第二章 作业讲解

1. 位于晶格间隙的杂质原子,通常,它的体积较_小_, 称为_间隙式_杂质。
2. 杂质原子取代晶格原子位于格点上,称为_替位式__杂质，它的大小接近___被取代原子的大小
3. 受主杂质是_可以向半导体提供导电空穴的杂质，未电离时呈_电中性__ 称为__束缚__态，电离后呈负电性/离化态__，成为 ___负电中心。施主杂质是（可以向半导体提供导电电子的杂质），未电离时呈（电中性）称为（束缚）态，电离后呈（正电性/离化态）成为（正电中心）。
4. 浅施主能级位于_离导带底很近的禁带中__；浅受主能级位于__离价带顶很近的禁带中_ 。杂质电离能很大的能级属于___深能级__。深施主能级位于（远离导带底的禁带中）；深受主能级位于（远离价带顶的禁带中）
5. Si中同时均匀掺入P和B，B的掺杂浓度为10^3个/cm^3，P的掺杂浓度为10^4个/cm^3，则Si为 ___n__（n或p型）半导体。
6. MX型离子晶体，一般负离子空位V_X为 _施主__，M为间隙原子时为施主__。

第二章 作业讲解

7. GaAs中的反结构缺陷指的是 _镓取代砷起受主作用或者砷取代镓原子起施主作用，这种点缺陷称为反结构缺陷。
8. 深能级的特点是什么？

答：半导体中的深能级有如下特点：a.电离能很大；b.多次电离，每电离一次引入一个能级；c.对半导体的电导影响不大，主要作为复合中心降低非平衡少数载流子的寿命）

7. 晶体的缺陷可以分为 __点缺陷_ ，_线缺陷__和 _面缺陷__。
8. 晶体中的点缺陷包括__空位__ ，_填隙原子 和 __杂质原子。
9. 名词解释。

等电子杂质是指与基质晶体原子具有相同数量价电子的杂质原子，替代了晶格点上同族原子后，基本上仍是电中性的。也称为中性杂质

等电子陷阱是_杂质取代同族原子后在禁带中引入的能级；杂质取代同族原子，由于原子电负性的不同，形成的带电中心__。

双性杂质是指__IV原子既能取代III族原子形成施主杂质，又能取代V族形成受主杂质的杂质，称为双性杂质。

第二章 作业讲解

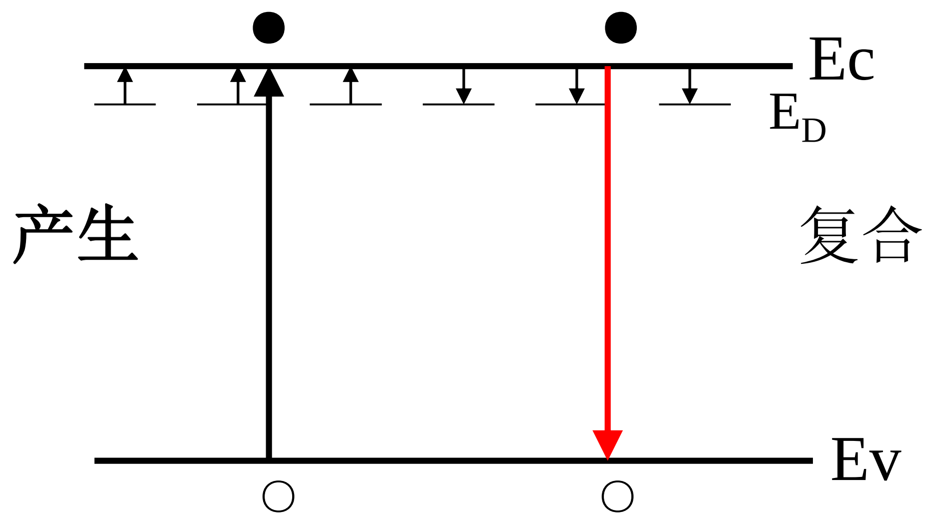
2.以As掺入Ge中为例，说明什么是施主杂质、施主杂质电离过程和n型半导体。

- 砷是5价元素，将其掺杂到锗晶体中，取代格点上的锗原子。砷的4个价电子与最近邻的4个锗原子形成共价键，剩余的一个价电子束缚在砷离子的周围，但是束缚能很小，只需要很少的能量就可摆脱束缚成为导电电子。把这种可以向半导体提供导电电子的杂质称为施主杂质。
- 剩余价电子摆脱砷离子束缚的过程称为杂质电离。
- 砷杂质的掺入，使锗的导带电子浓度大大增加，远大于价带空穴浓度，半导体以电子导电为主，称为n型半导体。

