

# 第一章 半导体物理基础

- 1.1 半导体的晶格结构
- 1.2 半导体的电子状态和能带结构
- 1.3 半导体中的掺杂与载流子
- 1.4 载流子输运和复合

# 半导体中的缺陷

## ◆实际半导体材料中总是存在**偏离理想情况**的各种复杂情况

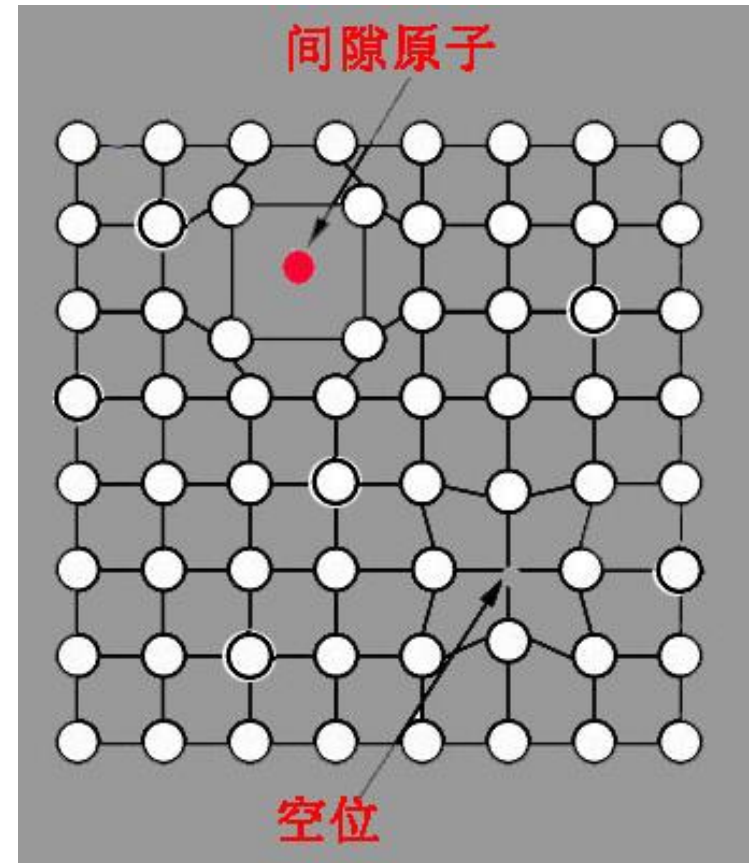
- 晶格中存在于组成半导体材料的元素不同的其他化学元素的原子——杂质
- 某些区域晶格中原子周期性排列被破坏——形成各种缺陷
- ...

## ◆**缺陷**按其几何形状分为三类

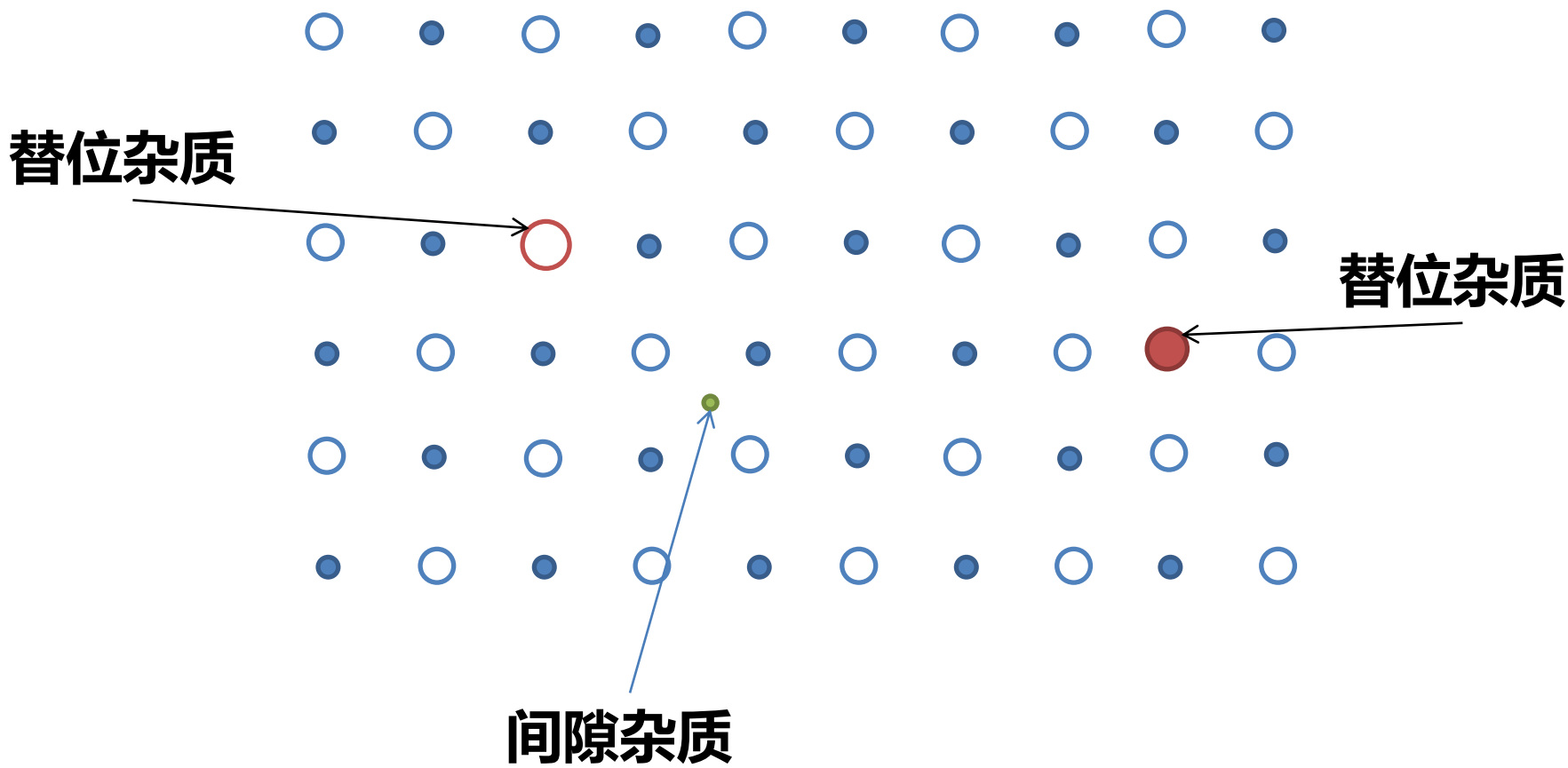
- **点缺陷**
- **线缺陷**
- **面缺陷**

# 点缺陷——空位 (vacancy)、 间隙原子 (interstitial atom)

晶格中某个原子脱离了平衡位置，形成空结点，称为**空位**；某个晶格间隙挤进了原子，称为**间隙原子**

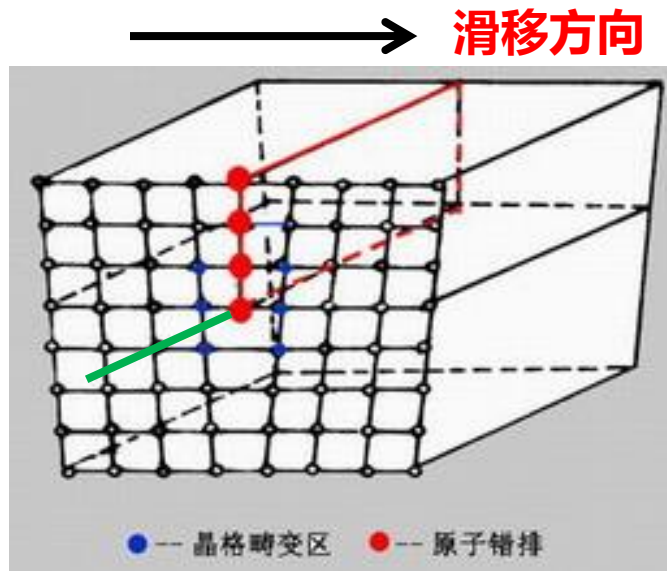


# 点缺陷——杂质原子



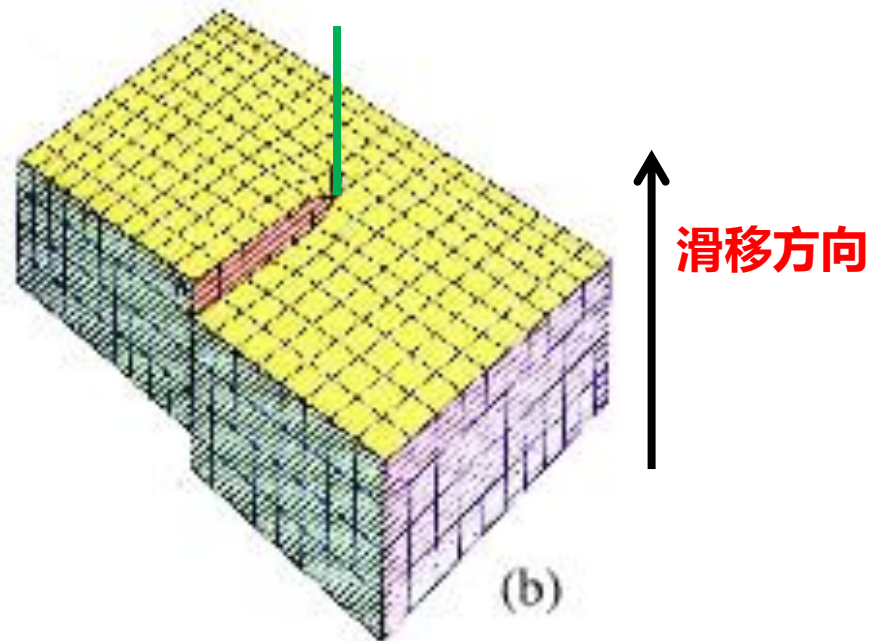
# 线缺陷——位错 (dislocation)

在晶体中某处有一列或若干列原子发生了有规律的错排现象。晶体中**最普通的线缺陷就是位错**，这种错排现象是晶体内部局部滑移造成的，根据局部滑移的方式不同，可以分别形成**螺型位错**和**刃型位错**。



刃型位错

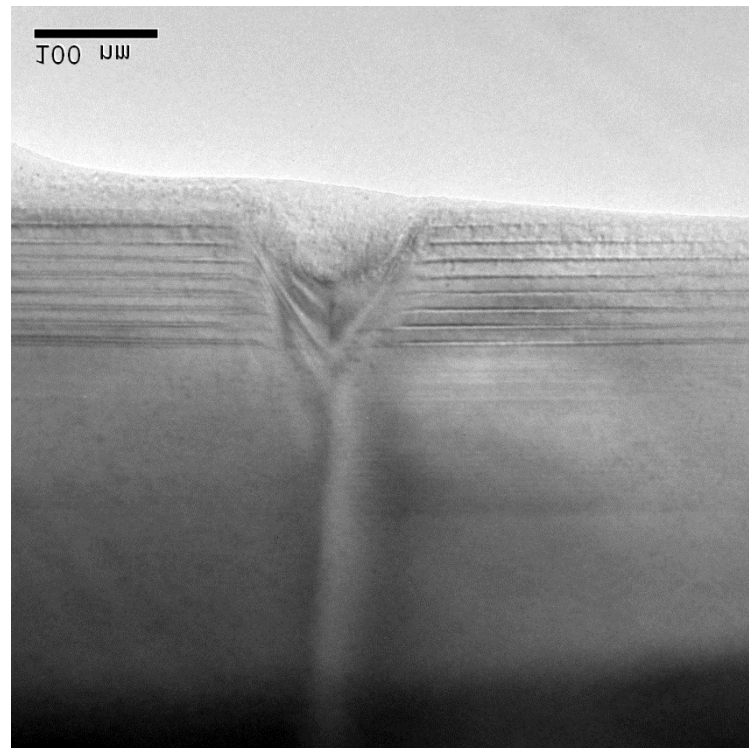
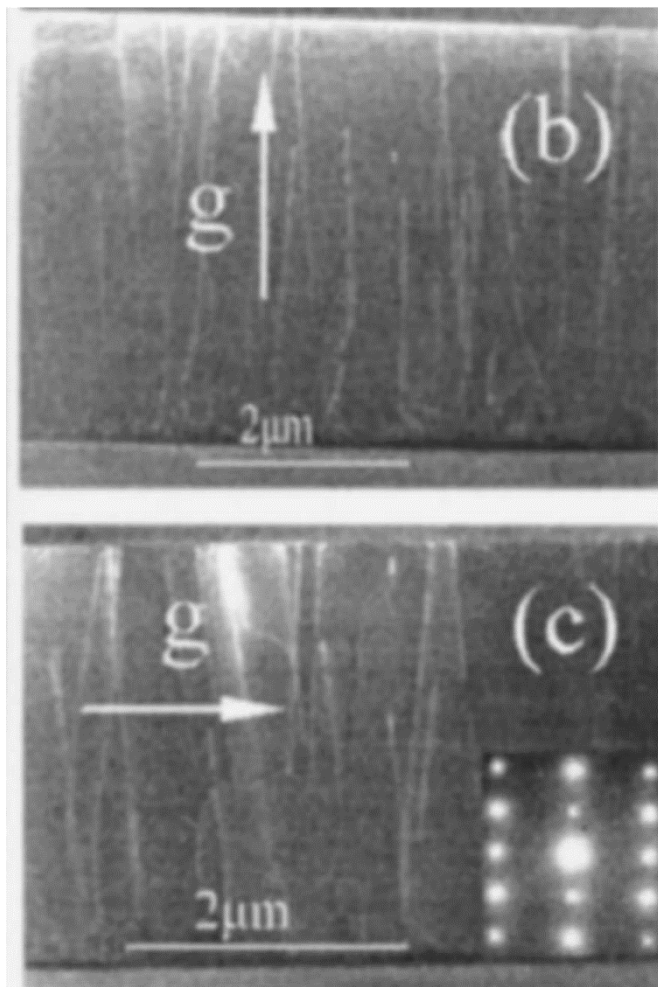
位错线与滑移方向垂直



