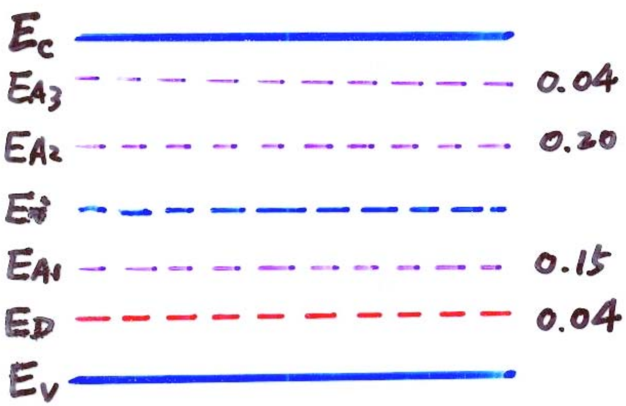
4.1 硅、锗晶体中的杂质能级9

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 ⇒ 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. $Au^0 \to Au^+$ 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

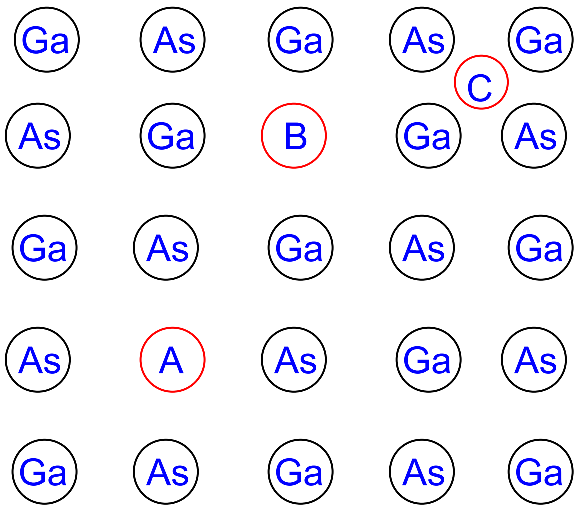
4.2 III－V族化合物中的杂质能级

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

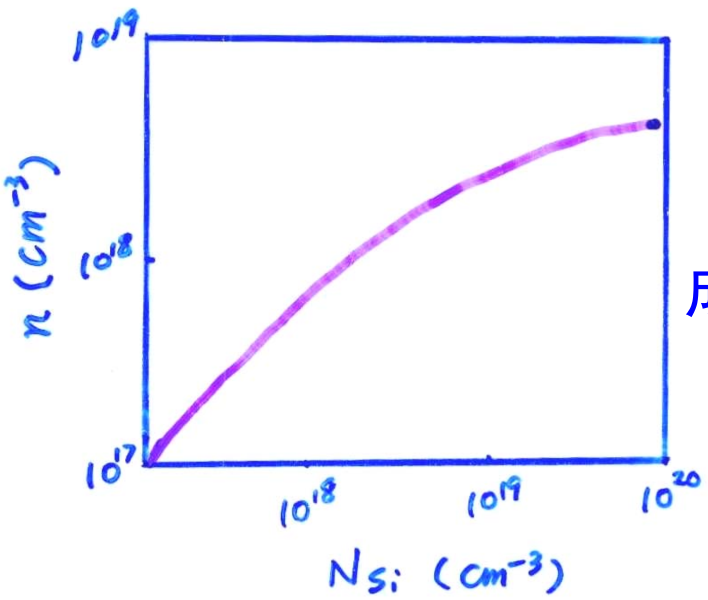
间隙式杂质：处于 4 个 III 族（V 族）原子围成的正四面体

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 （~10^7 Ω·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

