

第 1 章 半导体物理与工艺概要

半导体物理学是半导体器件工作的物理基础。为此本章简要地回顾了半导体物理的基本内容，且着重介绍与器件工作有关的概念与结论；另一方面，半导体器件的特性在很大程度上又依赖于其制备工艺，所以，基本的器件制造工艺也将在本章扼要介绍。

1.1 晶体结构和能带结构

本节简要讨论有关晶体结构和能带理论的基本知识。首先介绍理想晶体及其能带，讲述几种在器件制造中最重要的半导体晶体的结构及其电子态的能带结构，然后分析实际晶体偏离理想晶体的一些因素以及它们对半导体性质所产生的影响。

1.1.1 理想晶体的结构

1.1.1.1 半导体单晶

固体按照其导电性质分为金属（导体）、绝缘体和半导体三大类。按照其微观的原子（这里“原子”泛指原子、离子、分子或基团，即基元）排列情况，则划分为晶体和非晶体两大类。原子有规则排列，即所有原子的位置在空间形成一个周期点阵（又称周期格子）的固体叫做晶体。金属、半导体及部分绝缘体（如 NaCl、石英、方解石、各种宝石等）都是晶体。原子排列没有规则性的固体，则为非晶体（也称无定形体），玻璃、松香、石蜡、橡胶、塑料等为非晶体。虽然也有非晶态的半导体材料，如非晶硅，但只用来制造廉价的非晶硅太阳能电池和开关器件（如 TFT），目前尚不能制造出用于信号放大与处理的半导体器件。

晶体又分为单晶和多晶。在单晶体中，原子排列的规则周期性在整个晶体中出现。而在多晶体中，原子排列的规则性只在一个个被称为晶粒的很小的区域内出现，各个晶粒之间则由原子排列没有规则性的边界区域（称为晶粒间界，简称晶界）分隔开。多晶可以看成是由许多微小的单晶集合在一起而成的，而非晶体则连多晶这种局部周期性也没有，整个原子的排列完全是杂乱无章的。常见的金属多为多晶，烧结而成的陶瓷半导体也是多晶，用提拉法和区熔法以及外延工艺生长的 Si、Ge、GaAs、GaP、CdS 等半导体晶体都是单晶。由于多晶体中存在大量的晶界，而晶界处的性质与单晶体内部有很大不同。因此，一般来说也不能用多晶材料制作半导体器件。半导体材料今天能得到如此广泛的应用，主要归功于现在能够制备纯净和完美的各种半导体单晶。

在宏观物理性质上，晶体（以下均指单晶）表现出几个主要特征^[1]：具有固定的熔点、规则的几何外形、各向异性等。晶体之所以具有这些特点，是由于晶体在结晶时，原子是按一定的规则排列的。也就是说，这些性质反映了晶体内部原子的有序排列。非晶体在凝固时不经过结晶（即有序化）的阶段，因此完全不具备上述性质。纯净的半导体单晶锗（Ge）、硅（Si）和砷化镓（GaAs）的熔点（亦是其结晶点）分别为 937℃、1415℃、1238℃，当其中混有不同比例的杂质时，其熔点将发生变化。晶体的各向异性是指在不同方向上其力学、热学及光学等性质是不同的如热导率、光折射系数等参数沿不同晶向而有差异。此外，单晶体还有沿某些确定方向的晶面容易劈裂（称为解理）的性质，这是力学性质的各向异性。对锗和硅解理面为 {111} 面，而对具有类似晶格结构的砷化镓则为 {110} 面，其原因将在后面说明。半导体单晶的各向异性还表现在沿不同晶向其腐蚀速率不同，称为各向异性腐蚀。正是利用这一性质发展起来的 VMOS 工艺使 MOS 晶体管开始进入大功率器件领域。

1.1.1.2 重要半导体的晶体结构

三种最重要的半导体是锗、硅和砷化镓，它们的性质已得到广

泛和深入的研究。在半导体器件中，硅是应用最多的材料，这是因为 Si 的本征载流子浓度比 Ge 小三个数量级，所以 Si 器件的参数如反向漏电流等比 Ge 器件好得多。锗材料的性质最早得到研究，因而它较多地用于早期的半导体器件中。砷化镓有与锗、硅不同的性质，主要用于微波器件和光电器件中。

