

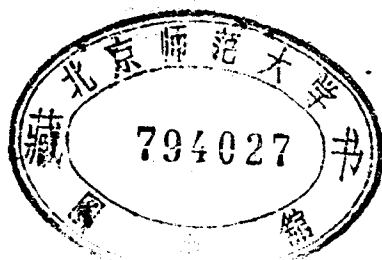
半导体中的深能级杂质

〔美〕A. G. 米尔恩斯 著

张月清 何宇亮 陈存礼 译

甘炳皇 校

JY1/115/15



科学出版社

1981

内 容 简 介

杂质问题是半导体的最重要、最基本的问题之一。深能级杂质和半导体的发光、光电、电学、热学、力学等性质关系极大，并在空间电荷限定电流效应、复合波振荡、自振荡、杂质碰撞电离效应等方面都起着关键作用。

本书是一本论述半导体中杂质问题的专著，系统地总结了1973年以前有关半导体杂质的研究工作，较深入地讨论了锗、硅、III-V族化合物、II-VI族化合物中的深能级杂质问题。本书可供半导体物理、器件、材料方面的科研工作者，以及高等院校有关专业的教师、研究生和高年级学生参考。

A. G. Milnes

DEEP IMPURITIES IN SEMICONDUCTORS

Wiley 1973

半导体中的深能级杂质

[美] A. G. 米尔恩斯 著

张月清 何宇亮 陈存礼 译

甘炳皇 校

*

科学出版社出版

北京朝阳区门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1981年5月第一版 开本：787×1092 1/32

1981年5月第一次印刷 印张：17 5/8

印数：0001—3,800 字数：403,000

统一书号：13031·1550

本社书号：2125·13—3

定价：2.70 元

JY1/115/15

序 言

半导体能隙中的深能级杂质在器件中可能产生一些很有用的效应。众所周知,利用金可以在要求毫微秒开关时间的硅 pn 结中产生快复合作用。能隙光导体的高量子增益,通常可以通过深杂质能级对一种载流子的俘获作用来实现。杂质光电导性是半导体中深能级杂质效应的另一个很重要的应用。业已探明,硅和锗中起这种作用的是金、锌、汞、镉和其它中心。距带边最近邻、小于 0.1 电子伏的能级杂质,在很低温度下起深中心的作用,并能在波长从 10 到 100 微米范围内用作杂质光电导探测器。含有深能级杂质的半导体也能在热敏电阻型应用中用作温度灵敏元件。

在发光二极管中,深能级杂质中心可能是决定发射的辐射波长的因素。在磷化镓二极管的红光发射中,“锌-氧”对是造成已观察到的非常高的发射效率(300K 时超过 8%)的杂质。在半绝缘性砷化镓中,深杂质中心氧和铬是造成已观察到的高阻的原因。这种材料有某些特殊的用途,例如作为微波集成电路的介质衬底。

深能级杂质还能在半导体中产生各种各样引人入胜的效应,但还没有证实有实用价值。如果在大块的高阻砷化镓或硅上加上若干脉冲,则可观察到计数效应。在硅中已观察到兆赫频率的振荡效应;在掺氧-铜的 GaAs 中已观察到低频的、与电场有关的陷阱撤空畴的振荡效应。人们还观察到各种各样的其它空间电荷限定电流效应和双端负阻效应,但还需要研究它们的实际用途。还发现了深能级杂质对结以及大块半

导体的应力灵敏度有很大影响,因而可以用作势能应变计。

深能级杂质,除了上述很有价值的效应外,也还存在一些不能令人满意的方面。例如,在高能隙化合物半导体中,深能级杂质是不可避免的,它们可能造成不应有的俘获、振荡和负阻效应,而这些有可能是使这些材料的用户遭到重大挫折的原因。通过对精心制作的半导体(例如,硅和锗)中深能级杂质的研究,对所涉及的物理学得到了合理了解。这种了解有助于解释化合物半导体中可能存在多于一个深杂质能级时产生的更复杂效应。

半导体中的深能级杂质效应,作为研究课题已有二十多年的历史了,已发表的论文不仅数量多,而且范围相当广泛。但除了一些评论性文章外,还没有对这个课题进行过总结。为了使本书的论述不超出合理范围,必须把这种论述只限于硅、锗和 III-V 族化合物半导体中的深能级杂质效应。有关研究 II-VI 族化合物半导体中深能级杂质效应的现状,可以从现有的关于光电导性、电致发光和 II-VI 族半导体工艺方面的评论性文章得到了解。本书不讨论由辐照和离子轰击所造成的缺陷中心。这方面的内容可参阅有关会议论文集和许多评论性文章。

