.2.1 费米分布函数f(E)

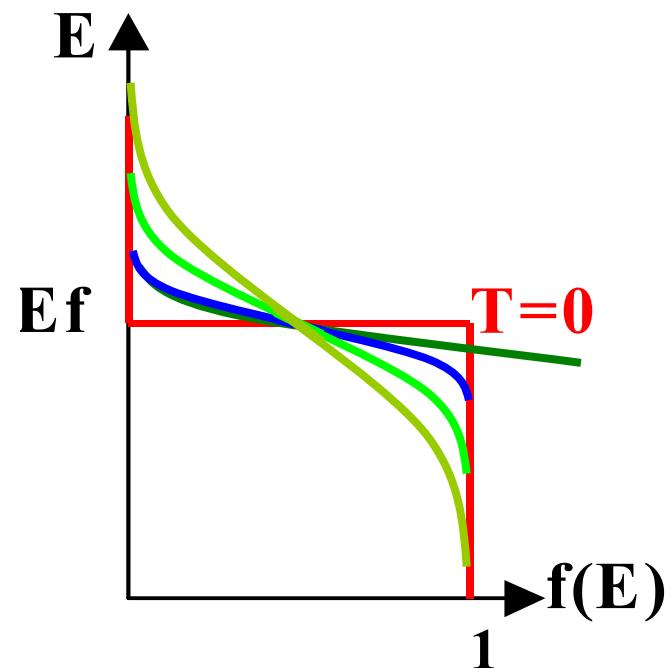
能量为  $E$  的一个量子态  
被一个电子占据的几率为

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)}$$

$E_f$  —— 费米能级（化学势）

热平衡系统具有统一的化学势  
统一的费米能级

决定  $E_f$  的条件:  $\sum_i f(E_i) = N$



费米分布函数的性质

T=0K时:  $E < E_f$   $f(E) = 1$

$E > E_f$   $f(E) = 0$

T>0K时:

$$f(E) = \begin{cases} 1/2 < f < 1 & E < E_F \\ 1/2 & E = E_F \\ 0 < f < 1/2 & E > E_F \end{cases}$$

# 5.2 费米能级和载流子的统计分布<sub>2</sub>

## 5.2.1 费米分布函数f(E)

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)}$$

当  $E - E_f > 5kT$  时,  $f < 0.007$ ,

当  $E - E_f < -5kT$  时,  $f > 0.993$

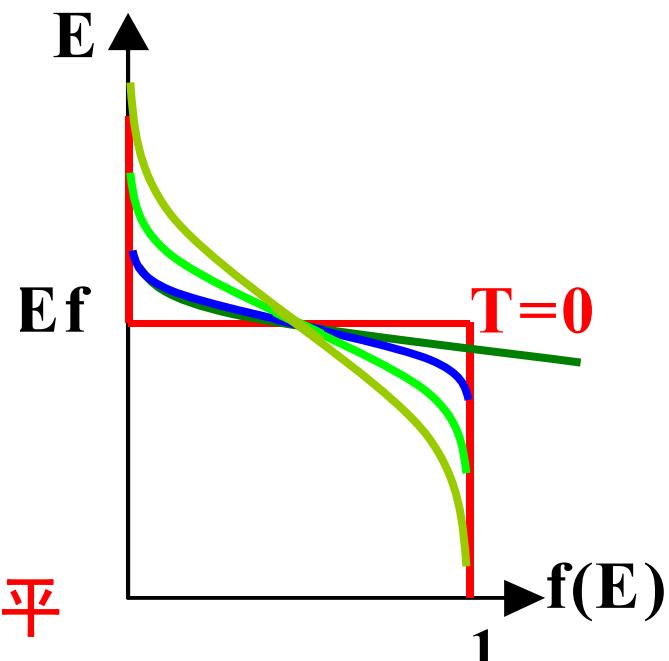
费米能级的物理意义 — 标志了电子填充水平

$$E - E_f \gg kT \quad \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right) \gg 1$$

$$f(E) \approx \exp\left(-\frac{E - E_f}{kT}\right) = \exp\left(\frac{E_f}{kT}\right) \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) = A \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)$$

