

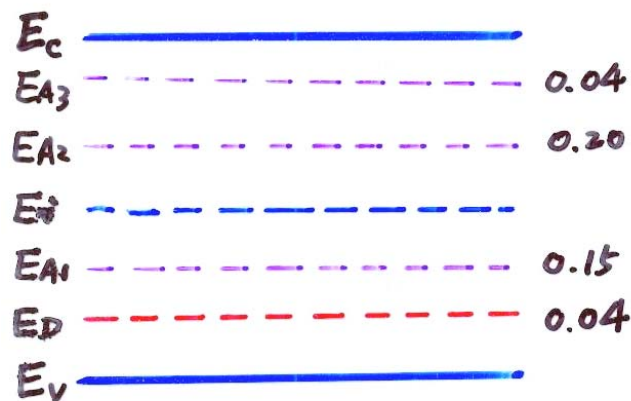
4.1 硅、锗晶体中的杂质能级⁹

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, ΔE_D , ΔE_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^+ Au^0 Au^- Au^{2-} 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 ΔE_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. ΔE_D , ΔE_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

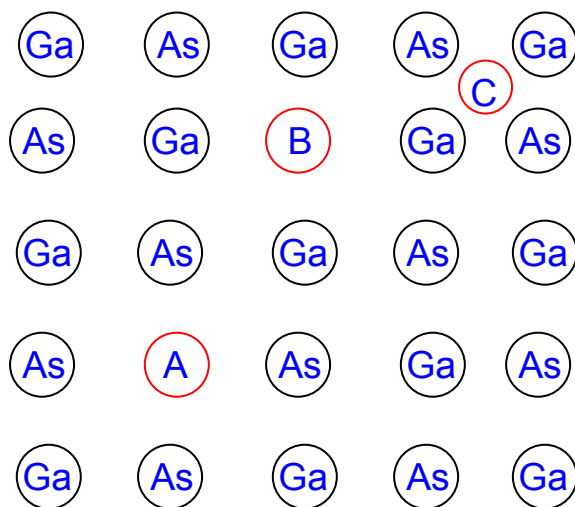
4.2 III—V族化合物中的杂质能级

4.3 缺陷、位错能级

4.2 III—V族化合物中的杂质能级₁

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

