

# 第三章 平衡态半导体的物理基础

本章将讨论在热平衡条件下，半导体的基本特性及其物理基础，主要包括：平衡半导体载流子分布的物理规律；掺杂对半导体性质的影响等问题。

## 本章内容：

§ 3.1 本征半导体和本征费米能级

§ 3.2 非本征半导体

§ 3.3 费米能级

§ 3.4 重掺杂半导体

§ 3.5 深能级杂质和多重能级杂质

# 第三章 平衡态半导体的物理基础

## § 3.1 本征半导体和本征费米能级

基于能带论，半导体的性质及导电能力，与电子和空穴浓度有关，而电子和空穴的浓度与价电子在导带和价带中的占据分布情况密切相关，因此，研究掌握各种具体条件下载流子浓度分布情况和规律至关重要。本节将首先讨论在热平衡条件下，没有缺陷和杂质的纯净半导体（称为本征半导体）中载流子的分布规律和特征。

在热平衡条件下，半导体中价电子在导带和价带中的分布遵循统计物理规律，即电子填充从低能带开始依次向高能级和高能带填充，并遵循泡利不相容原理。

# 第三章 平衡态半导体的物理基础

## § 3.1 本征半导体和本征费米能级

本节将首先从统计物理规律出发，研究平衡半导体中载流子的分布规律。半导体的载流子（电子和空穴）分别表征导带中的电子和价带中电子的空位，因此，载流子的浓度分布取决于导带和价带的能级态被电子的占据情况。为此，首先需要知道：1) 导带或导带底及价带或价带顶附近的能级态分布情况（状态密度）；2) 电子在这些能级态的占据概率（分布规律）。

### 3.1.1 半导体能带的状态密度

### 3.1.2 半导体载流子的分布函数

### 3.1.3 本征半导体和本征载流子的浓度

### 3.1.4 本征费米能级

# 第三章 半导体中载流子的统计分布

## § 3.1 本征半导体和本征费米能级

### 3.1.1 半导体能带的状态密度

由于电子在能带中的占据和分布需要遵循泡利不相容原理和统计物理规律，因此，要想了解电子在半导体导带和价带的占据分布情况，首先要了解和掌握半导体导带和价带中的能级态分布情况。

由于能带中的能级态随能量的变化是准连续的，因此，可在 $\mathbf{K}$ 空间用状态分布函数表示。

# 第三章 半导体中载流子的统计分布

## § 3.1 本征半导体和本征费米能级

### 3.1.1 半导体能带的状态密度

#### K空间的状态密度

按照能带论的计算结果

- 不同半导体能带结构的 $E$ - $K$ 关系通常不同，因而其状态密度也不相同；
- 电子在 $K$ 空间的量子能态由能量本征值和波矢  $k$  共同表征；
- 在 $K$ 空间，波矢 $k$ 是均匀分布的，但只能取按一定的规则取值，其取值规律与晶体尺寸有关；
- 每一个 $k$ 允许值对应两个不同的允许电子占据的量子态；
- 可等价认为，每个  $k$  值在 $K$ 空间占据的体积为 $1/V$ ， $V$ 是晶体的体积

## § 3.1 本征半导体和本征费米能级

在 $\mathbf{K}$ 空间，能量是波矢 $k$ 的函数，波矢 $k$ 是准连续分布的，因此，能级状态可以看成是连续分布的，用状态密度来表示。

### 状态密度的定义

假定在 $E$ 到 $E+dE$ 的无限小能量间隔内允许的量子态数为 $dZ$ ，则状态密度 $g(E)$  定义为：

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

状态密度的物理意义是，在能带中能量允许值 $E$ 附近单位能量间隔内包含的量子态数

## § 3.1 本征半导体和本征费米能级

### 3. 半导体状态密度实例

半导体在导带底和价带顶的状态密度 $g(E)$ 非常重要，其表达式根据其 $E$ - $k$ 关系求得。

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

$dZ = 2V \times 4\pi k^2 dk$ ，由 $E$ - $k$ 关系，可得

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

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

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

类似，可以用 $E$ - $k$ 关系，求出导带电子和价带空穴的有效质量

## § 3.1 本征半导体和本征费米能级

### 3. 半导体状态密度实例

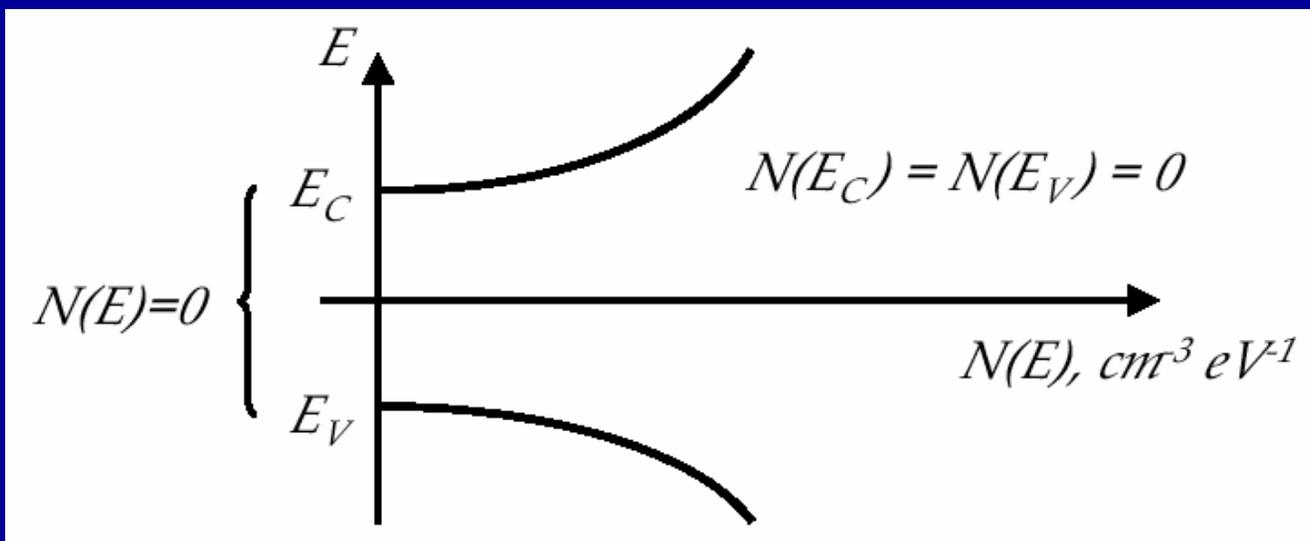
在抛物线近似下，半导体Si在价带和导带的状态密度为：

$$N_v(E) = \left(\frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3}\right) (m_p^*)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}$$

$E < E_v$  时

$$N_c(E) = \left(\frac{8\sqrt{2}\pi}{h^3}\right) (m_n^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}$$

$E > E_c$  时



导带底和价带顶的状态密度为0。

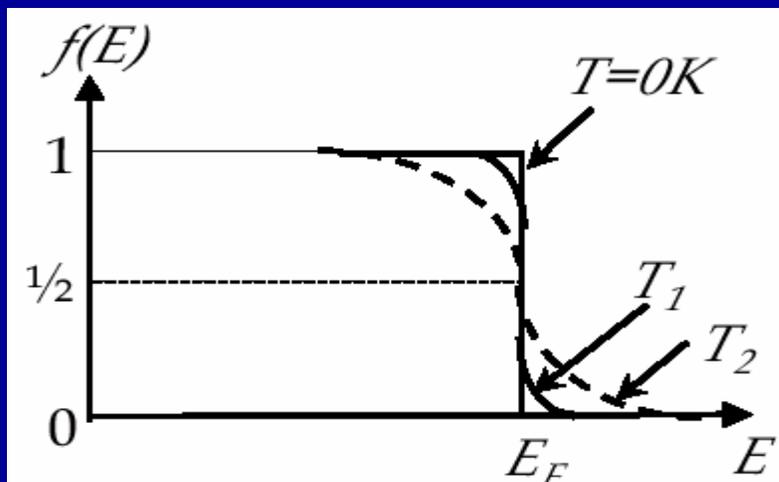
## § 3.1 本征半导体和本征费米能级

### 3.1.2 半导体载流子的浓度分布函数

#### 1. 费米分布函数

按照量子统计理论，在热平衡条件下，电子在各能量状态的分布与状态对应的能量值相关。电子占据能量 $E$ 状态的概率满足费米分布函数：

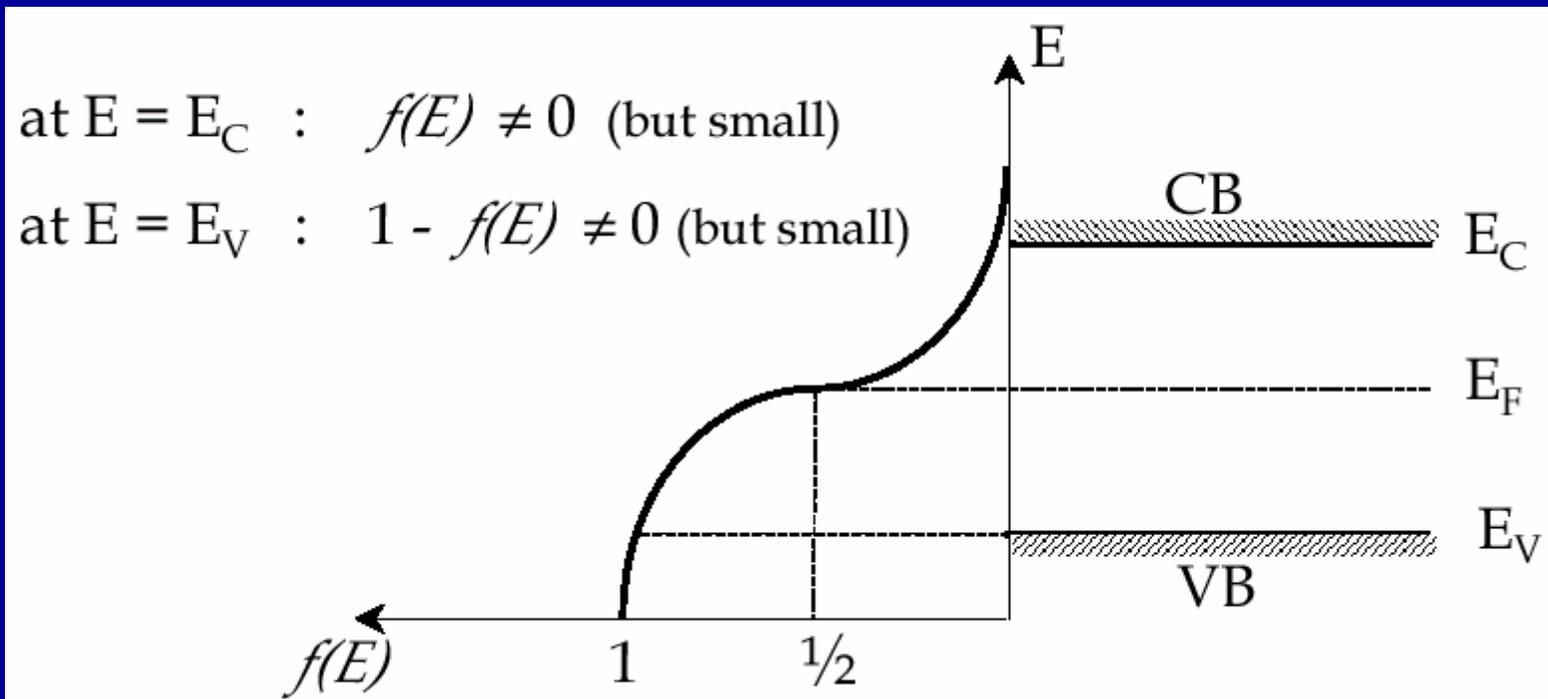
$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}$$