本书内容涉及以下几个方面: 1. 深杂质的能级和俘获截面。 2. 大块材料和 p-n 结结构中的寿命、复合和俘获效应。 3. 电容效应。 4. 空间电荷限定电流效应。 5. 复合波和慢畴效应。 6. 热激发射研究。 7. 深能级杂质的碰撞电离。 8. 跳跃和杂质带电导效应。

本书一般避免详细的数学推导,这些推导结果可参阅原始文献。这样,就可以使全书论点突出,而不为细节所冲淡。

A. G. 米尔恩斯

1973 年 4 月 于宾夕法尼亚州匹兹堡市

目 录

第一章 能级概念.....	1
1.1 浅能级杂质	1
1.2 浅能级杂质电离能的计算	3
1.3 深杂质能级问题	6
1.4 深杂质能级	8
第二章 硅和锗中的深杂质能级.....	12
2.1 硅: I、II 和 III 族杂质	17
2.2 硅中含有 Ni, Pd, Pt, Co, Fe, Mn, Cr 和 W	26
2.3 固溶度与分布系数的关系	28
2.4 硅中含有 VI 族杂质 O, S, Se 和 Te	34
2.5 硅中含有 IV 族元素 C, Ge 和 Sn	37
2.6 硅中含有其它杂质 Li, N, 稀土族和辐照引发能级	39
2.7 掺在锗中的杂质	42
2.8 锗中含有 II 族杂质 Be, Zn, Cd 和 Hg	44
2.9 锗中掺有 Li, Cu, Ag, Au 和其它 I 族元素	45
2.10 锗中掺有 Ni, Pt, Co, Fe, Mn 和 Cr	48
2.11 锗中掺有 VI 族元素杂质: O, S, Se 和 Te	50
2.12 锗中的其它杂质	50
第三章 砷化镓和其它 III-V 族化合物中的深杂质能级...	52
3.1 GaAs 中含有 I 族杂质 Li, Na, Cu, Ag 和 Au	53
3.2 GaAs 中含有 II 族杂质 Be, Mg, Zn, Cd 和 Hg	61
3.3 GaAs 中含有 IV 族杂质 C, Si, Ge 和 Sn	63
3.4 GaAs 中含有 VI 族杂质 O, S, Se 和 Te	67
3.5 GaAs 中含有过渡族元素 Cr, Mn, Fe, Co, Ni 和 V	71
3.6 GaAs 中稀土族元素的研究 Tm 和 Nd	73

3.7	GaP 和 InP 中的深能级杂质	74
3.8	InSb, InAs, GaSb 和 AlSb 中的深能级杂质	81
第四章	深能级杂质的稳定态统计学	88
4.1	部分补偿的半导体统计学, $N_D > N_A$	89
4.2	简并度因子	92
4.3	具有两个独立施主能级的半导体	95
4.4	带有两重性的掺杂剂	97
4.5	多重能级杂质的广义统计学	98
第五章	陷阱概念: 强陷阱模型和场致效应	107
5.1	Lax 的级联俘获模型	110
5.2	电场对由中性陷阱发射载流子的影响	116
5.3	其它场效应	121
第六章	在大块材料中作为复合中心和陷阱的深能级杂质	133
6.1	单能级的复合和产生	133
6.2	寿命的进一步分析	139
6.3	掺镉硅中的寿命	143
6.4	表面复合效应	149
6.5	含有一个电子陷阱和一个复合中心的半导体中的复合作用	152
6.6	俘获和复合动力学的一般考虑	155
6.7	掺金硅的瞬态寿命等值图	160
第七章	含深能级杂质的大块半导体中的光电导性和瞬态效应	164
7.1	与单一深受主能级有关的非本征光电导性	164
7.2	杂质光电导性中的瞬态效应	173
7.3	掺银硅的光电导性衰减	176
7.4	由“带隙宽度”能量的光引发的本征光电导性	187
7.5	涉及两种波长光的光电导性效应	191
7.6	光电导探测器的性能	201