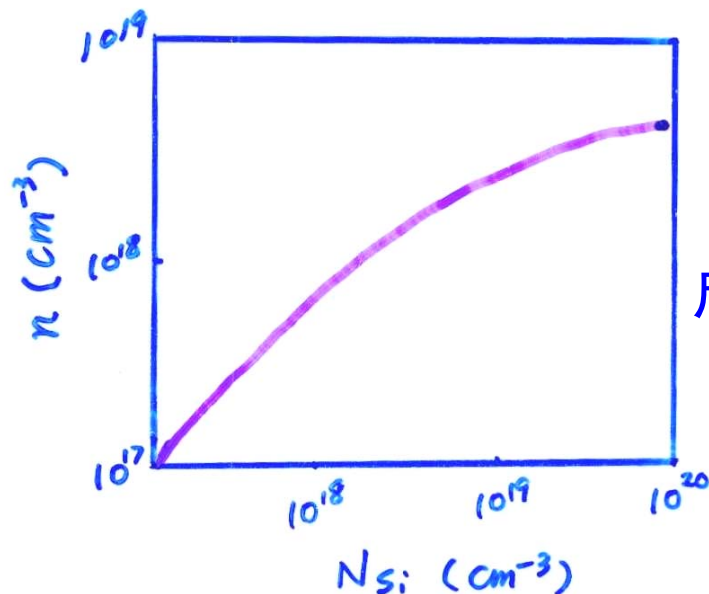
间隙式杂质：处于 4 个 III 族（V 族）
原子围成的正四面体

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₂

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

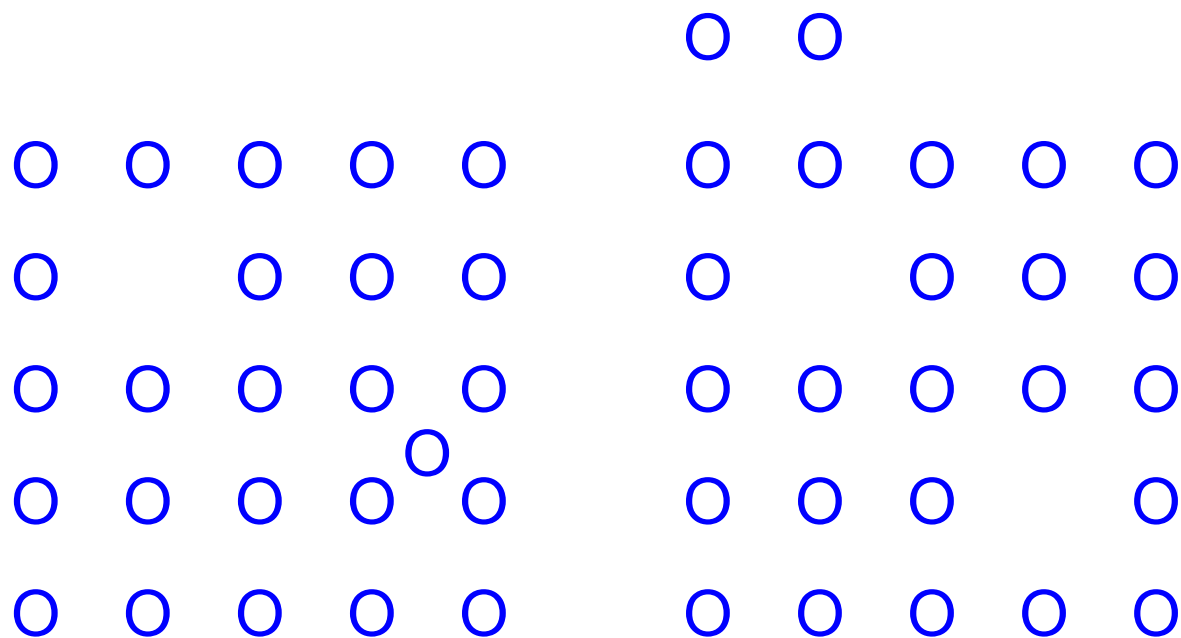
4.2 III—V族化合物中的杂质能级

4.3 缺陷、位错能级

4.3 缺陷、位错能级¹

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）



—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

Frankel 缺陷

Schottky 缺陷

空位—间隙成对出现

只形成空位

4.3 缺陷、位错能级₂

4.3.1 点缺陷

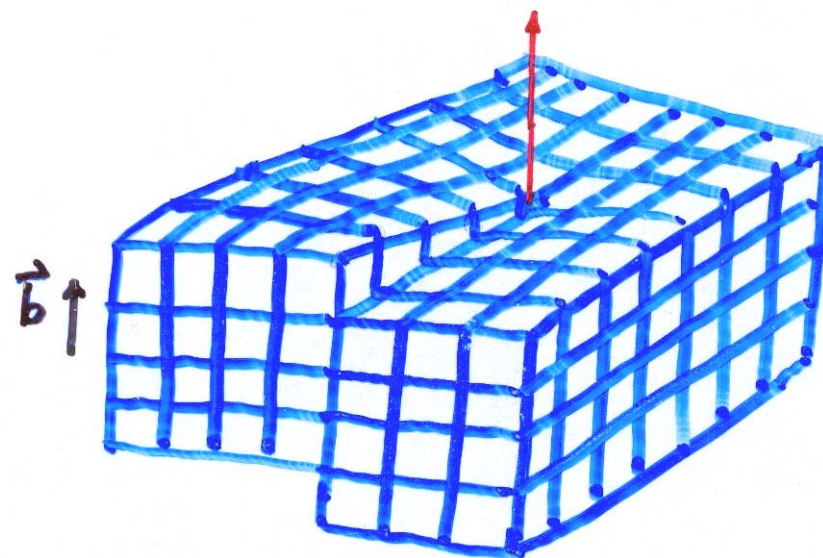
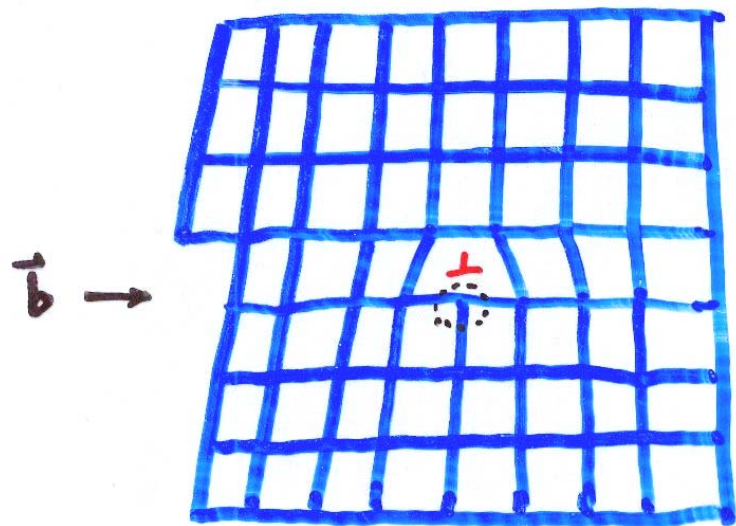
空位：不饱和键，倾向于接受电子——受主

