

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

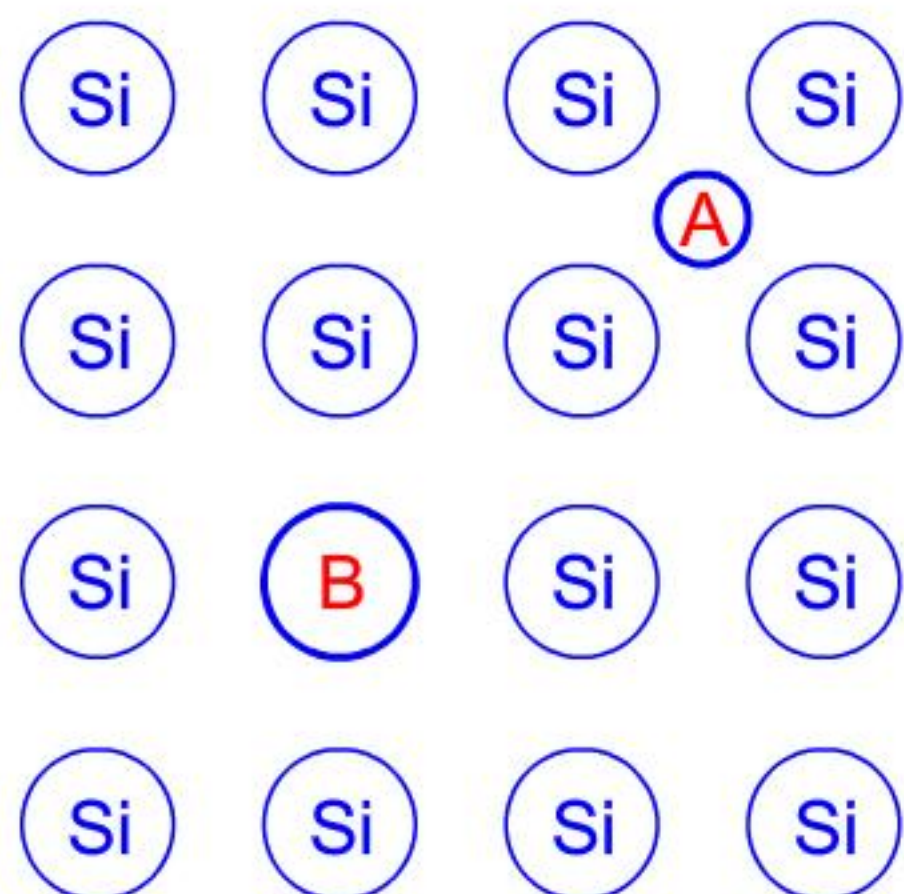
4.2 III—V族化合物中的杂质能级

4.3 缺陷、位错能级

4.1 硅、锗晶体中的杂质能级₁

4.1.1 替位式杂质和间隙式杂质

—按照球形原子堆积模型，金刚石晶体的一个原胞中的8个原子只占该晶胞体积的34%，还有66%是空隙！



A—间隙式杂质原子：原子半径比较小

B—替位式杂质原子：原子的大小与被取代的晶体原子大小比较相近

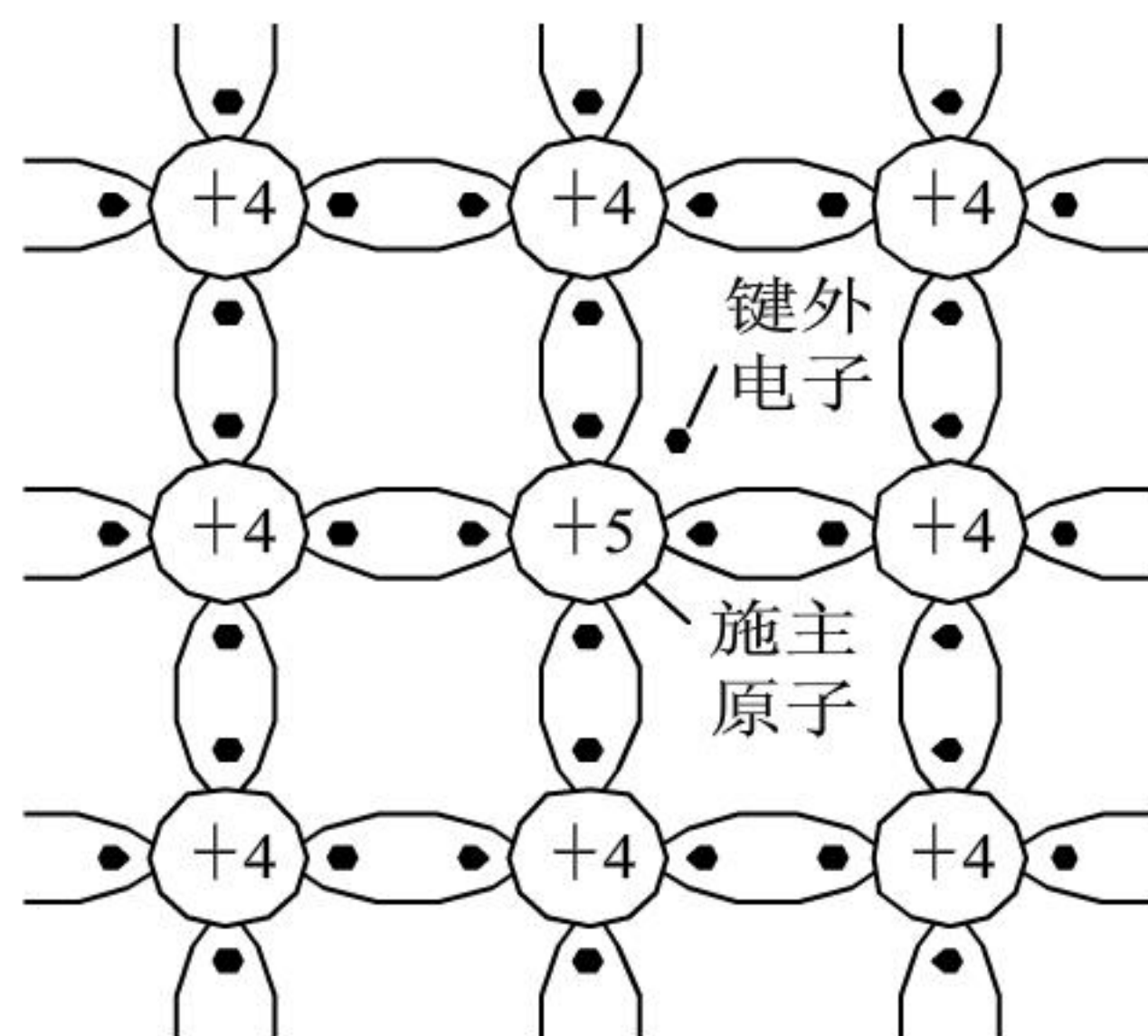
杂质浓度：单位体积中的杂质原子数

4.1 硅、锗晶体中的杂质能级₂

4.1.2 施主杂质 施主能级 受主杂质 受主能级

— 当V族元素P在Si中成为替位式杂质且电离时，能够释放电子而产生导电电子并形成正电中心，称它们为施主杂质或n型杂质