Ge、Si、GaAs 单晶都属于立方晶系，晶胞为立方体。Ge 和 Si 晶体为金刚石结构，如图 1-1 所示，在一个面心立方晶胞内还有 4 个原子，这 4 个原子分别位于 4 个体对角线的 $1/4$ 处。它是一个复式格子，可以看做是由两个 Ge 或 Si 原子组成的两个面心立方子晶格沿体对角线位移 $1/4$ 的长度套构而成。GaAs 晶体为闪锌矿晶格（如图 1-2），其结构与金刚石结构类似，只不过组成闪锌矿晶格的两个面心立方子晶格是由两种原子组成，即 Ga 原子的面心立方子晶格和 As 原子的面心立方子晶格沿体对角线平移 $1/4$ 套构而成。除 GaAs 之外的大多数 III-V 族化合物半导体单晶也是

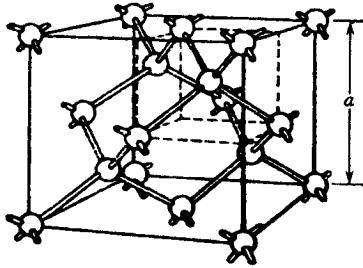


图 1-1 金刚石晶格 (C, Ge, Si 等)

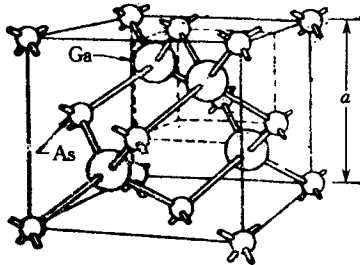


图 1-2 闪锌矿晶格 (GaAs, GaP 等)

闪锌矿结构。

除金刚石结构和闪锌矿结构外，有许多半导体（包括部分 III-V 族化合物半导体）有纤锌矿或 NaCl 晶体结构。图 1-3 示意出纤锌矿结构，它可以看成是由两个 6 角密积晶格（譬如对 CdS 为 Cd 的子晶格和 S 的子晶格）套构而成。在上述金刚石结构、闪锌矿结构和纤锌矿三种晶体结构中，每个原子（或离子）都有 4 个最近邻的原子（或离子）。以任一原子为中心，它的 4 个最近邻原子分别位于一个 4 面体的 4 个顶角上。

图 1-4 为 NaCl 型晶体结构，是由两个简立方晶格（如 PbS 为

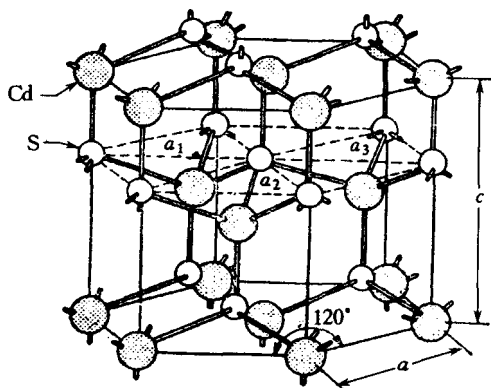


图 1-3 纤锌矿晶体结构 (CdS, ZnS 等)

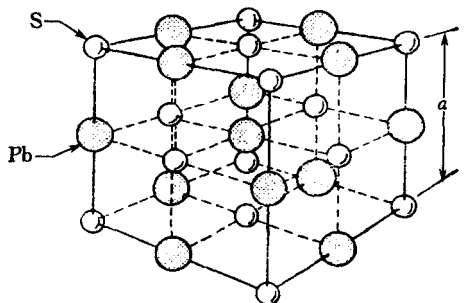


图 1-4 NaCl 晶格 (PbS, PbTe 等)