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₃

4.3.2 线缺陷一位错



滑移矢量 $\vec{b} \perp$ 位错线
Burgers 矢量 刃位错

$\vec{b} \parallel$ 位错线
螺位错

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

<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

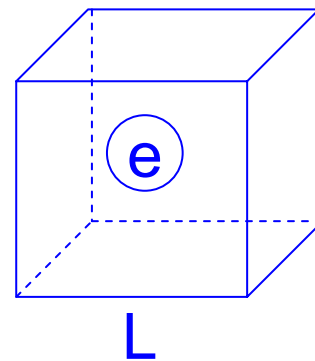
5.5 简并半导体

5.1 状态密度₁

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

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

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

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

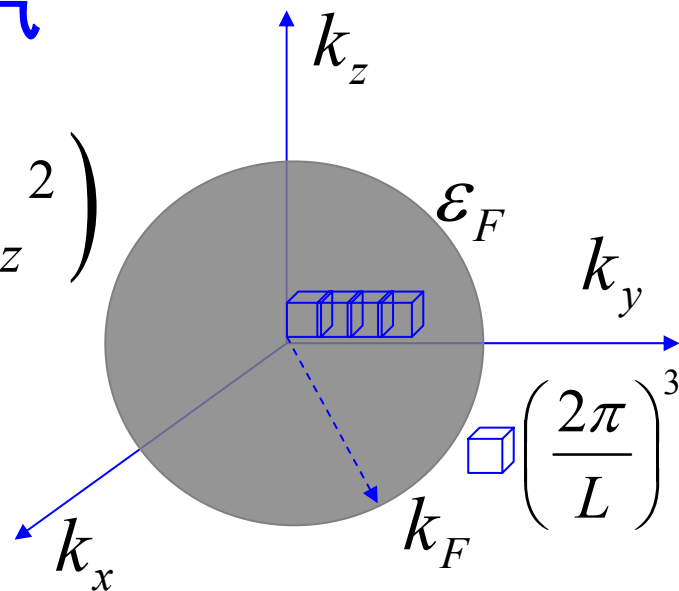
— \mathbf{k} 的分量是这个问题的量子数；此外，还要考虑自旋方向的量子数 m_s 。

5.1 状态密度₂

5.1.1 复习：三维情况下的自由电子气

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

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



— 三维情况下电子每个允许状态可以表示为 \mathbf{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： \mathbf{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， \mathbf{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₃

5.1.2 状（能）态密度的定义

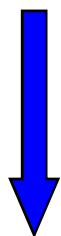
一状态密度：单位能量间隔内的状态数目

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

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
dΩ*

状态数的变化
dZ



5.1 状态密度₄

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： $\Omega^* = \frac{4}{3} \pi k^3$

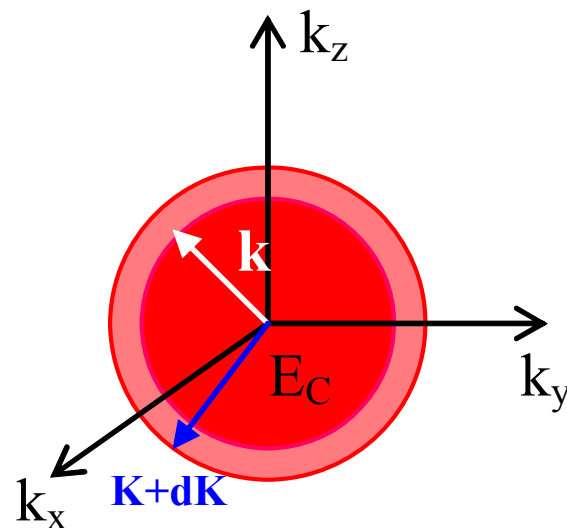
当能量从 $E \rightarrow E + dE$ 时，球体半径从 $k \rightarrow k + dk$