成键后，P原子多
余1个价电子



问题：该电子的运动状态和能量？

1. 比成键电子自由得多， $E_D \gg E_V$
2. 与导带电子也有差别（受到 P^+ 库仑吸引作用）

$$\therefore E_D = E_C - E_{\text{库仑}} \text{（落在禁带中）}$$

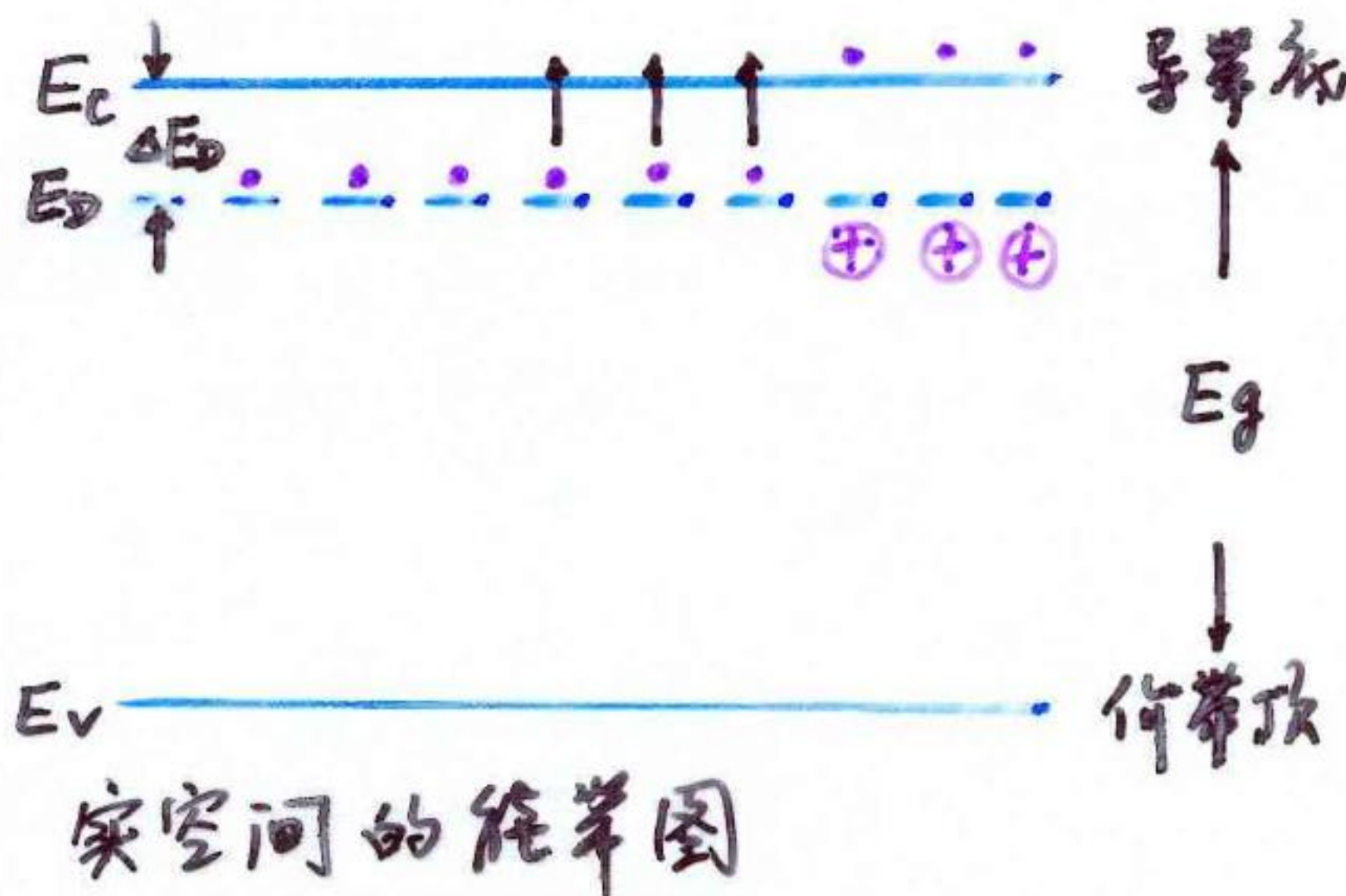
4.1 硅、锗晶体中的杂质能级³

4.1.2 施主杂质 施主能级 受主杂质 受主能级

— 施主电离

注意点:

1. 杂质能级用短线表示
(分立能级, 局域, 未形成能带)
2. $\Delta E_D \ll E_g$



$T = 0 \text{ K}$, 束缚态

$T \neq 0 \text{ K}$, 能带角度: 电子从 E_D 跃迁到 E_C , 成为导带电子
空间角度: 电子脱离 P^+ 离子的库仑束缚, 运动到无穷远