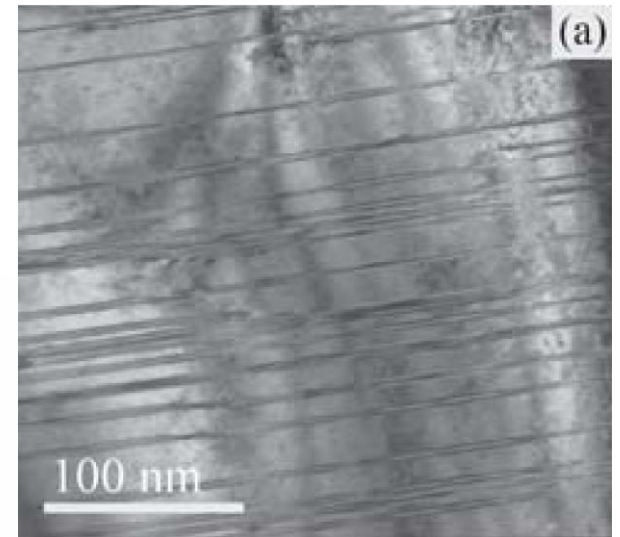
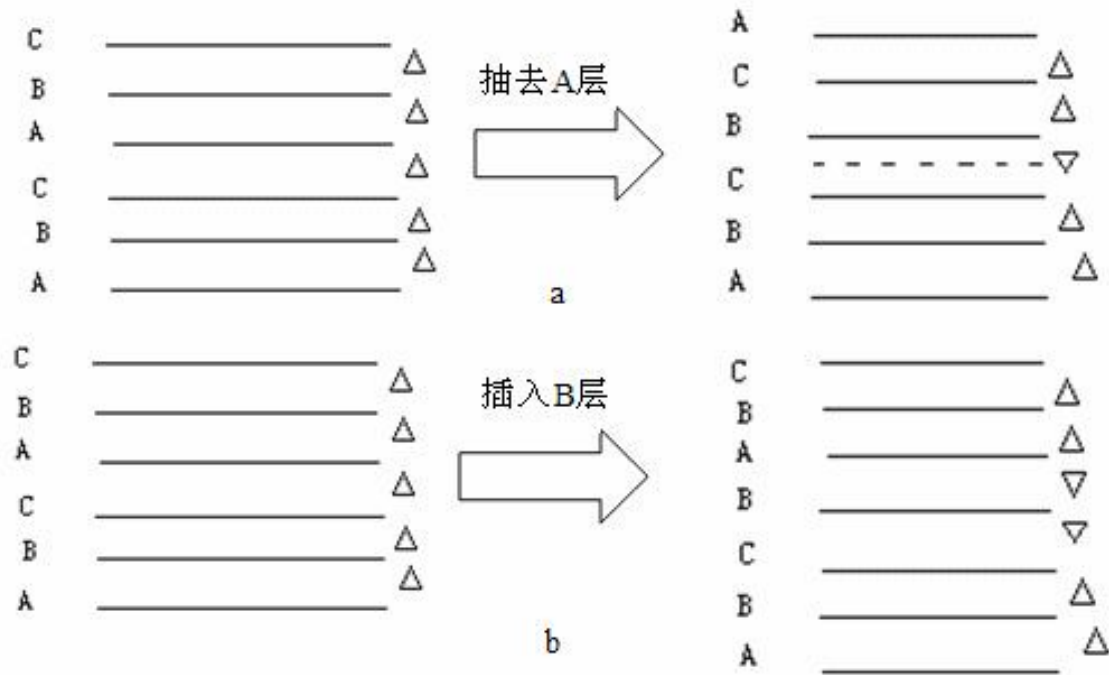
螺型位错

位错线与滑移方向平行

# GaN材料中的位错

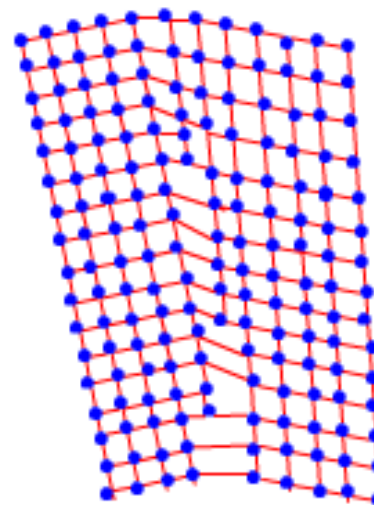
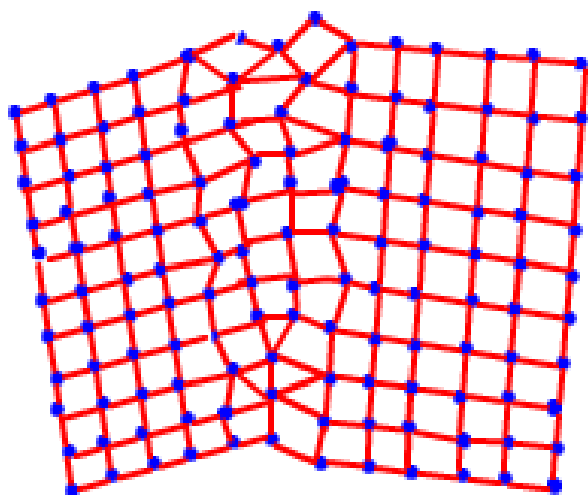


# 面缺陷——堆垛层错 (stacking fault)



# 面缺陷——多晶体和晶粒间界

实际的固体材料绝大部分是多晶体，由许多晶粒组成。由于晶粒可以有多种取向，多晶体的宏观性质往往表现为各向同性。晶粒之间的交界区（面）称为晶粒间界——可以看作是一种面缺陷。



一般的晶粒间界只有极少几层原子排列是比较错乱的，它的周边还有若干层原子是按照晶格排列的，只不过是较大的畸变而已。



# 半导体中的缺陷能级

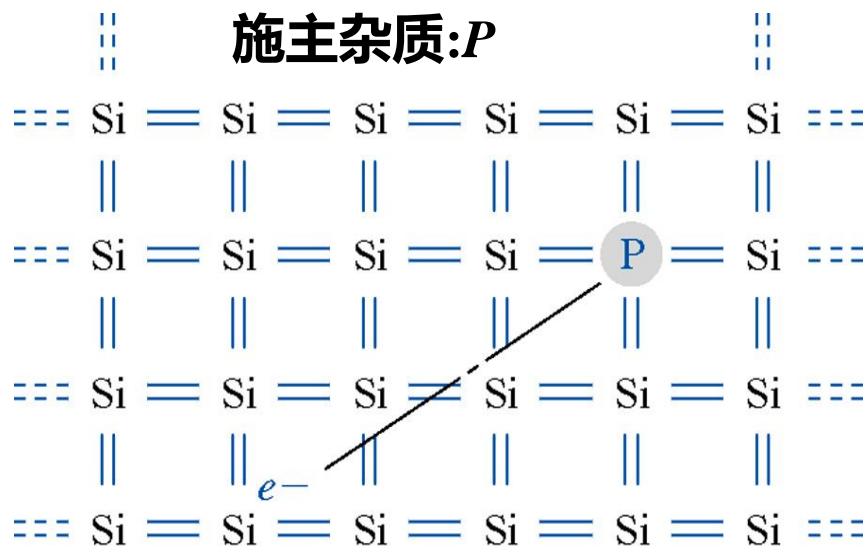
在完整的周期晶格中，电子波函数**扩展**于整个晶体之中（是一种**共有化**状态），电子的能级只能处于**能带之中**而不能存在于禁带

半导体中的杂质、空位等缺陷使严格的周期性势场受到破坏，从而有可能使电子或者空穴**束缚**在他们的周围，形成（空间上）**局域化**的电子态。这些局域电子态的能量通常在**禁带之中**，称为杂质（缺陷）能级。

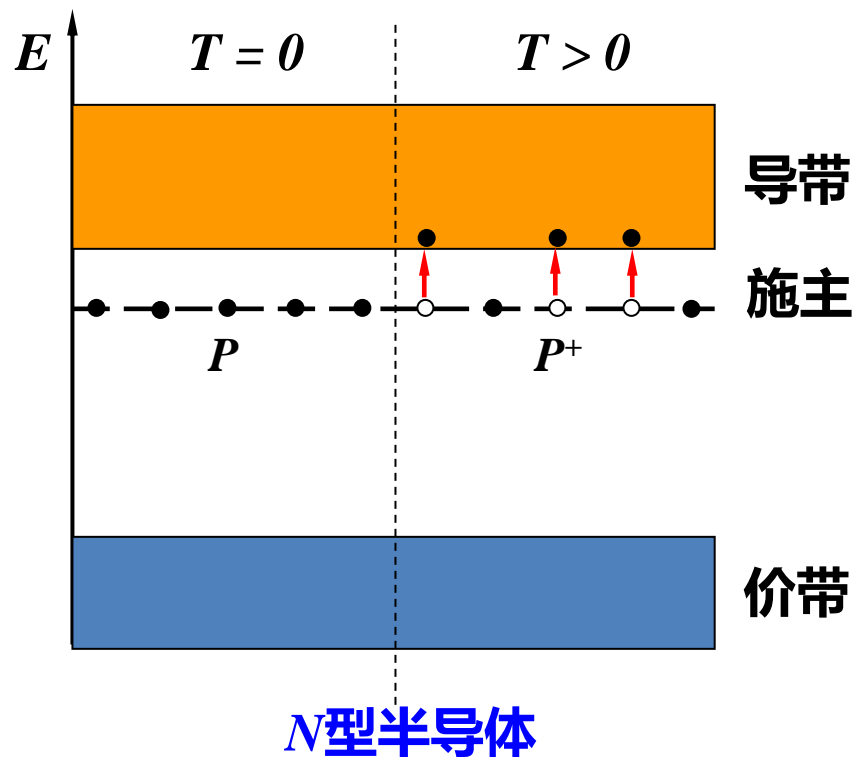
某些合适的杂质对电子和空穴的束缚很弱，在室温下电子和空穴很容易获得能量脱离束缚而在整个晶体中运动。相当于这些杂质能级离导带底（或者价带顶）很近。电子（或者空穴）很容易受到热激发进入导带（或者价带）。

# 施主杂质

- 施主——杂质在能隙中提供带有电子的能级（束缚态）
  - 电子由施主能级激发到导带远比价带激发容易



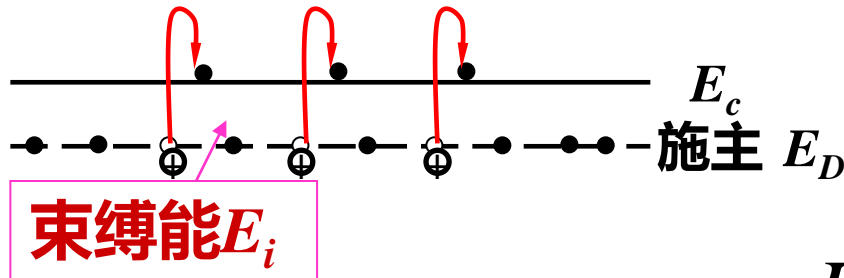
在Si或Ge中加入少量五价的P、As或Sb，或在GaAs中用VI族元素（S、Se、Te）替代As就形成N型半导体



主要含施主杂质  
导电几乎完全依靠施主热激发到导带的电子

# 施主杂质能级的特点

- 束缚能很小 ( $E_i \sim 10 \text{ meV}$ 量级)
  - 电子很容易摆脱施主束缚而跃到导带运动
  - 导带底能量-施主能级能量=施主电离能=束缚能

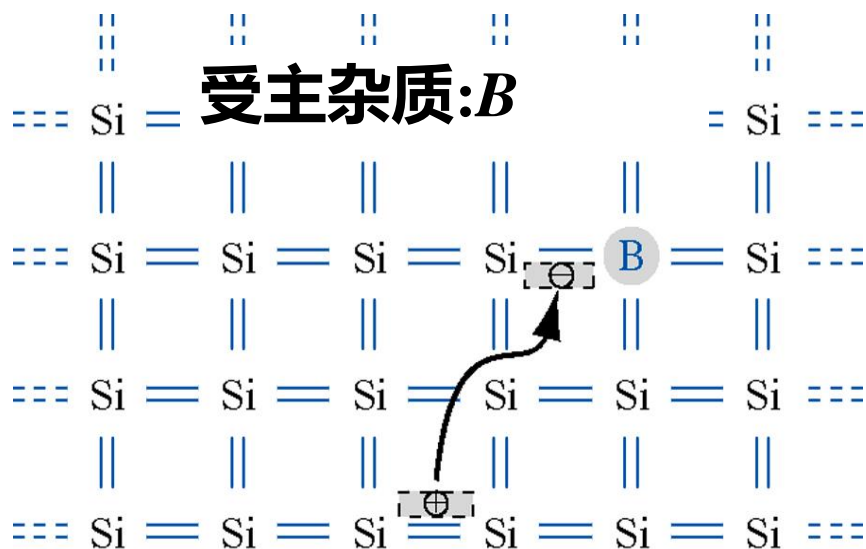


$$E_i = \Delta E_D = E_c - E_D$$

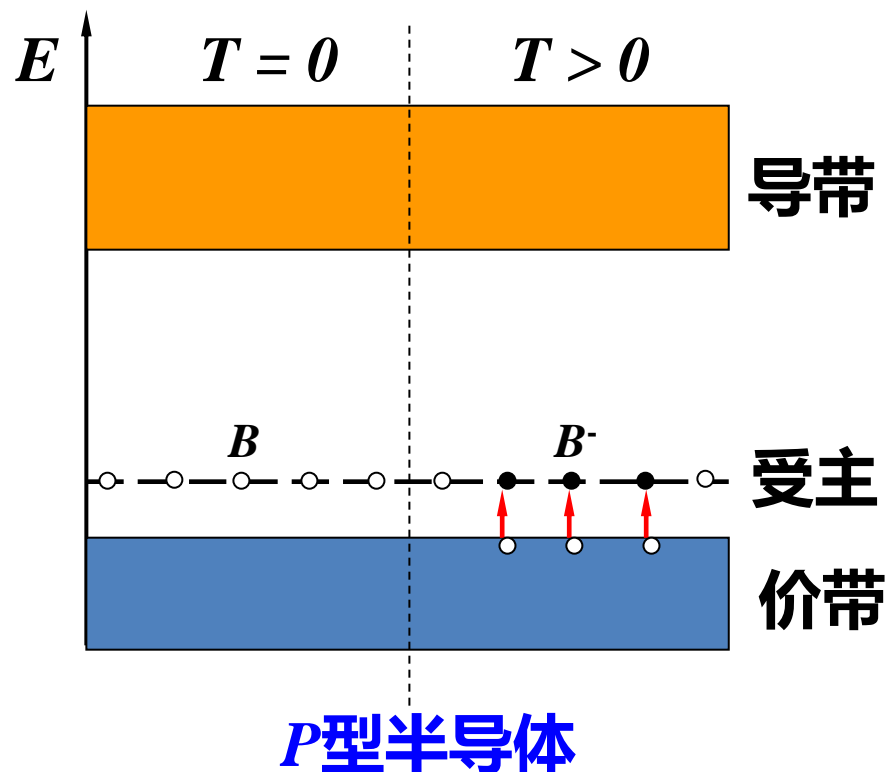
这里所指的施主电离实际上是电子克服施主的束缚而电离到导带中的过程。因此，施主能级 $E_D$ 应在导带底 $E_c$ 以下，其能量差就是施主的电离能 $E_i$ （或 $\Delta E_D$ ），即只要给施主电子以 $E_i$ 大小的能量，就可以将它激发到导带中