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

状态数从 $Z \rightarrow Z + dZ$

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

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



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⁵

5.1.2 状（能）态密度的定义

一例子：球形等能面

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

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

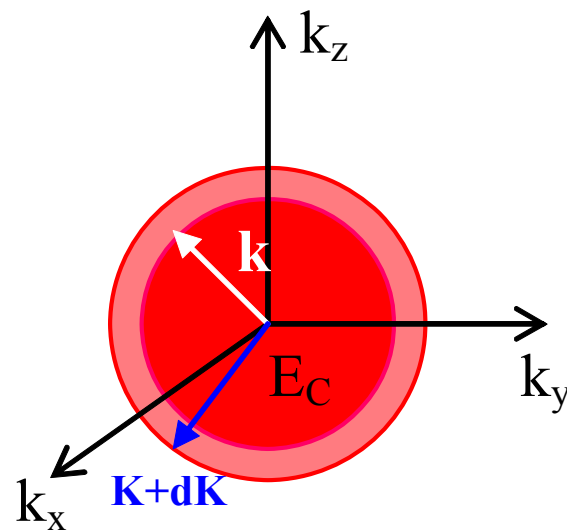
$$d\Omega^* = \frac{2\pi}{\hbar^3} (2m_n^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} dE$$

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

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

导带中单位能量
间隔的状态数

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



能带极值在 $\vec{k}=0$ ，等能面为球面

5.1 状态密度₆

5.1.2 状（能）态密度的定义

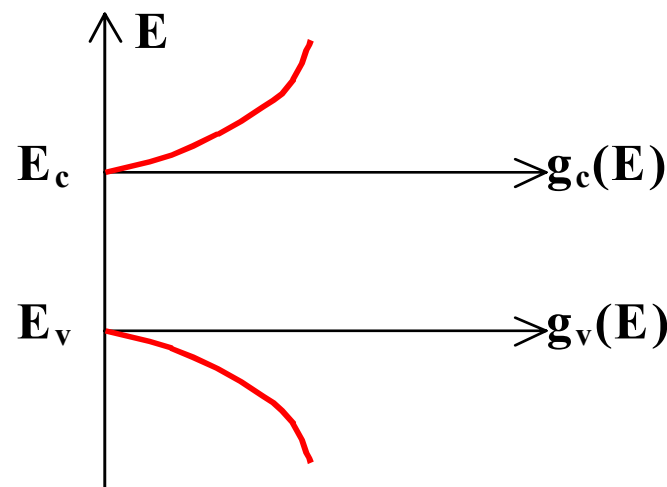
—例子：球形等能面

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：

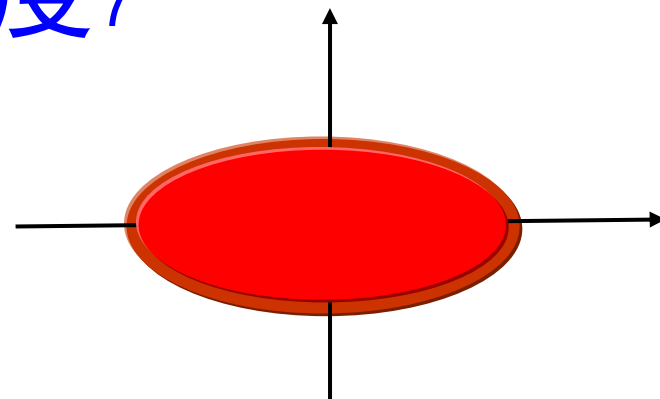
- 状态密度与能量呈抛物线关系
- 有效质量越大，状态密度也就越大
- 仅适用于能带极值附近