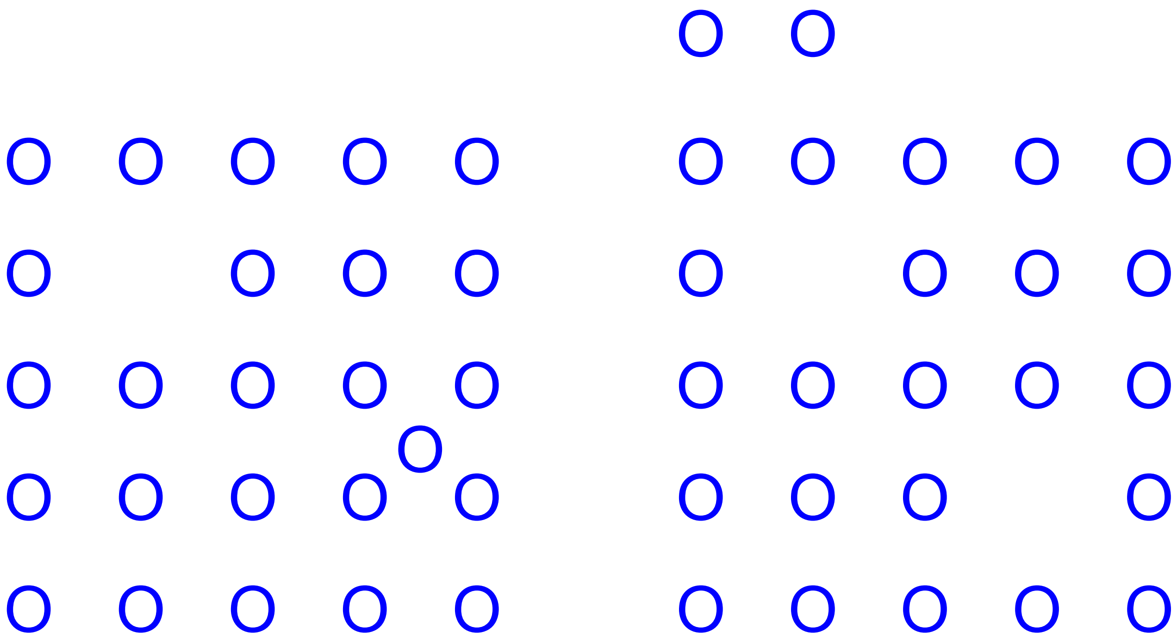
4.2 III－V族化合物中的杂质能级

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）



一同时存在

一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

空位一间隙成对出现　　只形成空位

4.3 缺陷、位错能级2

4.3.1 点缺陷

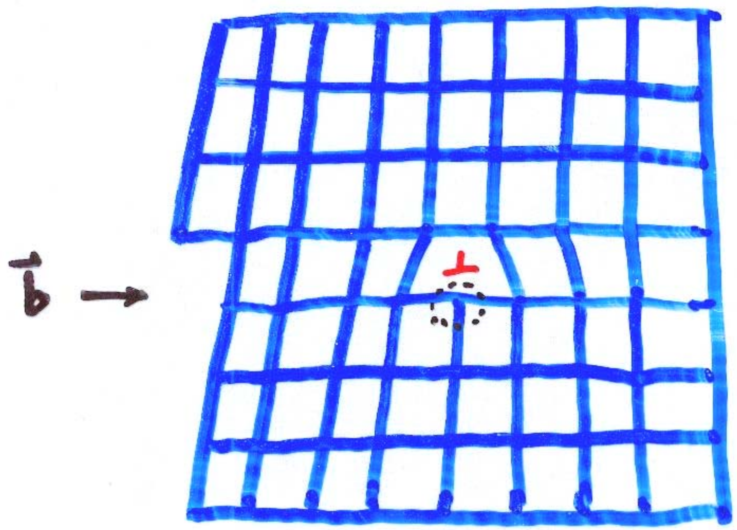
空位：不饱和键，倾向于接受电子——受主

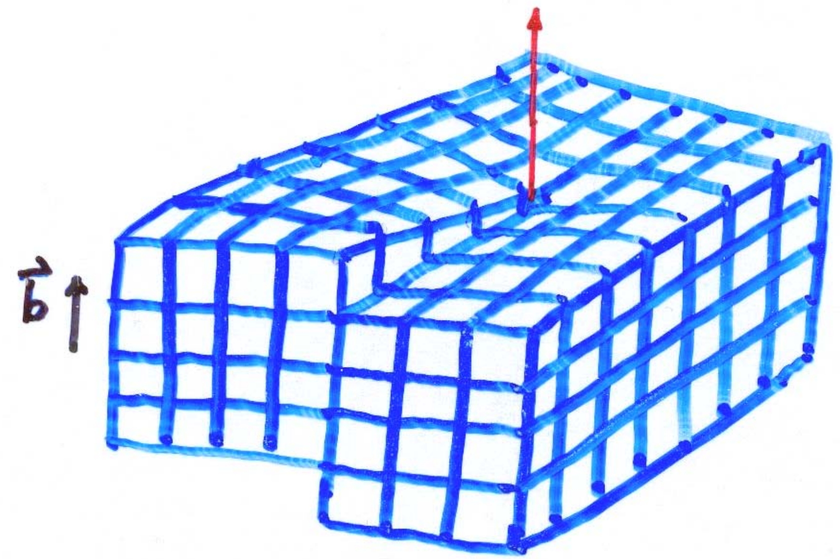
间隙原子：4 个多余的价电子　　——施主

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—位错





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

Burgers 矢量　　刃位错　　　　　　　　　　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

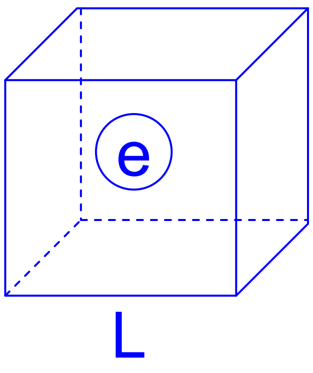
http://10.14.3.121

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

$$\boxed{\psi_{\vec{k}}(\vec{r})=\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r})} \qquad \boxed{k_x,k_y,k_z=0;\pm\frac{2\pi}{L};\pm\frac{4\pi}{L};\ldots;\pm\frac{2n\pi}{L}}$$