- $E_F$ 是费米能级
- 在绝对零度下，能量小于 $E_F$ 的能级态全满，而能量大于 $E_F$ 的能级态全空
- 费米能级是反映电子在能带中填充状态的一个标尺
- （后面专门重点讨论费米能级）

## 2. 费米 (Fermi) 分布函数 (Distribution) 的特征

设电子的分布函数为 $f(E)$ ，则空穴的分布函数应为 $1-f(E)$



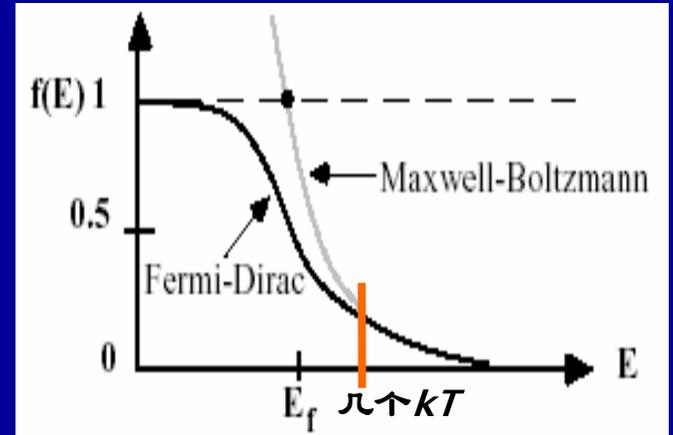
### 3. 玻耳兹曼 (Boltzmann) 分布函数

当电子能量 $E$ 比费米能级高几个 $kT$ 时, 即

$$E - E_f \gg kT \text{ 时}$$

电子的费米分布函数可简化为玻耳兹曼分布函数

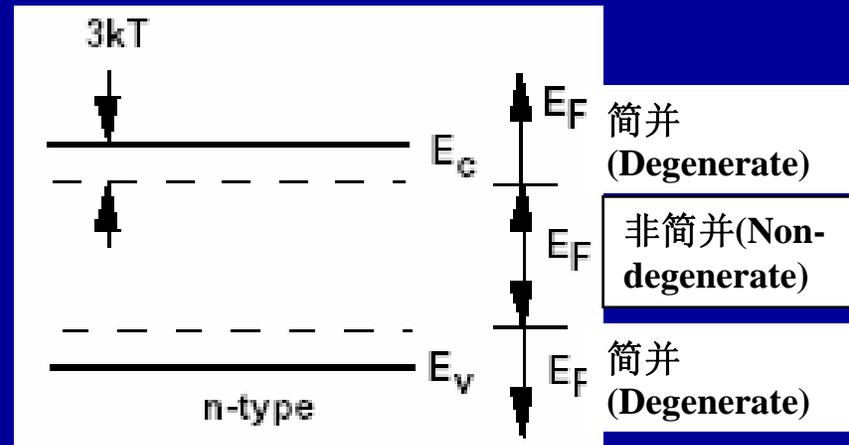
$$f(E) \approx e^{-\frac{(E - E_f)}{kT}}$$



这意味着, 当费米能级距离导带和价带都比较大时, 导带中电子数很少, 电子的分布可用经典的玻耳兹曼分布函数描述。

半导体中载流子 (电子) 分布满足玻耳兹曼分布时, 称为此类半导体为非简并半导体

载流子分布不满足玻耳兹曼分布的半导体称为简并半导体。简并半导体中载流子的分布需要采用费米分布函数描述



## 4. 电子和空穴的浓度

1) 按照统计物理理论，半导体中电子的浓度可表示为：

$$n = \int g(E) f(E) dE$$

假定导带中电子集中分布在导带底附近，导带底的状态密度为  $N_C$ ，则有：

$$n_0 = N_C f(E_C)$$

其中， $N_C$ 是导带底状态密度

$$f(E_C) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_C - E_f}{kT}}} \cong e^{-\frac{E_C - E_f}{kT}}$$

➤严格的理论推导，可求得非简并半导体中电子浓度表达式为

$$n_0 = N_C e^{-\frac{E_C - E_f}{kT}}$$

其中

$$N_C = 2 \times \left( \frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

## 4. 电子和空穴的浓度

### 2) 半导体中空穴的浓度

$$p = \int g(E)(1 - f(E))dE$$

类似，假定空穴集中分布在价带顶附近，价带顶的状态密度为 $N_V$ ，则有：

$$p_0 = N_V [1 - f(E_V)]$$

空穴实际对应的是价带中的电子空位，因此空穴的分布函数可表示为：

$$1 - f(E_V) = 1 - \frac{1}{1 + e^{\frac{E_V - E_f}{kT}}} \cong e^{-\left(\frac{E_f - E_V}{kT}\right)}$$

➤严格推导获得的非简并半导体中空穴浓度表达式：

$$p_0 = N_V e^{-\left(\frac{E_f - E_V}{kT}\right)}$$

其中

$$N_V = 2 \times \left( \frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

## 4. 电子和空穴的浓度

非简并半导体中电子浓度和空穴浓度表达式为：

电子浓度

$$n = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT}$$

空穴浓度

$$p = N_V e^{-(E_f - E_V)/kT}$$

其中

$$N_C = 2 \times \left( \frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

$$N_V = 2 \times \left( \frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

$N_C$ 、 $N_V$ 分别为导带底和价带顶等效态密度，近似为  $T^{3/2}$ ， $E_f$ 为费米能级  
 $N_C$ 、 $N_V$ 的物理含义是，如果把导带电子和价带空穴等效地看作是仅仅分布在导带底和价带顶时，导带底和价带顶对应的等效状态密度

# 1. 本征载流子浓度

$$n_i = N_C e^{-(E_C - E_i)/kT}$$

$$p_i = N_V e^{-(E_i - E_V)/kT}$$

其中 $E_i$ 是本征半导体的费米能级，称为本征费米能级

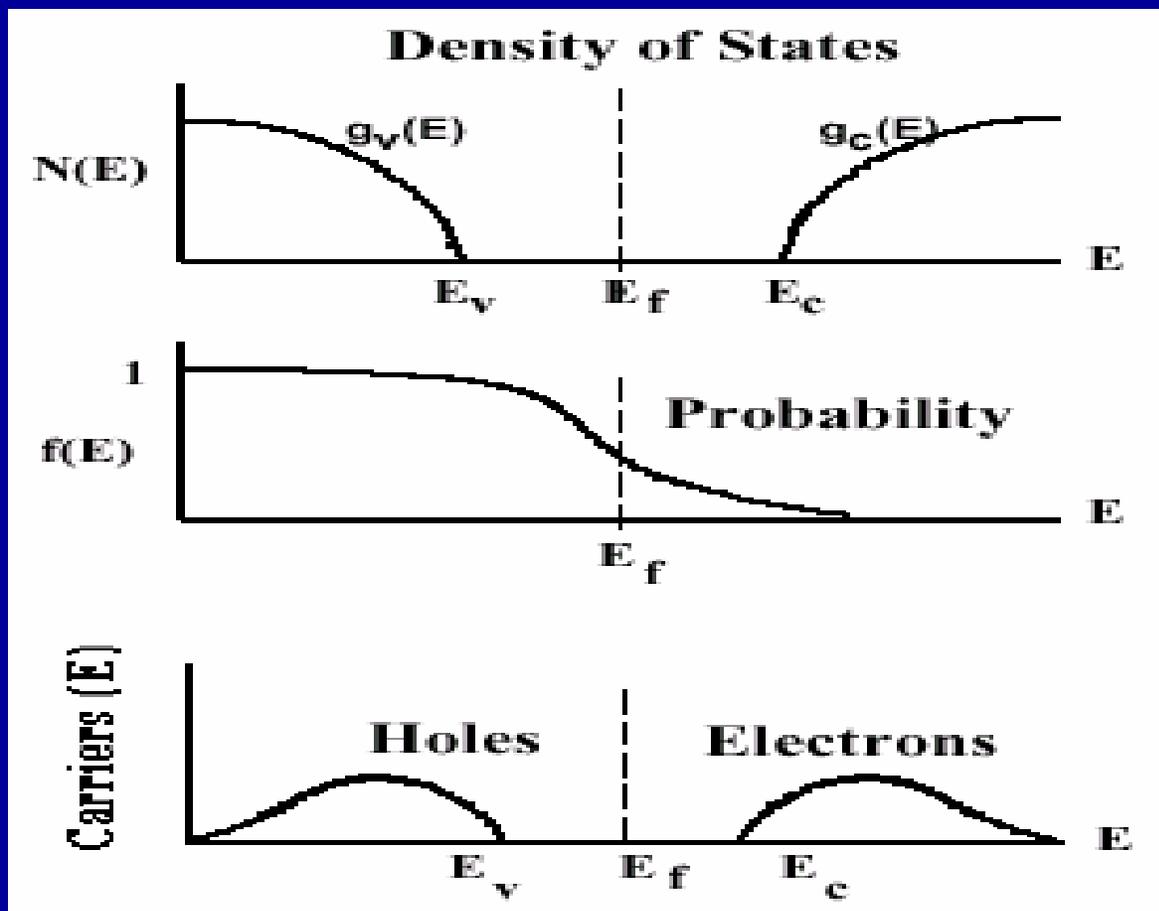
$$n = p = n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-(E_C - E_V)/2kT} = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_g/2kT}$$

\*对本征半导体:

- 本征半导体的载流子浓度与导电底和价带顶的等效状态密度、禁带宽度、温度有关;
- 等效导带底和价带顶状态密度是温度的函数;
- 禁带宽度是半导体材料的本征特性，是常数;
- 本征载流子的电子和空穴浓度相等，禁带宽度是其主要决定因素。

图中示出半导体中本征载流子的状态密度、分布函数、和载流子浓度实际的分布

$$n = \int g(E) f(E) dE$$



但在实际应用中，我们通常将载流子的分布等效为：电子主要分布在导电底，而空穴主要分布在价带顶

## 2. 本征费米能级

费米能级是一个重要物理量，本征半导体的费米能级由下式决定

$$E_i = E_f = \frac{E_C + E_V}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left( \frac{N_C}{N_V} \right) = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \left( \frac{m_p}{m_n} \right)$$

在通常应用的室温条件下，由于半导体的禁带宽度远远大于 $kT$ ，所以，上式的第二项可忽略，即

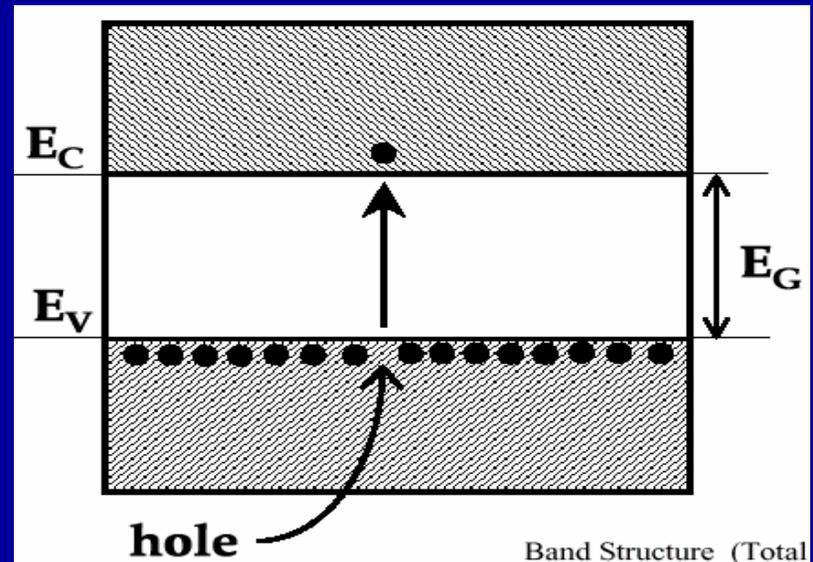
$$E_i \approx \frac{E_C + E_V}{2}$$

本征费米能级位于禁带中央，等效为 $N_C = N_V$ 的情形

近似认为，本征费米能级位于禁带中央，和导带底及价带顶一样，均可作为电势的参考点（很好的近似）

### 3) 本征费米能级 ( $E_i$ )

对于本征半导体来说，导带中的电子源于价带中电子的激发。因此，在本征半导体中，电子的浓度 ( $n_0$ ) 总是等于空穴的浓度 ( $p_0$ ) (通常用  $n_i$  表示)。在热平衡条件下，满足浓度分布函数，费米能级为：



$$n = p = n_i = \sqrt{N_V N_C} e^{-\frac{(E_C - E_V)}{kT}} = \sqrt{N_V N_C} e^{-\frac{E_g}{kT}}$$