5.1 状态密度₇

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：

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

椭球的体积：

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

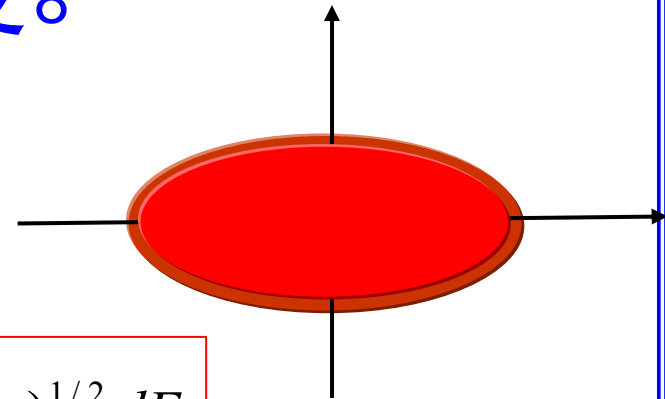
能量变化dE引起的体积变化：

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

5.1 状态密度⁸

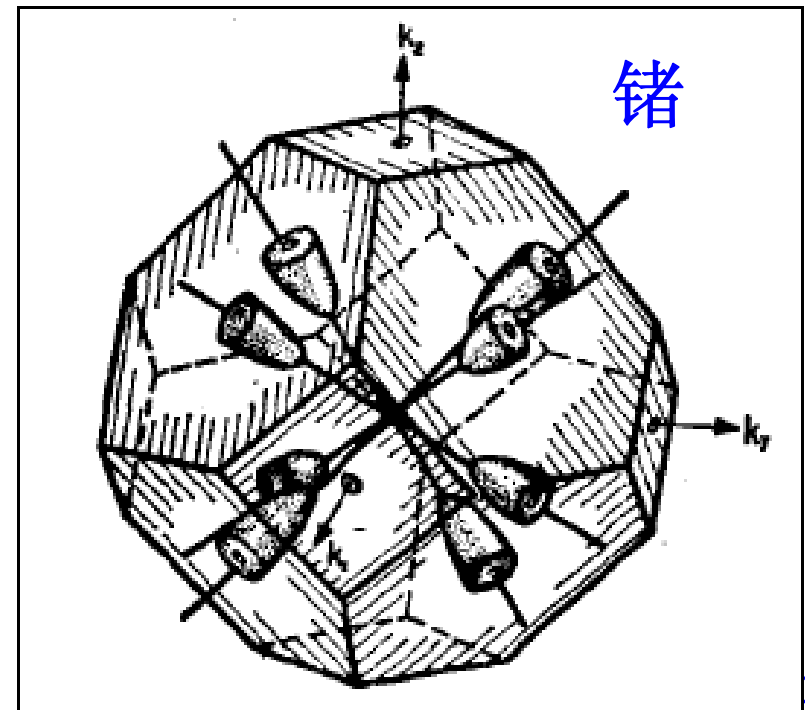
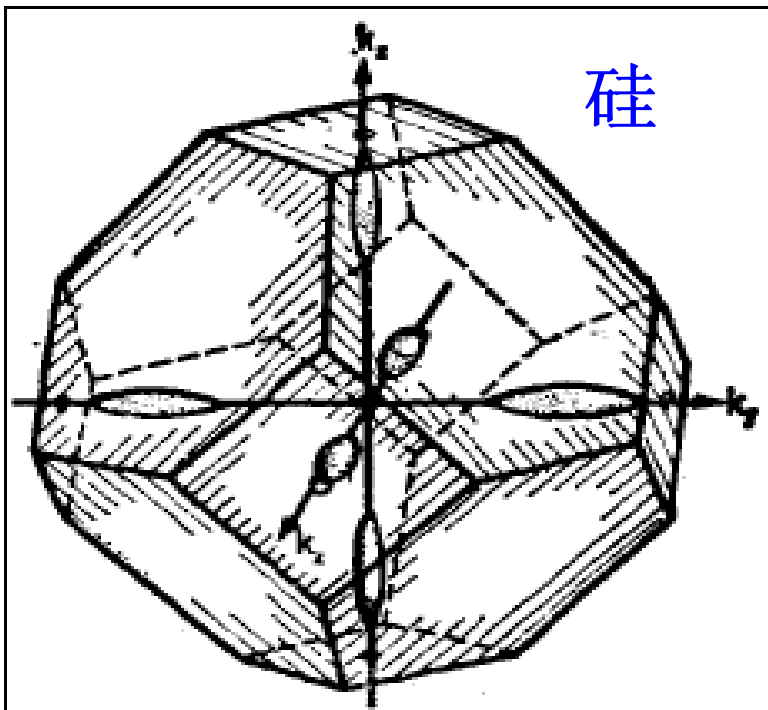
5.1.2 状（能）态密度的定义