# 受主杂质

- 受主——指杂质提供带隙中空能级
  - 电子由价带激发到受主能级比激发到导带容易



若在Si或Ge中掺入少量三价的B、Al、In等，或在GaAs中用II族元素（Zn、Be、Mg）替代Ga则形成P型半导体。



主要含受主杂质，主要依赖空穴导电  
(价带许多电子激发到受主能级，留下很多空穴)

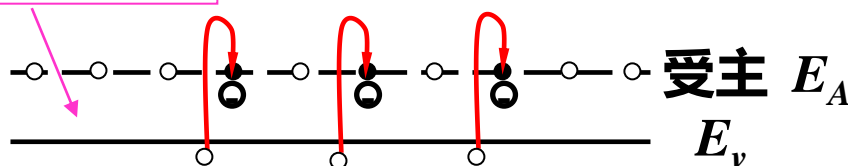
# 受主杂质能级的特点

- 束缚能很小 (10 meV量级)
  - 电子很容易激发到受主的束缚能级, 在价带顶留下空穴。
  - 受主能级能量-价带顶能量=受主电离能=束缚能

$E_c$

$$E_i = \Delta E_A = E_A - E_v$$

束缚能 $E_i$



空穴电离意味着空穴得到能量脱离受主的束缚进入价带。  
受主能级 $E_A$ 在价带顶 $E_v$ 之上, 能量差即为受主的电离能 $E_i$  (或者 $\Delta E_A$ ) 。

# 浅能级杂质

- 上述由替位杂质所形成的施主和受主
  - 能级靠近导带或价带，又称为**浅能级杂质**
  - 杂质能级对电子或空穴的束缚能很小（**杂质电离能小**）
  - 室温下，电子很容易从施主能级跃迁到导带或从价带跃迁到受主能级
  - 可以想象，载流子将以杂质跃迁产生为主，远远多于从价带到导带跃迁产生的载流子数目

# 深能级杂质

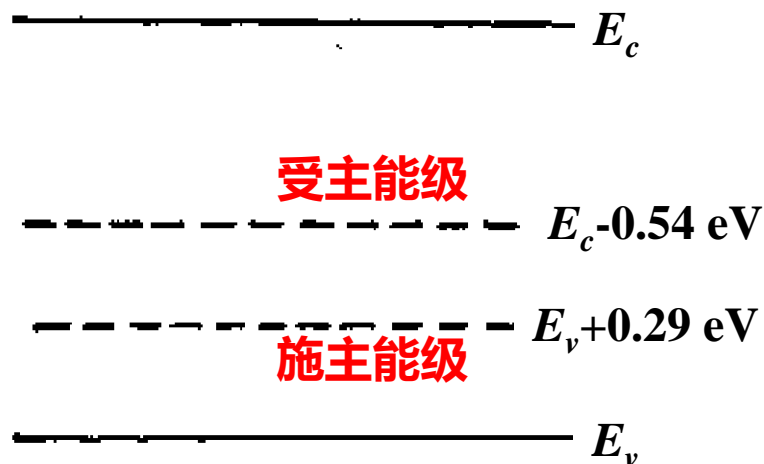
- 施主能级离导带底远，受主能级离价带顶远
- 大多数是多重能级
  - 如Au在硅中，有施主能级也有受主能级
  - 金为1价，**施主能级靠近价带(!)**，**受主能级靠近禁带中部(!)**
- 深能级杂质的束缚能强，很难电离，而且一般含量很少，所以对半导体中载流子导电的贡献很小
  - 有效的复合中心，降低载流子寿命
  - 做补偿杂质，提高材料电阻率

Cu:  $3d^{10} 4s^1$

Ag:  $4d^{10} 5s^1$

Au:  $5d^{10} 6s^1$

Cu、Ag、Au等是典型的深能级杂质，  
在Ge或Si中均产生多重能级



硅中金杂质的能级

# 半导体中载流子的填充

- **单位体积的能态密度 $N(E)$** 
  - 单位体积内，能带中能量 $E$ 附近每单位能量间隔内的量子态数
- **占据几率 $f(E)$** 
  - 电子占据能量 $E$ 的概率
- **电子浓度 $n = \sum N(E) f(E)$** 
  - 将每一 $E$ 处的状态数乘以占据概率即为每一 $E$ 处的电子浓度
  - 所有能级的电子浓度求和是整个体系中的电子浓度



# 能态密度

电子状态用波矢 $k$ 标志, 根据周期性边界条件,  $k$ 的取值不连续, 每一个 $k$ 的取值代表一个量子态, 这些量子态在 $k$ 空间中排成一个态空间点阵, 每一个量子态在 $k$ 空间中所占的体积 $(2\pi)^3/V$ , 则 $k$ 的取值密度为 $V/(2\pi)^3$ 。

计入电子自旋, 每个 $k$ 代表自旋方向相反的两个量子态。所以 $k$ 空间中电子允许的量子态密度是 $2V/(2\pi)^3$

考虑导带底附近球形等能面情况  $E(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_-^*}$

$$k = \frac{(2m_-^*)^{1/2} (E - E_c)^{1/2}}{\hbar}$$

则 $E+dE$ (对应半径 $|k|$ 和 $|k+dk|$ 之间的球壳)之间的量子态数为

$$dZ = 2 \cdot \frac{V}{8\pi^3} \cdot 4\pi k^2 dk = 4\pi V \frac{(2m_-^*)^{3/2}}{h^3} (E - E_c)^{1/2} dE$$

# 基于带边有效质量近似的 载流子能态密度

- 导带底电子能态密度

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

- 得到单位体积的导带底电子能态密度

$$N_c(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_-^*)^{3/2} \sqrt{E - E_c}$$

- 同理、单位体积的价带顶空穴能态密度

$$N_v(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_+^*)^{3/2} \sqrt{E_v - E}$$

# Ge、Si的导带态密度有效质量

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2(k_x - k_{0x})^2}{2m_x^*} + \frac{\hbar^2(k_y - k_{0y})^2}{2m_y^*} + \frac{\hbar^2(k_z - k_{0z})^2}{2m_z^*}$$

$$N_c(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_-^*)^{3/2} \sqrt{E - E_c}$$

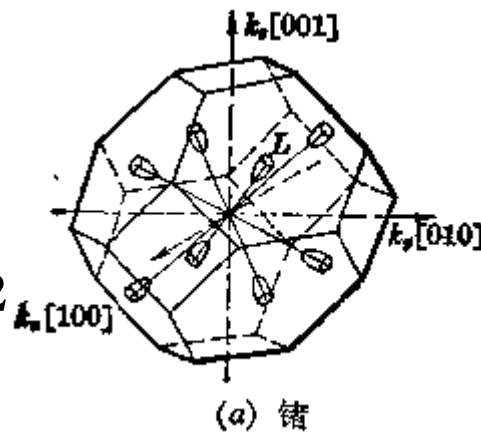
## • Ge

– 在L点(111)方向有8个1/2椭球等能面

$$(2m_-^*)^{3/2} = 4 \times (2m_l^*)^{1/2} (2m_t^*)^{1/2} (2m_t^*)^{1/2} \quad m_l: 1.64$$

$$m_-^* = (16m_l m_t^2)^{1/3} \quad m_t: 0.082$$

$$m_-^*: 0.56$$



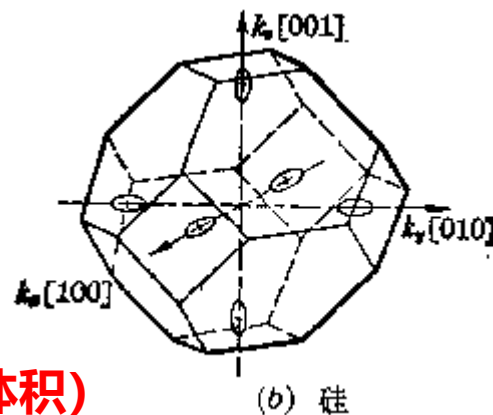
## • Si

– 在(100)方向有6个椭球等能面

$$(2m_-^*)^{3/2} = 6 \times (2m_l^*)^{1/2} (2m_t^*)^{1/2} (2m_t^*)^{1/2} \quad m_l: 0.98$$

$$m_-^* = (36m_l m_t^2)^{1/3} \quad m_t: 0.19$$

$$m_-^*: 1.08$$



**将所有椭球中的状态数（体积）折合成一个球的状态数（体积）**

# 综合轻重空穴能带的态密度空穴有效质量

$$N_v(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_+^*)^{3/2} \sqrt{E_v - E}$$

- 态密度空穴有效质量(Si和Ge的价带等能面是扭曲的球面)

$$(2m_+^*)^{3/2} = (2m_{lh}^*)^{3/2} + (2m_{hh}^*)^{3/2}$$

$$m_+^* = (m_{lh}^{3/2} + m_{hh}^{3/2})^{2/3}$$

注意：态密度有效质量是一种等效的表示

将轻重空穴两个球中的状态数（体积）折合成一个球的状态数（体积）

如果自旋分裂带足够接近，有效质量会增加

$$\text{Si: } m_{hh} \text{ 0.49, } m_{lh} \text{ 0.16}$$

$$m_+^* \text{ 0.52}$$

$$\text{Ge: } m_{hh} \text{ 0.28, } m_{lh} \text{ 0.044}$$

$$m_+^* \text{ 0.29}$$

$$\text{GaAs: } m_{hh} \text{ 0.45, } m_{lh} \text{ 0.082}$$

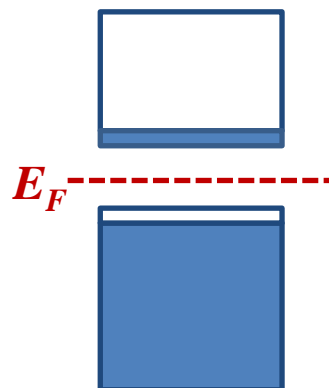
$$m_+^* \text{ 0.53}$$

# 半导体的费米能级

- 半导体电子同样遵循费米分布的一般规律
- 半导体中一般情况下导带电子很少，费米能级位于能隙内，且

$$E_c - E_F \gg k_B T$$

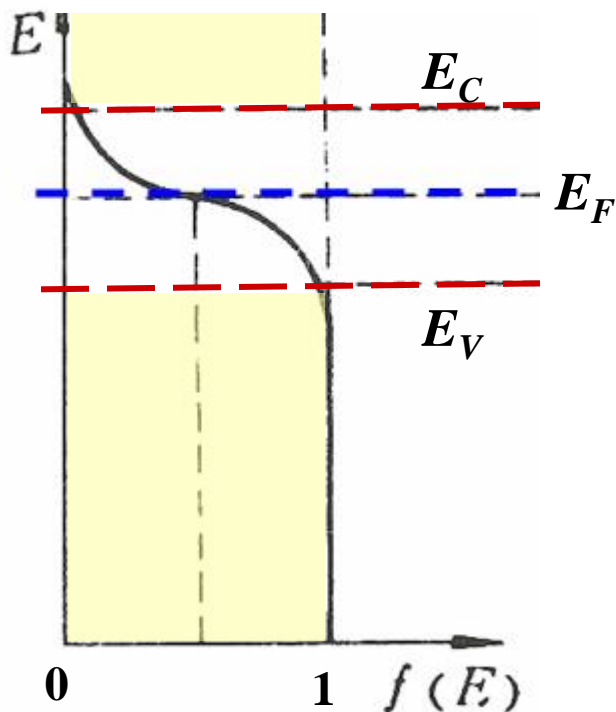
$$E_F - E_v \gg k_B T$$



# 半导体中电子的费米统计分布

从分布几率看，当 $E = E_F$ 时， $f(E_F) = 0.5$ ，代表填充几率为1/2的能态。当 $E - E_F > \text{几个} k_B T$ 时， $\exp[(E - E_F)/k_B T] \gg 1$ ，