第3章

半导体中载流子的统计分布

产生和复合



- 载流子的产生

本征激发:电子空穴对

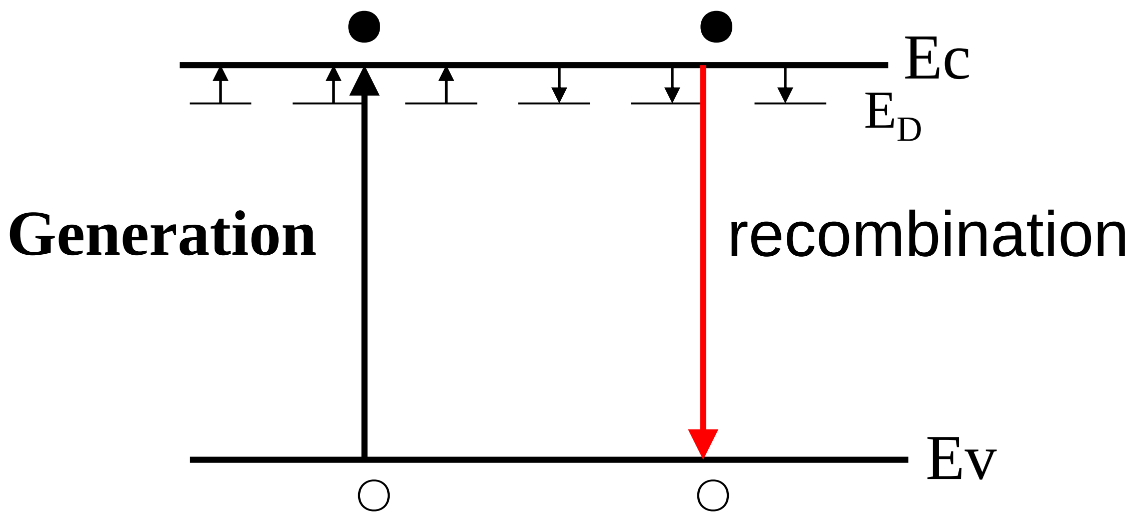
施主电离：电子

杂质电离

受主电离：空穴

- 复合

热平衡状态



热平衡状态

- 动态平衡：产生=复合
- 和温度有关
- 温度改变时，热平衡状态被破坏，达到新的热平衡状态

本章研究内容

- 载流子浓度随温度变化的规律
- 计算一定温度下半导体中热平衡载流子浓度
  - ✓ 允许的量子态按能量如何分布？-状态密度
  - ✓ 电子在允许的量子态中如何分布？-电子的分布

$\boxed{\text{态密度}} \times \boxed{\text{电子的分布}} = \boxed{\text{载流子的浓度}}$

第3章

3.1 态密度

3.2 费米能级和载流子的统计分布

3.3 本征半导体的载流子浓度

3.4 杂质半导体的载流子浓度

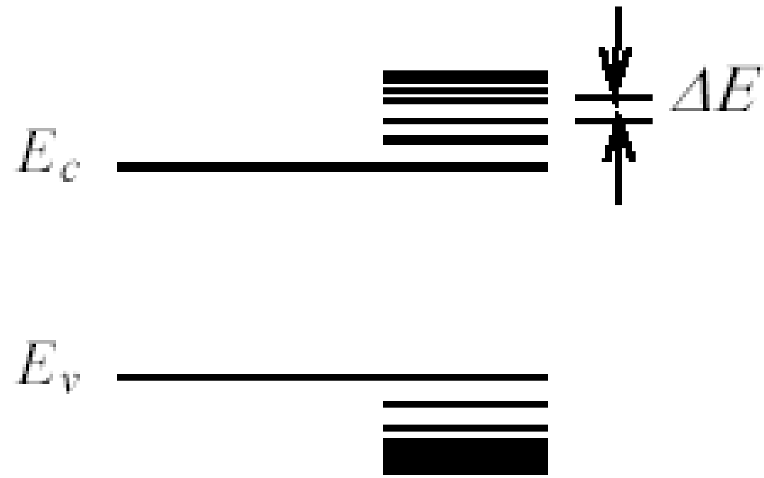
3.5 一般情况下的载流子统计分布

3.6 简并半导体

态密度(DOS)

- DOS：能带中能量E 附近每单位能量间隔内，可以被电子占据的量子态数

$$g(E)=\frac{\overbrace{dZ}^{\text{量子态数}}}{\underbrace{dE}_{\text{能量间隔}}}$$



✓ 在某一能级DOS值很高，意味着有很多可以被电子占据的量子态；

✓ DOS值为零，说明在这一能级没有可以被电子占据的量子态。

DOS

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

量子态数

能量间隔

1.单位K空间的DOS:

$$g(\mathrm{k}) = \frac{\mathrm{d}Z}{dV_{\mathrm{k}}}$$

2. E ~ E+dE的K空间的体积

$$(\mathrm{E} \sim E + \mathrm{d}E) \sim \mathrm{V_k}$$

3. E ~ E+dE的量子态数

$$\mathrm{V_k} \cdot \frac{\mathrm{dZ}}{\mathrm{dV_k}} \sim (\mathrm{E} \sim E + \mathrm{d}E)$$