本征费米能级近似位于禁带中央。通常空穴有效质量大于电子，因此，本征费米能级实际上在中带偏上的位置。通常将本征费米能级作为半导体的能量参考点之一。

实际上，电子、空穴的浓度与费米能级和导带底和价带顶的能量差有关。其中，本征费米能级是一个标尺：若费米能级高于本征费米能级，则电子多于空穴，反之也成立。

## § 3.2 非本征半导体

### 3.2.1 半导体中的掺杂和杂质能级

杂质：在半导体晶体中存在其他原子或离子

缺陷：晶体按周期性排列的结构受到破坏

杂质和缺陷的引入，会使严格按周期性排列的晶体原子结构发生变化，晶格的周期势场也受到破坏。由此使得本征半导体中形成新的能级（导带和价带）。

根据能带论的计算，大多数杂质和缺陷在本征半导体中引入的能级态能量在导带与价带间的禁带范围内（**Energy Gap, forbidden gap**）；

由于这些禁带中的能级态上可以发生电子的占据和释放，因此，对半导体的特性会产生很大的影响。

## 3.2.1 半导体中的掺杂和杂质能级

### 半导体中的杂质

#### 1) 杂质的分类（根据在晶格中的位置）

- 替位式杂质：杂质原子替代晶格原子
- 间隙式杂质：杂质位于晶格原子的间隙

#### 2) 半导体的掺杂

- 在半导体中通过可控操作、人为引入杂质的过程，是半导体技术中重要的工艺步骤之一
- 掺杂引入的杂质通常为替位式杂质，包括施主和受主杂质两种
- 扩散和注入是典型的掺杂工艺
- 杂质浓度：单位体积中杂质原子数，是掺杂的重要因子
- 半导体可通过掺杂实现对半导体性质的调制

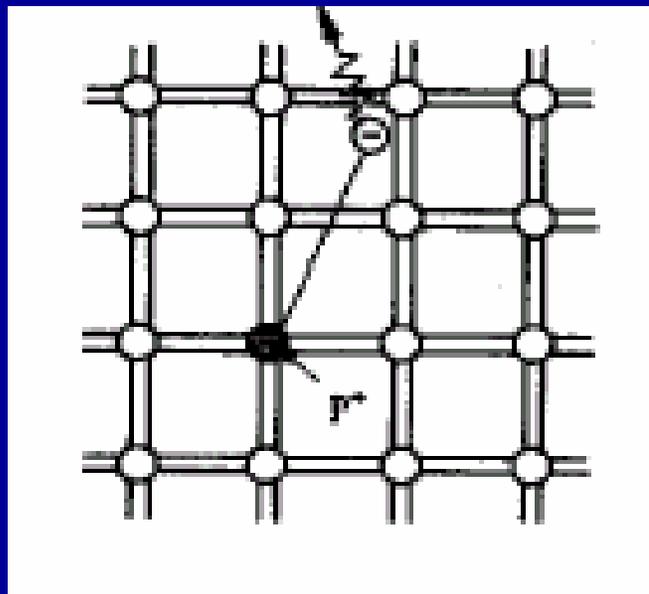
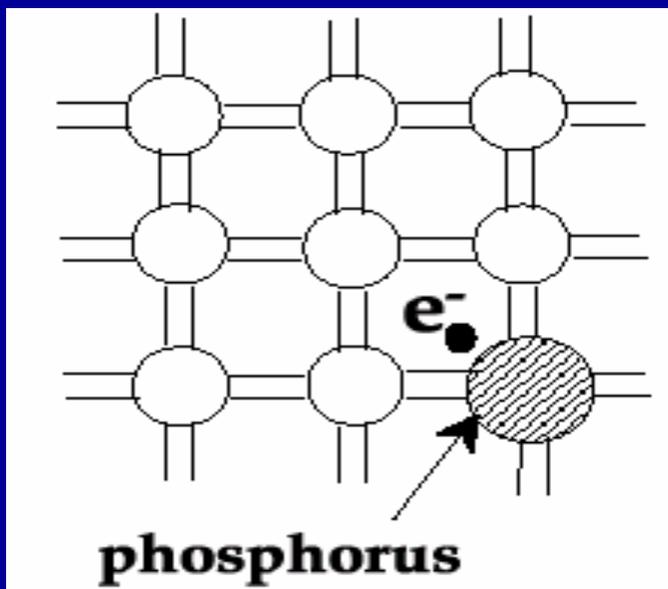
**Si**半导体技术能够得到广泛应用的重要原因是：可通过选择掺杂杂质的类型和浓度，对掺杂半导体的性能进行可控调制

## 3.2.2 施主和受主

### 1. 施主杂质和施主能级

#### 1) 施主杂质（从晶体结合的角度）

以4价Si中掺入5价的P或As为例说明

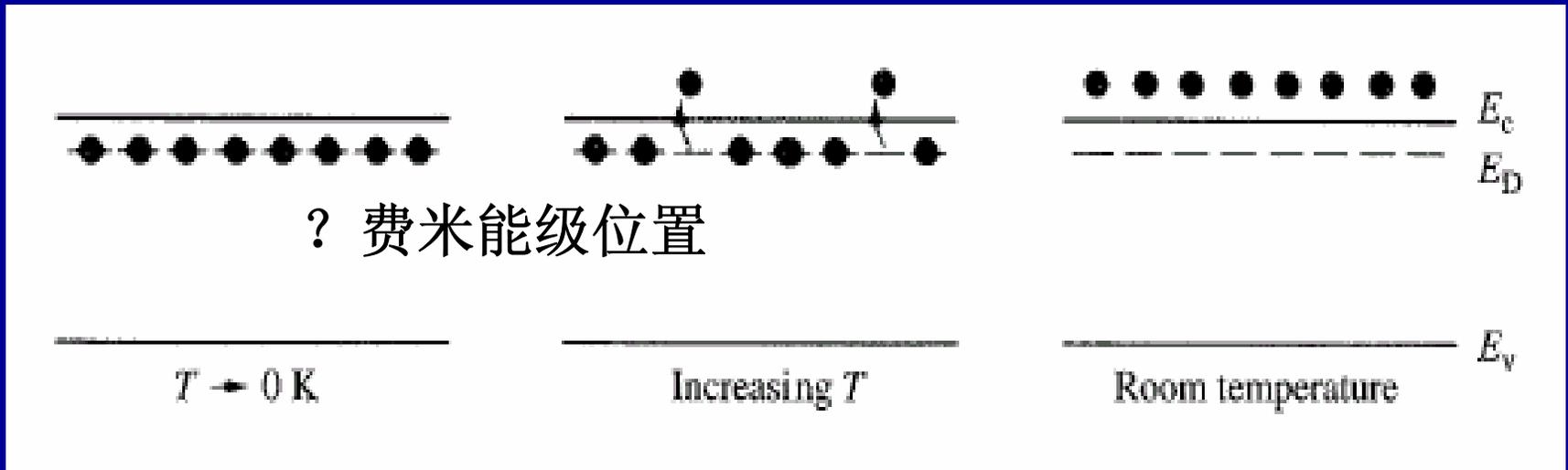


施主杂质掺入后，能够向晶体提供额外的可以自由导电的载流子—电子，同时自身成为带正电的离子的杂质。

## 3.2.2 施主和受主

### 1. 施主杂质和施主能级

#### 1) 施主杂质（从能带论的角度）



在掺入施主杂质后，将会在禁带中引入新的施主能级态。

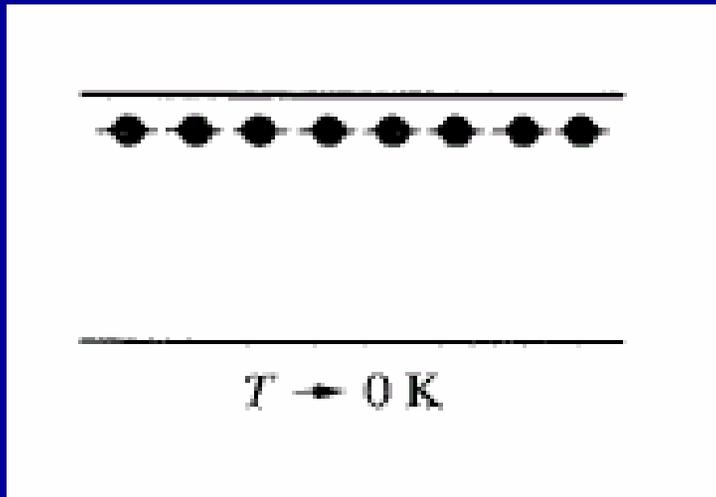
考虑五价的P原子，除了4个电子与周围的Si原子结合形成共价键外，还剩余一个未成键的电子被约束在P离子的周围，未成键电子所处的能级称为施主能级

施主掺杂又称为N型掺杂

# 1. 施主杂质和施主能级

## 2) 施主能级

施主掺杂在半导体禁带中引入新电子能级的同时，在新电子能级上有电子占据



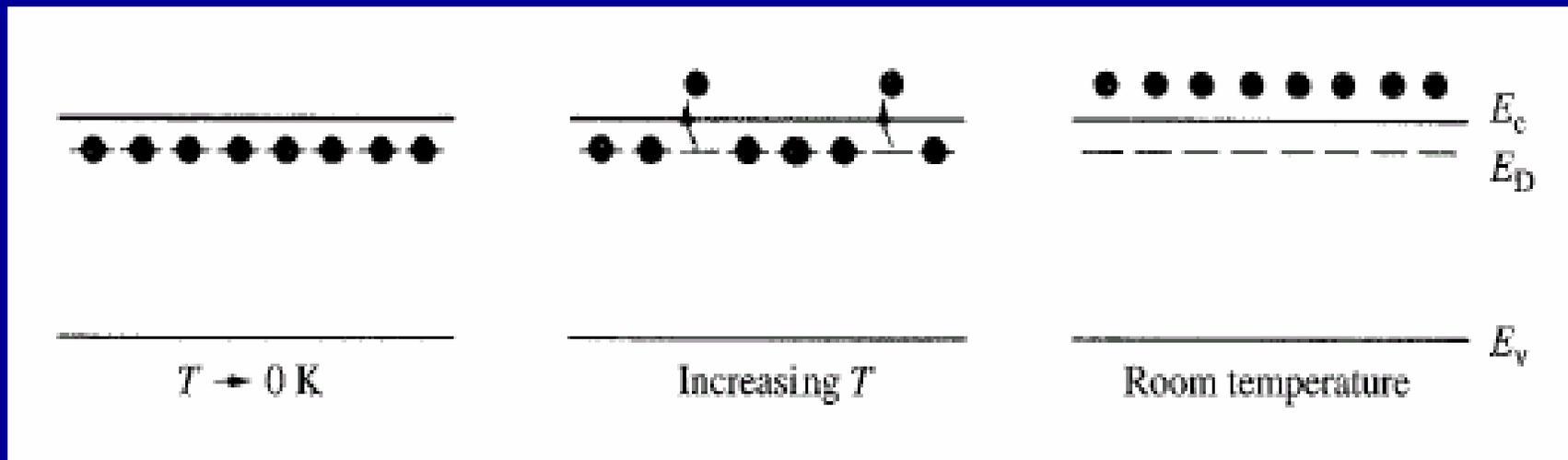
晶体中的自由导电电子等同于导带电子，成键的电子等价于价带电子

- P原子除了4个形成共价键电子外，还存在一个多余的电子，受到正离子 $P^+$ 的吸引；
- 多余电子引起的相互作用能可以可做为是微扰，其作用是在禁带中形成新的电子允许能态；
- 该电子受到 $P^+$ 的吸引，能量较导带中的电子能量低；
- 但该吸引作用比共价键结合要弱，因此其能量较价带中的电子高；
- 因此，施主能级应该位于带隙中。