电子有：



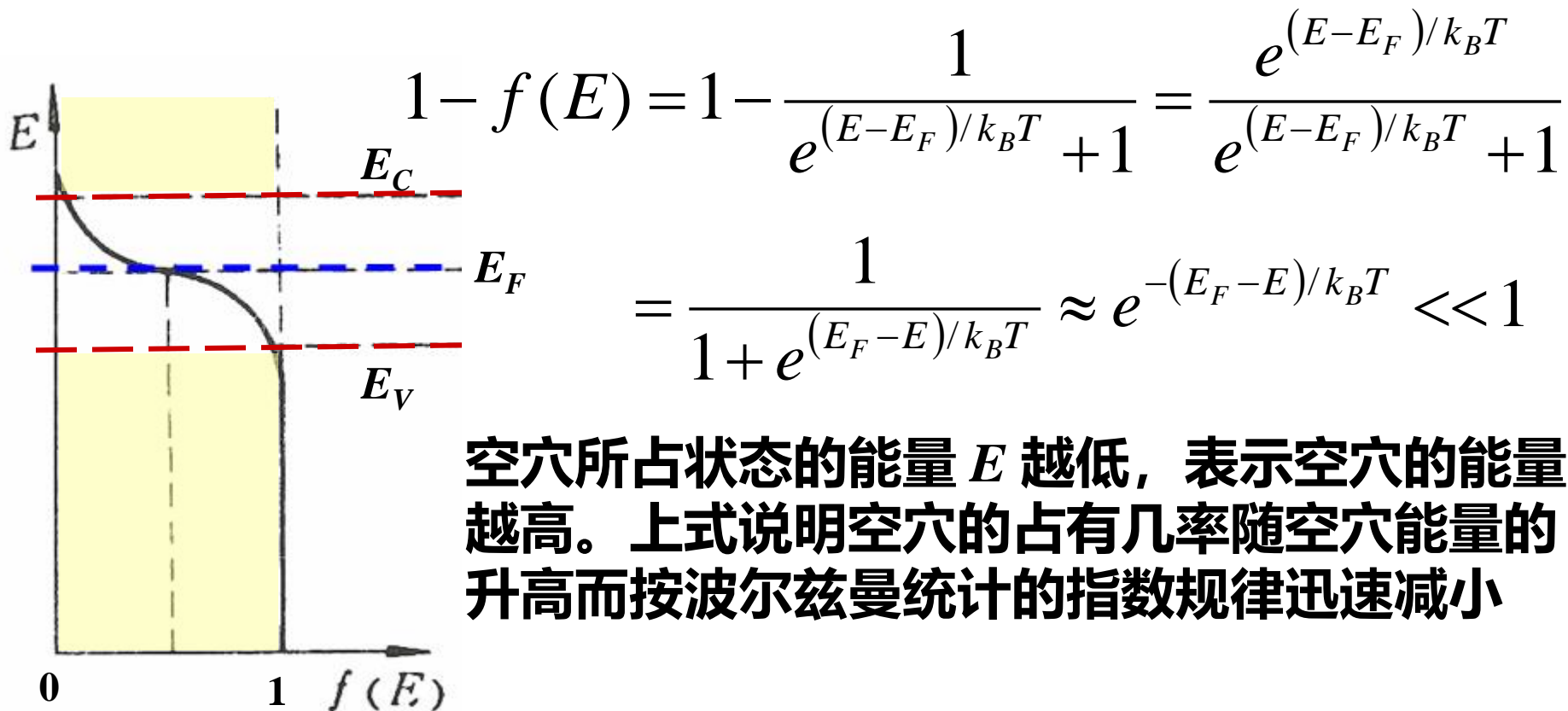
$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_B T} + 1} \approx e^{-(E-E_F)/k_B T} \ll 1$$

$$E - E_F > E_C - E_F \gg k_B T$$

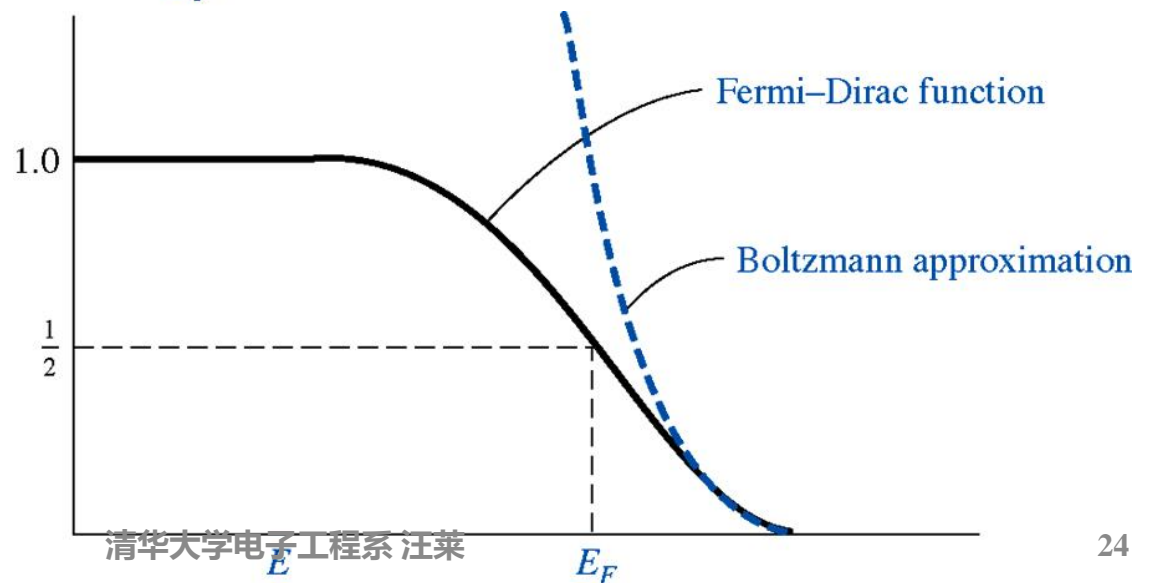
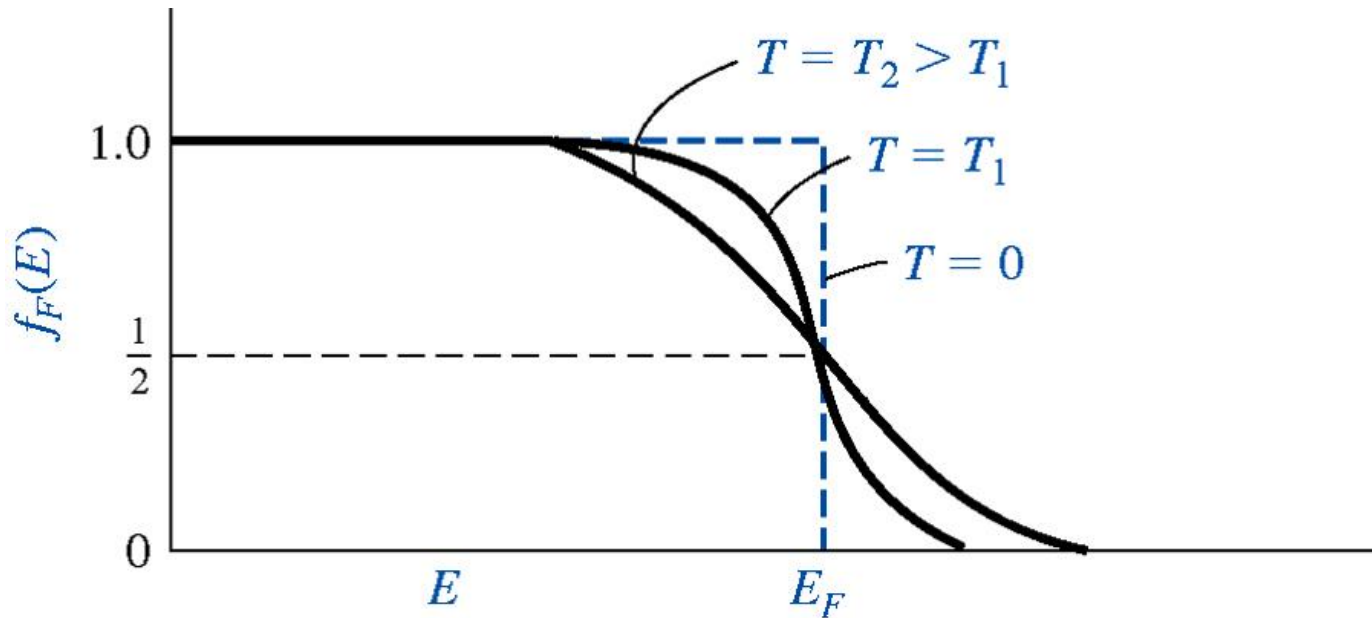
这时，费米分布过渡到经典的玻尔兹曼分布。且 $f(E)$ 随 $E$ 的增大而迅速趋于零。这表明， $E - E_F > \text{几个} k_B T$ 的能态是没有电子占据的空态

# 半导体中空穴的费米统计分布

价带中空穴的情况也很类似，价带能级被空穴占据的几率也就是不为电子占据的几率，即：



# 近玻尔兹曼统计分布





# 半导体载流子浓度的计算

- 已知条件

- 导带底能级 $E_c$ 、价带顶能级 $E_v$
- 导带底电子有效质量 $m_-^*$ 、价带顶空穴有效质量 $m_+^*$
- 假设知道费米能级  $E_F$

- 计算原则

- 通过 $E_F$ 与 $E_c$ 、 $E_v$ 的关系确定费米分布 $f(E)$
- 根据有效质量确定载流子能态密度 $N(E)$
- 通过积分获得总的载流子浓度 
$$n = \int_{E_c}^{\infty} f(E)N(E)dE$$

# 根据分布几率和能态密度计算电子浓度

## • 导带中电子总浓度

$$\begin{aligned} n &= \int_{E_c}^{\infty} f(E) N_c(E) dE \\ &= \frac{4\pi}{h^3} (2m_-^*)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} e^{-(E-E_F)/k_B T} (E-E_c)^{1/2} dE \\ &= \frac{4\pi}{h^3} (2m_-^*)^{3/2} e^{-(E_c-E_F)/k_B T} \int_{E_c}^{\infty} e^{-(E-E_c)/k_B T} (E-E_c)^{1/2} d(E-E_c) \\ &= \frac{2}{h^3} (2\pi m_-^* k_B T)^{3/2} e^{-(E_c-E_F)/k_B T} \\ &= N_c e^{-(E_c-E_F)/k_B T} \end{aligned}$$

$$N_c = \frac{2}{h^3} (2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}$$
 导带底有效状态密度

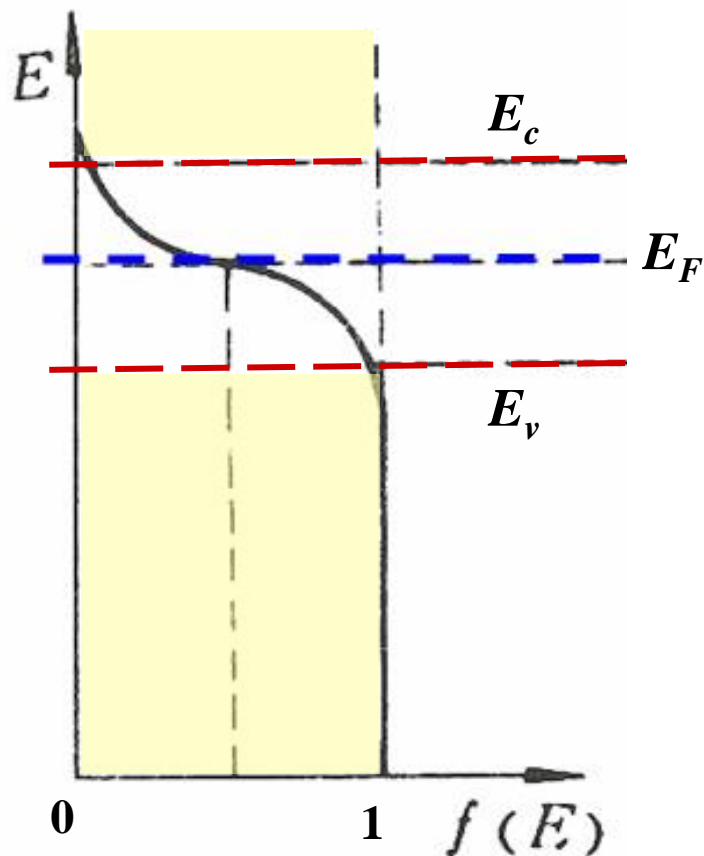
# 半导体中的载流子浓度

导带中电子的浓度：

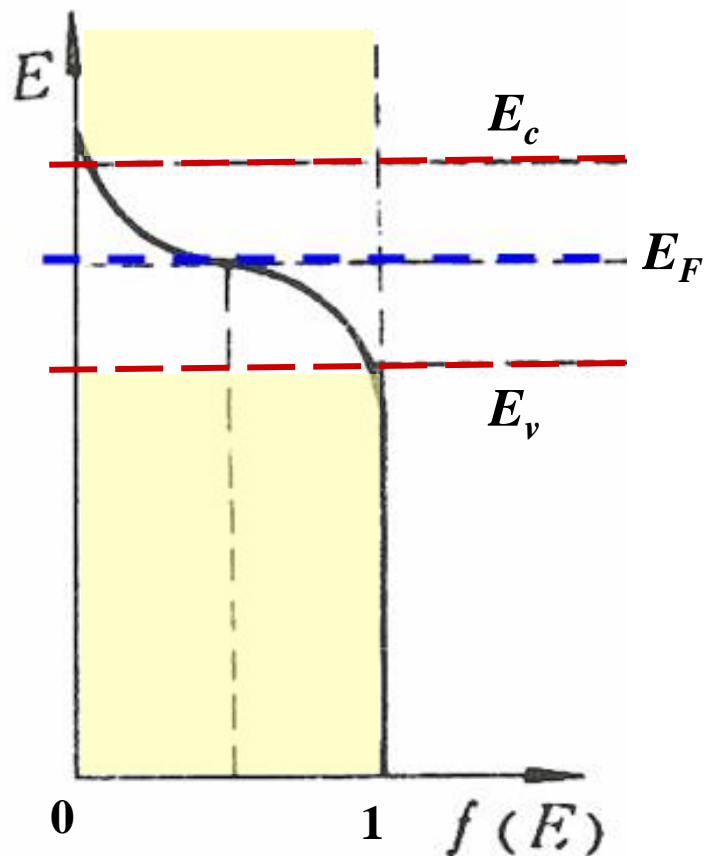
$$n = N_c e^{-(E_c - E_F)/k_B T}$$

$$N_c = \frac{2}{h^3} (2\pi m^* k_B T)^{3/2} \text{ 导带底有效状态密度}$$

这表明，在计算导带电子数时可以等效地用导带底能级 $E_c$ 代替整个导带，导带的电子数就如同在导带底 $E_c$ 处集中了 $N_c$ 个能态所含有的电子数



# 半导体中的载流子浓度



## 价带中空穴的浓度:

$$p = N_\nu e^{-(E_F - E_\nu)/k_B T}$$

$$N_v = \frac{2}{h^3} (2\pi m_+^* k_B T)^{3/2} \text{ 价带顶有效状态密度}$$

**这表明，在计算价带空穴数时可以等效地用价带顶能级 $E_v$ 代替整个价带，价带的空穴数就如同在价带顶 $E_v$ 处集中了 $N_v$ 个能态所含有的电子数**

# 电子浓度与空穴浓度之间的关系

$$n = N_c e^{-(E_c - E_F)/k_B T}$$

$$p = N_v e^{-(E_F - E_v)/k_B T}$$

- $E_F$ 联系着电子、空穴浓度
  - $E_F$ 升高, 电子浓度增高、空穴浓度降低
  - $E_F$ 降低则反之
- 电子、空穴浓度积保持常数
  - 前提条件是费米能级远离导带和价带

$$np = N_c N_v e^{-(E_c - E_v)/k_B T} = N_c N_v e^{-E_g/k_B T}$$

# 半导体的本征热激发

$$np = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right)$$

## 本征载流子浓度

$$n_i = n = p = (N_c N_v)^{1/2} e^{-E_g/2k_B T}$$

只和材料、温度相关，可以查表得到，Si的 $n_i=1.5\text{E}10 \text{ cm}^{-3}$

根据本征半导体中载流子浓度与温度的关系，可以得到带隙

# 本征费米能级

- 本征载流子浓度  $n_i$

$$n_i = n = p = (N_c N_v)^{1/2} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