1.单位K空间的量子态数

边长为L的正方体
的周期性边界条件

$$\begin{cases} \psi(x+L,y,z)=\psi(x,y,z) \\ \psi(x,y+L,z)=\psi(x,y,z) \\ \psi(x,y,z+L)=\psi(x,y,z) \end{cases}$$

$$Ae^{i(k_x\cdot x-\omega t)} = Ae^{i[k_x(x+L)-\omega t]}$$

$$Ae^{i(k_y\cdot y-\omega t)} = Ae^{i[k_y(y+L)-\omega t]}$$

$$Ae^{i(k_z\cdot z-\omega t)} = Ae^{i[k_z(z+L)-\omega t]}$$

$$Ae^{i[k_x(x+L)-\omega t]} = Ae^{i(k_x\cdot x-\omega t)+ik_xL}$$

$$= Ae^{i(k_x\cdot x-\omega t)}\cdot e^{ik_xL} = Ae^{i[k_x\cdot x-\omega t]}$$

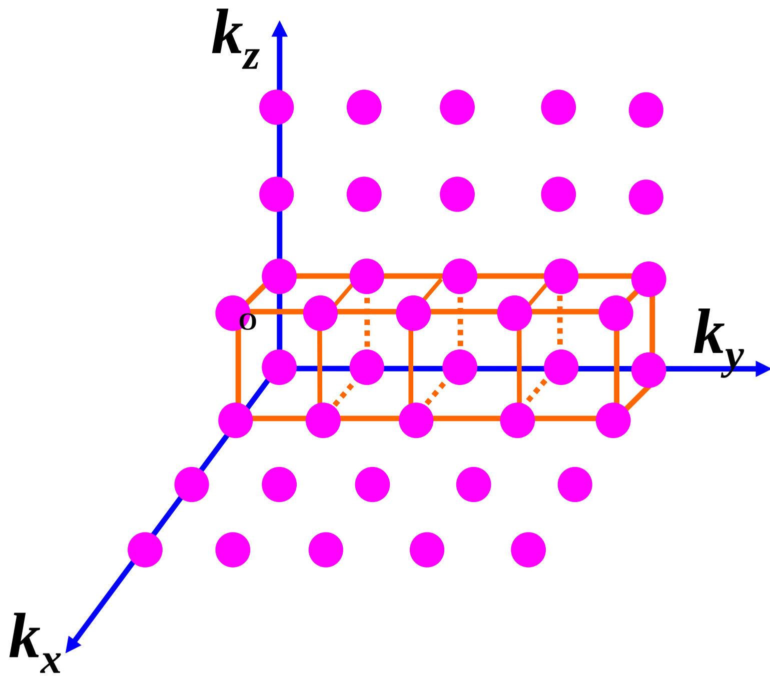
$$\therefore\ e^{ik_xL} = 1 \quad e^{ik_xL} = \cos(k_xL) + i\sin(k_xL)$$

1.单位K空间的量子态数

$$e^{ik_x L} = \cos(k_x L) + i\sin(k_x L)$$

$$k_x L = 2\pi \Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{L}$$

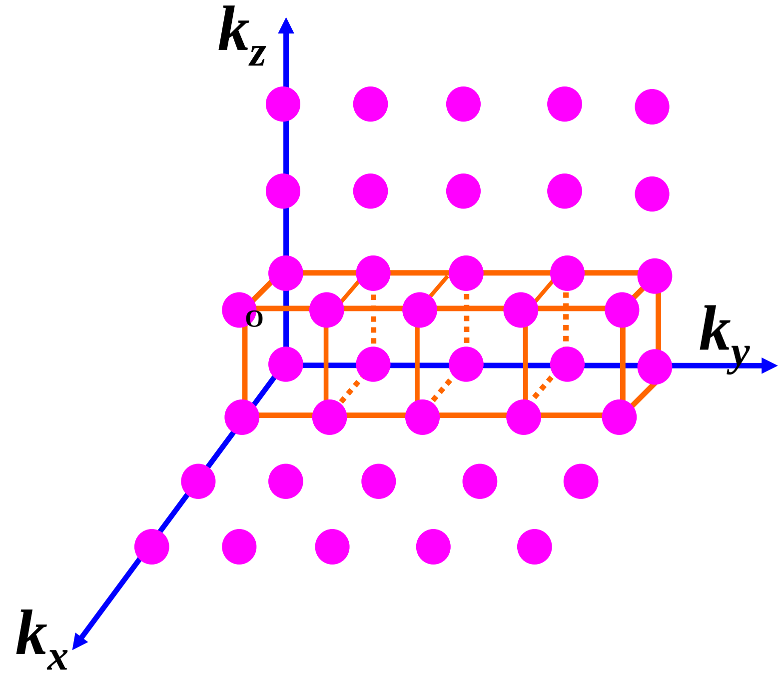
$$\begin{cases} k_x = \dfrac{2\pi n_x}{L} \left(n_x = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots\right) \\ k_y = \dfrac{2\pi n_y}{L} \left(n_y = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots\right) \\ k_z = \dfrac{2\pi n_z}{L} \left(n_z = 0, \pm 1, \pm 2 \cdots\right) \end{cases}$$