第八章	半导体结中深能级杂质的复合和俘获效应·····	205
8.1	由 pn 结中深的产生-复合中心所引起的产生和复合电 流(Sah-Noyce-Shockley 模型)·····	206
8.2	深能级杂质对二极管特性影响的实验观察 ·····	211
8.3	在深能级杂质存在的情况下结电容随频率的变化 ·····	219
8.4	耗尽区中电容和反向电流的瞬态变化 ·····	248
8.5	其它结型结构中深能级杂质效应 ·····	254
第九章	陷阱的热激电流的研究·····	260
9.1	准平衡分析 ·····	261
9.2	通用公式 ·····	262
9.3	快的重俘获分析 ·····	263
9.4	一般分析 ·····	264
9.5	数值估计 ·····	266
9.6	从起始上升曲线的斜率求能级 ·····	271
9.7	两个陷阱能级的相互作用 ·····	275
9.8	硅的若干实验研究 ·····	278
9.9	热激电流的其他实验研究 ·····	293
9.10	电场对 TSC 测量的影响 ·····	300
9.11	结耗尽区中的热激电流 ·····	303
第十章	深能级杂质的寿命和俘获截面的测量方法·····	307
10.1	现有方法的回顾 ·····	307
10.2	光电磁效应 ·····	310
10.3	扩散长度和漂移技术 ·····	318
10.4	结耗尽技术 ·····	321
10.5	深能级杂质的噪声研究 ·····	323
10.6	硅中的俘获截面 ·····	330
第十一章	含深能级杂质的半导体中空间电荷限定电 流的研究·····	342
11.1	Ashley-Milnes 空间电荷状态 ·····	344
11.2	深能级杂质的密度梯度效应 ·····	361

11.3	在双注入状态中细丝状物的形成	366
11.4	作为 GaAs 中双注入阈值的一个因素——光学反馈 ...	374
11.5	双注入负阻特性的可能用途	379
第十二章	高阻深能级杂质半导体中陷阱控制畴的传播 和其他振荡现象	382
12.1	由场增强俘获作用所产生的畴的分析	385
12.2	与畴振荡实验观测结果的关系	399
12.3	在硅 <i>pin</i> 结构中由深能级引起的振荡现象	407
12.4	复合波振荡现象	411
12.5	其它振荡形式	412
第十三章	深能级杂质的电场碰撞电离作用	413
13.1	硅中铜、镍和金的碰撞电离模型	414
13.2	实验研究	423
13.3	在高密度碰撞中心下的重迭效应	430
13.4	小结	432
第十四章	与深能级杂质有关联的杂质带电导和跳跃 ...	433
14.1	杂质带电导	434
14.2	跳跃电导率及其与频率的关系	439
14.3	与深能级杂质的关系	446
	符号	447
	参考文献	458

第一章 能级概念

本书主要论述在各种输运和注入条件下深能级杂质对半导体的复合和产生性能的影响。首先,我们概略地复习一下有关计算半导体能隙中杂质能级的知识,就我们的目的来说,没有必要非常详细地去探讨业已提出的各种模型。确实,还没有在定量方面特别成功的很深能级杂质模型。然而,为了解后面几章所处理的论题,有必要作一些扼要重复。首先研究浅杂质能级的电离能,然后再研究如何修改这些处理方法,以便应用于较深杂质能级的问题。

1.1 浅能级杂质

对于 IV 族半导体 Si 和 Ge, 用 P、As 和 Sb 这类杂质替代基质原子, 就可以产生浅施主。V 族元素的外壳层具有五个电子, 其中四个用在替代式的共价键中, 每个原子余下的另外一个电子起导电作用。在很低温度下 (例如 4K), 这个电子仍继续受杂质原子束缚。电离能 E_i 是把电子释放到导带所需要能量的量度; E_i 可由霍尔测量来确定, 它给出热致释放的载流子数与温度的函数关系。电子密度 n 与温度的关系通常是 $\exp(-E_i/kT)$ 形式, 式中 k 是玻耳兹曼常数, T 是绝对温度, 测定 E_i 的另一种方法是测量从杂质原子释放电子所需的红外光子的能量。

采用周期表中第 III 族元素, 诸如 B, Al 和 Ga 这类替代式杂质, 就可以在 Si 和 Ge 中获得浅受主。这些杂质需要一个

额外电子来满足共价键的要求,因此除在最低温度外,它都能从邻近的基质原子获得一个电子,从而产生一个空穴.采用霍耳方法或者上述的光学方法,就能测定相对于价带的激活能.表 1.1 列出了 Si 和 Ge 电离能的实验数据.