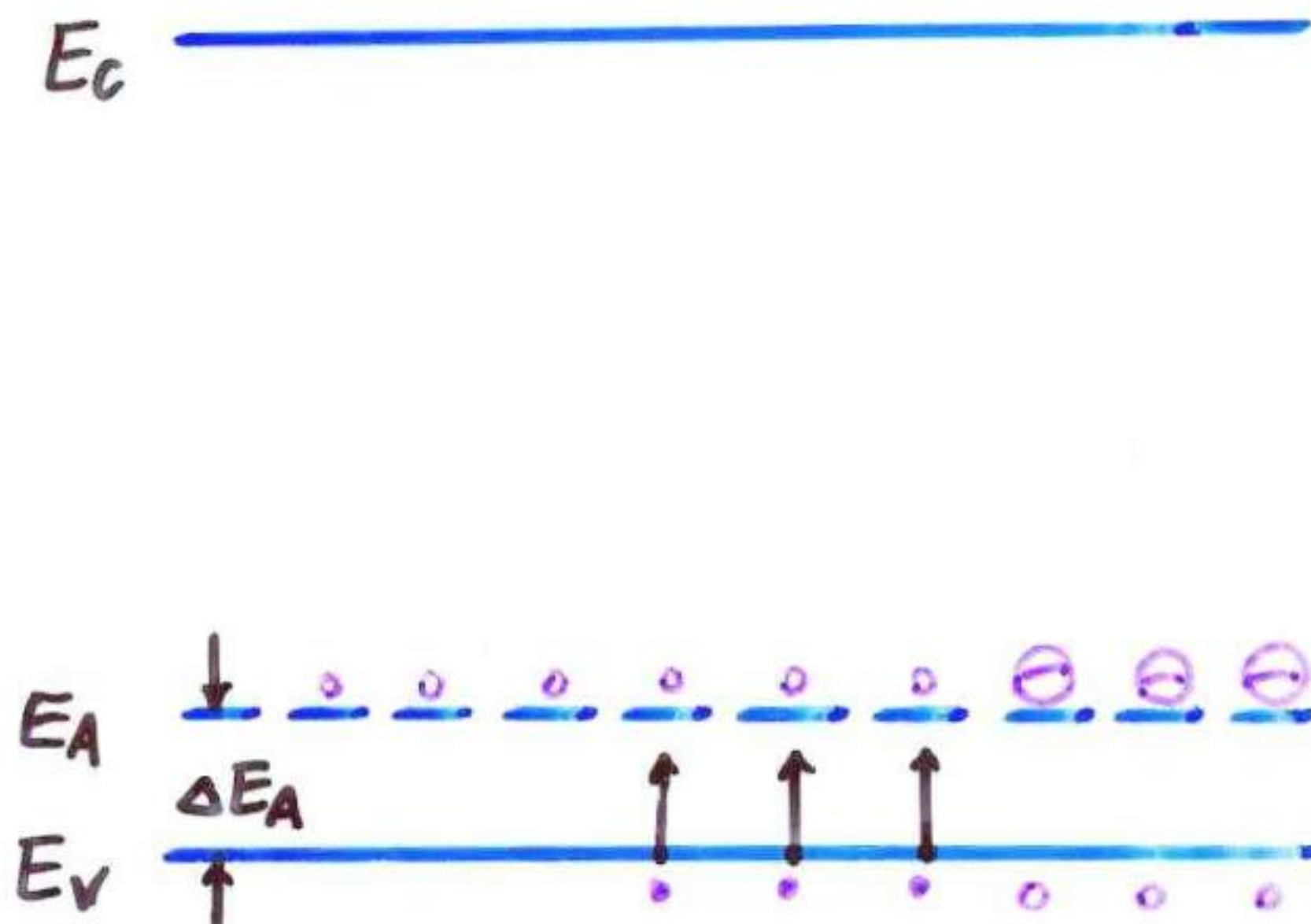