状态代表点在K空间的分布

1.单位K空间的量子态数

$$\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{8\pi^3}{L^3} = \frac{8\pi^3}{V}$$



- 单位K空间体积的态密度数

$$\frac{1}{\frac{8\pi^3}{V}} = \frac{V}{8\pi^3}$$

- 考虑电子的自旋

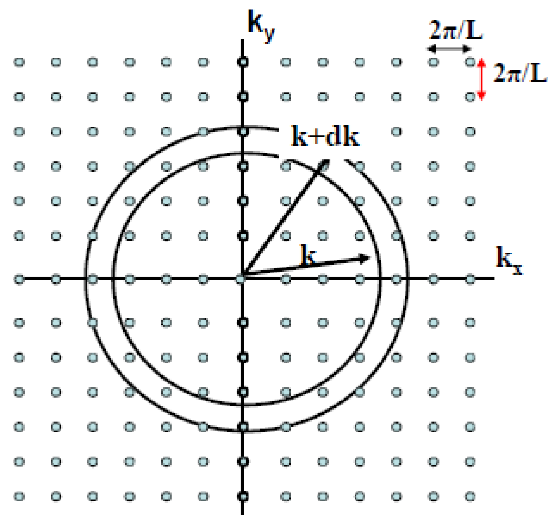
$$\frac{2V}{8\pi^3} \qquad g(k) = \frac{2V}{8\pi^3}$$

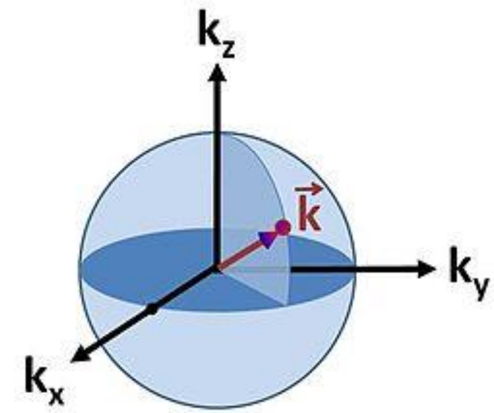
2. K空间的体积

- 导带底附近的状态密度，能带极值在K=0
- 等能面为球面

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

$$V_{E\sim E+dE} = 4\pi k^2 dk$$

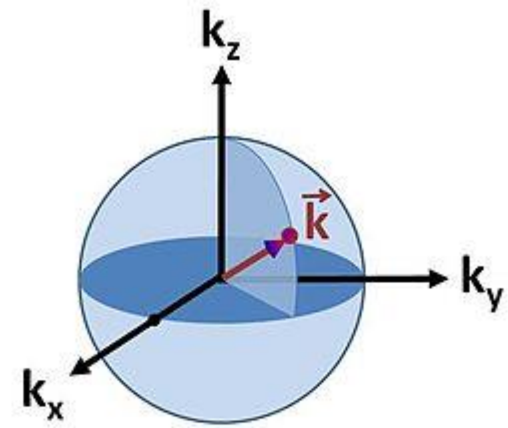




$$dZ_{E\sim E+dE} = g(k)\cdot V_{E\sim E+dE} = \frac{2V}{8\pi^3}\cdot 4\pi k^2 dk$$

2. K空间的体积

- 导带底附近状态密度



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

$$\Rightarrow kdk = \frac{m_n^* dE}{\hbar^2} \qquad \Rightarrow k = \frac{\left(2m_n^*\right)^{1/2}\left(E - E_c\right)^{1/2}}{\hbar}$$