表 1.1 硅和锗中浅能级杂质的电离能(引自 Kohn, 1957)

	杂质元素	E_i (电子伏)	
		热学方法	光学方法
硅中	施主		
	Li	0.033	
	P	0.044	0.045
	As	0.049	0.053
	Sb	0.039	0.043
	Bi	0.069	
	受主		
	B	0.045	0.046
	Al	0.057	0.067
	Ga	0.065	0.071
锗中	In	0.16	0.154
	施主		
	P	0.0120	
	As	0.0127	
	Sb	0.0096	
	受主		
	B	0.0104	
	Al	0.0102	
	Ga	0.0108	
	In	0.0112	

从表 1.1 中可以看出, Ge 中所有浅施主和浅受主的电离能很接近,约为 0.011 电子伏.至于硅,浅施主和浅受主趋向于 0.04 到 0.07 电子伏范围,只有铋例外,因为它比其它杂质深得多.光学方法与热学方法的测量结果相当一致.

从红外吸收研究可以推断出载流子从杂质基态到仍然受束缚的受激能级的跃迁过程。这对于把浅能级掺杂的半导体作为长波长红外传感器的使用者，以及把这些作为检验他们模型的成功程度基准的理论工作者都是十分重要的。

1.2 浅能级杂质电离能的计算

一个简单的有效质量模型能够用来近似地计算电子对象 As^+ 这样的施主杂质的束缚能。根据 Mott 和 Gurney(1940) 及 Smith(1958) 的著作，作用在晶体中很远位置上的一个自由电子的力 F ，几乎等于由位于 As^+ 离子上的单个正电荷所产生的力。力 F 可表示为

$$F = \frac{e^2}{4\pi\epsilon r^2}, \quad (1.1)$$

式中 r 是电子距 As^+ 离子的距离， ϵ 是晶体的介电常数。上式只有在 r 大于两个或三个晶格间距的情况下才是有效的。如果 r 是最近邻距离的数量级，那末额外电子就会明显地干扰束缚电子，式(1.1)就不再成立了。然而，当 ϵ 很大时，这样小的 r 值只具有很微弱的影响。现在可以把力 F 看作是作用在电子上的“外”力，而电子则被看作是在理想晶体中运动。于是，我们把它当成一个在场 F 中运动着的有效质量为 m^* 的电子加以考虑。这时问题被简化成氢原子问题，我们可由

$$E_n = \frac{m^* \epsilon_0^2 E_H}{m_0 n^2 \epsilon^2} = \frac{(m^*/m_0) \epsilon_0^2}{n^2 \epsilon^2} \times 13.5 \text{ 电子伏} \quad (1.2)$$

得到束缚能量为 E_n 的一系列能级，式中 n 是整数， ϵ_0 是自由空间的介电常数。

当考虑到 Si 和 Ge 的能带偏离球形对称时，需要对这个简化模型进行修正。这种修正带来不少麻烦，本书不再考虑

它。然而,如果我们根据迁移考虑,取硅中电子的有效质量为 $m^* = 0.4 m_0$, $\epsilon/\epsilon_0 = 12$, 我们得到 $E_n = 0.04/n^2$ 电子伏。对于最低能态,由此得出 $E_1 = 0.04$ 电子伏。如我们从表 1.1 看到的一样,实验数值在 0.033 到 0.069 电子伏范围,具体数值视特定施主杂质而定。

对于 Ge 来说,观察到的数值约为 0.011 电子伏,为了从式(1.2)得到这个数值,必须假定 $m^* = 0.2 m_0$ 。但从迁移率考虑,这个假定是不能接受的。

人们特别重视估计受杂质中心束缚的电子或空穴波函数的扩展范围。它的一个度量是与类氢波函数相对应的“第一玻尔轨道半径” a_n 。 a_n 由

$$a_n = \frac{(m_0/m^*) \epsilon a_0 n^2}{\epsilon_0} \quad (1.3)$$

给出,式中 a_0 是氢的第一玻尔轨道半径(等于 0.53×10^{-8} 厘米)。对于 Ge 中的 V 族施主, $a_1 = 80 a_0$, 所以我们看到波函数的扩展遍及许多晶格间距。在这种情况下,可以看出,当 r 是 a_0 数量级时,场的贡献不大。这就证实了在 E_n 的近似计算中应用库仑场是正确的。对硅中的 V 族施主, $a_1 = 30 a_0$, 虽然波函数覆盖许多晶格格点,可预料到它与简单理论的吻合程度并不象锗那样好。对于受激态,因为具有 n^2 的因子,会符合得更好些。