Pd 的子晶格和 S 的子晶格) 沿 $\langle 100 \rangle$ 方向位移 $1/2$ 套构而成, 每个原子有 6 个最近邻原子。

表 1-1 列出了重要半导体的晶体结构及晶格常数^[2]。注意, 有一些化合物半导体, 如 ZnS 和 CdS, 可以兼有闪锌矿和纤锌矿两种晶体结构。

表 1-1 重要半导体的晶格结构表

	元素或化合物	名 称	晶 体 结 构	300K 的晶格常数/Å
元素半导体	C	碳、金刚石	金刚石	3.56679
	Ge	锗	金刚石	5.6748
	Si	硅	金刚石	5.43086
	Sn	灰锡	金刚石	6.4892
IV-IV	SiC	碳化硅	闪锌矿	4.358
III-V	AlSb	锑化铝	闪锌矿	6.1355
	BN	氮化硼	闪锌矿	3.615
	BP	磷化硼	闪锌矿	4.538
	GaN	氮化镓	纤锌矿	a=3.186 c=5.176
	GaSb	锑化镓	闪锌矿	6.0055
	GaAs	砷化镓	闪锌矿	5.6534
	GaP	磷化镓	闪锌矿	5.4505
	InSb	锑化铟	闪锌矿	6.4788
	InAs	砷化铟	闪锌矿	6.0585
	InP	磷化铟	闪锌矿	5.8688
II-VI	CdS	硫化镉	闪锌矿	5.832
	CdS	硫化镉	纤锌矿	a=4.16 c=6.756
	CdSe	硒化镉	闪锌矿	6.05
	ZnO	氧化锌	立 方	4.58
	ZnS	硫化锌	闪锌矿	5.42
	ZnS	硫化锌	纤锌矿	a=3.82 c=6.26
IV-VI	PbS	硫化铅	立 方	5.935
	PbTe	碲化铅	立 方	6.450

1.1.1.3 半导体晶体中原子间的结合力

半导体晶体的基本结合方式有两种：共价键和离子键。IV族元素半导体 C（金刚石）、Si、Ge、Sn（灰锡）是共价键结合的典型代表。所谓共价键，即相邻的两个原子各出一个电子相互共用，这两个电子的自旋方向彼此相反，从而在最外层形成公用的封闭电子壳层，这类晶体称为原子晶体，也称为共价晶体。在上述 4 个元素半导体中，每个原子最外层有 4 个电子，而这 4 种晶体均具有金刚石结构，因此每个原子都有 4 个同样的原子作为其最近邻。所以每个原子能够与周围其他 4 个原子组成共价键而各自形成封闭壳层的结构，其平面图如图 1-5(a) 所示。离子键又叫极性键，可以在许多化合物半导体中找到。以 II-VI 族化合物半导体 ZnS 为例，Zn 原子的最外层电子有 2 个，而 S 原子的最外层电子则有 6 个。当二者结合时，Zn 原子失去 2 个电子转移到 S 原子上，形成具有封闭壳层的正负两种离子 Zn^{2+} 、 S^{2-} 成为稳定的结构。在 ZnS 晶体的纤锌矿结构中，两个 6 角密积子晶格分别由 Zn^{2+} 和 S^{2-} 所占据。它们彼此之间，则主要依靠离子间的静电库仑力结合在一起，因此一种离子的最近邻离子必为异号离子，其平面图如图 1-5(b) 所示。对 ZnS 晶体（纤锌矿结构），与金刚石和闪锌矿结构类似，一个 Zn^{2+} （或 S^{2-} ）与 4 个最近邻的 S^{2-} （或 Zn^{2+} ）组成正 4 面体，即配位数是 4。离子键比共价键强，即拆散离子键需要较大的能量。