玻尔兹曼分布函数

$$f(E) = \exp\left(-\frac{E - E_f}{kT}\right)$$



# 5.2 费米能级和载流子的统计分布<sub>3</sub>

## 5.2.1 费米分布函数f(E)

— 电子的费米统计分布函数

$$f_e(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)}$$

$E - E_f \gg kT$

$$f_e(E) = \exp\left(-\frac{E - E_f}{kT}\right)$$

— 空穴的费米统计分布函数

$$f_h(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_f - E}{kT}\right)}$$

$E_f - E \gg kT$

$$f_h(E) = \exp\left(-\frac{E_f - E}{kT}\right)$$

$$f_h(E) + f_e(E) = 1$$

$$f_h(E) = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_f - E}{kT}\right)}$$

# 5.2 费米能级和载流子的统计分布<sub>4</sub>

## 5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

### 一 导带电子浓度

导带中的电子数:  $N = \int_{E_c}^{E'c} g_c(E) f_e(E) dE$

导带中的电子浓度:

$$n = \frac{N}{V} = \frac{1}{V} \int_{E_c}^{E'c} g_c(E) f_e(E) dE$$

设  $E_c - E_f \gg kT$ , 则可采用以下近似:

→ 采用玻尔兹曼分布函数

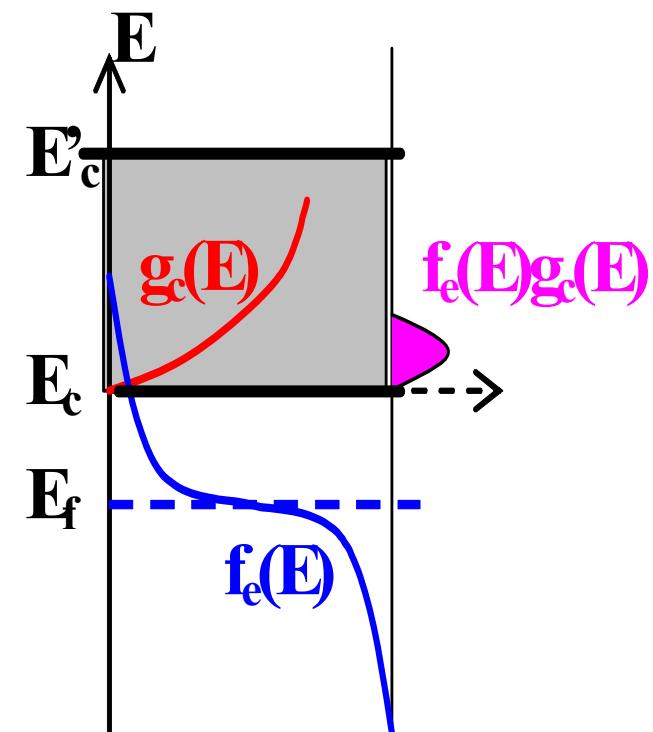
→  $g_c$  适用于整个导带

→ 将积分上限改为  $\infty$

电子状态密度有效质量

$$m_{dn} = (M^2 m_l^* m_t^{*2})^{1/3}$$

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi}{h^3} (2m_{dn})^{3/2} \sqrt{E - E_c} \exp\left(-\frac{E - E_f}{kT}\right) dE$$



# 5.2 费米能级和载流子的统计分布<sub>5</sub>

## 5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

### - 导带电子浓度

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi}{h^3} (2m_{dn})^{3/2} \sqrt{E - E_c} \exp\left(-\frac{E - E_f}{kT}\right) dE$$

换元

$$x = \frac{E - E_c}{kT}, \begin{cases} E = E_c, x = 0 \\ E = \infty, x = \infty \end{cases}$$

$$n = \frac{4\pi (2m_{dn})^{3/2}}{h^3} (kT)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right) \int_0^{\infty} x^{1/2} \exp(-x) dx$$

Γ函数:  $\Gamma(\alpha) = \int_0^{\infty} x^{\alpha-1} \exp(-x) dx$      $\Gamma(\alpha+1) = \alpha\Gamma(\alpha)$      $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} \exp(-x) dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