$$dZ_{E\sim E+dE} = \frac{2V}{8\pi^3} \cdot 4\pi k^2 dk$$

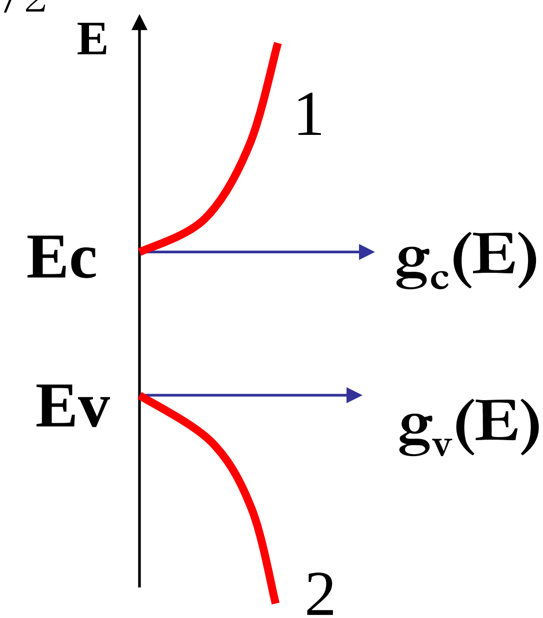
3. 态密度

导带底附近状态密度：

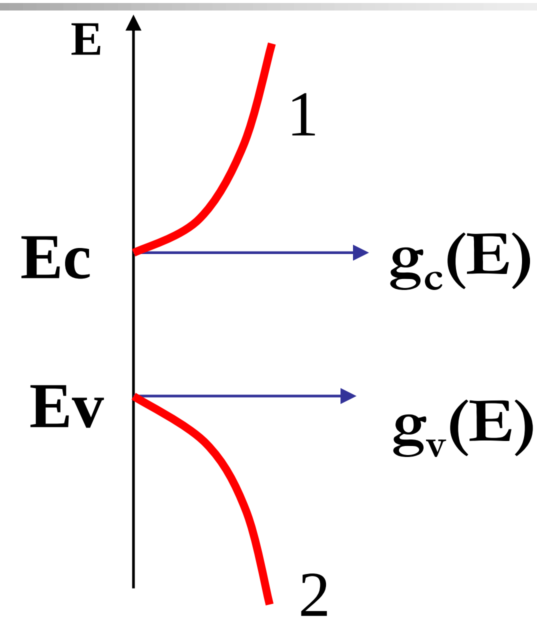
$$g_c(E)=\frac{dZ}{dE}=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\left(2m_n^*\right)^{3/2}}{\hbar^3}\left(E-E_c\right)^{1/2}$$

价带顶附近状态密度：

$$g_V(E)=\frac{dZ}{dE}=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\left(2m_p^*\right)^{3/2}}{\hbar^3}\left(E_V-E\right)^{1/2}$$



3.态密度



- 导带底附近:
- 单位能量间隔内的量子态数，随着电子能量的增加按抛物线关系增大;
- 价带顶附近:
- ✓ 价带顶附近单位能量间隔内的量子态数，随着能量的减小按抛物线关系增大。

DOS: 旋转椭球面

$$E(k)=E_{\mathrm{c}}+\frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{k_1^2+k_2^2}{m_t}+\frac{k_3^2}{m_l}\right]$$

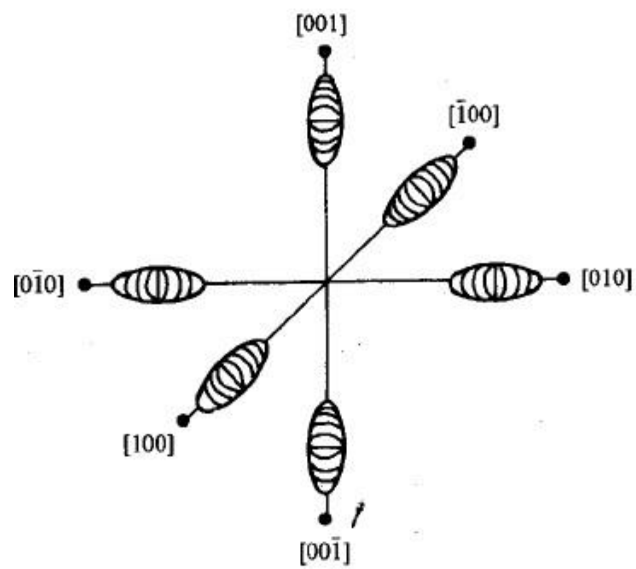
1.极值Ec不在k=0处；
2.设导带底的状态有s个；

$$g(E)=\frac{dZ}{dE}=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\left(2m_n^*\right)^{3/2}}{\hbar^3}\left(E-E_c\right)^{1/2}$$

$$\mathrm{m}_n^*=m_{dn}=s^{2/3}(m_l m_t^2)^{1/3}$$

- Si: S=6 $\quad m_l=(0.9163\pm0.0004)\mathrm{m}_0$ $\quad m_t=(0.1905\pm0.0001)\mathrm{m}_0$