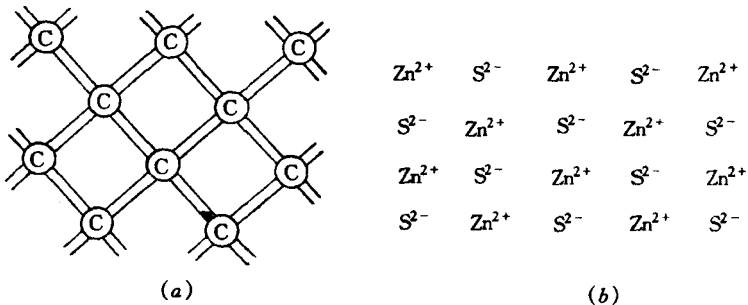


图 1-5 共价键和离子键的平面示意图

在大多数半导体晶体中，原子间的结合力是介乎离子键与共价键之间的形式。一般来说，元素在周期表中的位置越靠近上部和左右两侧，形成的价键越接近于离子键；反之，元素在周期表中的位置越靠近下部和中间，形成的价键越接近于共价键。Ⅳ族元素半导体 C、Ge、Si、Sn 为纯粹的共价键，Ⅲ-V 族化合物半导体 GaAs、InSb 等以共价键为主，但兼有一些离子键的成分；以离子键为主的半导体可以 ZnS、PbS 为例，但都兼有共价键的成分；许多Ⅱ-VI族化合物半导体也是如此。以离子键为主的半导体，常称为极性半导体，其中一部分取 NaCl 晶格结构。以共价键为主的半导体，则常称为非极性半导体。

除晶格结构决定晶体的性质外，原子（或离子）间的结合力对晶体的性质亦有影响。以Ⅲ-V族具有闪锌矿结构的 GaAs 为例，其（110）面就具有容易解理的性质。我们知道，对于金刚石结构（可以看做闪锌矿结构的特例）的 Ge、Si 晶体，（111）面之间有最大面间距，因此（111）面是解理面。但对 GaAs 单晶来说，虽然（111）面的面间距 $\frac{\sqrt{3}}{4}a$ 大于（110）面间的面间距 $\frac{\sqrt{2}}{4}a$ ，但在（111）面的两侧一边全是 Ga 原子，一边全是 As 原子。由于 Ga 与 As 之间具有离子键的成分使（111）面之间存在着较强的库仑引力，而（110）面是由相同数目的 Ga、As 原子组成的，两相邻的（110）面间除 Ga、As 原子键合时的库仑引力外，在相同原子之间还存在着一定的库仑斥力。因此，GaAs 晶体的（110）面更容易解理。

1.1.2 理想晶体的能带结构

1.1.2.1 能带理论

在晶体中由于原子间的相互作用，电子（尤其是价电子）不再专属某个原子，而是可以在整个晶体中运动，这称为电子的共有化。描述电子能量与电子在晶体中做共有化运动的波矢 k 之间的关系 $E(k)$ 称为能带结构，它表明电子在晶体中其能量可能具有哪些值。

由于晶体中复杂的相互作用，使 $E(\mathbf{k})$ 关系极为复杂。于是采用绝热近似、静态近似和单电子近似等近似处理，将晶体中电子系统这一多体问题简化为单电子问题。再用现代计算方法和高速电子计算机，采用适当的势函数，求解薛定谔方程。确定本征波函数和本征能量值 $E(\mathbf{k})$ ，其问题的实质是只需要考虑一个电子在固定的原子实势场及其他电子的平均势场中的运动。由于晶体中原子是规则排列的，所以电子是在周期性的势场中运动。这种周期性势函数下电子的能量状态（许可能量值），既不是像孤立原子中分立的电子能级，也不是像无限空间中自由电子具有连续能级，而是在一定能量范围内准连续分布的能级，称为能带。因此，用单电子近似研究晶体中电子能量状态的理论又称为能带论。

计算固体的能带结构只需要在波矢空间或称 \mathbf{k} 空间的一个区域内进行，而不需要像标志自由电子运动状态那样需要整个 \mathbf{k} 空间。由于晶体的周期性和对称性，可以证明为表示晶体中电子的状态，只需要利用围绕原点的一个有限区域，称这一区域为第一布里渊区或简约布里渊区（通常说到布里渊区就是指第一布里渊区）。电子的所有可能的状态 \mathbf{k} 都包含在这个区域里了，在布里渊区表面，能量发生跃变。波矢 \mathbf{k} 和能量在布里渊区内分布的重要性质有：