然而,从这种简单模型出发,我们不可能希望非常精确,因此许多理论工作者一直很注意这一课题。Kohn (1957) 概述了这方面的进展。因为 Kohn 对这个问题很热心,引用他的一些话是有价值的。

被俘获的电子或空穴穿过几百个晶体原胞的轨道完全可以简单地加以描述,这一点乍看起来似乎令人吃惊。然而,理论表明,轨道越大,理解得越精确。

为了评价这一点, 让我们首先考虑施主态。这样一种能态可以粗略地描绘如下: 假定把一个中性杂质原子引入晶格中, 设想移走它的一个电子, 而留下一个正离子。这个正离子将极化半导体, 使得在较大距离处它产生静电势

$$u = \frac{e}{\epsilon r}, \quad (1.4)$$

式中 ϵ 是静电介电常数。当电子返回时, 有两种情况可能发生: 这个电子很可能去占据距离杂质离子相当近的一个轨道。在这种情况下, 式(1.4)已不再适用, 同时在杂质离子的最近邻处将产生相当复杂的情况。简单说来, 我们得到一个“深”杂质能态。另一种情形是, 最低能态可能存在一个式(1.4)几乎完全适用的大轨道。人们往往认为, 这样一个能态可用薛定谔方程来描述:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} \right) F(r) = EF(r), \quad (1.5)$$

式中 m^* 是相应的有效质量(锗和硅的实际能带结构较复杂, 需要对动能项做一定的修正)。

显然, 轨道越大, 式(1.5)越准确, 因为邻近杂质离子的区域[此处, 式(1.4)不适用]将不起重要作用。这里我们看到了我们能够建立浅能级杂质态的精确图象的主要原因之一: 电势基本上是类库仑势的, 因而杂质态非常接近于氢原子态。第二个原因有些不好理解。以后我们将会看到, 有效质量的概念只对波函数 $F(r)$ 的空间变化很缓慢的状态才适用, 这个原理同样地也适用于描述具有大轨道的浅能级杂质态。

与氢原子类似表明, 不仅存在最低束缚态, 而且还存在受激束缚态的整个能谱。这些能态已经完全得到实验证实。由于它们的轨道甚至比基态的还要大, 因而(1.5)类型的方程对它们尤为适用。

我们对杂质态物理性质的理解仍在迅速地扩展着。可是, 对这些令人迷惑的“原子”内部情况早就有很多了解。它们有非常精细的结构。用 0.01 电子伏量级的能量就可以使它们分裂, 而且它们的轨道相当大, 达 10^{-7} — 10^{-6} 厘米。虽然如此, 它们的结构却能由控制具有 10^4 电子伏左右的束缚能量和 10^{-12} 厘米左右轨道直径的亚稳态原子的同一量子力学定律和同一库仑引力势来确定。类氢原子在自然界中存在

时的能量、尺寸和物理状态的范围确实是值得注意的。

从 Kohn 的论述来看,我们认为(不管他的意见如何)这个问题乃是一个相当复杂的问题,虽然对它已有了相当合理的理解。然而,正如从表 1.2 可以看到的,它仍有进一步研究的余地。

表 1.2 硅和锗基态浅施主能量的实验值和理论计算值的比较

(引自 P. Csavinszky, 1963)

施主	硅(电子伏)		锗(电子伏)	
	实验值	计算值	实验值	计算值
P	0.045	0.031	0.0128	0.0089
As	0.053	0.035	0.0140	0.0093
Sb	0.043	0.039	0.0098	0.0096
Bi	0.069	0.045	0.0125	0.0010

Ning 和 Sah(1973) 用包括谷间重叠项的有效质量近似方法,研究了关于硅中浅施主态的多谷效应,并且提供了能量计算和实验数据十分吻合的结果。

1.3 深杂质能级问题

在研究产生深能级的杂质时,我们碰到的问题是:能级可能与杂质复合体或者与杂质-空穴复合体有关,并且杂质可能是间隙式的,而不是替代式的。

即使局限于替代式杂质,要成功地应用有效质量理论也还有颇大的困难。Bebb 和 Chapman (1971) 用实验测得的能级作为出发点,研究了替代式杂质的波函数,他们作了如下论述:

替代式杂质基态束缚能的变化,是由杂质原子实的电势与简单点

电荷的电势的不同引起的。要想解释实验所观察到的杂质能级基态的化学位移,通常可以把杂质附近的区域分成内部和外部两个区域来进行。在外部区域中,可以证明通常的有效质量方程是成立的,并且可以用来获得当 $r > r_c$ 时的波函数, r_c 是分成内部和外部区域之后特定的半径。Nara 和 Morita 曾详细地证明,当 $r > r_c$ 时,势能可以用有效质量方程中它的渐近形式 $-e^2/\epsilon r$ 代替,此处 r_c 与最近邻的距离同一量级。为了描述杂质原子实区域 $r < r_c$,曾考虑过各种数值近似,其吻合程度由差到好不一。然后通过使杂质原子实和外部的函数满足某些连续性条件,获得描述整个空间的波函数。理论是否成功,通常以它能否预言经验的基态束缚能来衡量。能量积分运算表明,主要贡献来自小 r 区域,因此,它严格取决于原子实函数的准确度。

然而,在许多应用中,待计算的积分表明,主要贡献来自有效质量方程成立的大 r 区域。尤其是已经知道光学积分对波函数的原子实区域非常不敏感,因而只要知道大 r 区域中的波函数就能准确地求出积分值。对于其它积分,例如声子耦合强度等等,类似的结论在不同程度上也是正确的。因此,在许多(也许是绝大多数)应用中,我们只要求在有效质量方程成立的大 r 区域中,波函数是正确的就够了。

要求解大 r 区域中能反映杂质原子实电势影响的有效质量方程,通常涉及到用观察到的能量来代替本征能量的问题。已经发表了三个这种半经验解法,最简单而又最常用的近似法是,假定整个空间的势能是库仑势。然后对所得到的氢波函数,通过调节有效玻尔半径 a^* ,使之再次得到实验观察到的杂质束缚能 $E_{\text{obs}} = -(\hbar^2/2m^*)/a^{*2}$ 。这种方法对于相当浅的杂质能级特别成功。但在理论上这是要不得的,因为它要求对形式上由基质晶格所确定的参数进行调整。

Lucovsky 曾提出了适用于很深能级杂质的另一种方法。他假定基态束缚能的增大完全是由于杂质原子实势能引起的。根据这一假定,他用一个 δ -函数势阱一使深度调整到产生经验束缚能一来逼近离子势。Lucovsky 的方法虽然只限于很深的杂质能级,但是它至少已认识到了问题的物理意义。从逻辑上讲它是很难理解的,因为它要求指定 $r = 0$ 附近的势能,而在 $r = 0$ 处一般的有效质量方程不见得成立。然而,波函数位于 δ -函数势阱外面,并且被假定对大 r 区域是对的。

采用量子缺陷方法得到了一种和有效质量理论假设完全一致的更一般的解法,这种方法已成功地应用于原子物理学中。量子缺陷方法的依据是大 $r(r>r_c)$ 时势能变成库仑势 $-e^2/\epsilon r$ 的实验结果,因此在外部的有效质量方程的解也是库仑型的(但未必是氢原子模型的)。在量子缺陷方法中,“主量子数 ν 的允许值由实验观察的束缚能决定,而不是由 $r=0$ 处的边界条件决定。因此,在这种方法中, ν 的数值不必限于整数,并且波函数在 $r=0$ 处可能发散。尽管如此,仍不影响它在 $r=0$ 以外的区域中的适用性”。

根据量子缺陷模型, Bebb 和 Chapman 进行了诸如束缚态-束缚态跃迁速率、声子耦合强度以及杂质-带复合寿命等物理量的计算。关于计算细节,读者可参阅他们的有关文章。

1.4 深杂质能级

Glodeanu (1967) 提出了一种直接计算深杂质能级的方法。他研究了能够在禁带中产生两个局部能级的两价替代式杂质,在单能带近似中采用类氢模型,并计算了 GaAs、Si 和 Ge 中若干杂质的深施主和深受主能级。

在考虑一个具有两个附加电子的施主时,他写出了如下哈密顿算符:

$$H = \frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(r_1) + V(r_2) + U_{\text{eff}}(r_1, r_2), \quad (1.6)$$

和相应的薛定谔方程:

$$H\Psi(r_1, r_2) = E\Psi(r_1, r_2), \quad (1.7)$$

式中 $V(r_1)$ 是周期势,它表示电子 1 与有效晶体场的相互作用,类似地 $V(r_2)$ 是电子 2 的周期势。式(1.6)中的最后一项由

$$U_{\text{eff}}(r_1, r_2) = -\frac{Ze^2}{\epsilon r_1} - \frac{Ze^2}{\epsilon r_2} + \frac{e^2}{\epsilon |r_1 - r_2|} \quad (1.8)$$