—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



5.1 状态密度⁹

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¹⁰

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¹¹

5.1.3 状（能）态密度的汇总

一
维

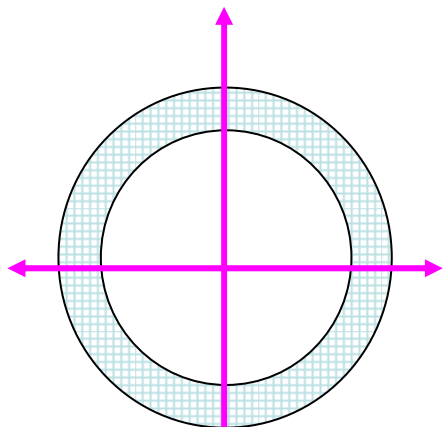


$$E(k) = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad L^* = 2k$$

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

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

二
维

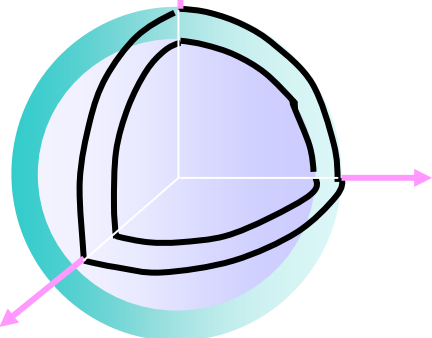


$$S^* = \pi k^2$$

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

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

三
维



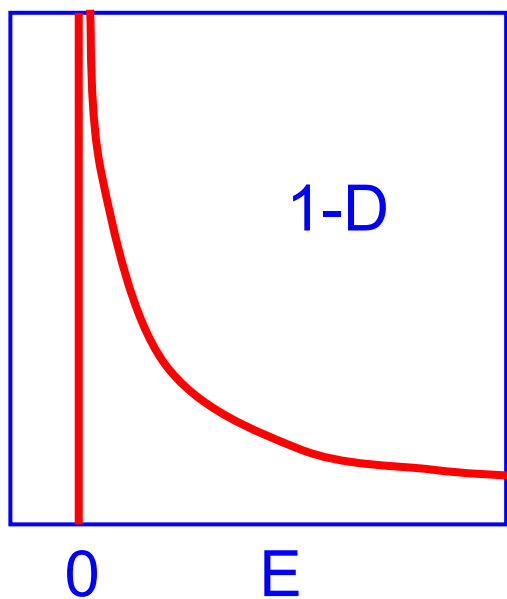
$$\Omega^* = \frac{4}{3} \pi k^3$$

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

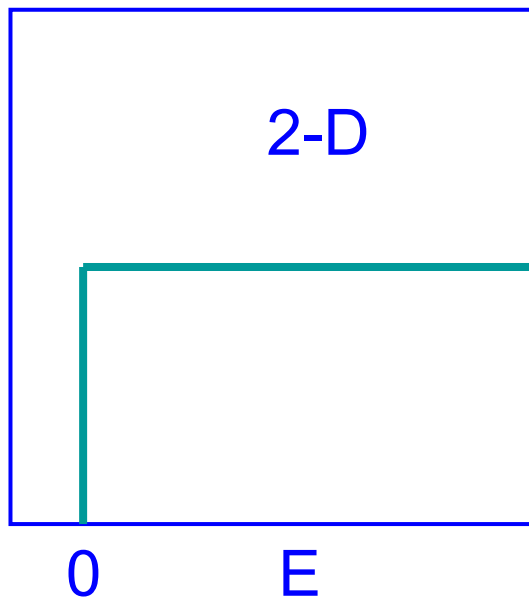
$$dZ = \frac{2V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{h^3} (2m_n^*)^{3/2} (E - E_0)^{1/2} dE$$