① E 是 \mathbf{k} 的多值函数，即对于某一个状态 \mathbf{k} ， E 可以有許多值，它们分别对应于不同的能带。

在任何一个能带内，波矢 \mathbf{k} 和波矢 $-\mathbf{k}$ 的状态具有相同的能量即 $E(\mathbf{k})=E(-\mathbf{k})$ 。

在 \mathbf{k} 空间也具有与晶体结构完全相同的对称性，即 $E_n(\mathbf{k})=E_n(\mathbf{R}\mathbf{k})$ ，其中 \mathbf{R} 代表晶体的任何对称操作。如果 \mathbf{R} 代表平移操作则有 $E_n(\mathbf{k})=E_n(\mathbf{k}+\mathbf{k}_h)$ ， \mathbf{k}_h 为倒格矢，此式代表了 \mathbf{k} 空间中的周期性。

进一步分析知道， \mathbf{k} 空间就是晶格的倒格子空间，而布里渊区就是倒格子空间中的维格纳-赛茨原胞。金刚石和闪锌矿晶格的布里渊区与面心立方晶格的布里渊区相同，如图 1-6 所示，它是一

个十四面体。图中还表示出最重要的对称点和对称线，如布里渊区中心点 $\Gamma = \frac{2\pi}{a}(0,0,0)$ ， $\langle 111 \rangle$ 轴 Δ 及其与布里渊区边界的交点 $L = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ ， $\langle 100 \rangle$ 轴 Δ 及其交点 $X = \frac{2\pi}{a}(0,0,1)$ ， $\langle 110 \rangle$ 轴 Σ 及其交点 $K = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right)$ 。

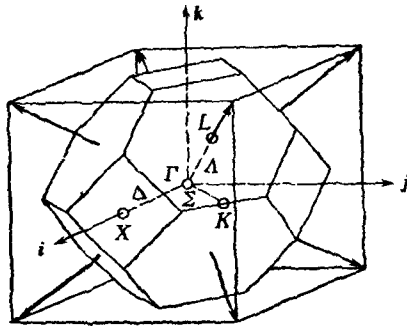


图 1-6 面心立方格子的布里区

1.1.2.2 Si、Ge、GaAs 的能带结构

计算固体能带的方法有多种，对半导体来说，最常用的三种方法是正交化平面波法、赝势法和 k - p 微扰法。图 1-7 示出 Ge、Si 和 GaAs 的能带结构^[2]。能带结构图中下部的顶点向上，即具有峰值的那些类似抛物线的曲线是描述晶体中外层价电子的能带，称为价带。而上部那些顶点向下具有谷值的那些类似抛物线的曲线是描述受到激发后参与导电的电子的能态的，称为导带。价带顶与导带底之间是电子所不能具有其能量值的禁带，其宽度称为禁带宽度或带隙宽度，通常以 E_g 表示 单位为电子伏特 (eV)。导带底和价带顶在布里渊区中的同一位置上（即具有同一 k 值）的称为直接带隙半导体；不在同一个位置上（即具有不同 k 值）则称间接带隙半导体。Ge、Si 能带结构是间接带隙型，GaAs 则为直接带隙型 因此 GaAs 也是良好的发光材料。此外，GaAs 的导带有两个间隔很小的能谷且低能谷有较小的有效质量（即较大 $\partial^2 E / \partial k^2$ 的

较窄能带)而高能谷有较大的有效质量(较小 $\partial^2 E/\partial k^2$ 的较宽能带),因而低能谷中的电子只要接受很小的能量(0.31eV)就能转移到高能谷中产生负阻效应,所以GaAs也常用于制作微波振荡器。