# 5.2 费米能级和载流子的统计分布。

## 5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

### — 导带电子浓度

$$n = \frac{2(2\pi m_{dn} kT)^{3/2}}{h^3} \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right) = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right)$$

导带有效状态密度

$$N_c = \frac{2(2\pi m_{dn} kT)^{3/2}}{h^3} = 4.82 \times 10^{15} T^{3/2} \left(\frac{m_{dn}}{m_0}\right)^{3/2}$$

### — 导带平衡电子浓度

$$300K, N_c(\text{Si}) = 2.8 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$$

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

# 5.2 费米能级和载流子的统计分布<sub>7</sub>

## 5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

—价带空穴浓度

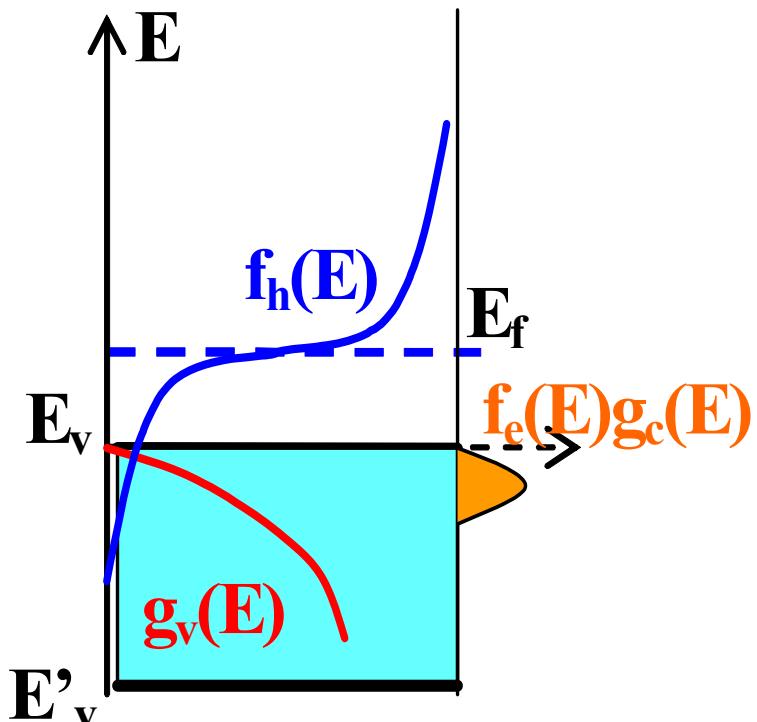
$$p = \frac{1}{V} \int_{E'_v}^{E_v} f_h(E) g_v(E) dE$$

$$f_h(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_f - E}{KT}\right)}$$

$$E_f - E_v \gg KT$$

$$f_h(E) = \exp\left(-\frac{E_f - E}{KT}\right)$$

$$g_v(E) = \frac{4\pi V}{h^3} (2m_{dp})^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$



空穴状态密度有效质量

$$(m_{dp})^{3/2} = (m_{pl}^*)^{3/2} + (m_{ph}^*)^{3/2}$$

价带有效状态密度

$$N_v(\text{Si}) = 1.1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

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

$$N_v = \frac{2(2\pi m_{dp} k T)^{3/2}}{h^3} = 4.82 \times 10^{15} T^{3/2} \left(\frac{m_{dp}}{m_0}\right)^{3/2}$$

# 5.2 费米能级和载流子的统计分布。

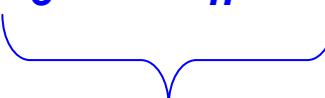
## 5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

—载流子浓度乘积的重要性质

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_f}{kT}\right) \quad p = N_v \exp\left(-\frac{E_f - E_v}{kT}\right)$$

$$np = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{kT}\right) = N_C N_V \exp\left(-E_g / kT\right)$$

只与  $m_e^*$ ,  $m_h^*$ ,  $E_g$  和  $T$  有关, 与  $E_F$  或掺杂浓度无关



材料参数

无论本征半导体还是杂质半导体, 只要是热平衡状态的非简并半导体, 都适用!