- 本征费米能级  $E_{Fi}$   $E_{Fi} = E_c - k_B T \ln(N_c / n_i)$

$$N_c = \frac{2}{h^3} (2\pi m_-^* k_B T)^{3/2}$$

$$N_v = \frac{2}{h^3} (2\pi m_+^* k_B T)^{3/2}$$

$$= E_v + k_B T \ln(N_v / n_i)$$

$$= \frac{1}{2} (E_c + E_v) + \frac{1}{2} k_B T \ln(N_v / N_c)$$

$$= \frac{1}{2} (E_c + E_v) + \frac{3}{4} k_B T \ln(m_+^* / m_-^*)$$

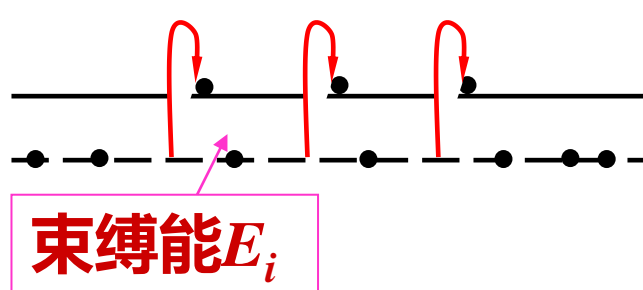
**$T=0$  K时, 本征费米能级刚好在禁带中间**

**在一般情况下, 由于  $k_B T$  较小, 且  $m_+^*$  和  $m_-^*$  相差不大, 所以, 本征半导体的费米能级  $E_{Fi}$  近似地在带隙的中间**

# 非本征半导体的杂质激发

- 施主杂质激发

- 假设N型半导体只含一种施主，浓度 $N_D$ ，能级 $E_D$
  - 在一般温度下，载流子主要为杂质激发的电子
- 导带中电子数目显然和空的施主能级的数目相等

$$n = N_D [1 - f(E_D)] = N_D \left[ 1 - \frac{1}{1 + \frac{1}{g_d} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{k_B T}\right)} \right] = N_D \frac{1}{1 + g_d e^{-(E_D - E_F)/k_B T}} = N_D \frac{1}{1 + 2e^{-(E_D - E_F)/k_B T}}$$


束缚能 $E_i$

$E_c$

施主能级 $E_D$

注意电子占据杂质能级的几率 $f(E_D)$ 与费米分布函数的区别。

$g_d$ 为施主能级的基态简并因子，为2（对应导带底）



# 故意掺杂的n型半导体的电子浓度

$$n = N_D \frac{1}{1 + g_d e^{-(E_D - E_F)/k_B T}}$$

$E_F$ 为未知数，  
利用 $n$ 与 $E_F$ 关系

$$e^{E_F/k_B T} = \frac{n}{N_c} e^{E_c/k_B T}$$

$$n = N_c e^{-(E_c - E_F)/k_B T}$$

$$N_c = \frac{2}{h^3} (2\pi m^* k_B T)^{3/2}$$

$$n = N_D \frac{1}{1 + \frac{g_d n}{N_c} e^{(E_c - E_D)/k_B T}}$$

$$n \left( 1 + \frac{g_d n}{N_c} e^{\Delta E_D/k_B T} \right) = N_D$$

$$\frac{g_d}{N_c} e^{\Delta E_D/k_B T} n^2 + n - N_D = 0$$

# 故意掺杂的n型半导体的电子浓度

$$\frac{g_d}{N_c} e^{\Delta E_D / k_B T} n^2 + n - N_D = 0$$

$n$ 是正数，只能取正号的根

求解：

$$n = \frac{-b + [b^2 - 4ac]^{1/2}}{2a} = \frac{-1 + \left[ 1 + 4 \left( \frac{2N_D}{N_c} \right) e^{\Delta E_D / k_B T} \right]^{1/2}}{2 \left( \frac{2}{N_c} \right) e^{\Delta E_D / k_B T}}$$

远大于1

## 1. 当温度 $T$ 很低时

$$n \approx \frac{\left[ 4 \left( \frac{2N_D}{N_c} \right) e^{\Delta E_D / k_B T} \right]^{1/2}}{2 \left( \frac{2}{N_c} \right) e^{\Delta E_D / k_B T}} = (N_c N_D / 2)^{1/2} e^{-\Delta E_D / 2 k_B T}$$

少量施主发生电离

少量电子进入导带。从价带激发至导带的电子更少，可忽略不计  
电子数按指数关系随温度升高而增加

# 故意掺杂的n型半导体的电子浓度

$$\frac{g_d}{N_c} e^{\Delta E_D / k_B T} n^2 + n - N_D = 0$$

**n是正数，只能取正号的根**

**求解：**

$$n = \frac{-b + [b^2 - 4ac]^{1/2}}{2a} = \frac{-1 + \left[ 1 + 4 \left( \frac{2N_D}{N_c} \right) e^{\Delta E_D / k_B T} \right]^{1/2}}{2 \left( \frac{2}{N_c} \right) e^{\Delta E_D / k_B T}}$$

**远小于1**

## 2. 温度足够高

$$n = \frac{-1 + 1 + 2 \left( \frac{N_D}{N_c} \right) e^{\Delta E_D / k_B T} + \dots}{\left( \frac{2}{N_c} \right) e^{\Delta E_D / k_B T}} \approx N_D$$

**常温下施主几乎全部电离激发电子**

# N型半导体中的空穴浓度和费米能级

少数载流子浓度（空穴）

$$p = \frac{n_i^2}{n}$$

注意，此时的 $p < n_i$ ，即掺杂会抑制本征热激发

费米能级

$$n = N_c e^{-(E_c - E_F)/k_B T}$$

$$\begin{aligned} E_F &= E_c - k_B T \ln(N_c / n) \\ &= E_{Fi} + k_B T \ln(n / n_i) \end{aligned}$$

本征半导体的费米能级

$$E_{Fi} = E_c - k_B T \ln(N_c / n_i)$$

施主杂质的浓度越高，费米能级越靠近导带

# 受主杂质激发有类似结果

假设:

- 受主杂质能级 $E_A$ , 电离能 $\Delta E_A$
- 杂质浓度 $N_A$

相似地, 杂质激发空穴浓度

$$p = \frac{-1 + \left[ 1 + 4 \left( \frac{g_a N_A}{N_v} \right) e^{\Delta E_A / k_B T} \right]^{1/2}}{2 \left( \frac{g_a}{N_v} \right) e^{\Delta E_A / k_B T}}$$

在低温下

$$p = \left( N_A N_v / g_a \right)^{1/2} e^{-\Delta E_A / 2 k_B T}$$

$g_a$ 为受主能级的基态简并因子, Si和GaAs的 $g_a$ 为4(对应价带顶简并)

# 受主杂质时载流子浓度和费米能级

## 常温下载流子浓度

- 多数载流子空穴浓度  $p = N_A$
- 少数载流子电子浓度  $n = n_i^2 / p$

## 费米能级

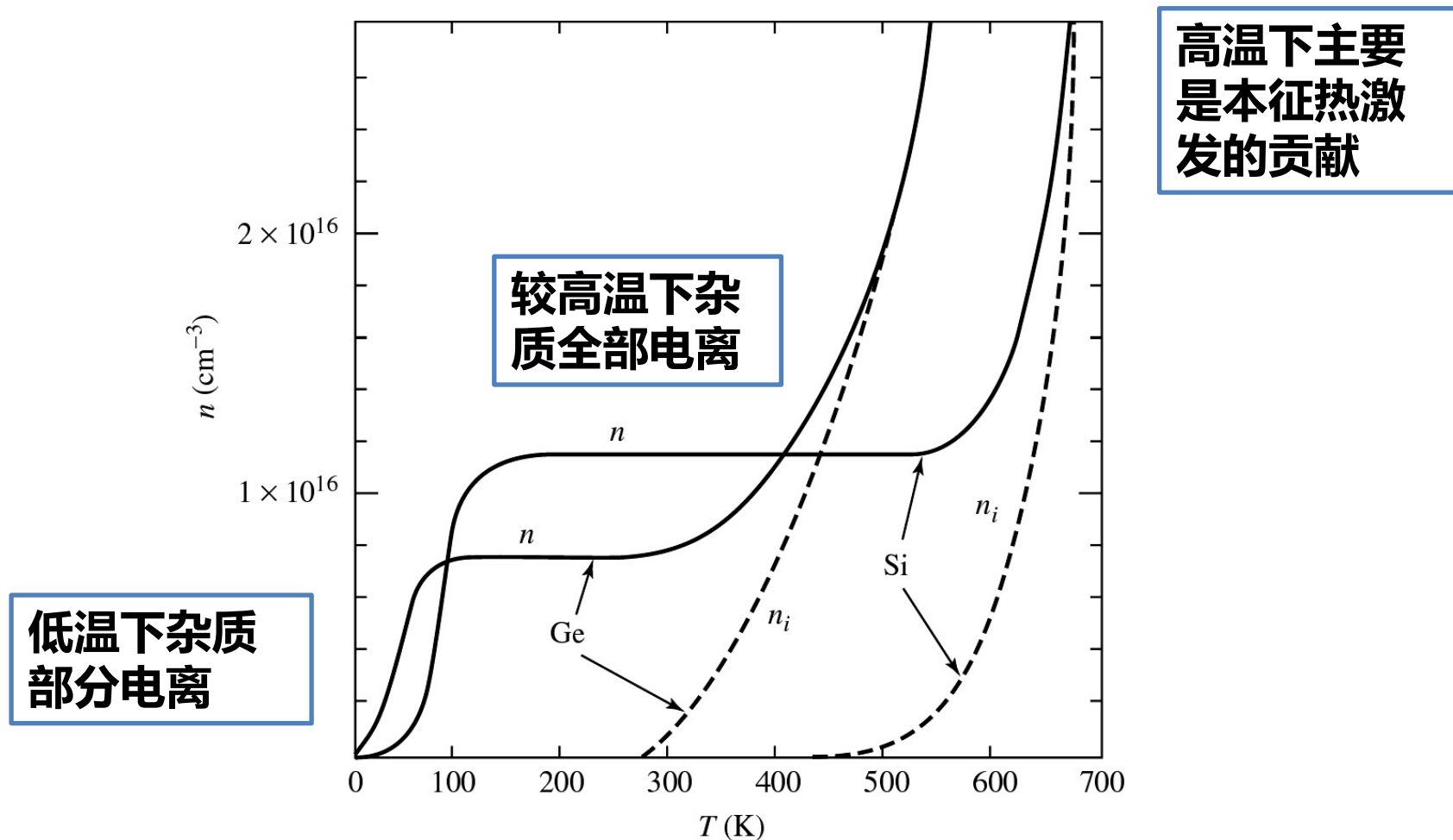
$$\begin{aligned} E_F &= E_v + k_B T \ln(N_v / p) \\ &= E_{Fi} - k_B T \ln(p / n_i) \end{aligned}$$

本征半导体的费米能级

$$E_{Fi} = E_v + k_B T \ln(N_v / n_i)$$

受主杂质的浓度越高，  
费米能级越靠近价带

# 载流子浓度与温度的关系



# 简并与非简并半导体

- 非简并半导体（玻尔兹曼分布）
  - 电子（空穴）占据导带（价带）的几率很小
  - 费米能级距离导带底（价带顶）较远
  - 杂质浓度很低（与半导体原子浓度相比小得多）
  - 杂质在半导体中引入分离的杂质能级，施主电子或受主空穴之间不存在相互作用
- 简并半导体（费米分布）
  - 占据导带（价带）的电子（空穴）数目很多
  - 费米能级和导带底（价带顶）很接近，甚至进入导带（价带）
  - 玻尔兹曼分布近似将不适用，必须使用费米分布
  - 杂质浓度很高，分立能级变成杂质能带，和原来的本征导带（价带）形成新的简并导带（价带）



# 费米 - 狄拉克积分

- 非简并:

$$n = N_c e^{-(E_c - E_F)/k_B T}$$

$$p = N_v e^{-(E_F - E_v)/k_B T}$$

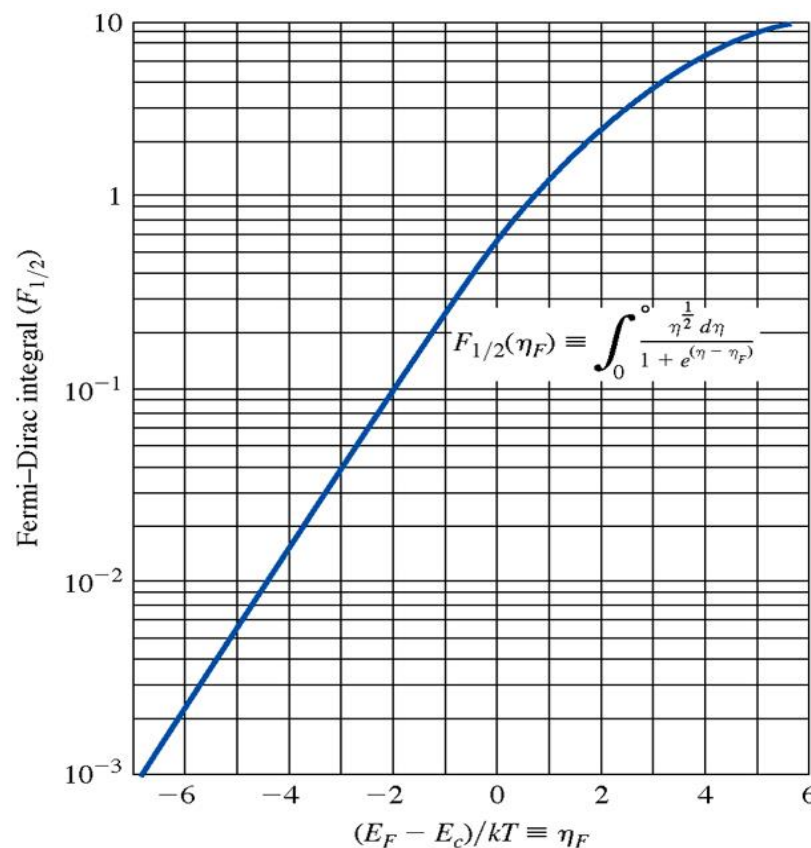
- 简并:

$$n = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left( \frac{E_F - E_c}{k_B T} \right)$$

$$p = N_v \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left( \frac{E_v - E_F}{k_B T} \right)$$