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

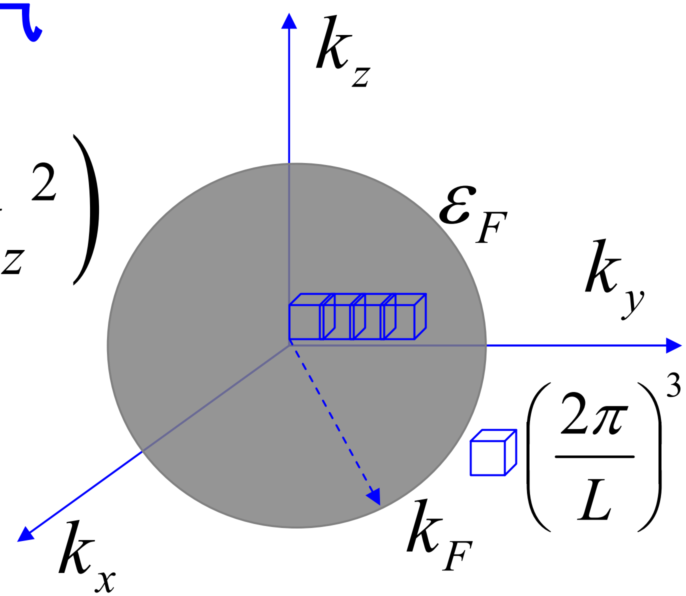
—***k***的分量是这个问题的量子数；此外，还要考虑自旋方向的量子数m_s。

5.1 状态密度2

5.1.1 复习：三维情况下的自由电子气

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

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



—三维情况下电子每个允许状态可以表示为***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：***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，***k***空间的态密度为：$\boxed{2\Big/\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 = \frac{2V}{(2\pi)^3}}$

5.1 状态密度3

5.1.2 状（能）态密度的定义

—状态密度：单位能量间隔内的状态数目

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

K空间考虑自旋状态密度为

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

E-k关系

按能量分布的状态密度

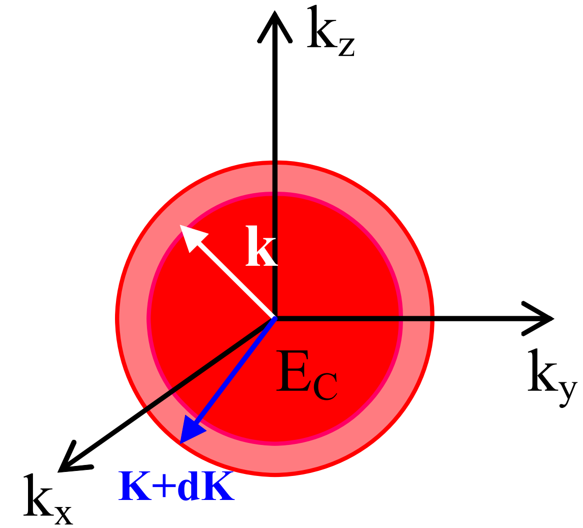
$$g(E)=\frac{dZ}{dE}=\frac{dZ}{d\Omega^*}\frac{d\Omega^*}{dk}\frac{dk}{dE}$$