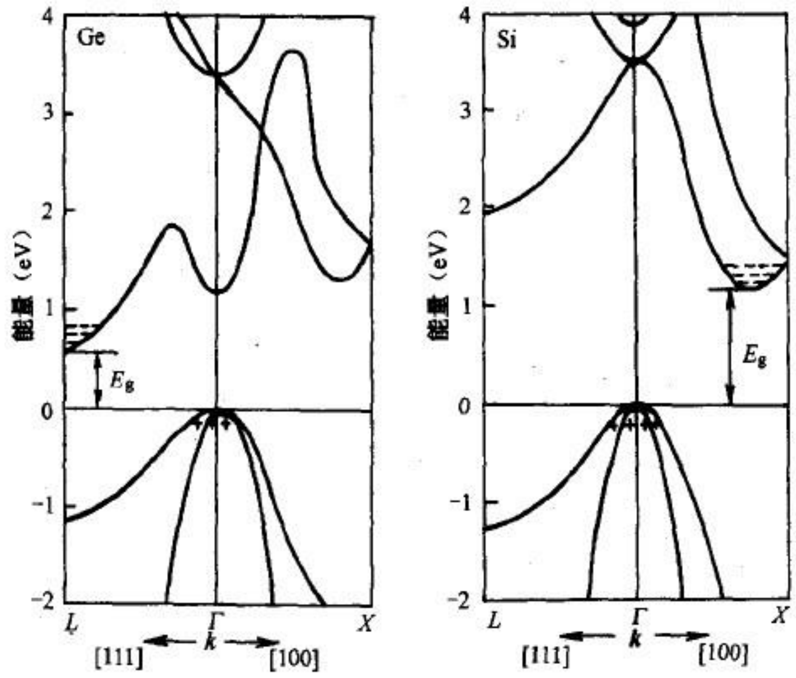
$$m_{\mathrm{dn}}=1.062\mathrm{m}_0$$



- Ge: S=4 $\quad m_{\mathrm{dn}}=0.56\mathrm{m}_0$

DOS:旋转椭球面

- 价带顶附近



$$g(E)=\frac{dZ}{dE}=\frac{V}{2\pi^2}\frac{\left(2m_{\mathrm{p}}^*\right)^{3/2}}{\hbar^3}\left(E_{\mathrm{v}}-E\right)^{1/2}$$

$$\mathrm{m}_p^* = m_{dp} = [(m_p)_l^{3/2} + (m_p)_h^{3/2}]^{2/3}$$

载流子的浓度

- 载流子浓度随温度变化的规律
- 计算一定温度下半导体中热平衡载流子浓度
  - 允许的量子态按能量如何分布？-状态密度
  - **电子在允许的量子态中如何分布？-电子的分布**

第3章

3.1 态密度

3.2 费米能级和载流子的统计分布

3.3 本征半导体的载流子浓度

3.4 杂质半导体的载流子浓度

3.5 一般情况下的载流子统计分布

3.6 简并半导体

费米分布函数

- 从大量电子的整体看，电子按能量大小具有一定的统计分布规律性；
- 根据量子统计理论，服从泡利不相容原理的电子遵循**费米统计律**
- 对于能量为E的一个量子态被一个电子占据的概率为 $f(E)$