- 费米积分 (查表或数值求解)

$$F_{1/2} \left( \frac{E_v - E_F}{k_B T} \right) = F_{1/2}(\xi) = \int_0^{\infty} \frac{x^{1/2}}{1 + e^{x-\xi}} dx$$



当 $E_F$ 小于 $E_c$ 很多时, 曲线呈指数线形但当 $E_F$ 接近 $E_c$ 时, 曲线不再以指数上升, 玻尔兹曼分布近似失效

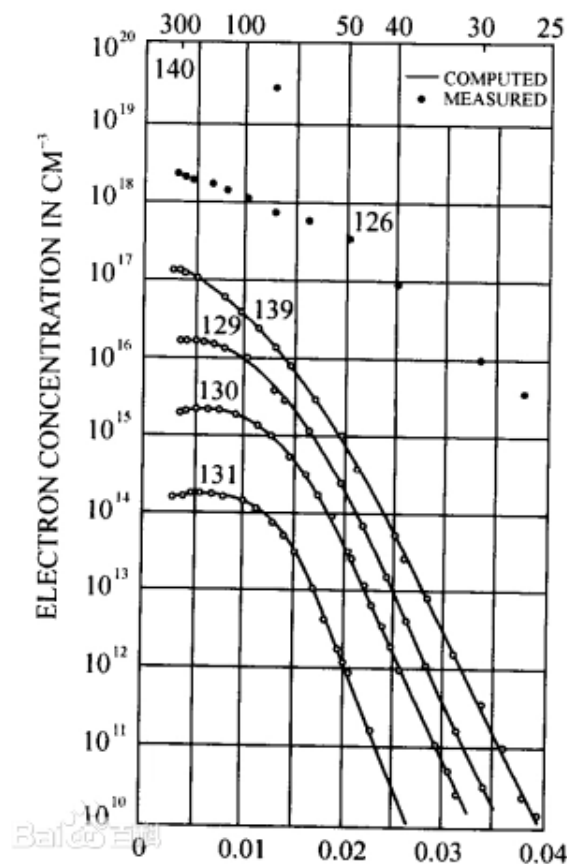
# 简并化条件

- **非简并:**  $E_c - E_F > 2k_0T$
- **弱简并:**  $0 < E_c - E_F \leq 2k_0T$
- **简并:**  $E_c - E_F \leq 0$
- **简并时杂质没有充分电离** 
$$n_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp(\frac{E_F - E_D}{k_B T})}$$
  - 当  $E_F = E_c$  时, 
$$n_D^+ = \frac{N_D}{1 + 2 \exp(\frac{\Delta E_D}{k_B T})}$$
  - 室温时, 对Ge:P,  $n_D^+ = 0.24 N_D$  ; 对Si:P,  $n_D^+ = 0.084 N_D$

# 杂质能带

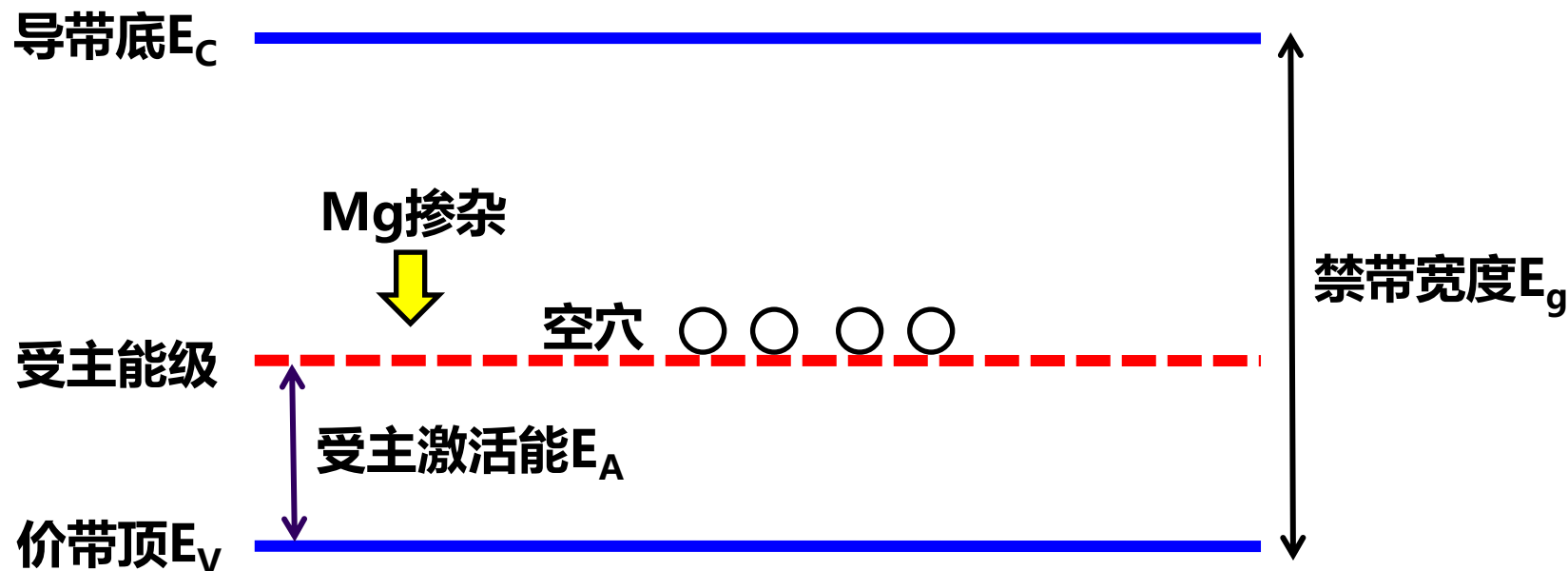
## • 杂质能带

- 掺杂浓度很高、以致相邻杂质原子的基态电子轨道发生交叠时，杂质能级展宽后的能带
- 能带宽度正比于相邻束缚电子波函数的交叠程度
- 表现：杂质束缚态消失



不同掺杂浓度Si的电子浓度  
和温度关系

# 宽禁带氮化物半导体p型掺杂所面临的挑战

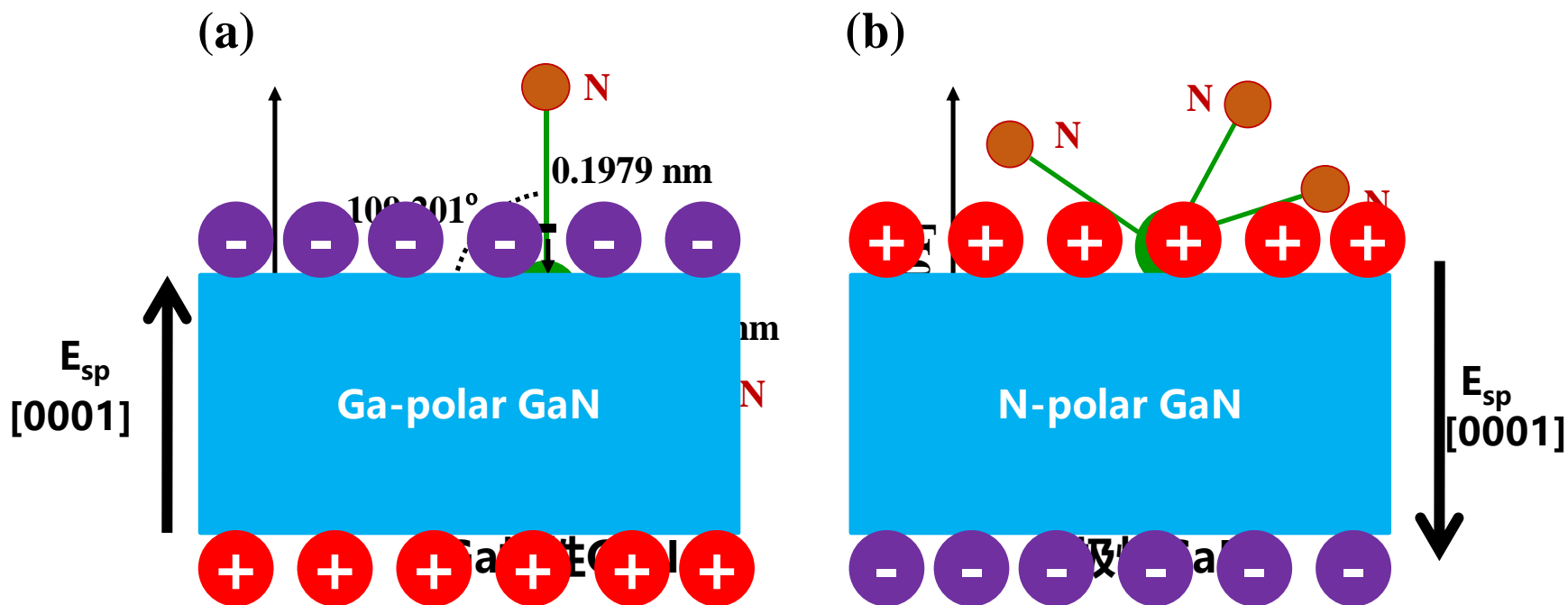


宽禁带氮化物半导体中受主激活能过高，  
难以实现p型

$E_A \approx 200\text{meV}$   
激活率  $< 1\%$

630meV

# 氮化物半导体的极化现象



N原子形成的负电中心和Ga原子形成的正电中心不重合

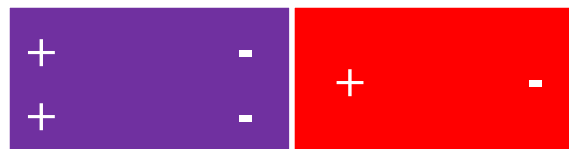
[0001]方向上产生偶极子

自发极化

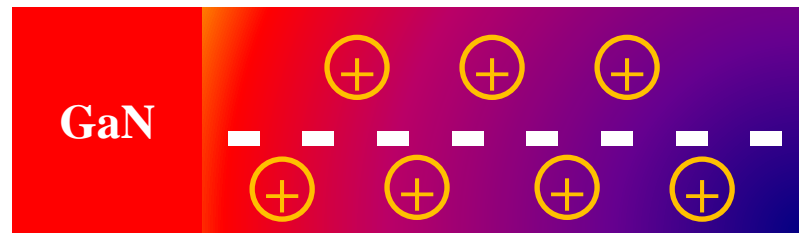
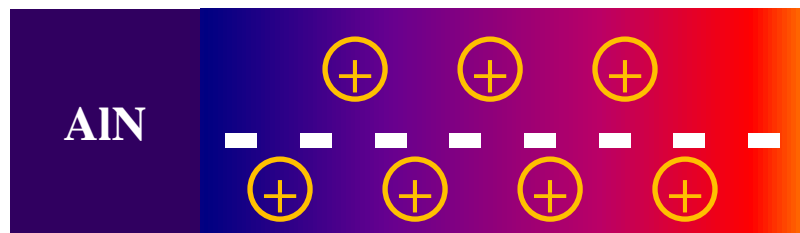
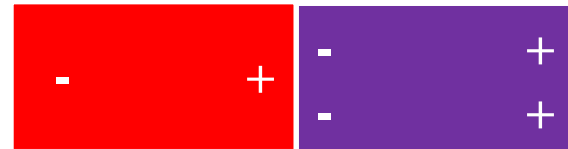
# 氮化物的极化效应在掺杂上的应用