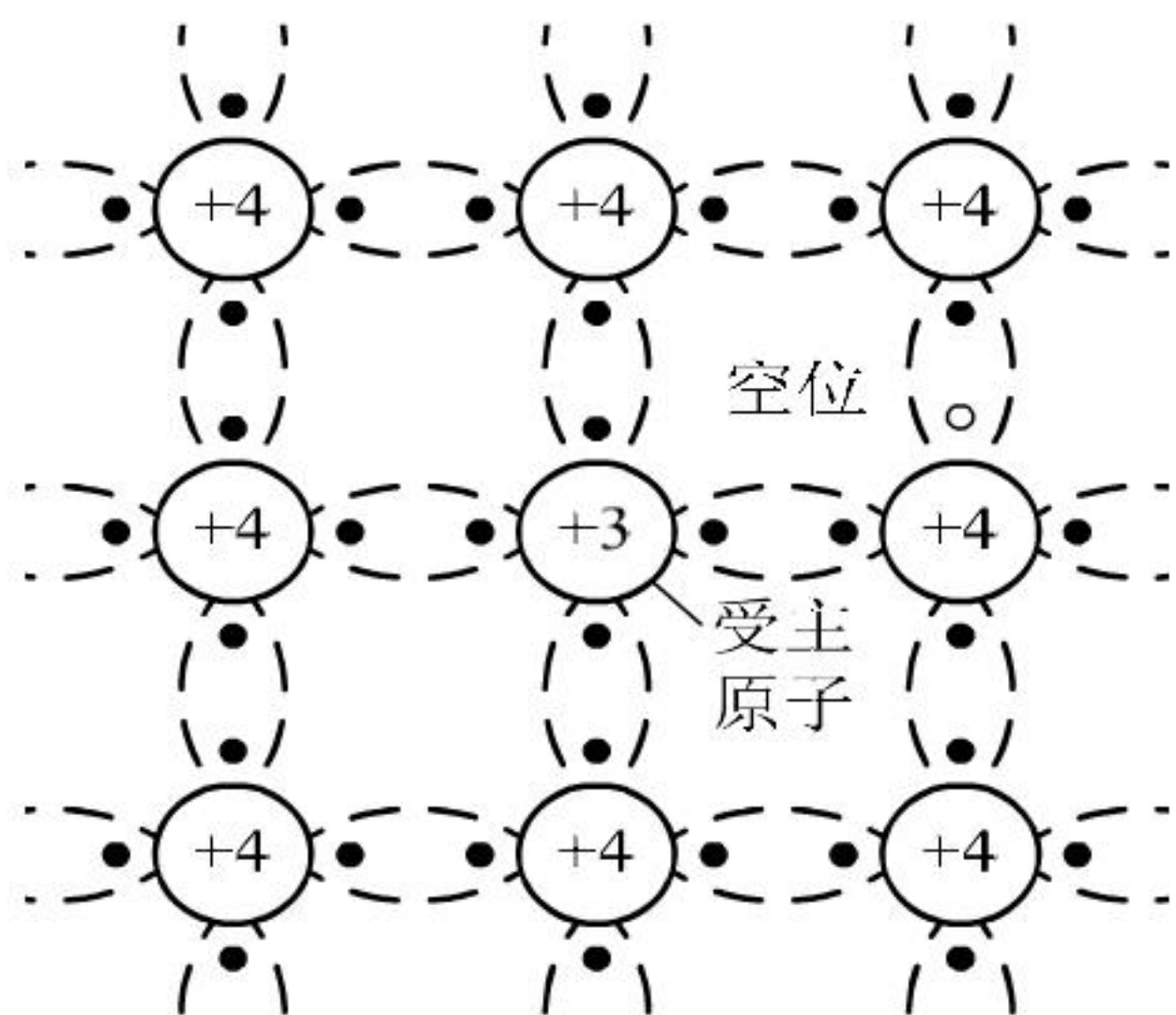
离化态

