清华大学
半导体能带工程
2024 年春季学期

作业 3

廖汶锋 2024 年 3 月 26 日

3.1. 限制在边长为 L 的正方形中 N 个自由电子，电子的能量：

$$E(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2)$$

(1) 求能量 E 到 $E + dE$ 之间的状态数；

(2) 求此二维系统在绝对零度的费米能量。

解. (1) 由二维无限深势阱模型可知

$$k_x = \frac{\pi}{L}n_x,\ k_y = \frac{\pi}{L}n_y,\ (n_x, n_y) \in \mathbb{N}^{*3} \tag{3.1-1}$$

所以 $(0, E]$ 之间包含的状态数为

$$Z = 2 \cdot \left(\frac{1}{4}\right) \cdot \pi \left(\frac{8mL^2E}{h^2}\right) = \frac{4\pi mL^2}{h^2}E \tag{3.1-2}$$

其中 “2” 代表电子自旋自由度，“$\frac{1}{4}$” 作为 (n_x, n_y) 都落在第一象限内。

由 (3.1-2) 可知，$[E, E + dE]$ 之间的状态数为

$$dZ = \frac{4\pi mL^2}{h^2}dE \tag{3.1-3}$$

(2) 在绝对零度时，电子的能量都分布到费米能级 E_F 以下，且所有能级都被填满，所以利用 (3.1-3) 可得

$$\begin{aligned} N &= \int_0^{E_F} dZ \\ &= \int_0^{E_F} \frac{4\pi mL^2}{h^2}dE \\ &= \frac{4\pi mL^2}{h^2}E_F \end{aligned} \tag{3.1-4}$$

因此费米能量的表达式为

$$E_F = \frac{h^2}{4\pi mL^2}N \tag{3.1-5}$$

3.2. 制造晶体管一般是在高杂质浓度的 n 型衬底上外延一层 n 型外延层，再在外延层中扩散硼、磷而成。

(1) 设 n 型硅单晶衬底是掺锑的，锑的电离能为 0.039eV，300K 时的 E_F 位于导带下面 0.026eV 处，计算锑的浓度和导带中电子浓度。（提示：注意简并）

(2) 设 n 型外延层杂质均匀分布完全电离，杂质浓度为 $4.6\times10^{15}\text{cm}^{-3}$，计算 300K 时 E_F 的位置及电子和空穴的浓度。

(3) 在外延层中扩散硼后，硼的浓度分布随样品深度变化。设扩散层某一深度处硼浓度为 $5.2\times10^{15}\text{cm}^{-3}$，计算 300K 时 E_F 的位置及电子和空穴的浓度。

(4) 若温度升高到 500K，计算 (3) 中电子和空穴的浓度。

已知 ：$N_c = 2.8\times10^{19}\text{cm}^{-3}$，300K 时 Si 的本征载流子浓度 $n_i = 1.5\times10^{10}\text{cm}^{-3}$，500K 时 Si 的本征载流子浓度 $n_i = 4\times10^{14}\text{cm}^{-3}$。

解. (1) $T = 300K$ 时，$k_BT = 0.0259\text{eV}$，记 $\eta_F = \frac{E_F-E_c}{k_BT} = -1.0045$。因为 $\eta_F \approx -1$，所以要用简并半导体的分析方法。

导带中电子浓度为

$$n = \frac{2}{\sqrt{\pi}}N_cF_{1/2}(\eta_F) = 8.739\times10^{18}\text{cm}^{-3} \tag{3.2-1}$$

其中，$F_{1/2}(\eta_F = -1.0045) = 0.2766$ 的值由费米-狄拉克积分的无穷级数展开所得，详细推导过程记录在附录中。

因为 $n >> n_i$，所以可以认为导带大部分是由施主电离所得，即 $n = n_D^+$。利用杂质电离的浓度公式可得：

$$N_D = n_D^+\left[1+g_d\exp\left(-\frac{E_D-E_F}{k_BT}\right)\right] = 3.762\times10^{19}\text{cm}^{-3} \tag{3.2-4}$$

(2) 因为杂质的浓度未至于令外延层变成简并半导体，所以本题利用非简并半导体的方式作分析。

由于杂质完全电离，表示 $E_D - E_F >> k_BT$，所以结合电中性条件可以整理成：

$$n^2 - N_Dn - n_i^2 = 0 \tag{3.2-5}$$

$$\Leftrightarrow n = \frac{N_D}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_D}{2}\right)^2 + n_i^2} \tag{3.2-6}$$

但因为 $\frac{N_D}{2} >> n_i$，所以 (3.2-6) 可以约化为

$$n = N_D = 4.6 \times 10^{15}\mathrm{cm}^{-3},\ p = \frac{n_i^2}{n} = 4.891 \times 10^4\mathrm{cm}^{-3} \quad (3.2\text{-}7)$$