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

一例子：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：

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

能带极值在$\vec{k}=0$，等能面为球面

球体体积：

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

当能量从E→E＋dE时，球体半径从k →k+dk

$$dk = \frac{1}{k}\frac{m_n^*}{\hbar^2}dE$$

球体体积从Ω* → Ω* +d Ω*

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

状态数从Z →Z＋dZ

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

5.1 状态密度5

5.1.2 状（能）态密度的定义

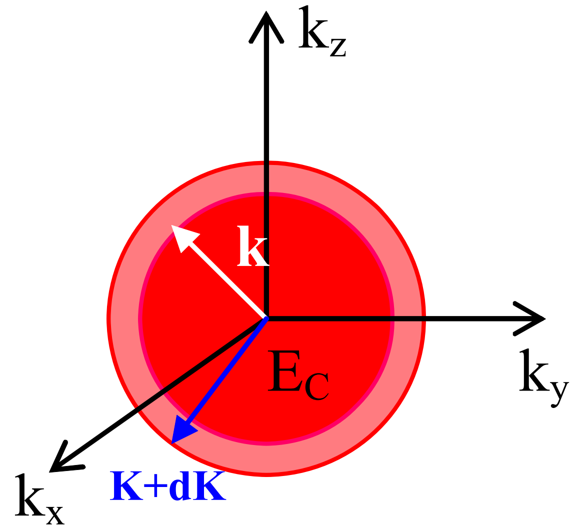
一例子：球形等能面

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

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

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

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



能带极值在$\vec{k}=0$，等能面为球面

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

导带中单位能量间隔的状态数

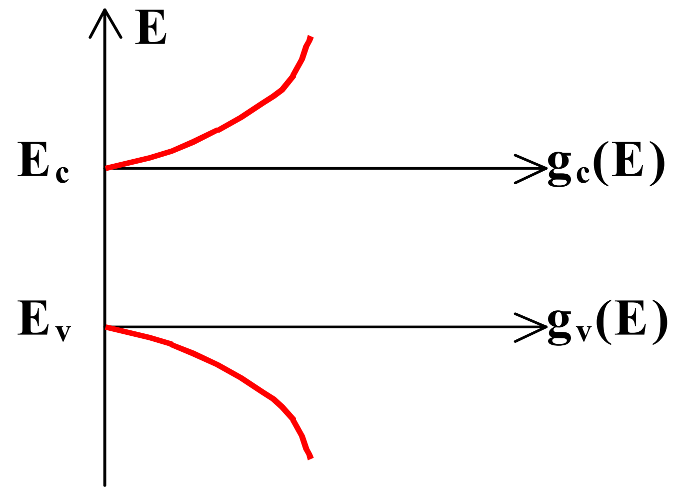
$$g_c(E) = \frac{4\pi V}{h^3}(2m_n^*)^{3/2}(E-E_c)^{1/2}$$

5.1 状态密度6

5.1.2 状（能）态密度的定义

一例子：球形等能面

价带中单位能量间隔的状态数



$$E(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*}$$

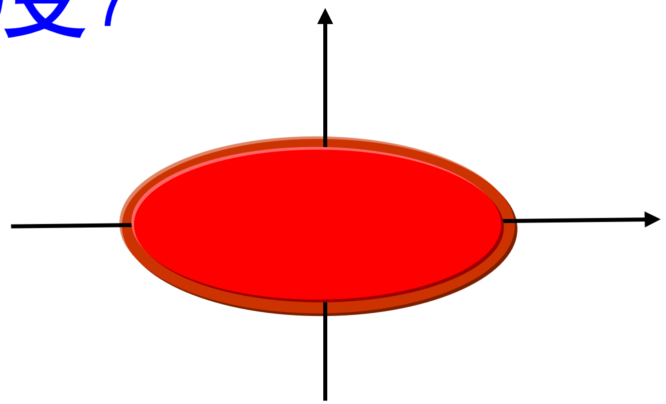
$$k^2 = \frac{(E_v - E)2m_p^*}{\hbar^2}$$

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

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

一例子：椭球形等能面（导带）

一导带极值在 $\vec{k}=\vec{k}_0$，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：

$$\frac{(k_x-k_{x0})^2}{\frac{2m_x^*(E-E_0)}{\hbar^2}}+\frac{(k_y-k_{y0})^2}{\frac{2m_y^*(E-E_0)}{\hbar^2}}+\frac{(k_z-k_{z0})^2}{\frac{2m_z^*(E-E_0)}{\hbar^2}}=1$$