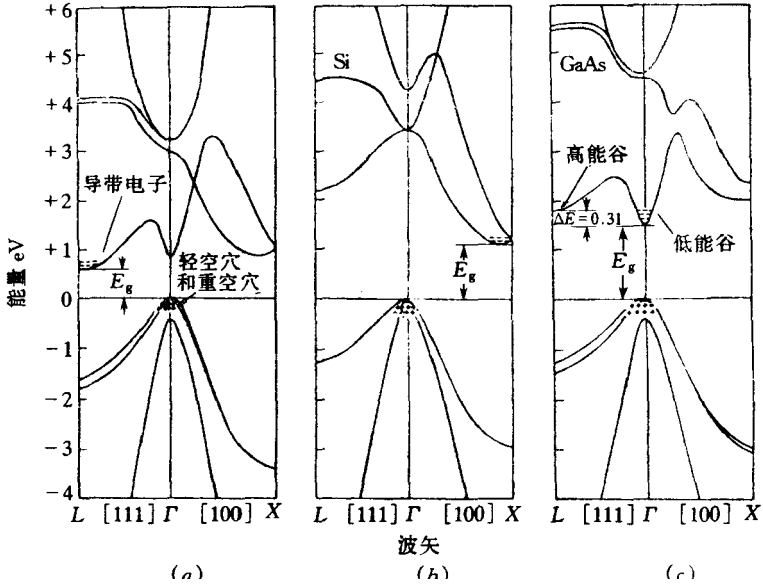


图 1-7 Ge、Si 和 GaAs 的能带结构

E_g —带隙;正号 (+)—价带内的空穴;负号 (-)—导带内的电子。

(a)Ge的能带结构;(b)Si的能带结构;(c)GaAs的能带结构。

在只考虑电导现象时,常采用简化的能带结构图,如图 1-8 所示。在图中,导带底(导带中电子的最小能量)记为 E_c ,价带顶(价带中电子的最大能量或空穴的最低能量)记为 E_v 。带隙 $E_g = E_c - E_v$ 。向上方向为电子能量增加,向下方向为空穴能量增加。

带隙宽度 E_g 是半导体的一个重要参数,它与下列因素有关:

温度。实验结果表明,大多数半导体的带隙随温度升高而减小,Ge、Si 和 GaAs 就是这样,即温度系数 dE_g/dT 为负。但也有少数半导体(如 PbS)其温度系数 dE_g/dT 为正,带隙随温度升

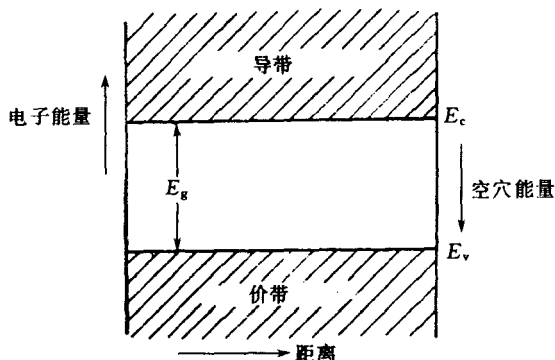


图 1-8 半导体的简化能带图

高而增大。

压力。压力增加时，有的半导体的带隙 E_g 随之增加 (dE_g/dP 为正) 如 Ge、GaAs。有的半导体其 E_g 却反而减小 如 Si。

对于重掺杂材料，带隙变窄。在双极晶体管中，必须考虑发射区重掺杂使禁带变窄的效应，它使发射效率降低。

在常温和常压下，高纯 Ge、Si 和 GaAs 材料的能隙值分别为 0.66eV、1.12eV 和 1.42eV。

1.1.3 晶格振动和杂质原子对半导体性质的影响

前面两部分讨论了理想晶体的结构和能带。所谓理想晶体，是指原子（或离子）严格地规则排列在晶格格点上的晶体，也称为完整晶体。在实际晶体中，原子（或离子）不停地在平衡位置附近作迅速的热振动，常不能保持在格点上而有所偏离。此外，实际晶体中还有各种缺陷，如替位杂质原子、空格点、间隙原子、位错等。这些因素都破坏了晶格的严格周期性，使实际晶体与理想晶体有差别。这里主要讨论晶格热振动和杂质原子对半导体性质的影响。

1.1.3.1 晶格振动产生的影响

晶格热振动主要产生两方面的影响。

热激发，即热振动能量使施主或受主杂质电离，或者使处于晶格上的半导体原子的价键断裂，从而在半导体中产生自由电子和自由空穴，如图 1-9 所示。后一过程称为本征激发，它总是同时产生一个电子和一个空穴，即所谓的电子—空穴对。在杂质半导体中，自由载流子通常主要来自杂质的电离，本征激发可以忽略；而在本征（即不含杂质的）半导体中，自由载流子主要源自本征激发，因而自由电子和自由空穴数目相等。