$$x > y$$



$$x < y$$



Ga极性AlGaInN的极化诱导p型掺杂原理

N极性AlGaInN的极化诱导p型掺杂原理

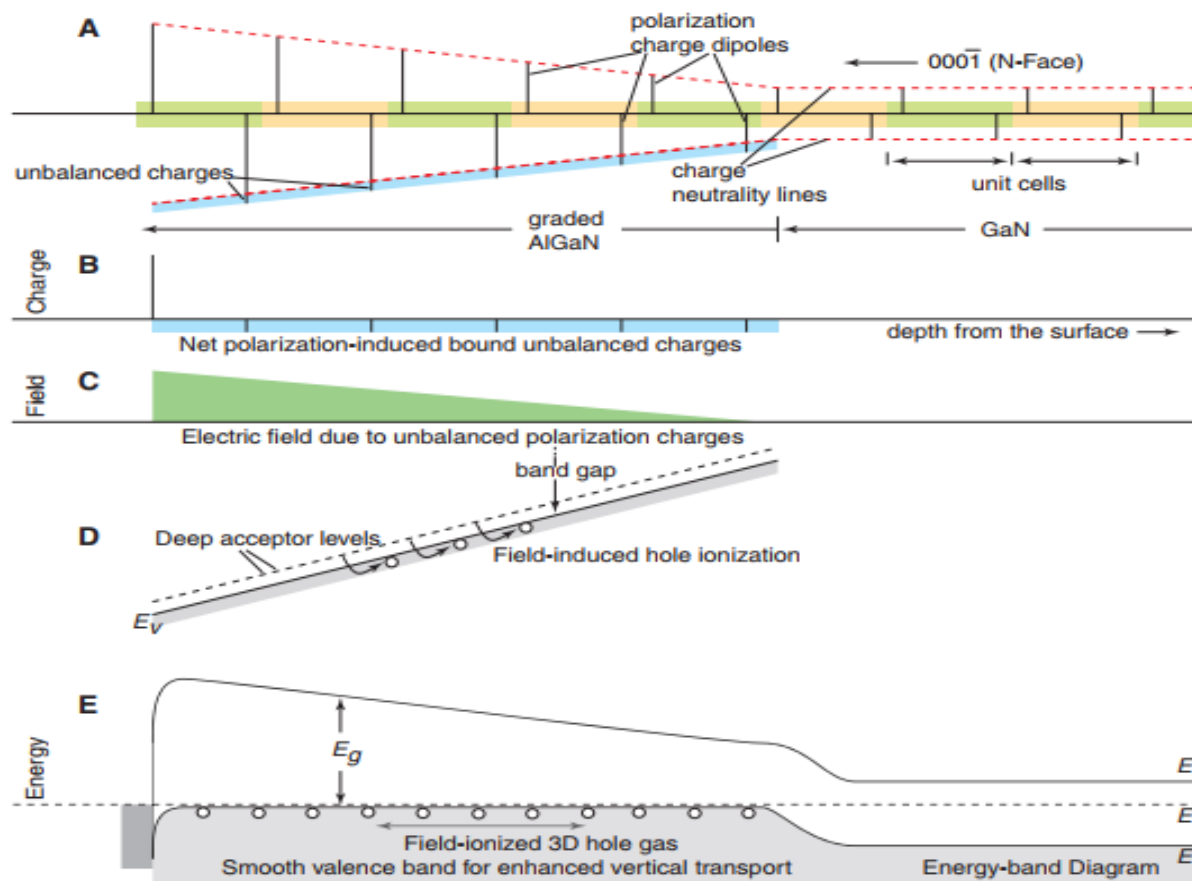
# MBE制备N极性极化诱导p-AlGaN

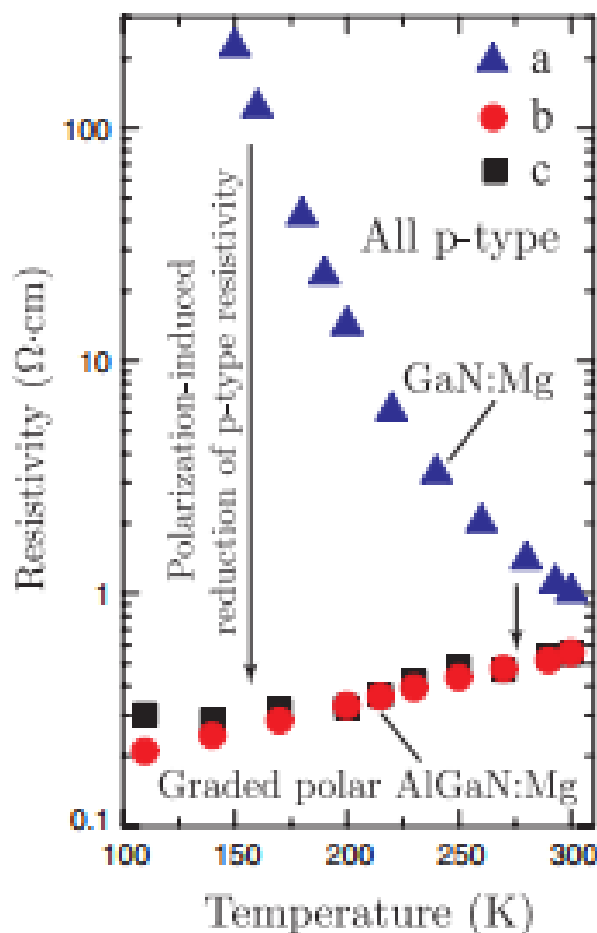
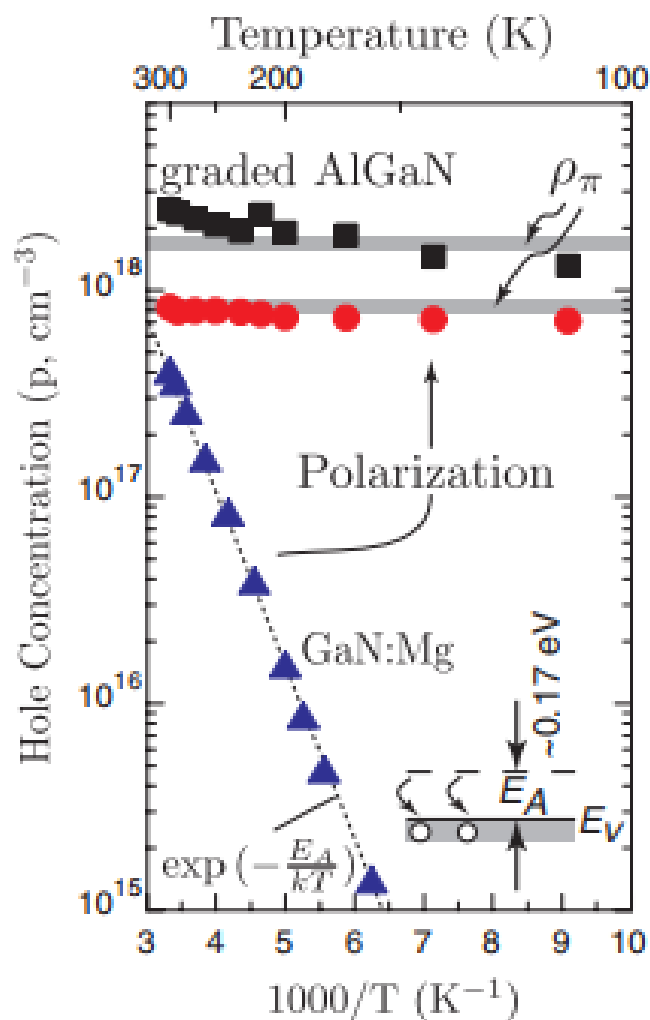
Science

*Science* 327 (5961), 60-64

## Polarization-Induced Hole Doping in Wide-Band-Gap Uniaxial Semiconductor Heterostructures

John Simon, Vladimir Protasenko, Chuanxin Lian, Huili Xing and Debdeep Jena

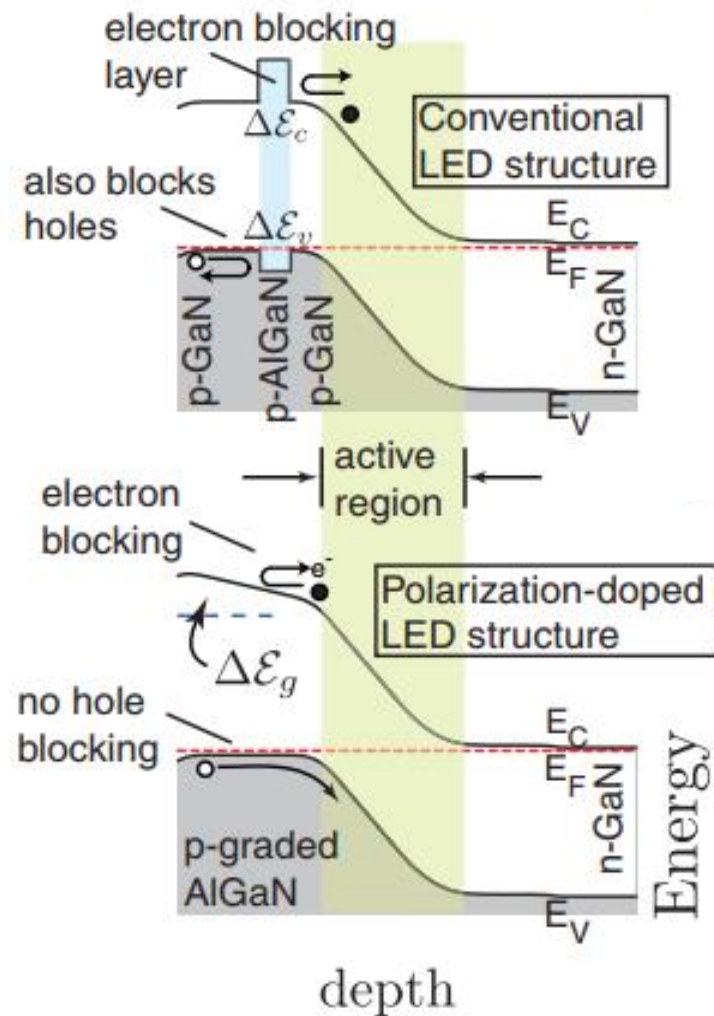
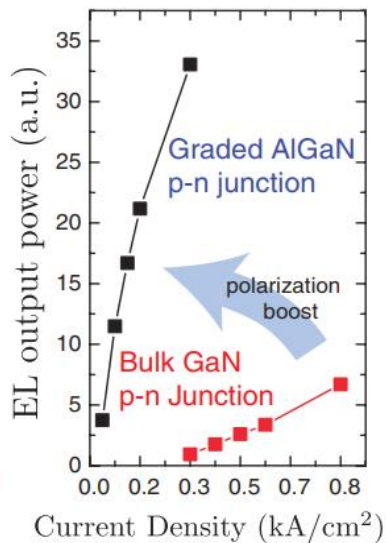
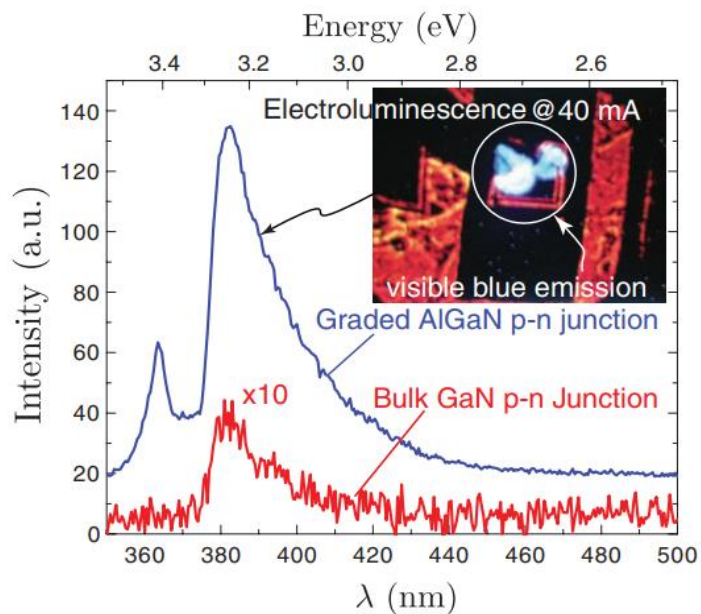
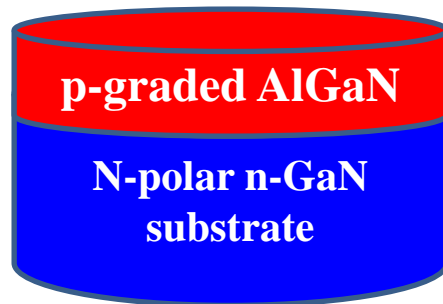
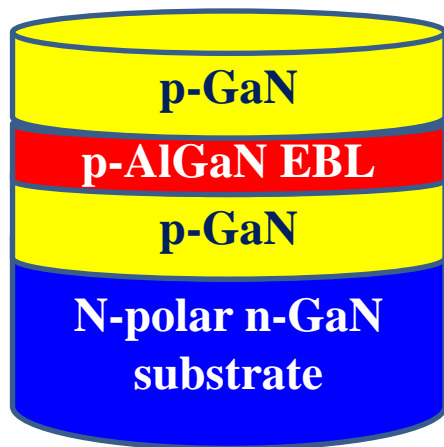




- ▲ GaN
- $\text{Al}_{0 \sim 0.16} \text{Ga}_{1 \sim 0.84} \text{N}$  (85nm)
- $\text{Al}_{0 \sim 0.3} \text{Ga}_{1 \sim 0.7} \text{N}$  (85nm)