椭球的半轴：

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

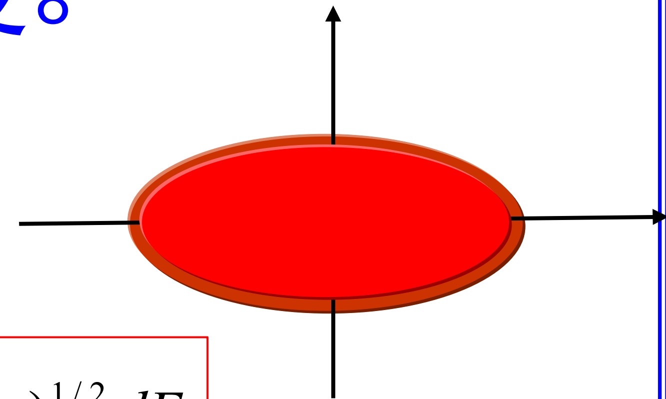
椭球的体积：

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

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

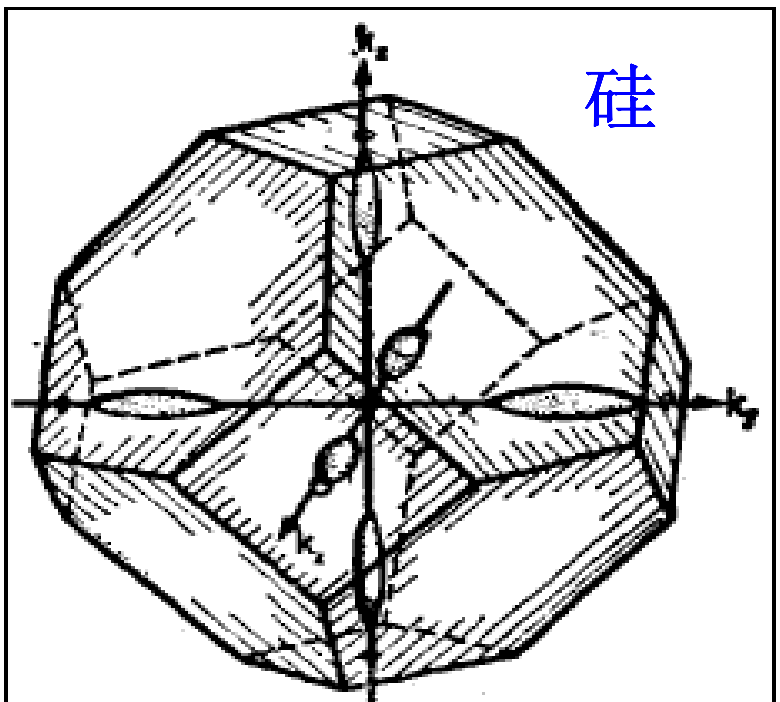


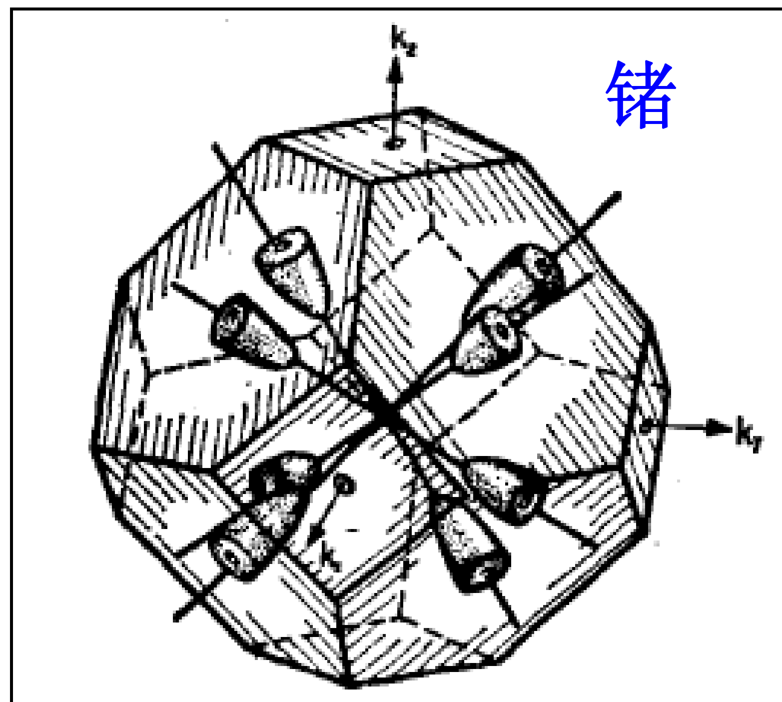
5.1.2 状（能）态密度的定义

一例子：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

一例子：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

$\mathrm{Si}: \quad m_l^* = 0.98 m_0, \quad m_t^* = 0.19 m_0, \quad \mathrm{M} = 6$ $\mathrm{m_{dn}} = 1.08 m_0$

$\mathrm{Ge}: \quad m_l^* = 1.64 m_0, \quad m_t^* = 0.082 m_0, \quad \mathrm{M} = 4$ $\mathrm{m_{dn}} = 0.56 m_0$