$$f(E)=\frac{1}{1+e^{\frac{E-E_F}{k_0T}}}$$

物理意义：是描写热平衡状态下，电子在允许的量子态上如何分布的一个统计分布规律。

- $f(E)$ 称为电子的费米分布函数
- 空穴的费米分布函数？$1-f(E)$

费米能级

$$f(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{K_0T}\right)}$$

- E_F 费米能级
- T, 导电类型, 杂质浓度, 电势零点的选取
- 能带内所有量子态被电子占据的量子态数等于电子的总数。

$$\sum_i f(E_i)=N$$

- 系统的化学势 $E_F=\mu=\left(\frac{\partial F}{\partial N}\right)_T$

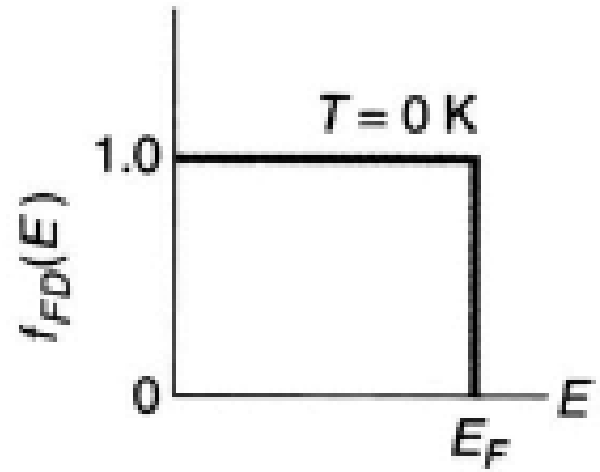
费米能级

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

- 在热平衡状态
  - ✓ 体系中增加一个电子引起体系自由能的变化，等于体系的化学势
  - ✓ 统一的化学势，因此有统一的费米能级

费米能级

$$f(E)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-E_F}{K_0T}\right)}$$



- $T=0K$：

$$E<E_F\rightarrow f(E)=1$$

$$E>E_F\rightarrow f(E)=0$$

- 绝对零度时，费米能级可看成量子态是否被电子占据的一个界限。

费米能级

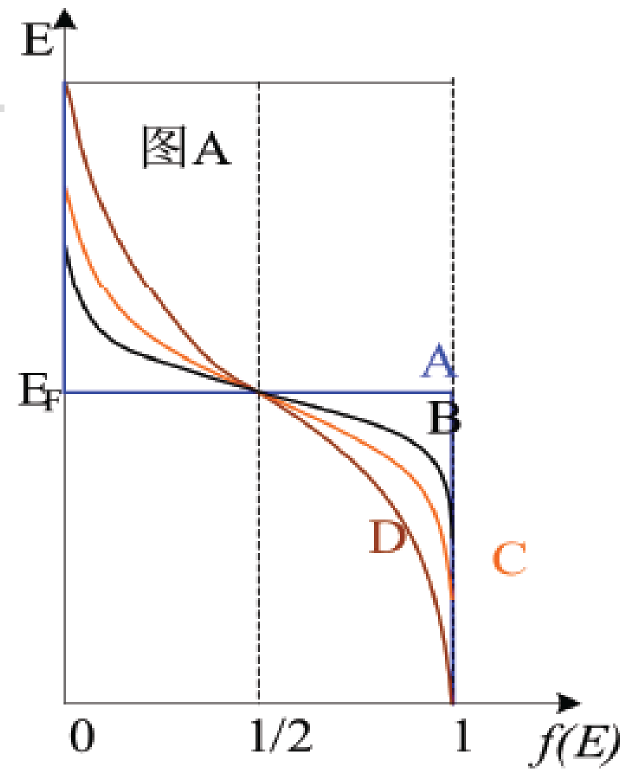
$$f\left(E\right)=\frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E-E_F}{K_0T}\right)}$$

- $T > 0K$：

$$E < E_F \rightarrow f\left(E\right) > 1/2$$

$$E = E_F \rightarrow f\left(E\right) = 1/2$$

$$E > E_F \rightarrow f\left(E\right) < 1/2$$



- 费米能级上被电子占据的概率为50%.
- 系统温度高于绝对零度时，费米能级可看成量子态基本被电子占据或基本是空的一个标志。

费米能级

- 如果 E比费米能级高或低 $5k_0T$, 计算该能级被电子占据的概率。

解:

$$f(E)=\frac{1}{1+e^{\frac{E-E_F}{K_0T}}}$$

$$E-E_F=5k_0T,\ f(E)=\frac{1}{1+e^{\frac{5k_0T}{k_0T}}}=\frac{1}{1+e^{5}}=0.007$$

$$E-E_F=-5k_0T,\ f(E)=\frac{1}{1+e^{-\frac{5k_0T}{k_0T}}}=\frac{1}{1+e^{-5}}=0.993$$

费米能级

- 当温度不太高时：
  - ✓ $E>E_F$，基本为空；
  - ✓ $E<E_F$，基本被占据；
  - ✓ $E=E_F$，50%
- 费米能级的位置比较直观的反应了电子占据量子态的状况；
- 费米能级高,则更多的电子占据了更高的能级；
- 费米能级标志着电子填充能级的水平。

费米能级

- 例题：如果 E_F=5eV, 计算当电子占据能级E=5.5eV的概率为1%时的温度T；在这个温度下计算占据概率为0.1~0.9时的能量间隔。

解：

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1} \qquad T=\frac{E-E_F}{k_B\, ln\left(\frac{1}{f(E)}-1\right)}$$

1eV=1.602×10^{-19} J， k_B=1.38×10^{-16} erg/K=8.63×10^{-19} eV/K

$$T=\frac{5.5-5}{8.63\times10^{-5}\times\ln\left(\frac{1}{0.01}-1\right)}=1261\ \ K$$

费米能级

$$f(E)=\frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_BT}}+1} \qquad E=E_F+k_B T\,ln\left(\frac{1}{f(E)}-1\right)$$

- f=0.9

$$E_1=E_F+8.63\times10^{-5}\times1261\times ln\left(\frac{1}{0.9}-1\right)=E_F-0.24\ \ eV$$

- f=0.1

$$E_2=E_F+8.63\times10^{-5}\times1261\times ln\left(\frac{1}{0.1}-1\right)=E_F+0.24\ \ eV$$