5.1 状态密度₁₂

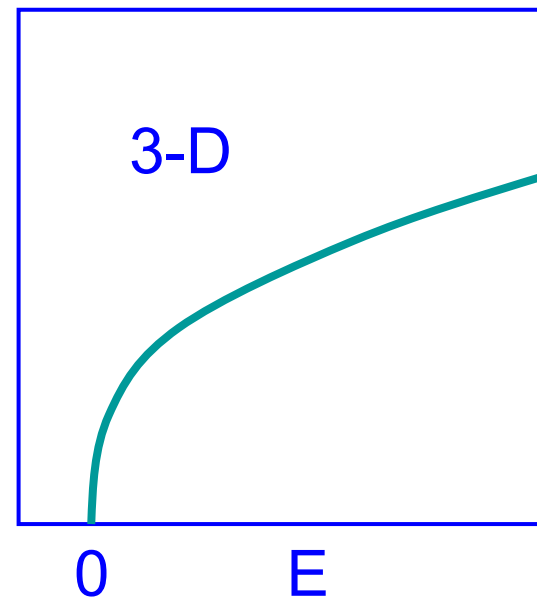
5.1.3 状（能）态密度的汇总



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



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



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

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₁

5.2.1 费米分布函数 $f(E)$

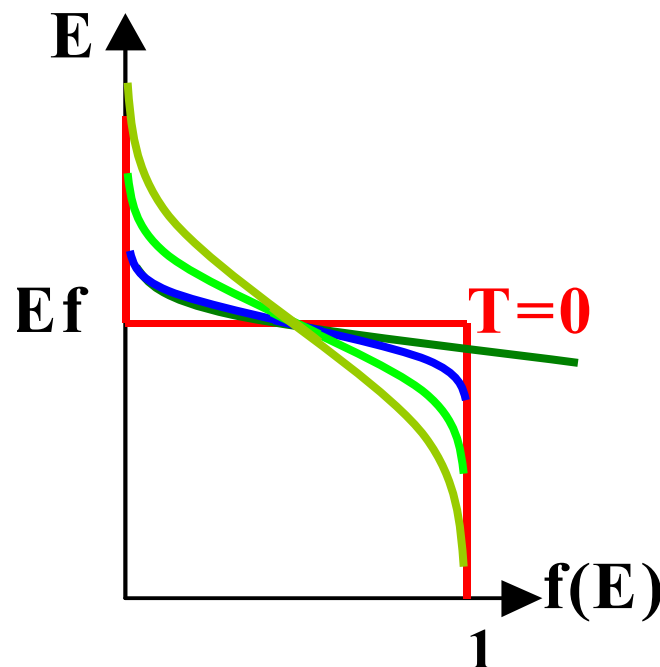
能量为 E 的一个量子态
被一个电子占据的几率为

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

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: $E < E_f$ $f(E)=1$

$T>0K$ 时: $E > E_f$ $f(E)=0$

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

5.2 费米能级和载流子的统计分布₂

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, $f > 0.993$

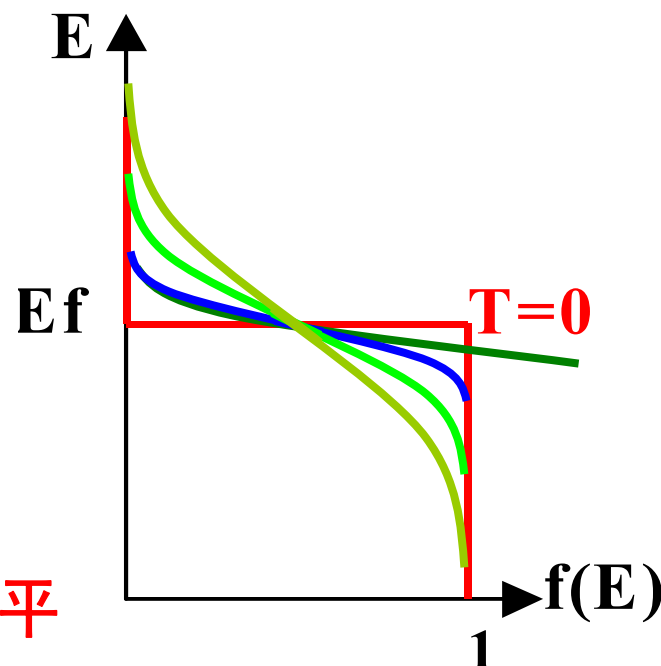
费米能级的物理意义 — 标志了电子填充水平

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

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

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₃

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₄

5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

一导带电子浓度

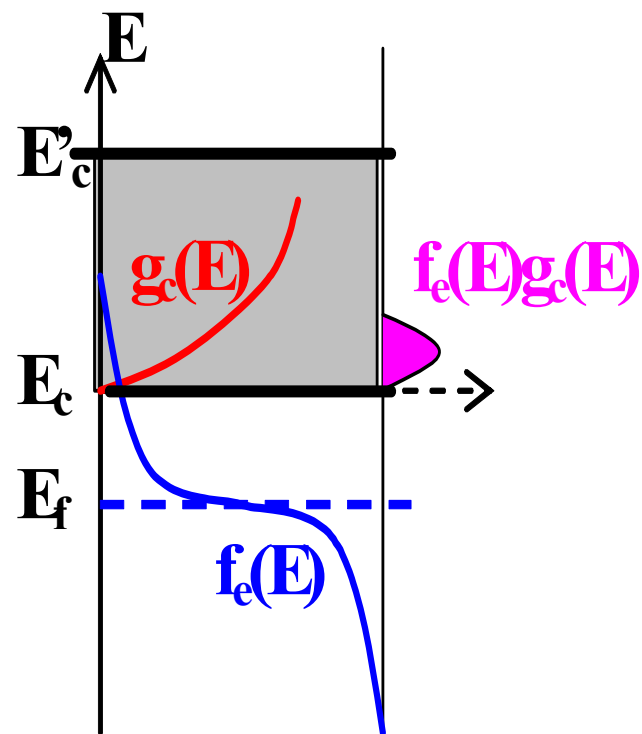
导带中的电子数: $N = \int_{E_c}^{E'_c} g_c(E) f_e(E) dE$

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 ∞



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₅

5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

一导带电子浓度

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