同理可计算出费米能级的位置：

$$E_c - E_F = k_B T \ln\left(\frac{N_c}{n}\right) = 0.226\mathrm{eV} \quad (3.2\text{-}8)$$

费米能级位于导带下方 0.226eV 处。

(3) 由于硼是受主杂质，所以有

$$p = \frac{N_A - N_D}{2} + \sqrt{\left(\frac{N_A - N_D}{2}\right)^2 + n_i^2} = 6.0\times10^{14}\mathrm{cm}^{-3},\ n = \frac{n_i^2}{p} = 3.75\times10^5\mathrm{cm}^{-3} \quad (3.2\text{-}9)$$

同理可计算出费米能级的位置：

$$E_c - E_F = k_B T \ln\left(\frac{N_c}{n}\right) = 0.8268\mathrm{eV} \quad (3.2\text{-}10)$$

费米能级位于导带下方 0.8268eV 处。

(4) 当 $T = 500K$ 时，本征载流子浓度变为 $n_i = 4 \times 10^{14}\mathrm{cm}^{-3}$，所以空穴和电子的浓度变为：

$$p = \left(\frac{N_A - N_D}{2}\right) + \sqrt{\left(\frac{N_A - N_D}{2}\right)^2 + n_i^2} = 8.0\times10^{14}\mathrm{cm}^{-3},\ n = \frac{n_i^2}{p} = 2.0\times10^{14}\mathrm{cm}^{-3} \quad (3.2\text{-}11)$$

最后计算出费米能级的位置：

$$E_i - E_F = k_B T \ln\left(\frac{n_i}{p}\right) = 0.0299\mathrm{eV} \quad (3.2\text{-}10)$$

费米能级位于本征费米能级 E_i 下方 0.0299eV 处。

附录 A　费米-狄拉克积分的级数展开

对于费米-狄拉克积分 $F_j(\eta_F)=\int_0^\infty \frac{x^j}{1+\exp(x-\eta_F)}dx$ 来说，虽然没有解析解，但是对于 $\eta_F<0$ 时，可以利用幂级数一致收敛的性质，把积分展开成无穷级数：

$$\begin{aligned}
F_j(\eta_F) &= \int_0^\infty \frac{x^j}{1+\exp(x-\eta_F)}dx \\
&= \int_0^\infty \frac{x^j\exp(\eta_F-x)}{1+\exp(\eta_F-x)}dx \\
&= \int_0^\infty \sum_{n=0}^{\infty}\left\{x^j\exp(\eta_F-x)\cdot(-1)^n\exp\left[n(\eta_F-x)\right]\right\}dx \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\int_0^\infty x^j\exp\left[(n+1)(\eta_F-x)\right]dx \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\exp\left[(n+1)\eta_F\right]\int_0^\infty x^j\exp\left[-(n+1)x\right]dx \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\exp\left[(n+1)\eta_F\right]}{(n+1)^{j+1}}\int_0^\infty \xi^j\exp(-\xi)d\xi \\
&= \Gamma(j+1)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\exp\left[(n+1)\eta_F\right]}{(n+1)^{j+1}} \\
&= j\Gamma(j)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\exp\left[(n+1)\eta_F\right]}{(n+1)^{j+1}} \qquad \text{(A3-0)}
\end{aligned}$$

把 $j=1/2$ 代入上式，结合 $\Gamma(1/2)=\sqrt{\pi}$ 可得：

$$F_{1/2}(\eta_F)=\frac{\sqrt{\pi}}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\exp\left[(n+1)\eta_F\right]}{(n+1)^{3/2}} \qquad \text{(A3-1)}$$

$$\begin{aligned}
n &= \frac{2}{\sqrt{\pi}}N_cF_{1/2}(\eta_F) \\
&= N_c\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n\exp\left[(n+1)\eta_F\right]}{(n+1)^{3/2}} \qquad \text{(A3-2)}
\end{aligned}$$

观察 (**??**) 可知，式中的无穷级数是交错级数，所以若用 $F_j(\eta_F;m)=j\Gamma(j)\sum\limits_{n=0}^{m-1}\frac{(-1)^n\exp[(n+1)\eta_F]}{(n+1)^{j+1}}$ 作为前 m 项之和来近似真值 $F_j(\eta_F)$，根据交错级数的特性可以推导出：

$$|F_j(\eta_F;m)-F_j(\eta_F)|\le|F_j(\eta_F;m)-F_j(\eta_F;m-1)|=\frac{\exp\left(m\eta_F\right)}{m^{j+1}} \qquad \text{(A3-4)}$$

若希望有限和近似的误差不超过 δ，则只要取 $m\ge\min(\delta^{-\frac{1}{j+1}},\eta_F^{-1}\ln\delta)$。如题 3.2(1) 中，如取 $\delta=10^{-19}$，则导出 m 取 44 便可，并计算得积分值为 0.276550161095773。