- Energy range

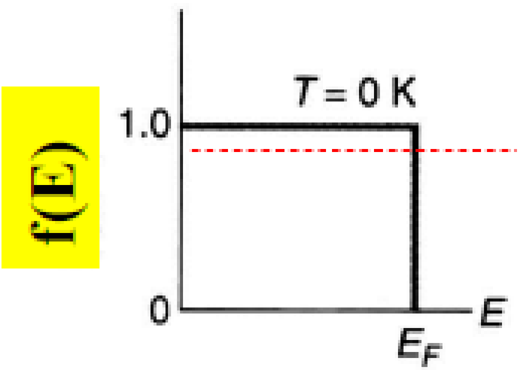
$$\Delta E=E_2-E_1=0.48\ \ eV$$

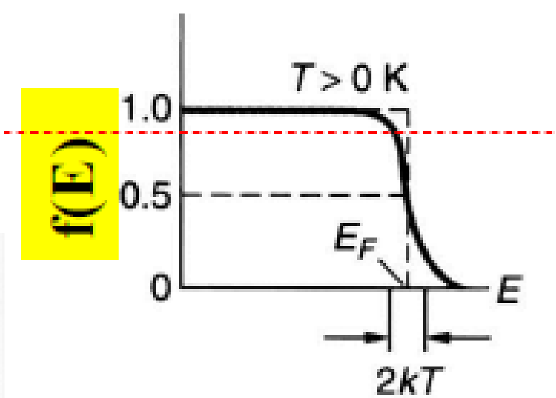
费米能级

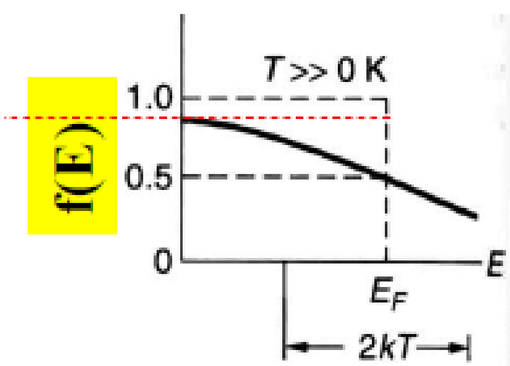
$$f(E)=\frac{1}{1+e^{\frac{E-E_F}{K_0T}}}$$

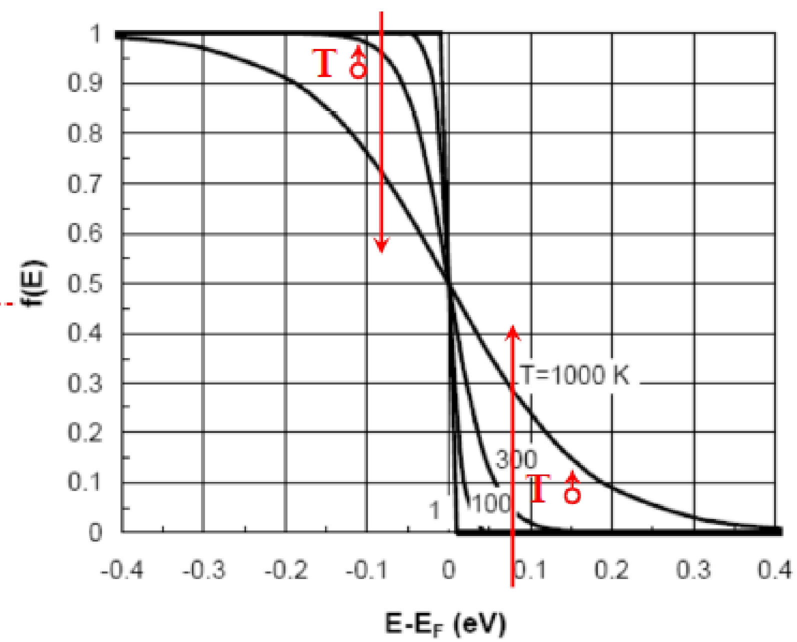
$$E<E_F,\ f(E)=\frac{1}{1+e^{-\frac{|E-E_F|}{K_0T}}}\quad T\uparrow\Rightarrow e^{-\frac{|E-E_F|}{K_0T}}\uparrow\Rightarrow f(E)\downarrow$$

$$E>E_F,\ f(E)=\frac{1}{1+e^{\frac{|E-E_F|}{K_0T}}}\quad T\uparrow\Rightarrow e^{\frac{|E-E_F|}{K_0T}}\downarrow\Rightarrow f(E)\uparrow$$









费米能级

- 可以认为是一个假想的电子的能级
- 不需要对应实际的能级
- 不要求有实际存在的能带结构
- 然而，费米能级能精确的确定热平衡状态
- 用伏特计可以测量费米能级的不同