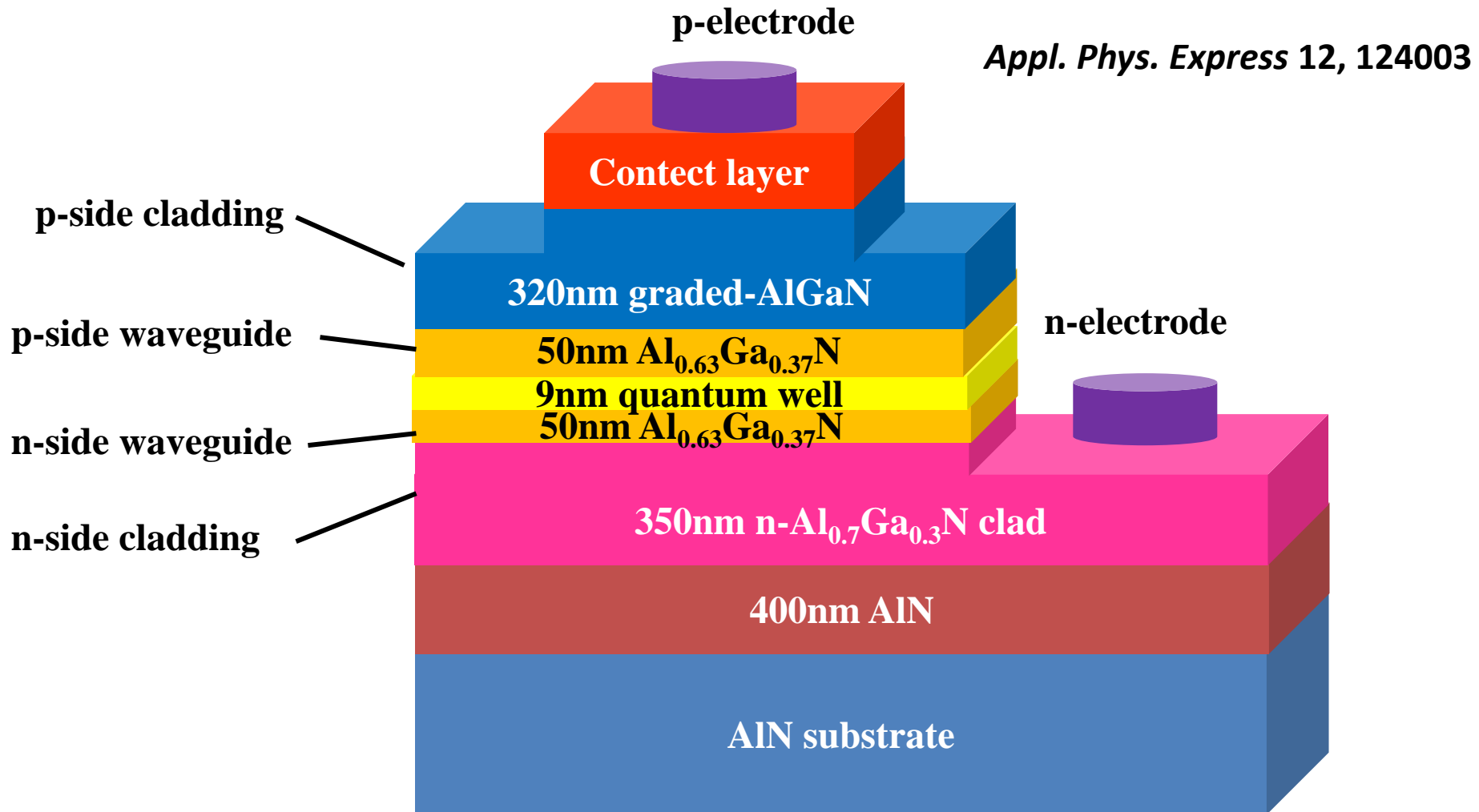
## 空穴浓度、电阻率随温度变化的规律

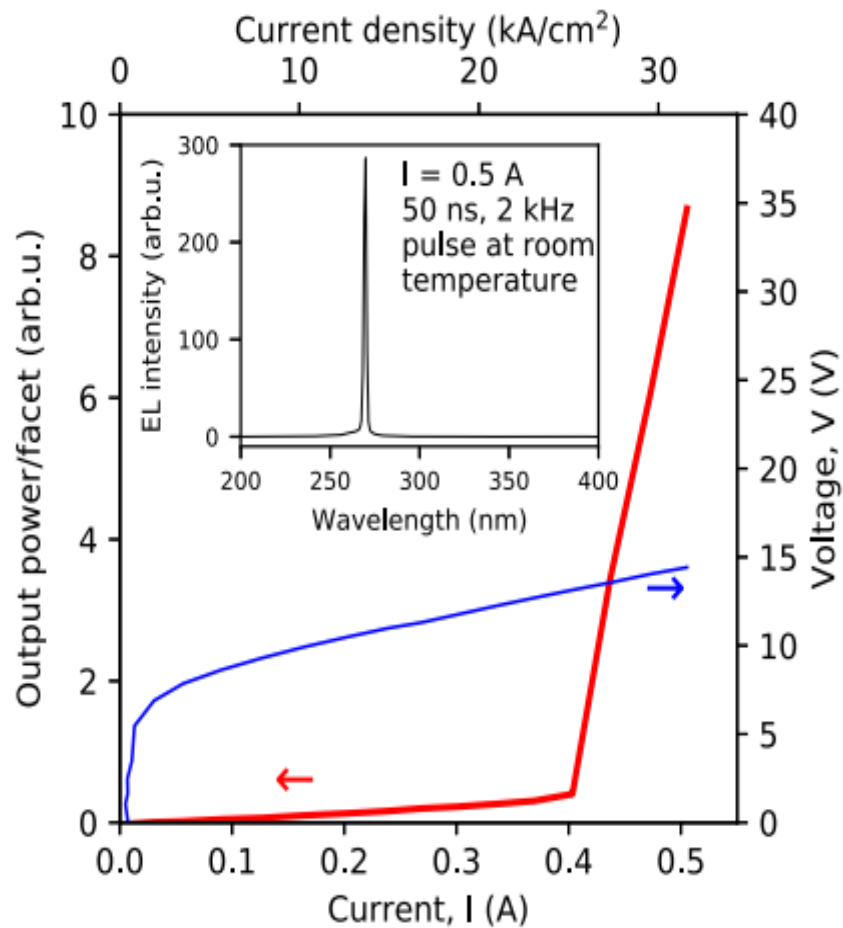




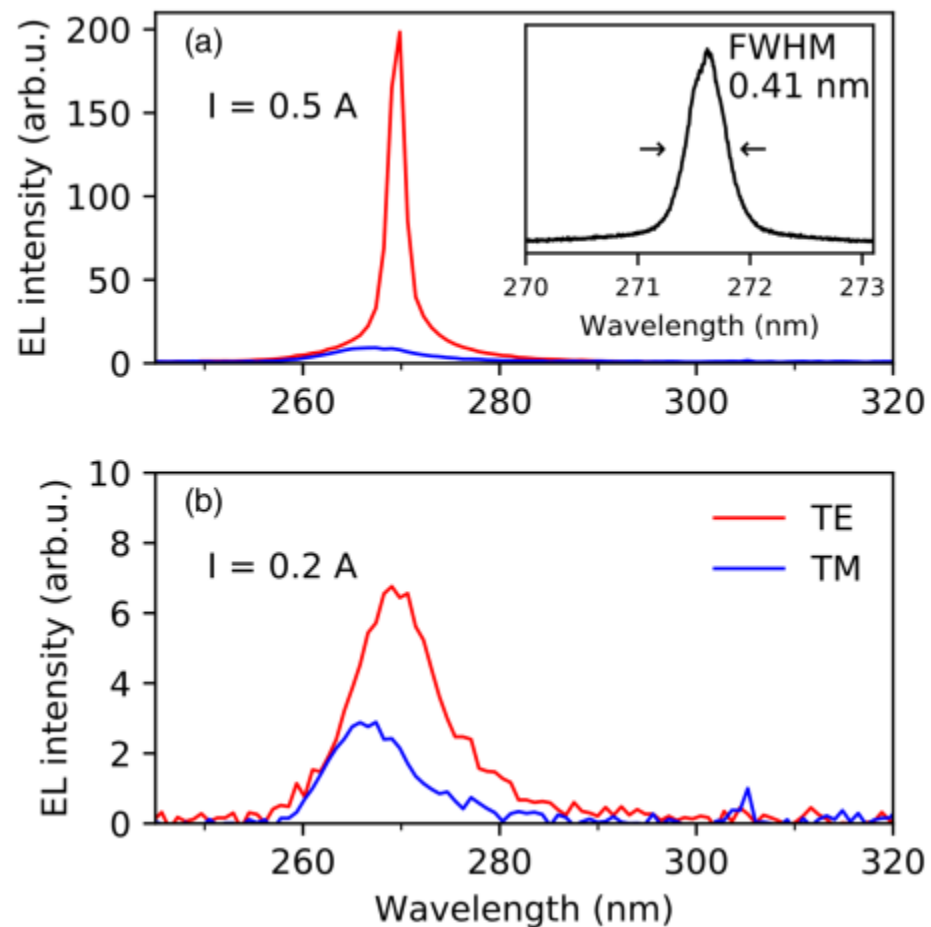
# Ga极性极化诱导p-AlGa<sub>0.37</sub>N的器件应用

## 第一支深紫外UVC半导体激光器



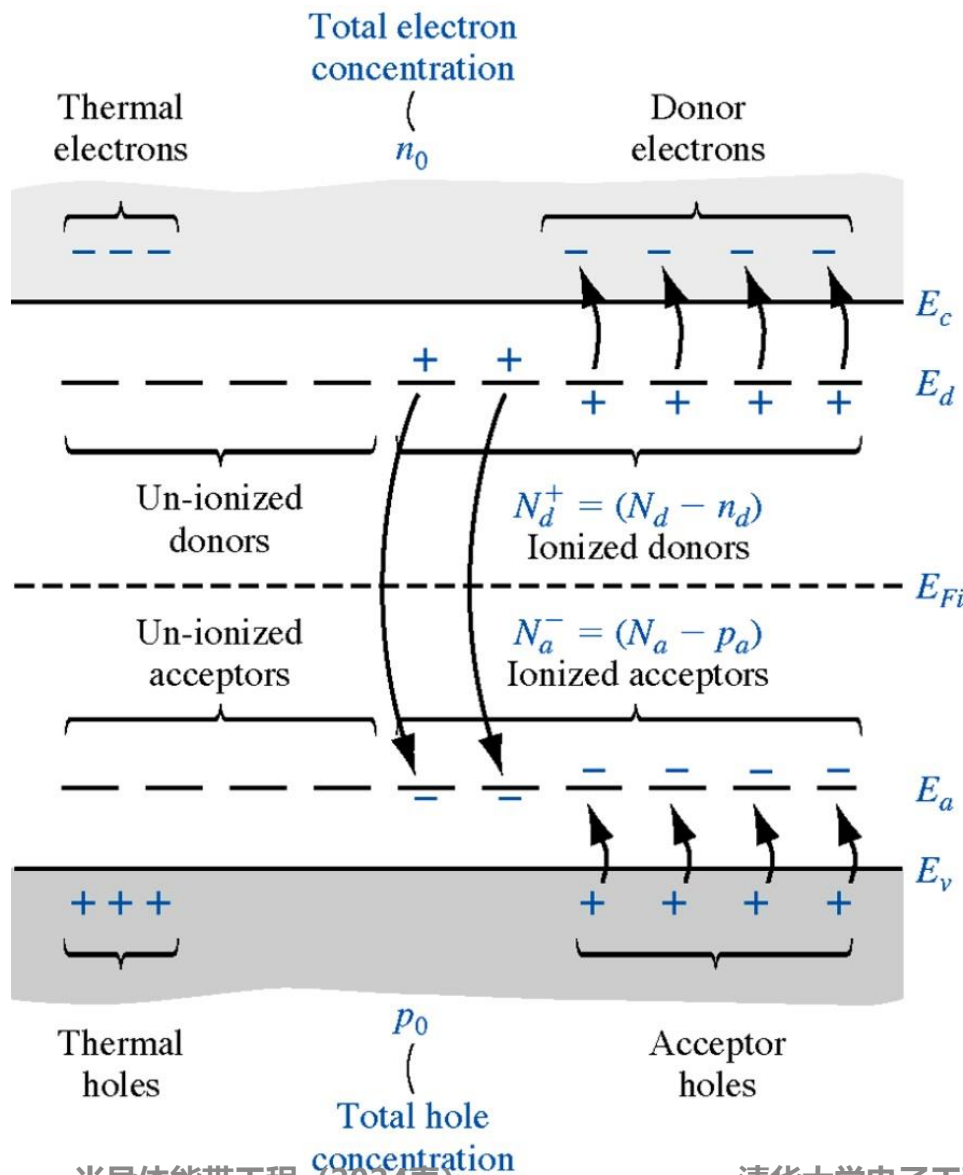


**激光器的I-V、I-L特性曲线**  
**插图：激光器电致发光谱**



**激光器的TE、TM模边发射EL谱**

# 补偿半导体中的载流子浓度



**补偿半导体 (Compensate semiconductor) 是掺杂半导体中的一种，即在半导体中既掺有施主、又掺有受主的半导体**

**既有施主，也有受主杂质，载流子浓度究竟为多少？**

# 补偿半导体中的载流子浓度

- 热平衡条件下，半导体处于**电中性状态**，**净电荷密度为零**

$$- n_0 + N_a^- = p_0 + N_d^+$$

$$- n_0 + (N_a - p_a) = p_0 + (N_d - n_d)$$

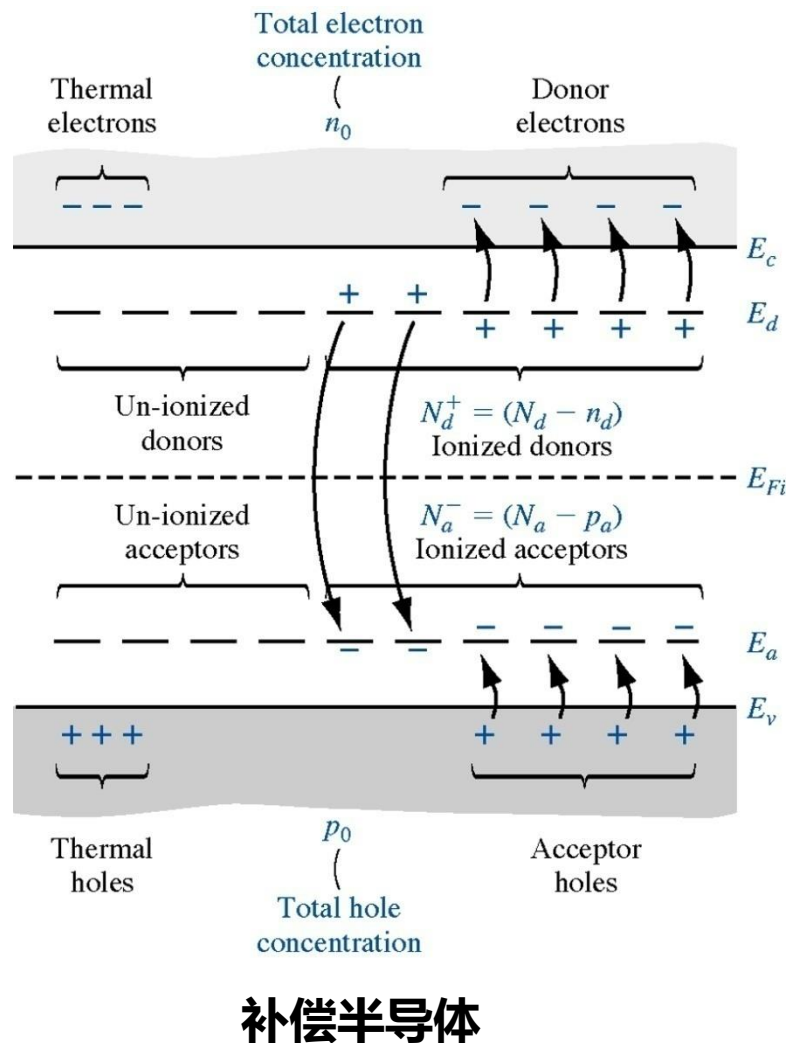
- 完全电离条件下**

$$- n_0 + N_a = p_0 + N_d$$

$$- \text{利用 } p_0 = n_i^2 / n_0$$

$$- \text{计算n型半导体时}$$

$$n_0 = \frac{(N_d - N_a)}{2} + \sqrt{\left(\frac{(N_d - N_a)}{2}\right)^2 + n_i^2}$$



# 补偿半导体中的载流子浓度

- 施主杂质大于受主杂质浓度

- $N_D - N_A \gg n_i$

- 则  $n = N_D - N_A$ ,  $p = n_i^2 / n$

- 受主杂质大于施主杂质浓度

- $N_A - N_D \gg n_i$

- 则  $p = N_A - N_D$ ,  $n = n_i^2 / p$

- 总的杂质浓度

- $N_{doping} = N_A + N_D$

由于补偿半导体中掺有两种杂质，所以会产生杂质的补偿作用，从而其中能够参加导电的多数载流子，就只有由那些**未被补偿的杂质**来提供；因此补偿半导体中**有效的载流子浓度很小**，故**电阻率很高**。虽然补偿半导体的电阻率很高，但它不同于未掺杂的本征半导体

# 小结

- 缺陷类型
- 能态密度
- 玻尔兹曼分布
- 掺杂
- 杂质电离能
- 补偿掺杂

# 作业

**1. 限制在边长为L的正方形中的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。**



# 作业

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 $4.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ，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 $5.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ，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： $N_c = 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ，300K时Si的本征载流子浓度 $n_i = 1.5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ，500K时Si的本征载流子浓度 $n_i = 4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$