5.1 状态密度10

5.1.2 状（能）态密度的定义

—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

$$\mathrm{Si}: m_{ph}^*=0.49m_0, m_{pl}^*=0.16m_0$$

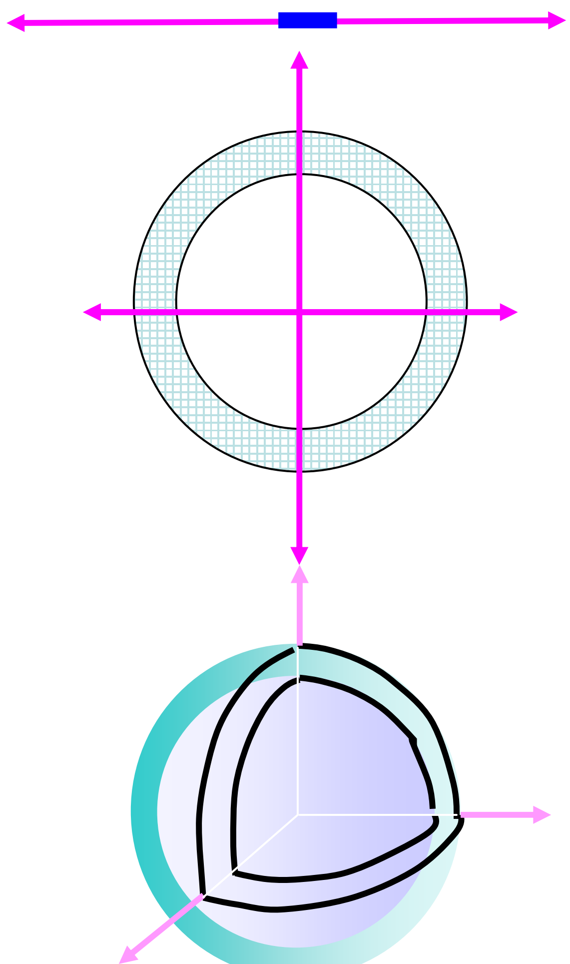
$$\mathrm{m_{dp}}=0.59m_0$$

$$\mathrm{Ge}: m_{ph}^*=0.28m_0, m_{pl}^*=0.044m_0$$

$$\mathrm{m_{dp}}=0.37m_0$$

5.1 状态密度11

5.1.3 状（能）态密度的汇总



一维

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

$$L^* = 2k$$

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

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

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

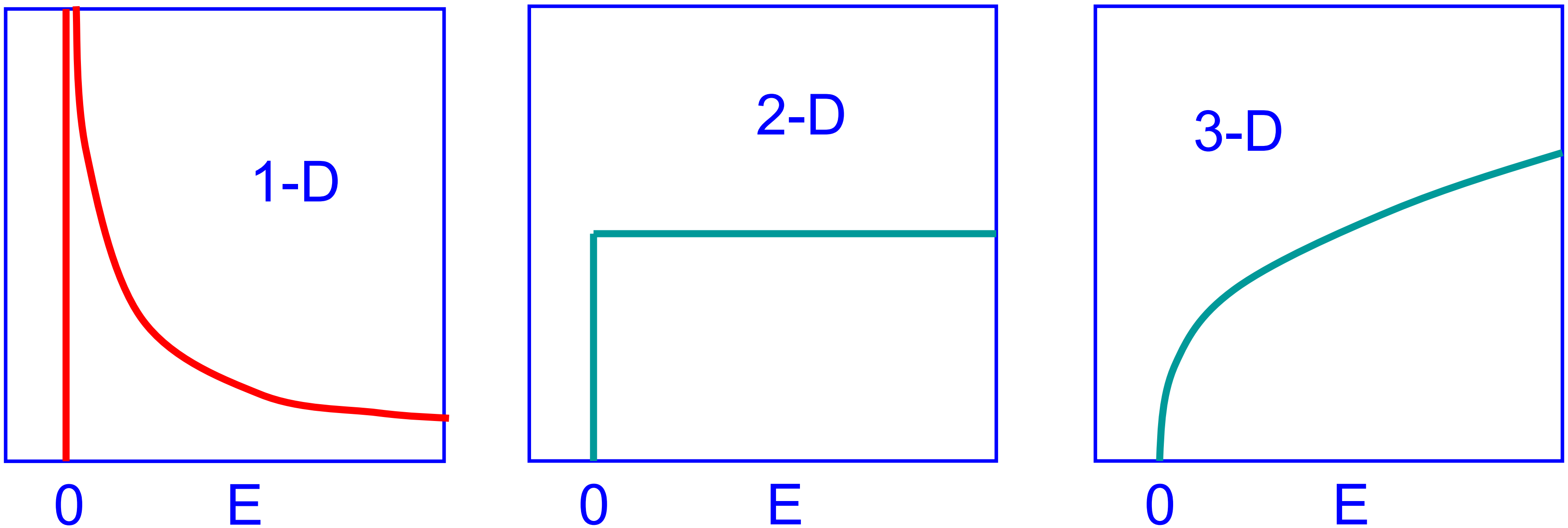
$$\Omega^* = \frac{4}{3}\pi k^3$$

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

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