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

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

5.2 费米能级和载流子的统计分布₆

5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

一导带电子浓度

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

导带有效状态密度

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

一导带平衡电子浓度

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

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

5.2 费米能级和载流子的统计分布

5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

一价带空穴浓度

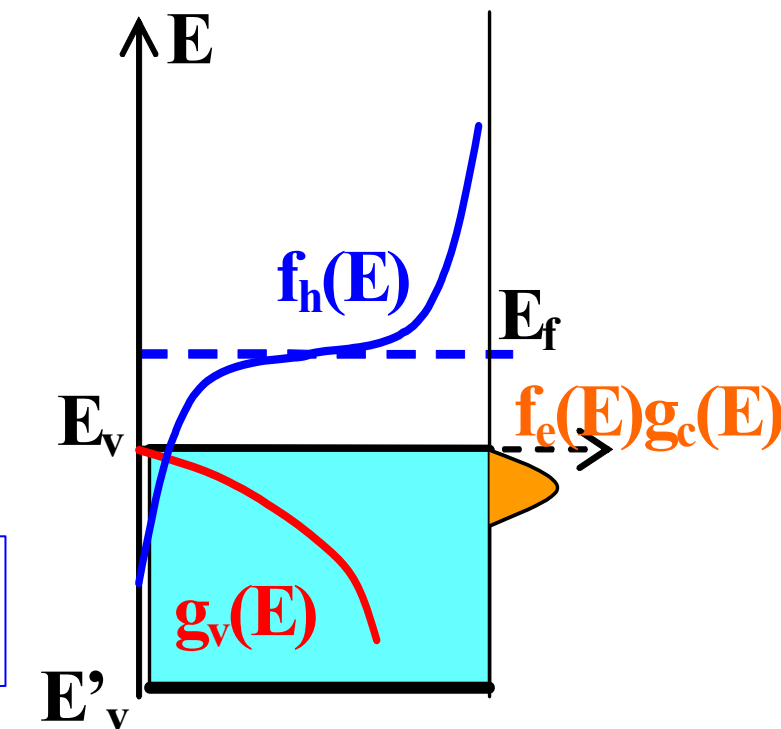
$$p = \frac{1}{V} \int_{E'_v}^{E_v} f_h(E) g_v(E) dE$$

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

$$E_f - E_v \gg KT$$

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

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



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

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

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

$$N_v = \frac{2(2\pi m_{dp} kT)^{3/2}}{h^3}$$

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

5.2 费米能级和载流子的统计分布⁸

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

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

$$np = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{kT}\right) = N_c N_v \exp(-E_g/kT)$$

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!