# 1. 施主杂质和施主能级

## 3) 施主的电离和电离能

电离：从施主能级向导带释放电子的过程。在**0K**时，施主能级被电子占据未电离，显电中性；随着温度的增加，占据施主能级的电子较价带电子更容易激发跃迁到导带，发生电离。当施主杂质发生电离后显正电性。如果施主能级很接近导带，则在一定温度下，所有施主杂质都将发生电离（完全电离）。



电离所需要的最小能量称为电离能，为导带底与施主能级之差

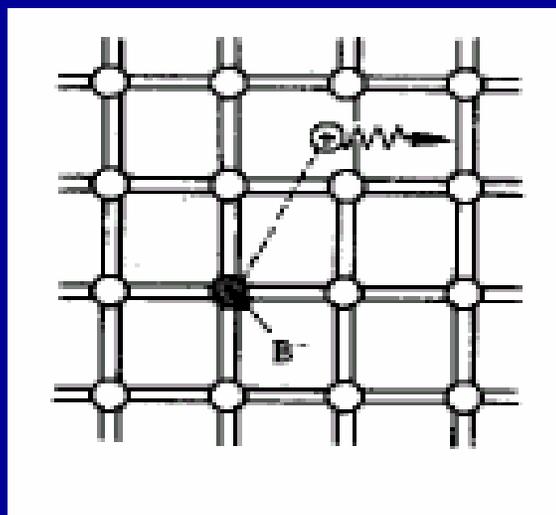
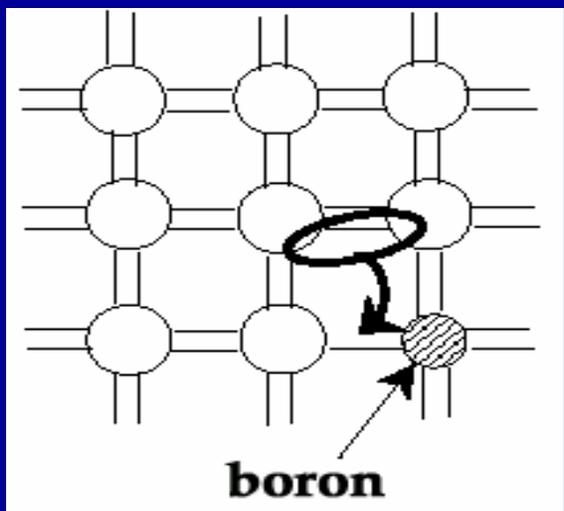
$$\varepsilon_D = E_C - E_D$$

## § 3.2 非本征半导体

### 3.2.2 施主和受主

#### 2. 受主杂质和受主能级

##### 1) 受主杂质（从晶体结合的角度）



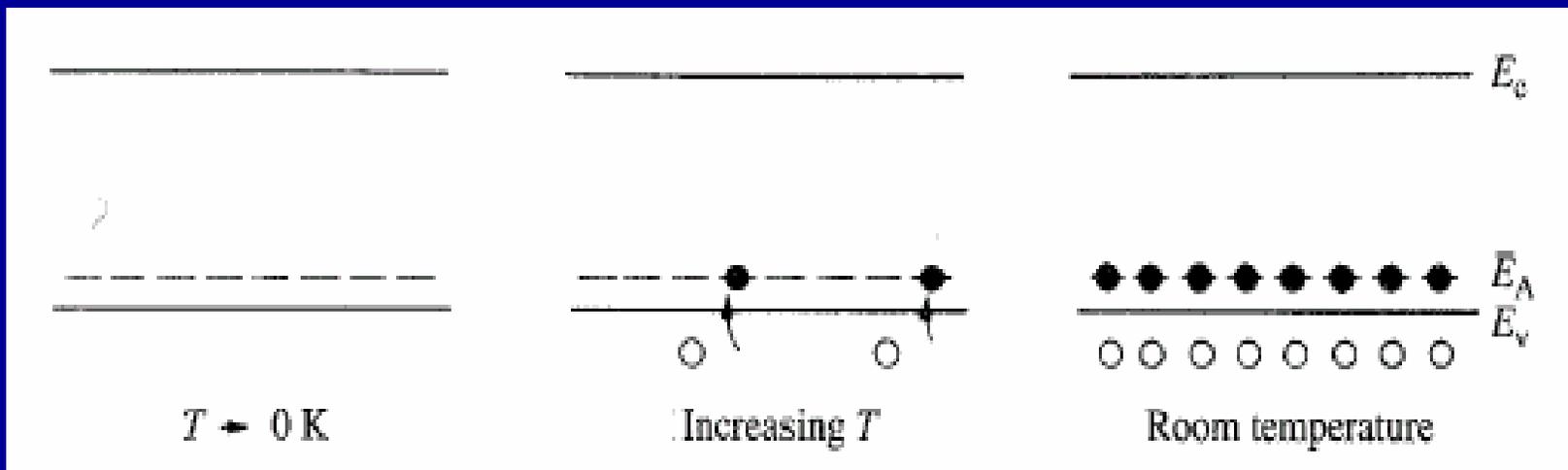
受主杂质掺杂又  
称为P型掺杂

能够为晶体提供未配对的电子空位（空穴）的杂质，称为受主杂质。受主杂质提供的空穴易于通过吸收附近其他的电子形成配对电子的方式，使得空穴在晶体中运动。受主杂质原子吸收其他电子后自身变成为带负电的离子。

## 3.2.2 施主和受主

### 2. 受主杂质和受主能级

#### 1) 受主杂质（从能带论的角度）

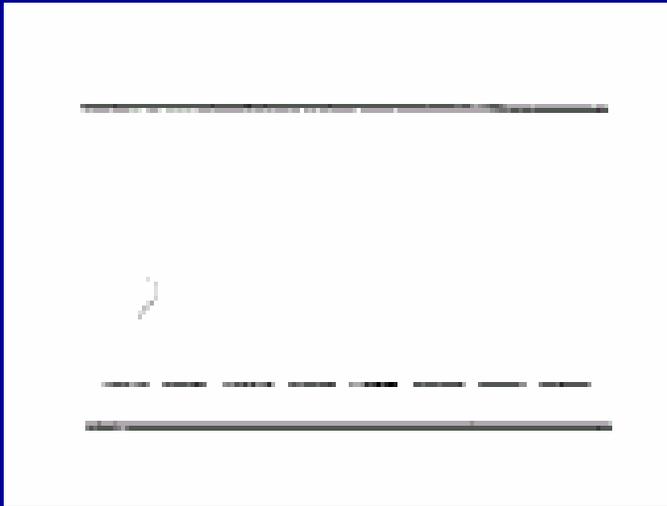


在四价的Si半导体中如果掺入三价的B原子，替代Si原子的位置后，在B原子的周围将形成一个电子的空位，该空位很容易吸引周围其他原子的电子过来形成共价键。显然，受主杂质的引入会在半导体能带中引入新的电子能级。可以将受主杂质等价于一个带负电的离子吸引一个带正电的空穴的模型，讨论受主杂质能级的情况。

## 3.2.2 施主和受主

### 2. 受主杂质和受主能级

#### 2) 受主能级



半导体中的受主杂质的作用可等价于一个带负电的离子吸引一个带正电的空穴（共价键电子空位）的模型：

电子空位是通过吸引周围的电子形成共价键的，因此，未形成共价键时的能量要比形成共价键时要高，受主能级较价带要高；

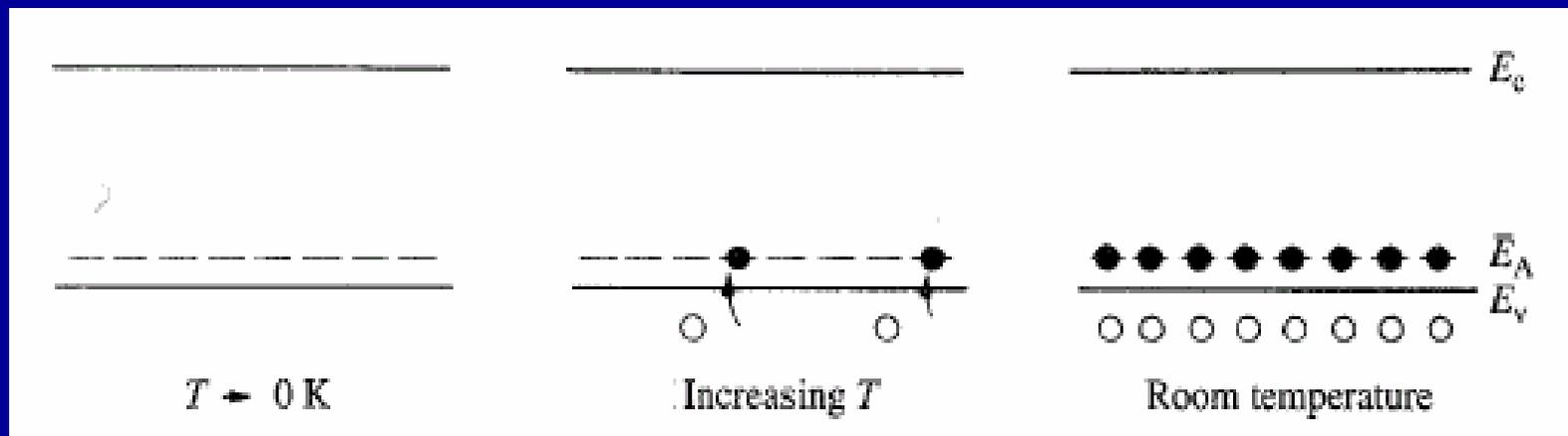
同时，由于对晶体中的电子存在吸引作用，因此，它的能级比导带低

受主掺杂的引入，将在禁带中引入未被电子占据的新的能级态。

## 3.2.2 施主和受主

### 2. 受主杂质和受主能级

#### 3) 受主杂质的电离和电离能



受主能级从价带接受电子成为带负电离子的过程称为受主杂质的电离。受主未电离前，受主能级没有电子占据，且显中性。

受主电离所需要的最小能量即为受主电离能，为价带顶与受主能级之差

$$\varepsilon_D = E_C - E_D$$

电离后，受主杂质呈负电性

受主杂质引入实际上在半导体禁带中提供了新的未占据电子的新的能级态

## § 3.2 非本征半导体

### 3.2.2 施主和受主

#### 3. 施主和受主的特征

对于Si中的P、As、B等杂质，其掺杂效应是唯一确定的，但对某些半导体杂质如GaAs中的Si、Si中的一些深能级杂质，则表现出可变的掺杂效应，即其既可能表现为施主特征，也可能表现为受主特征。