电离的原因: 热激发, 远红外光的照射

4.1 硅、锗晶体中的杂质能级₄

4.1.2 施主杂质 施主能级 受主杂质 受主能级

— 当III族元素B在Si中成为替位式杂质且电离时，能够接受电子而产生导电空穴并形成负电中心，称它们为受主杂质或p型杂质



按杂质向半导体提供载流子的类型分类

n 型半导体

p 型半导体

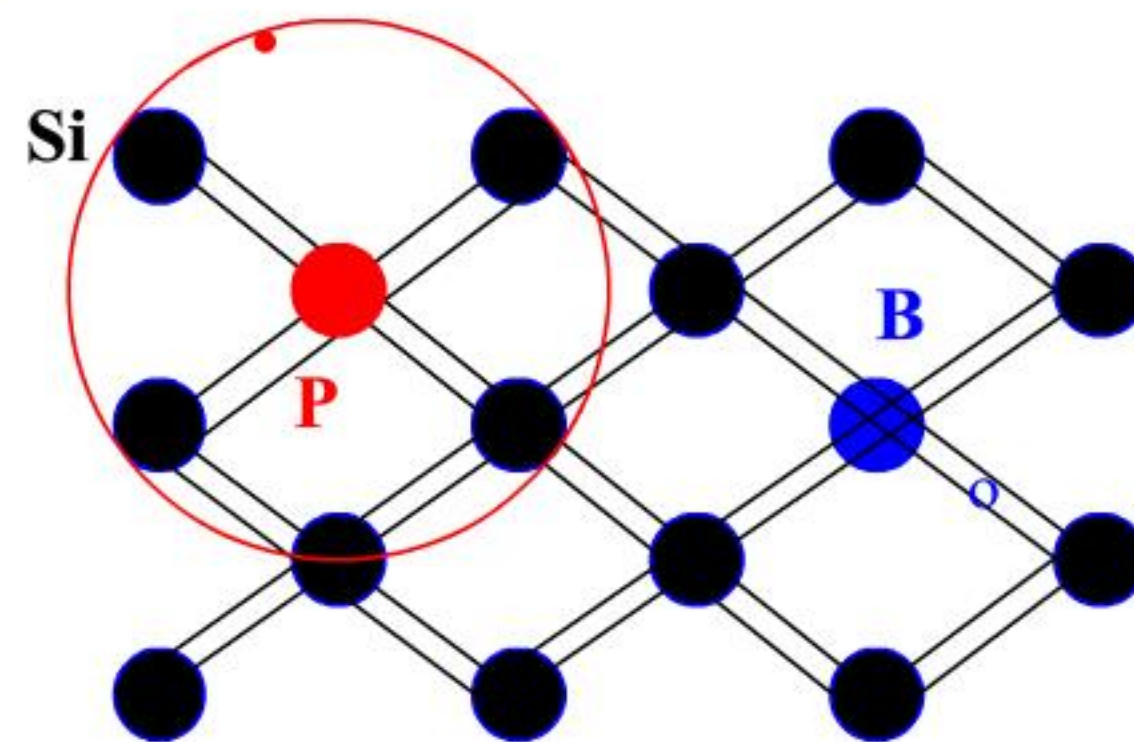
本征半导体

4.1 硅、锗晶体中的杂质能级⁵

4.1.3 杂质浅能级电离能的简单计算

一类氢原子模型的计算

氢原子:
$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13.6}{n^2} \text{ (eV)}$$



修正: 1° $\varepsilon_0 \rightarrow \varepsilon_0 \varepsilon_r$ $\varepsilon_r(\text{Si})=12$ $\varepsilon_r(\text{Ge})=16$.