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

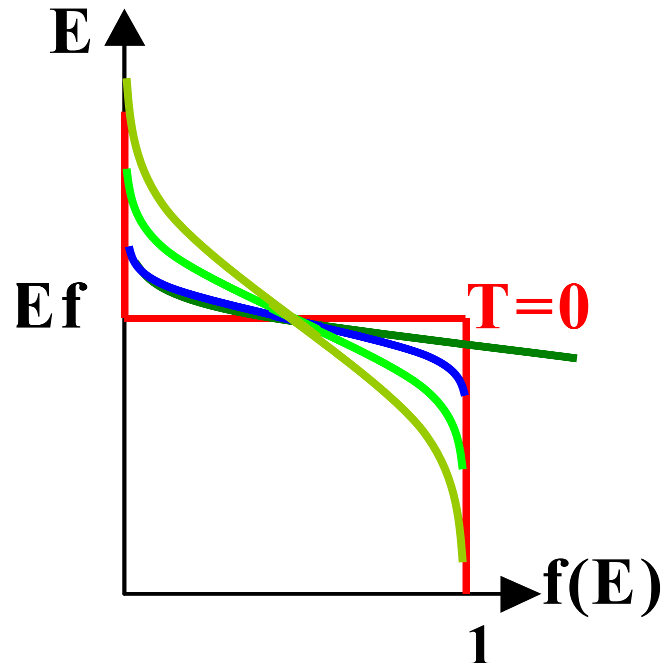
5.5 简并半导体

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

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



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

$E>E_f$ $f(E)=0$

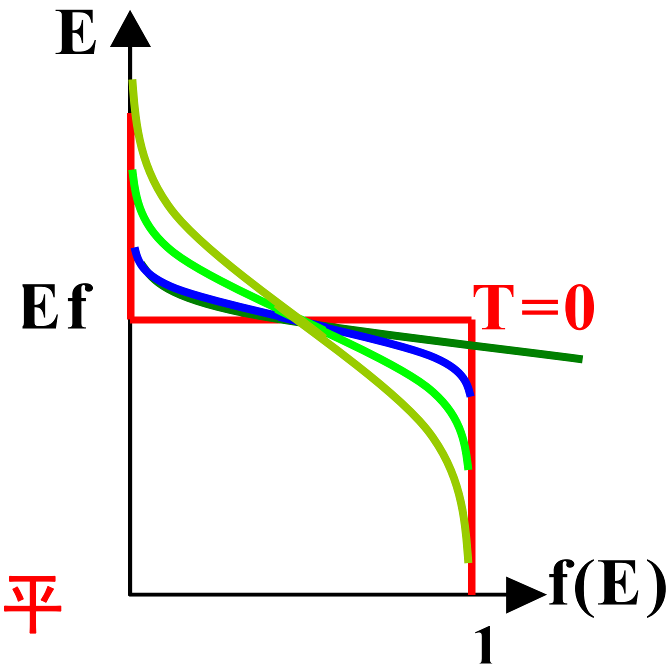
T>0K时:

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

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)

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



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

$$E-E_f >> kT \qquad \exp\left(\frac{E-E_f}{kT}\right) >> 1$$

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

玻尔兹曼分布函数 $$\boxed{f(E)=\exp\left(-\frac{E-E_f}{kT}\right)}$$

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)