## § 3.2 非本征半导体

### 3.2.2 施主和受主

#### 3. 施主和受主的特征

##### 1) 施主的特征

未电离时，施主能级被电子占据，同时保持电中性；

电离后，施主能级释放电子并带正电；

通过杂质电离，能够向半导体提供导电载流子—电子

##### 2) 受主的特点

未电离前，受主能级没有电子占据，同时保持电中性；

电离后，受主能级接收电子并带负电；

通过杂质电离，能够向半导体提供导电载流子—空穴

### 3. 施主和受主的特征

#### 3) 施主杂质与受主杂质之比较

##### 1) 杂质的电性特征

- 未电离时：均为电中性
- 电离后：施主失去电子带正电，受主得到电子带负电

##### 2) 杂质能级电子占据特征

- 未电离：施主能级被电子占据，受主能级没有电子占据
- 电离后：施主能级没有电子占据，受主能级被电子占据

##### 3) 导电性能和载流子特征

- 掺入施主后：可提供电子，使得电子数大于空穴数
- 掺入受主后：可提供空穴，使空穴数大于电子数

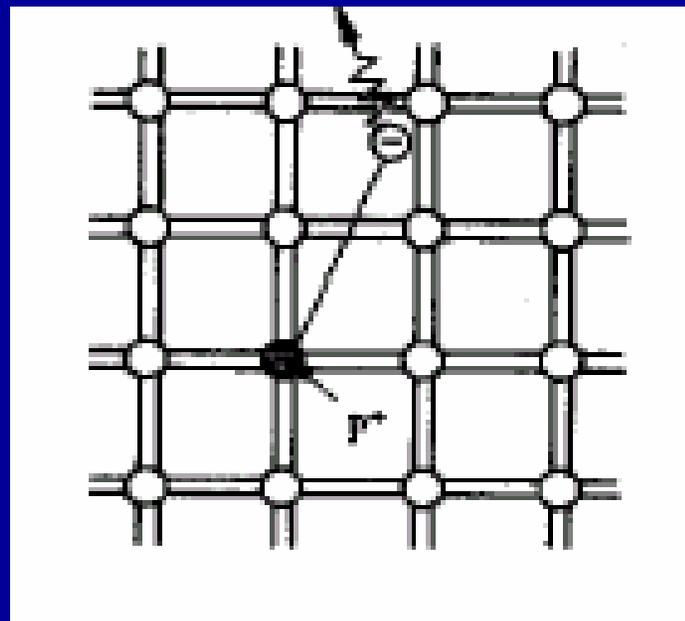
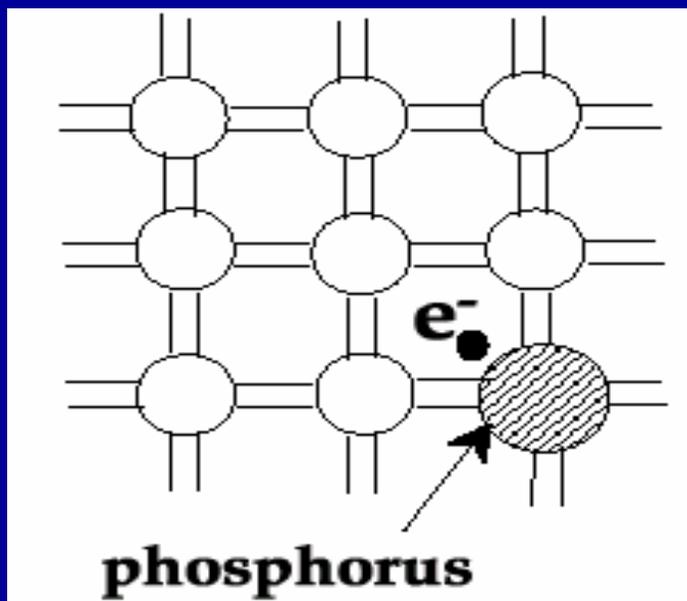
# 第三章 平衡态半导体的物理基础

## § 3.2 非本征半导体

### 3.2.3 N型半导体和P型半导体及载流子的浓度

- 进行施主掺杂（N型掺杂）的半导体称为N型半导体  
在N型半导体中，通常电子浓度高于空穴浓度；
- 进行受主杂质（P型掺杂）的半导体称为P型半导体  
在P型半导体中，通常空穴浓度高于电子浓度
- 半导体经过施主和受主掺杂后，杂质往往需要经过高温激活后，才能起到掺杂作用??

# N型半导体

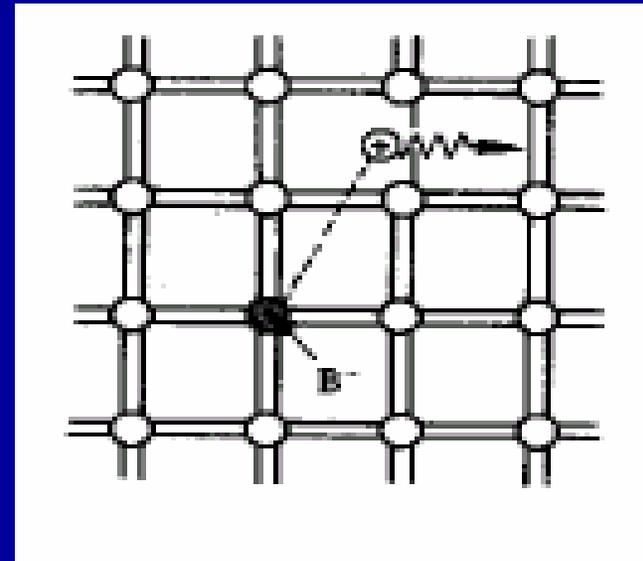
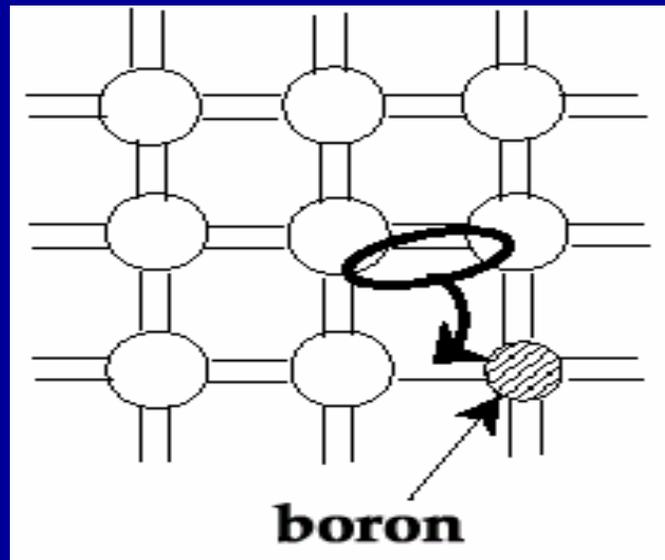


将导带中的电子等价为自由电子，未成键的剩余电子与P的相互作用等价为类氢原子电子与原子核的相互作用，根据类氢原子模型，可计算出施主杂质能级距导带底的能量差，即电离能：

$$E_B \approx -\frac{m_n^* q^4}{2(4\pi\epsilon_{Si}\epsilon_0\hbar)^2} = \frac{m_n^*}{m_0} \frac{1}{\epsilon_{Si}^2} E_{H1n=1} \approx -0.1eV$$

## P型半导体

类氢原子模型  
也可用来估算  
B原子杂质的  
电离能。



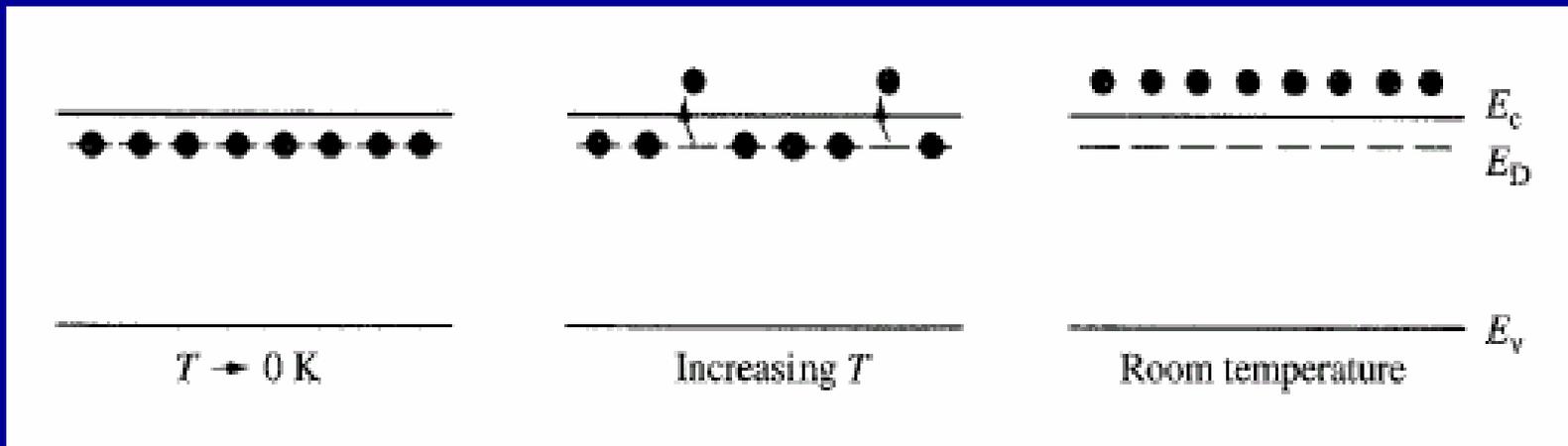
## N型和P型半导体

具体测量得到的不同杂质电离能的值

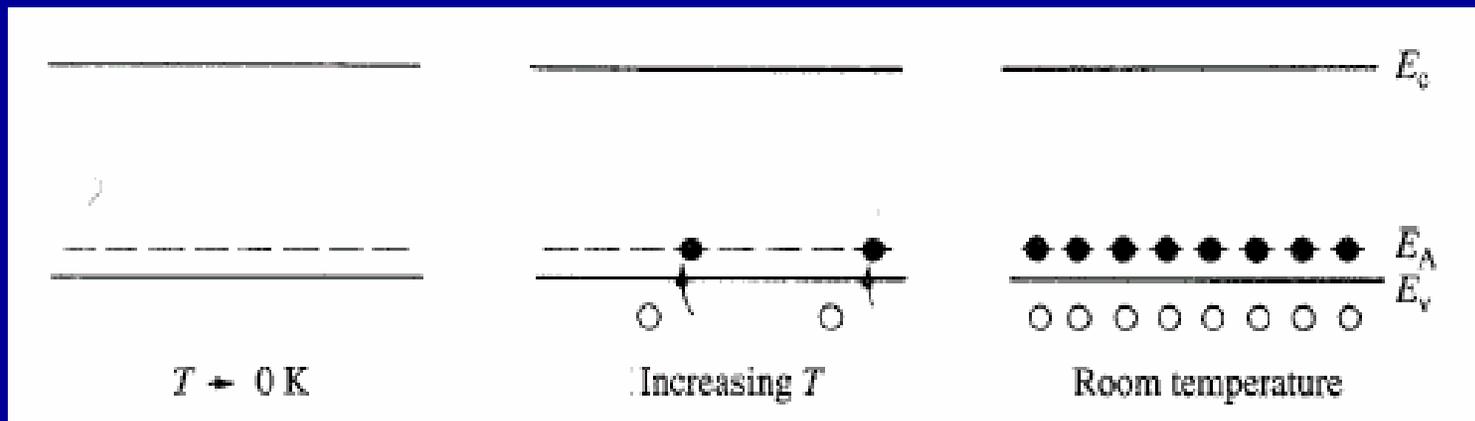
<i>Donors</i>	$ E_B $	<i>Acceptors</i>	$ E_B $
Sb	0.039 eV	B	0.045 eV
P	0.045 eV	Al	0.067 eV
As	0.054 eV	Ga	0.072 eV
		In	0.16 eV