2° $m_0 \rightarrow m^*$ 注意 Si, Ge 多能谷效应,

作各向同性处理后, $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{3} \left(\frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t} \right)$ 电导有效质量

类氢模型:
$$E_n = -\frac{m^* e^4}{8\varepsilon_0^2 \varepsilon_r^2 h^2 n^2} = -\frac{(m^*/m_0) 13.6}{\varepsilon_r^2 n^2} \text{ (eV)}$$

$\therefore \Delta E_{D(A)} \sim \text{几十 meV}$

4.1 硅、锗晶体中的杂质能级₆

4.1.3 杂质浅能级电离能的简单计算

一类氢原子模型的计算

氢原子基态电子的玻尔半径

施主杂质电子的玻尔半径:

$$a_B = \frac{h^2 \varepsilon_0}{\pi e^2 m_0} = 0.53 (\text{\AA}) \quad \begin{matrix} \varepsilon_0 \Rightarrow \varepsilon_0 \varepsilon_r \\ m_0 \Rightarrow m_e^* \end{matrix} \quad a^* = \frac{h^2 \varepsilon_r \varepsilon_0}{\pi e^2 m_e^*} = 0.53 \frac{m_0}{m_e^*} \varepsilon_r (\text{\AA})$$

$$\text{Si: } m^* = 0.26 m_0$$

$$\varepsilon_r(\text{Si}) = 12$$

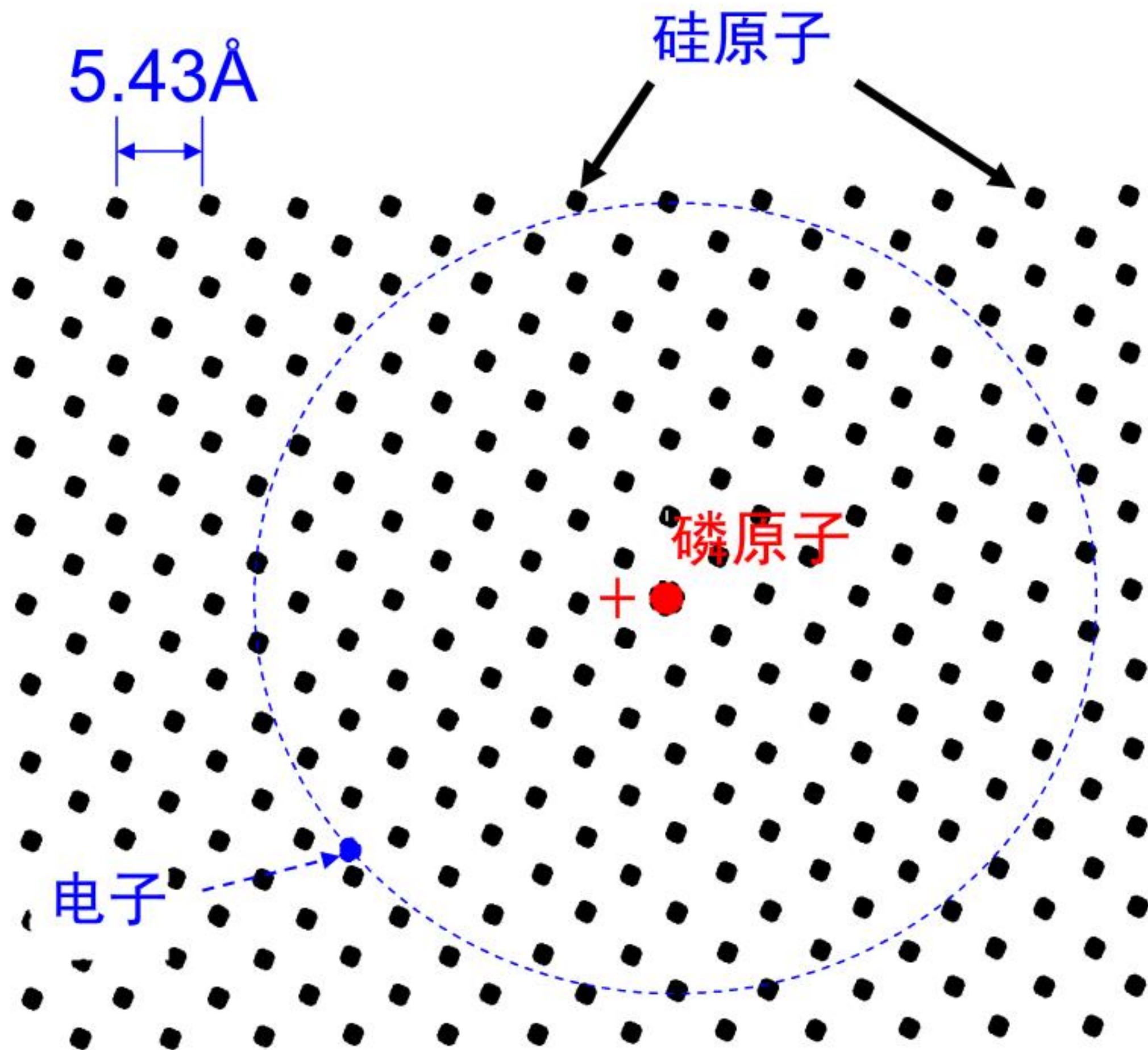
$$a^* = \frac{h^2 \varepsilon_r \varepsilon_0}{\pi e^2 m_e^*} = 0.53 \frac{m_0}{m_e^*} \varepsilon_r$$
$$0.53 \times \frac{1}{0.26} \times 12 = 24.5 (\text{\AA})$$