一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$_f$>>kT

$$f_e(E)=\exp\left(-\frac{E-E_f}{kT}\right)$$

一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>>kT

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

$$\boxed{f_h(E)+f_e(E)=1}$$

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

5.2 费米能级和载流子的统计分布4

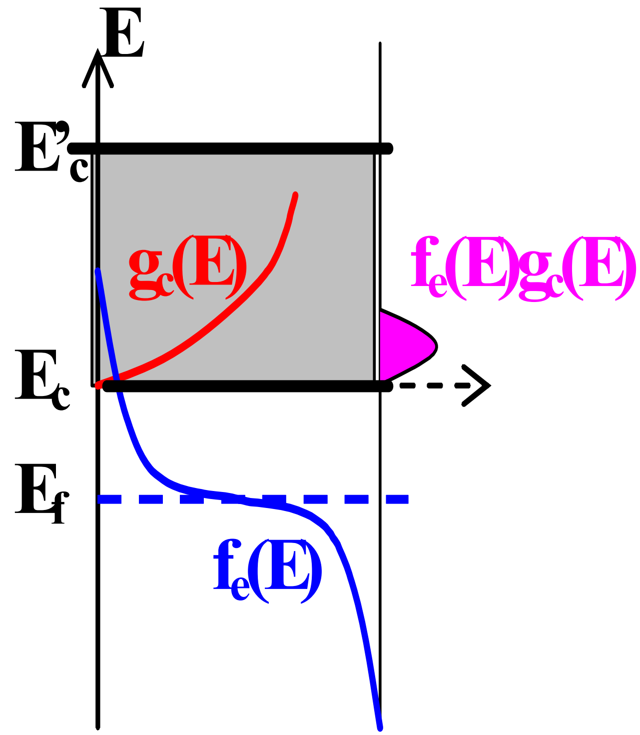
5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

一导带电子浓度

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

导带中的电子浓度：

$$\boxed{n=\frac{N}{V}=\frac{1}{V}\int_{Ec}^{E'c} g_c(E) f_e(E) dE}$$



设Ec－E_f>>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

$$m_{dn}=(M^2 m_l^* m_t^{*2})^{1/3}$$

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

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

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

换元 $\boxed{x=\frac{E-E_c}{kT},\begin{cases}E=E_c,x=0\\E=\infty,x=\infty\end{cases}}$

$$\boxed{n=\frac{4\pi(2m_{dn})^{3/2}}{h^3}(kT)^{3/2}\exp\left(-\frac{E_c-E_f}{kT}\right)\int_0^{\infty}x^{1/2}\exp(-x)dx}$$

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

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

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

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

导带有效状态密度

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

300K，$N_C(Si)=2.8\times10^{19}cm^{-3}$

一导带平衡电子浓度

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

5.2 费米能级和载流子的统计分布7

5.2.2 导带电子和价带空穴浓度

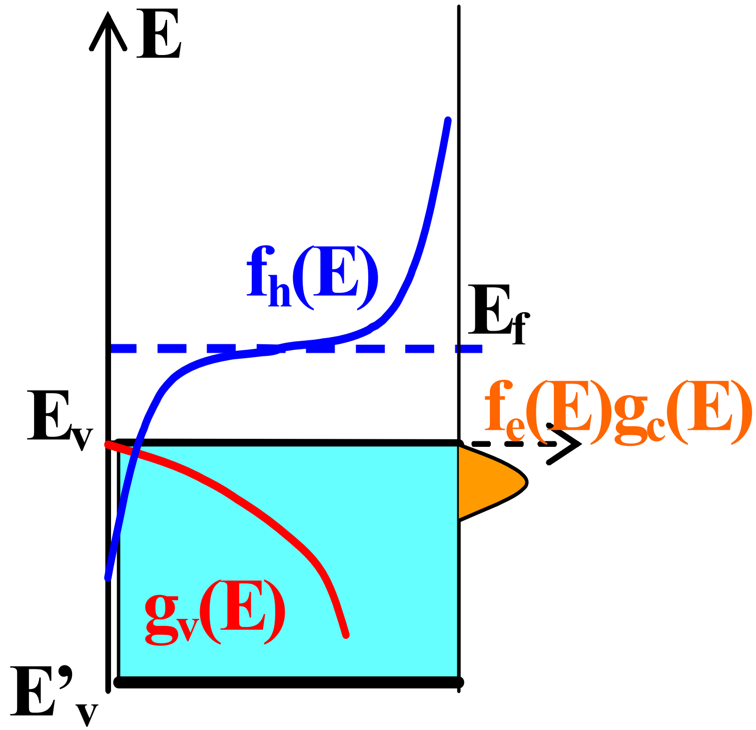
一价带空穴浓度

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

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

$E_f - E_V >> KT$

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



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

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(Si)= 1.1×10^{19}cm^{-3}

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

$$N_v = \frac{2(2\pi m_{dp} kT)^{3/2}}{h^3} = 4.82\times 10^{15} T^{3/2} (\frac{m_{dp}}{m_0})^{3/2}$$

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

一载流子浓度乘积的重要性质

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

$$\boxed{np = N_C N_V \exp\left(-\frac{E_C - E_V}{kT}\right) = N_C N_V \exp\left(-E_g/kT\right)}$$

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！