- 杂质的二重性
- 能级的二重性

# N型和P型半导体中电子和空穴特征



N型掺杂未电离时，电子局域在施主能级上



P型掺杂未电离时，空穴局域在受主能级上

## § 3.3 费米能级

### 3.3.1 非本征半导体载流子浓度

在非本征的N型和P型半导体中，如果保持热平衡，仍然满足

$$n = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT}$$

$$p = N_V e^{-(E_f - E_V)/kT}$$

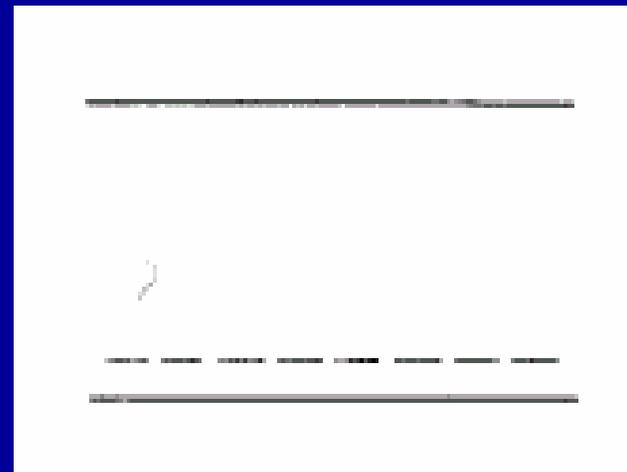
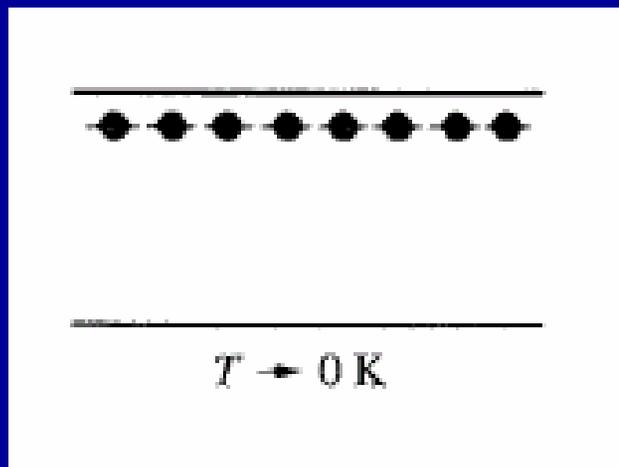
1) 在热平衡时，费米能级相同

$$np = n_i^2$$

2) 与本征情形不同在于

$$n \neq p$$

同时，费米能级随掺杂类型  
和浓度变化



## § 3.3 非本征半导体

### 3.3.1 非本征半导体载流子浓度

3) 本征费米能级可作为能量参考点, 由此, 电子和空穴的浓度公式可改写为:

$$n_0 = n_i e^{\frac{E_F - E_i}{kT}}$$

$$p_0 = n_i e^{\frac{E_i - E_F}{kT}}$$

其中

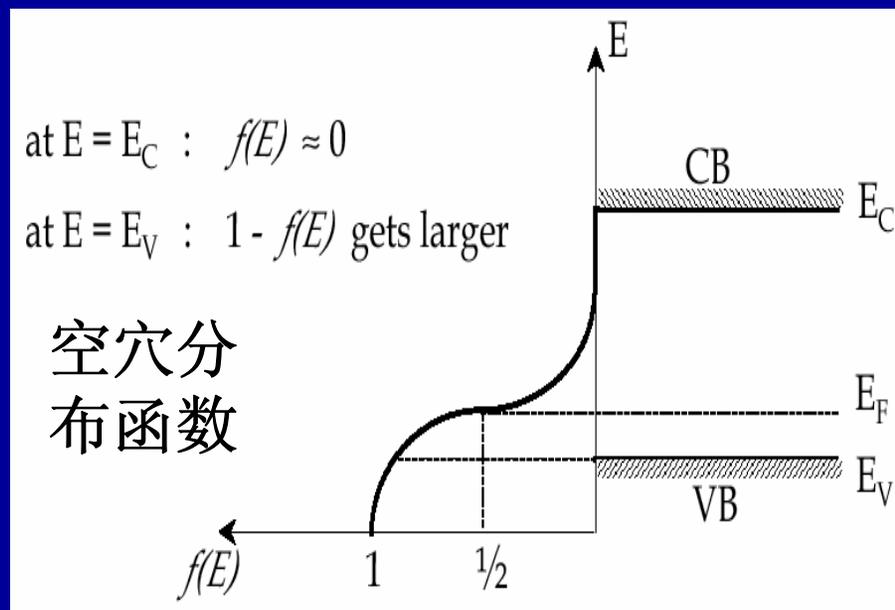
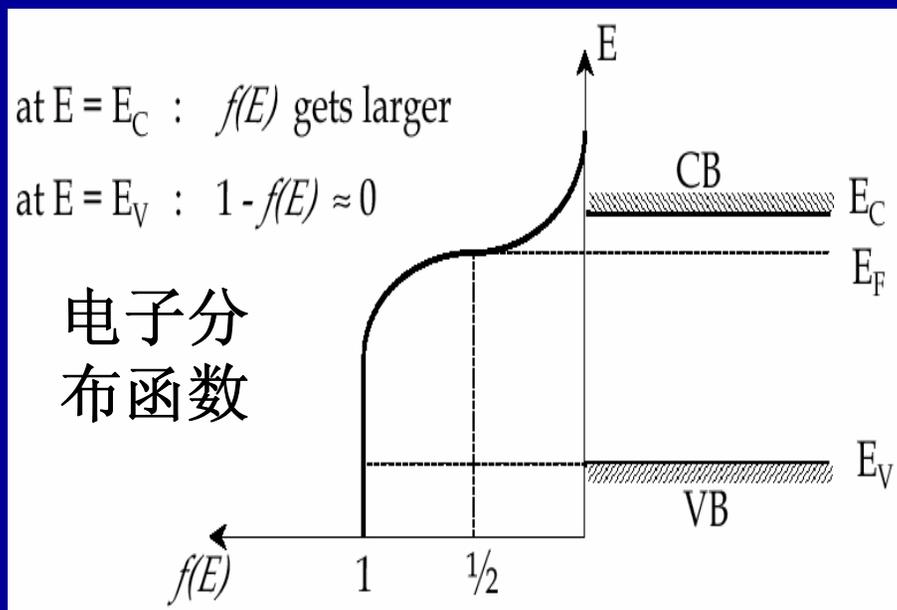
$$n_i = \sqrt{N_V N_C} e^{-E_g / 2kT}$$

一般, 在浅施主掺杂浓度大于本征载流子浓度的情形下, 多数载流子浓度主要取决于掺杂浓度

## § 3.3 非本征半导体

### 3.3.2 非本征费米能级

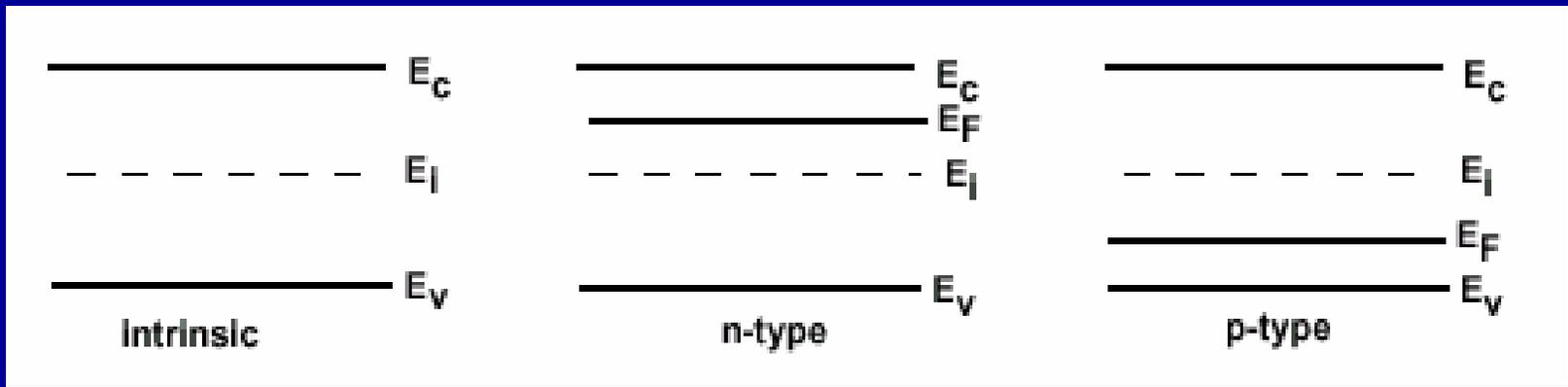
**N**型半导体中，导带中的电子除了来源于价带中的电子激发产生外，还可能来自于施主能级电子的电离，因此，电子变成多数载流子即 $n > p$ 。由于施主能级更靠近导带，因此比价带电子更容易被热激发到导带。根据载流子浓度公式，可以判定，在**N**型半导体中费米能级更靠近导带



## 3.3.2 非本征费米能级

### 费米能级的变化

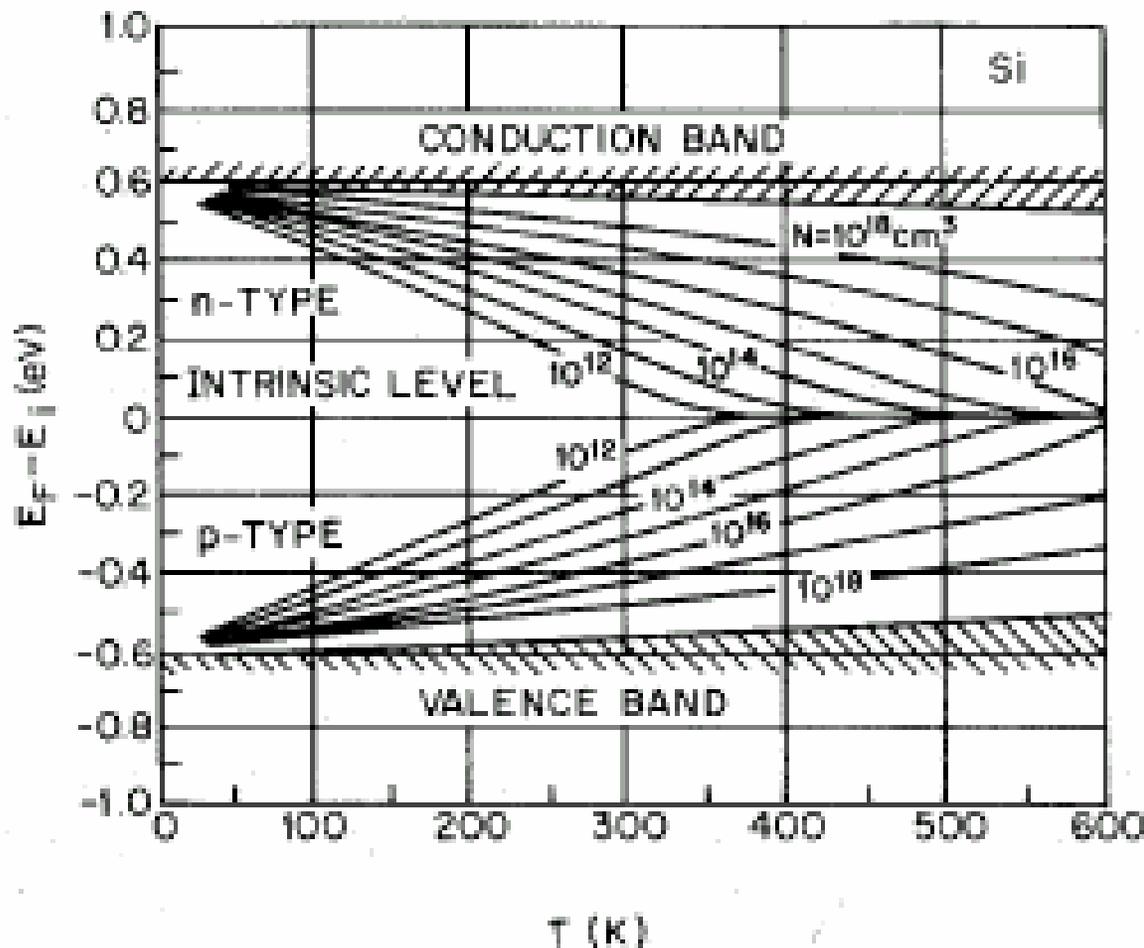
- 随掺杂浓度在禁带中上下变化
- 随施主杂质浓度增加费米能级向导带靠近，电子数增加
- 随受主杂质浓度增加费米能级向价带靠近，空穴数增加
- 随温度变化，费米能级表现出不同的变化趋势