4.1 硅、锗晶体中的杂质能级₇

4.1.3 杂质浅能级电离能的简单计算

一类氢原子模型的计算

$$a^* = 24.5(\text{\AA})$$



4.1 硅、锗晶体中的杂质能级

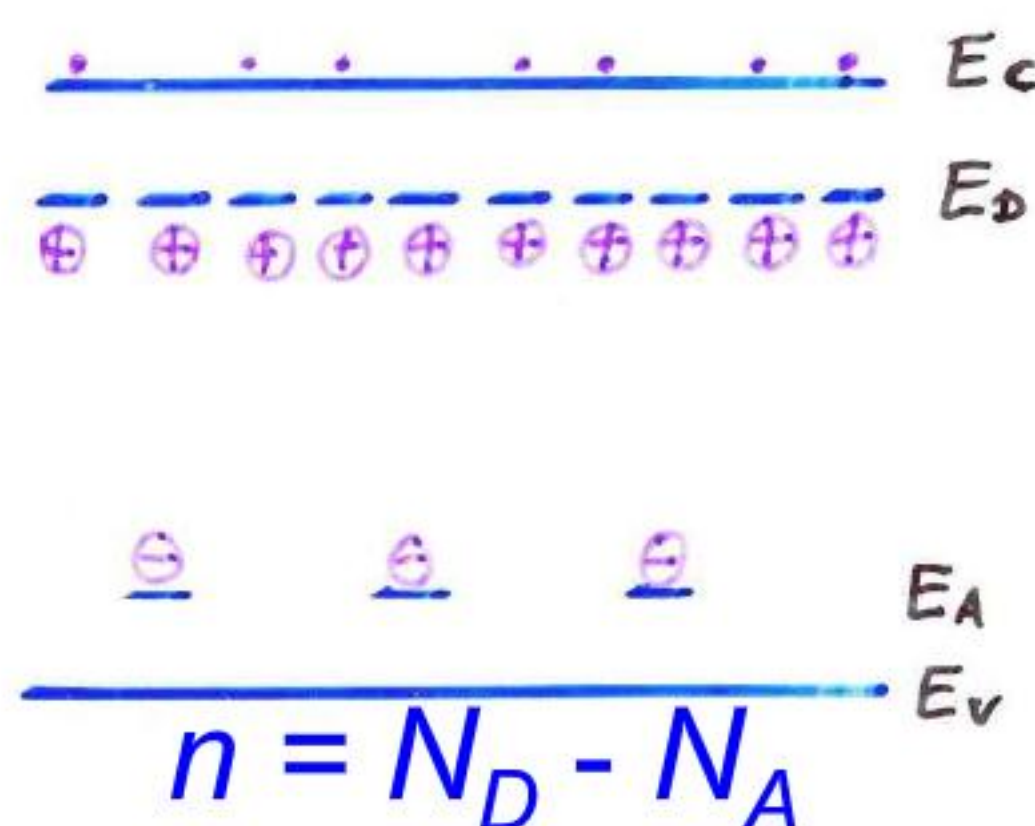
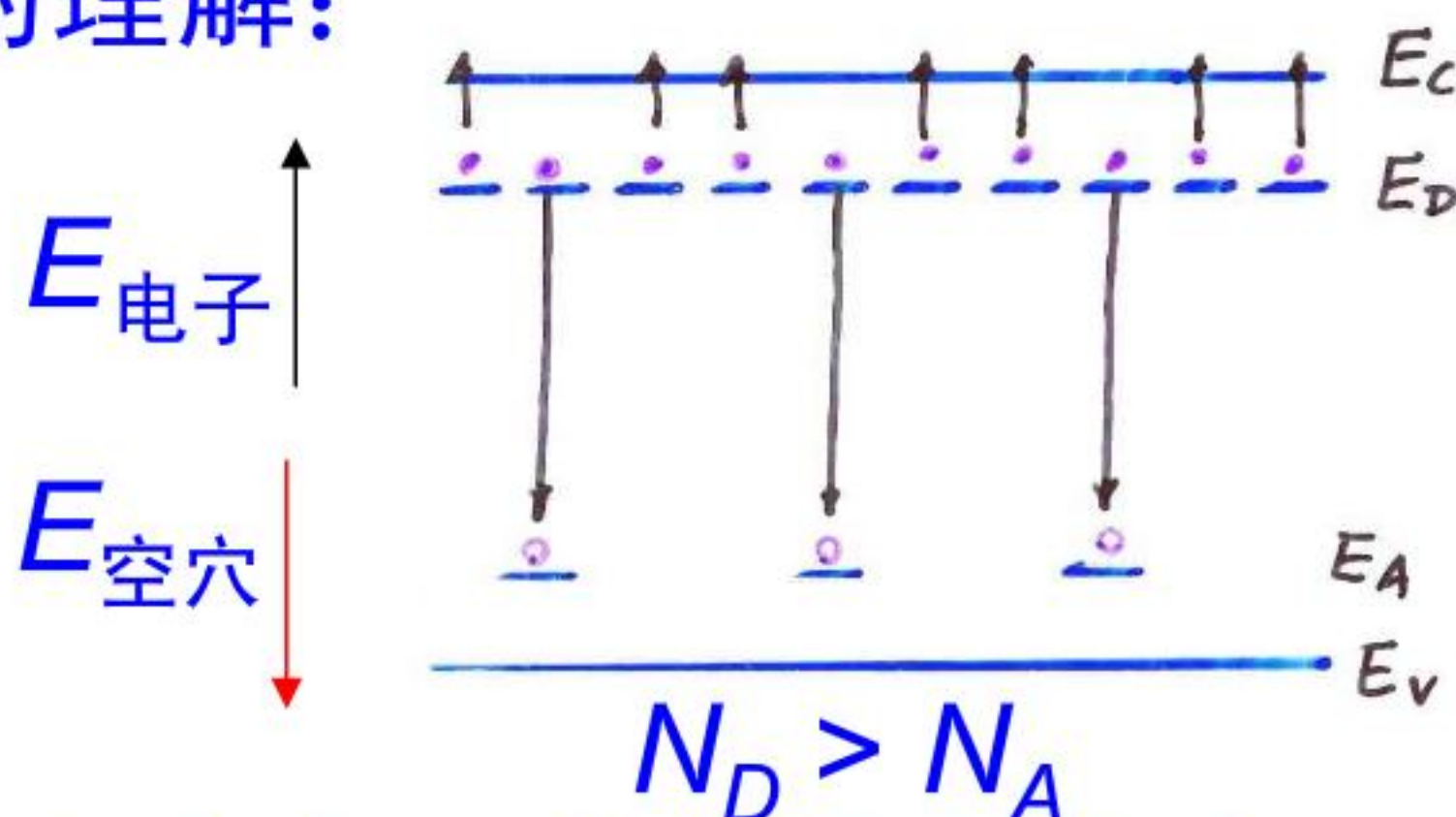
4.1.4 杂质的补偿作用

— 当半导体中同时存在施主和受主时，考虑杂质补偿作用

空间角度的理解：施主周围有多余的价电子，受主周围缺少价电子，施主多余的价电子正好填充受主周围空缺的价键电子，使价键饱和，使系统能量降低

—— 稳定状态

能带角度的理解：



有效施主浓度 (有效掺杂浓度) $N_{D(\text{eff})} = N_D - N_A$

杂质补偿度 $\gamma = 1 - \left| \frac{N_D - N_A}{N_D + N_A} \right|$ 注意： $N_D \approx N_A$ 并非高纯半导体