### 3.3.2 非本征费米能级

费米能级的变化

$$E_i = E_f = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left( \frac{N_c}{N_v} \right)$$
$$= \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \left( \frac{m_p}{m_n} \right)$$



随温度增加，本征费米能级偏离禁带中央位置向导带方向移动；同时费米能级与本征费米能级靠近直至相同，发生本征激发；掺杂浓度高本征激发的温度高。

### 3.3.2 非本征费米能级

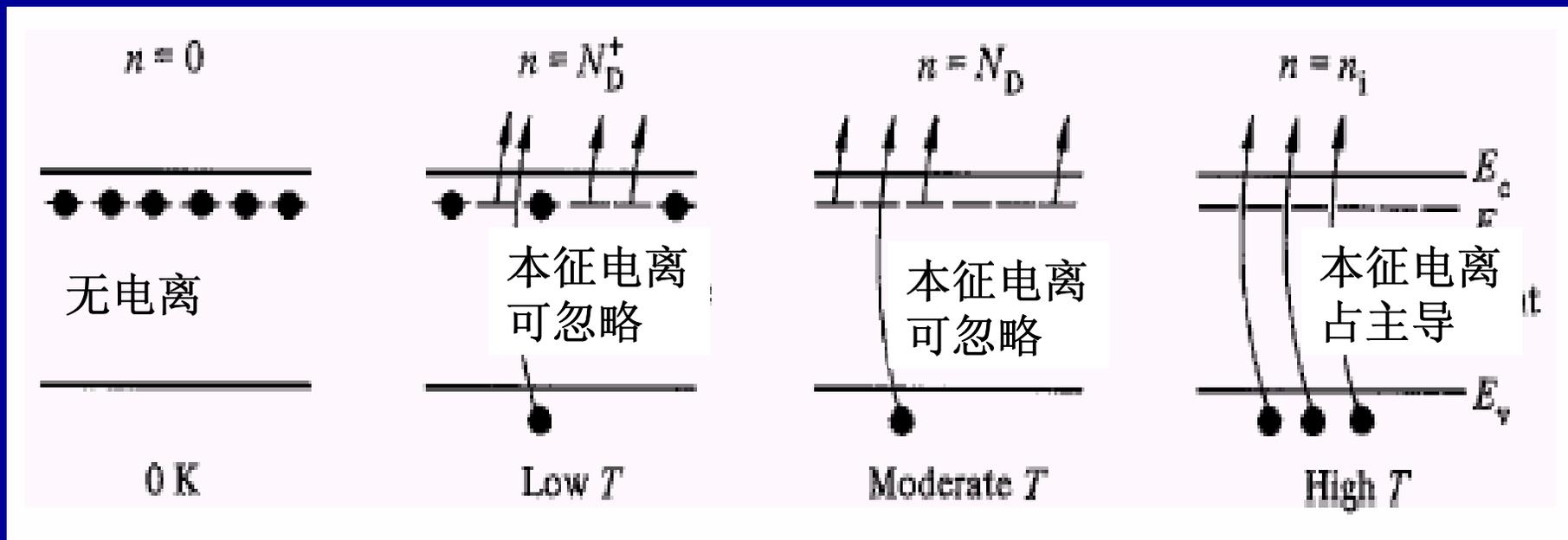
- 费米能级 $E_f$ 是一个非常重要的物理量
- 费米能级是反映电子在允许能级占据分布情况的标尺
- 此外，费米能级还代表了系统的热力学化学势
- 在热平衡下，系统的费米能级相同
- 如果系统的费米能级不同，则发生电子从 $E_f$ 高的部分向低的部分流动，直至相同，从而达到热平衡。

费米能级是分析半导体系统特性的基础

了解系统费米能级非常重要

### 3.3.3 电中性条件

#### 非本征载流子浓度与温度的关系



在不同温度下，杂质电离程度不同，载流子浓度也不同。在不同掺杂和电离条件下，半导体仍然保持电中性，满足电中性条件，这是分析费米能级随掺杂浓度和电离度变化的基础

### 3.3.3 电中性条件

实际上是电荷守恒原理的具体表现形式

#### 1) 施主掺杂情形 ( $N_D$ )

$$n = p + n_D^+ = p + N_D - n_D$$

系统允许能级态包括导带、价带和施主能级；

**0K**时，价带和施主能级全部占据

#### 2) 受主掺杂情形 ( $N_A$ )

$$p = n + p_A^- = N_A - p_A + n$$

系统允许能级态包括导带、价带、受主能级；

**0K**时，价带全满，受主能级和导带全空

#### 3) 施主掺杂 $N_D$ 和受主掺杂 $N_A$ 情形

$$n + N_A - p_A = p + N_D - n_D$$

系统允许能级态包括导带、价带、施主能级、受主能级；

**0K**时，价带全满，导带全空，施主、受主能级发生补偿

### 3.3.3 电中性条件

#### 杂质能级的电子和空穴

1) 电子占据施主能级的概率

$$f_D(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_f}{kT}\right)}$$

2) 施主能级上电子的浓度

$$n_D = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_f}{kT}\right)}$$

3) 空穴占据受主能级的概率

$$f_A(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_f - E_A}{kT}\right)}$$

4) 受主能级上空穴的浓度

$$p_A = \frac{N_A}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_f - E_A}{kT}\right)}$$

### 3.3.3 电中性条件

#### 杂质能级的电子和空穴

##### 5) 电离施主的浓度

$$n_D^+ = N_D - n_D = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_f}{kT}\right)}$$

##### 6) 电离受主的浓度

$$p_A^- = N_A - p_A = \frac{N_A}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_f - E_A}{kT}\right)}$$

### 3.3.4 费米能级的温度变化关系

#### ➤ 低温弱电离区

只有少数施主杂质能级的电子电离进入导带，大部分杂质没有电离，因此，费米能级在施主能级之上

电中性条件简化为： $n = n_D^+ = N_D - n_D$

$$n = N_D - n_D = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_f}{kT}\right)} \approx \frac{N_D}{2} \exp\left(-\frac{E_f - E_D}{kT}\right)$$

$$n = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT}$$

$$E_f = \frac{E_C + E_D}{2} + \left(\frac{kT}{2}\right) \ln\left(\frac{N_D}{2N_C}\right)$$

### 3.3.4 费米能级的温度变化关系

#### ➤中等电离和强电离区

$E_F$ 接近 $E_D$ 的中等电离和 $E_F$ 在 $E_D$ 以下的强电离

电中性条件:  $n = p + N_D - n_D = p + n_D^+ \approx n_D^+$

此时:

$$n_D^+ = N_D - n_D = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_f}{kT}\right)}$$

可得:

$$E_f = E_D + kT \ln\left(\frac{\sqrt{4 + \chi^2} - \chi}{4\chi}\right)$$

其中

$$\chi = \left(\frac{N_C}{2N_D}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{\epsilon_D}{2kT}\right)$$

### 3.3.4 费米能级的温度变化关系

#### ➤ 强电离

杂质全部电离情形，即

$$n = N_D$$

$$n = N_C e^{-(E_C - E_f)/kT}$$

可求得

$$\begin{aligned} E_f &= E_D + kT \ln \left( \frac{1}{4\chi^2} \right) \\ &= E_C + kT \ln \left( \frac{N_D}{N_C} \right) \end{aligned}$$

对应于  $\chi \gg 1$

$E_f$  在  $E_D$  以下，随温度上升而下降

### 3.3.4 费米能级的温度变化关系

#### ➤ 过渡区

杂质全部电离，但随温度增加，空穴浓度增加，电中性条件为：

$$n = N_D + p$$

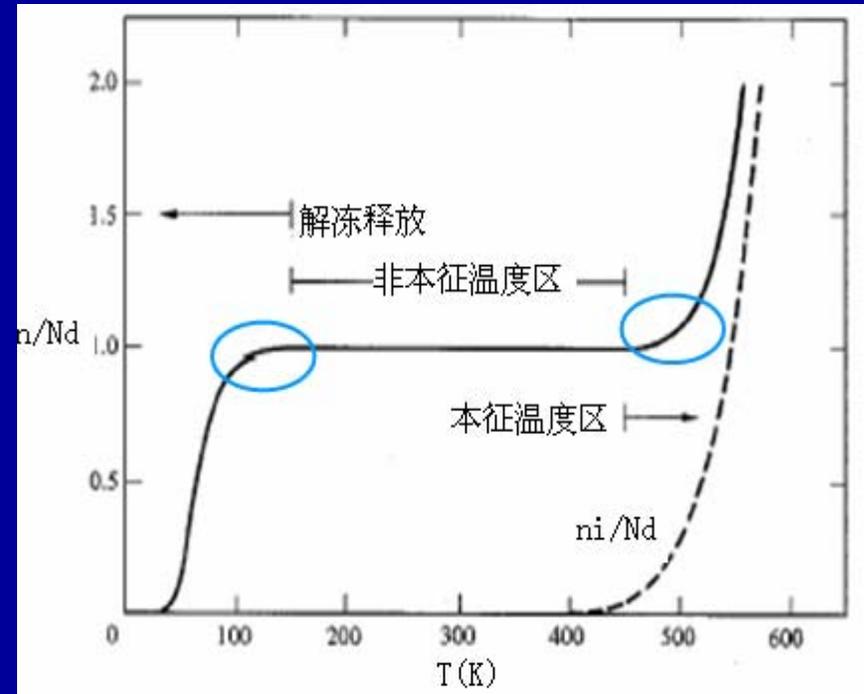
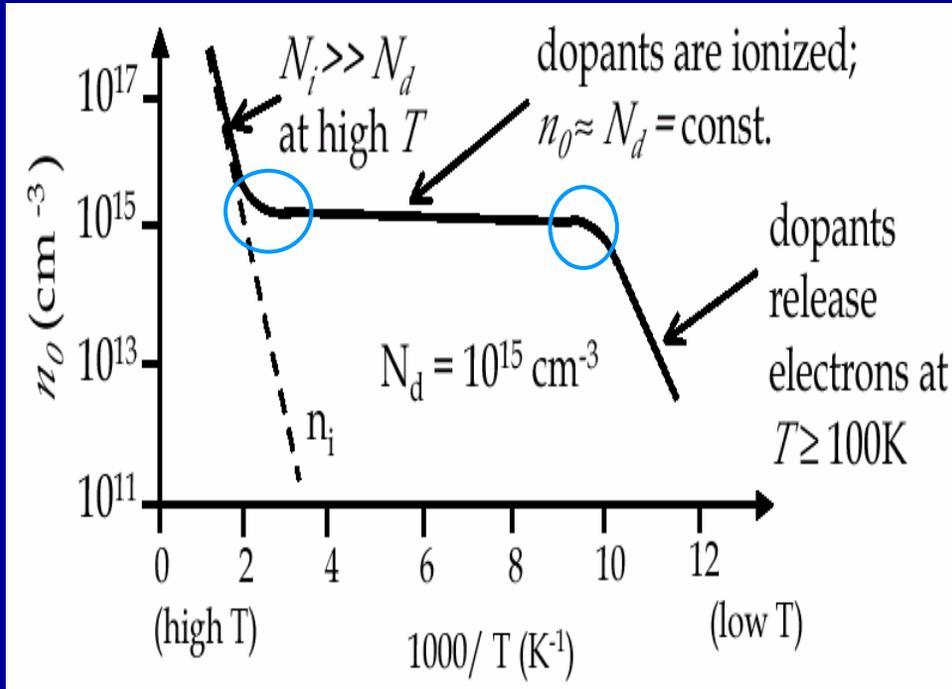
$E_f$  向本征费米能级靠近

#### ➤ 本征电离区

本征载流子浓度远超过掺杂浓度

$$n = p$$

# 9. 非本征半导体载流子浓度随温度变化关系



## § 3.5 简并半导体

重掺杂半导体情形，费米能级接近或进入导带或价带，电子和空穴不满足玻耳兹曼分布条件，半导体可看作是导体

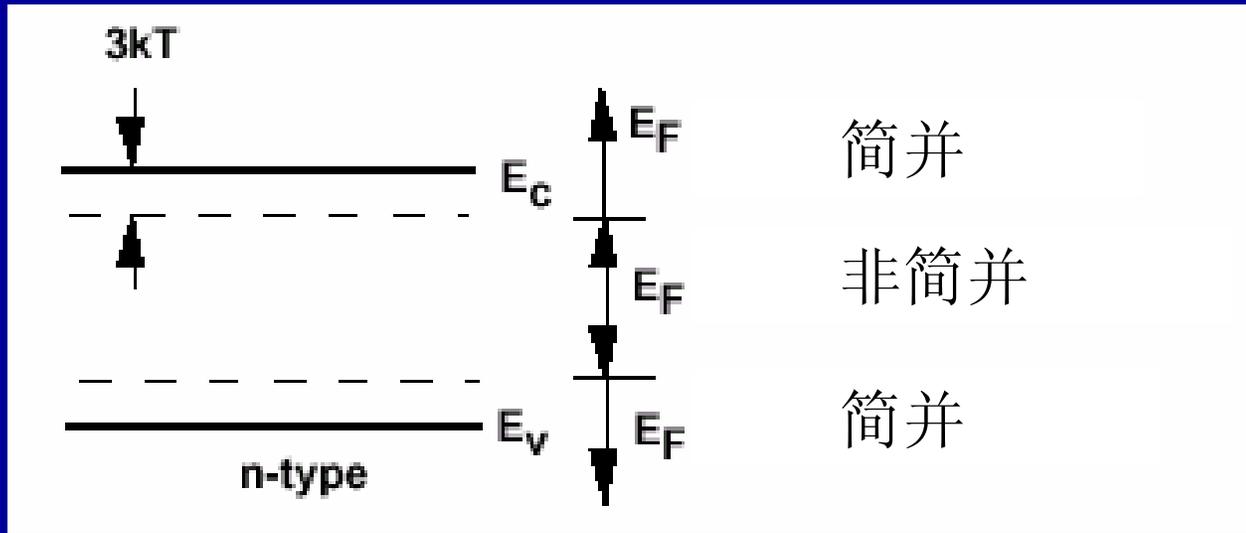
### 1. 简并半导体的载流子浓度

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

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

## 2. 简并化条件

- $N_D$  接近和大于  $N_C$



- $N_D$  与杂质电离能有关，杂质电离能越小，发生简并的杂质浓度越小

- 简并化发生在一个温度范围，杂质浓度越大，发生简并的温度范围越宽

## § 3.5 简并半导体

### 3. 简并时杂质未充分电离情形

CMOS工艺中，多晶硅栅的重掺杂注入需要在高温下激活。

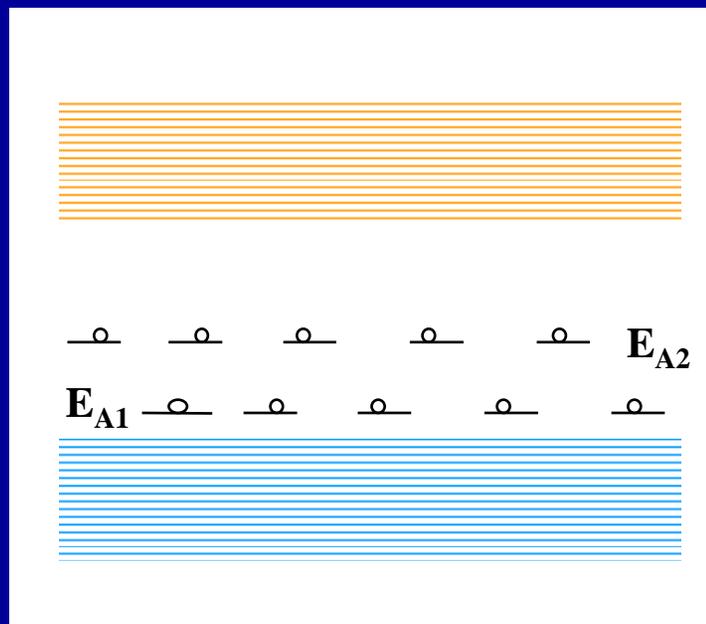
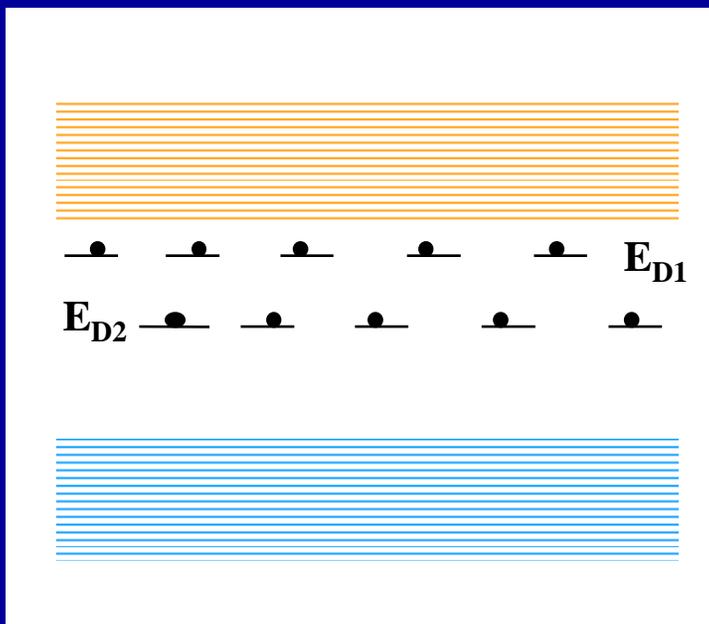
### 4. 杂质能带

杂质浓度增加，杂质间相互作用增强，杂质能级可展宽为杂质能带

简并时，杂质能级展宽为杂质能带，并进入到导带或价带，形成新的简并能带，使得禁带宽度变窄

## 3.5.1 半导体的深能级杂质

➤ 半导体中掺入杂质后会在禁带中引入新的能级，如果掺入的杂质的电离能很小，则称该杂质为浅能级杂质，杂质的电离能很大，则称为深能级杂质



### 3.5.1 半导体的深能级杂质

- 浅能级施主的能级靠近导带，浅能级受主的能级靠近价带；深能级施主能级则往往位于禁带下部分，深能级受主能级位于禁带上半部分
- 多重能级特性：一些深能级杂质会产生多次电离，从而产生多重能级；
- 由于二次电离是在一次电离的基础上实现的，因此，一次电离能总是小于二次电离能

## 3.5.1 半导体的深能级杂质

对于深能级施主有：

$$N_D^+ = N_D (1 - f_D(E)) = \frac{N_D}{1 + e^{\frac{E_f - E_D}{kT}}}$$

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

$$n = N_C e^{-\frac{E_C - E_f}{kT}}$$

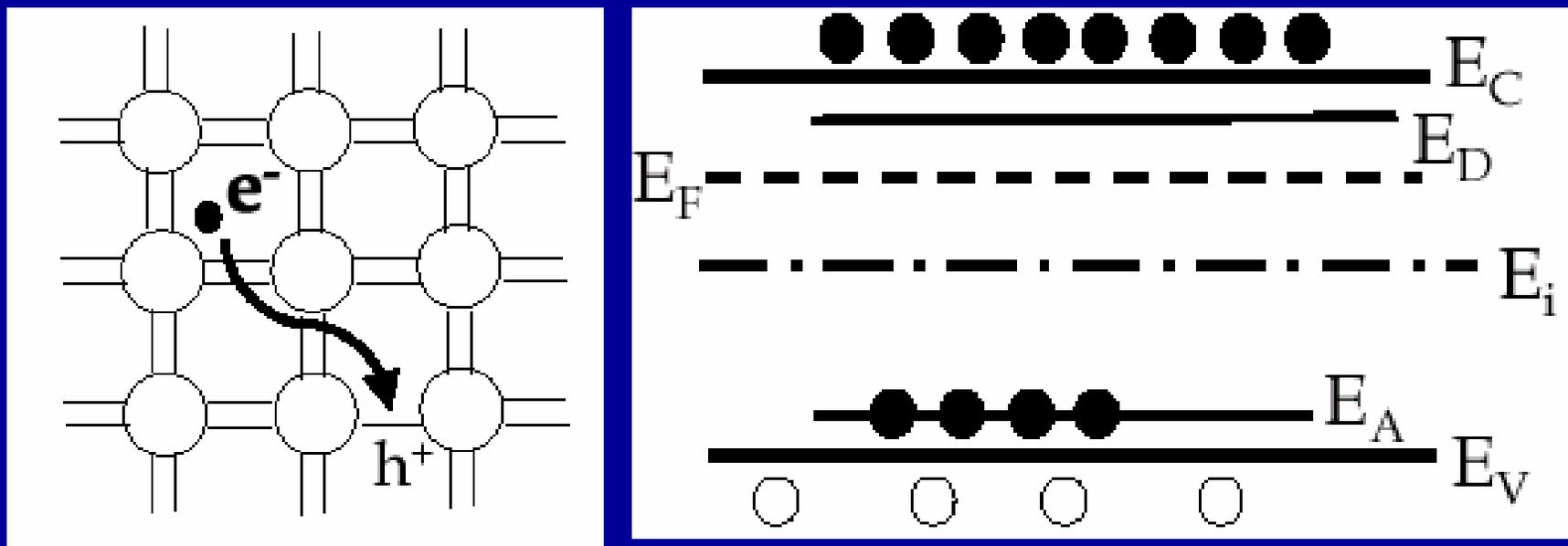
对于深能级受主同样有：

$$N_A^- = N_A f_D(E) = \frac{N_A}{1 + e^{\frac{E_A - E_f}{kT}}}$$

$$p = N_A^- + n = N_A^- + \frac{n_i^2}{p}$$

$$p = N_V e^{-\frac{E_f - E_V}{kT}}$$

## 3.5.2 半导体掺杂的补偿效应



- 1) 施主浓度大于受主浓度时，半导体呈N型
- 2) 受主浓度大于施主浓度时，半导体呈P型
- 3) 半导体中同时存在施主和受主杂质时，补偿作用首先起作用
- 4) 利用半导体杂质的补偿作用，可以改变半导体的导电类型

## § 3.5 深能级杂质和多重能级杂质

### 3.5.3 深能级杂质对载流子浓度和电导率的影响

#### Au在Si中的掺杂作用

- 1) 元素Au杂质在Si中既可起施主作用，又可起受主作用，称为两性杂质
- 2) 如果在Si中掺入Au的同时，掺入浅的受主杂质，则Au呈施主作用，反之，若同时掺入施主杂质，则Au呈受主作用
- 3) Au在Si中掺杂特性举例