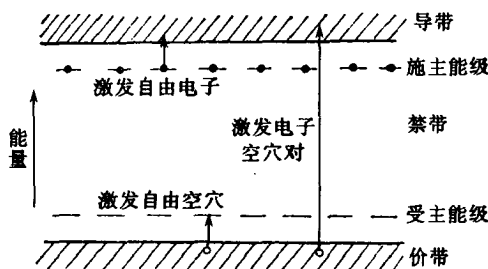


图 1-9 半导体中的热激发

对自由电子和自由空穴产生散射，即阻碍它们在晶体中的运动。在严格的理想周期势场中，自由电子和自由空穴在外电场作用下运动时是不受任何阻碍的，结果这些自由载流子的速度将持续增加，动能也会无限制地增加。但实际晶体中的晶格振动使理想周期势场遭到破坏，当载流子运动时将会与晶格交换动量和能量，即受到声子的散射，所以其速度不会无限制增加下去。当然除晶格振动外，其他任何破坏严格晶格周期性的因素（各种缺陷）也都会对载流子产生散射。

1.1.3.2 杂质原子产生的影响

杂质原子对半导体性质的影响也主要表现在两个方面。

1) 在晶体中产生附加能级

在理想半导体晶体的能带中有一个禁带，在这个能量区域内没有允许的能量状态存在。但如果半导体晶体中含有杂质原子（主要指替位型杂质）则由于其电离能很小，通常由晶格热振动提

供的能量就足以使其电离而产生自由电子或自由空穴。这相当于在禁带中产生了附加能级，称为杂质能级。电离后提供自由电子的杂质称为施主，提供自由空穴的杂质称为受主。图 1-10 示出了 Ge、Si 和 GaAs 中各种杂质能级的实测值。从图中可见，一种杂质原子可能有好几个能级，有的还可以兼有施主和受主能级。有的杂质能级靠近导带底 E_c 和价带顶 E_v ，有的则靠近禁带中央部分（禁带深处）前一种情况称为浅能级 后者称为深能级。情况是多种多样的。

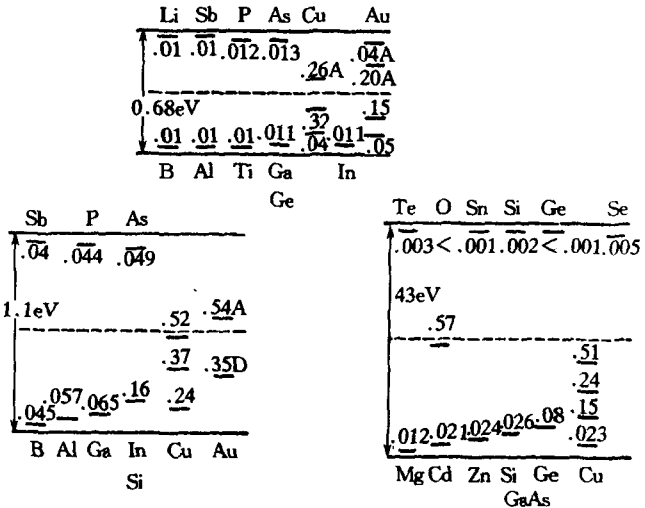


图 1-10 $T = 300K$ 时 Ge、Si 和 GaAs 中的各种杂质能级

除了替位型杂质原子能够在半导体的禁带中产生附加能级外，间隙型杂质原子和其他晶格缺陷都能产生附加能级。例如极性半导体，仅仅因为化学比的偏离也会产生施主或受主能级。像 PbS 如果 Pb 的成分多了（化学式为 $Pb_{1+\delta}S$ 通常 $\delta < 10^{-3}$ ）就得到浅施主。空格点有时也能成为施主或受主。此外，晶体的表面也能产生附加能级，称为表面能级。

各种附加能级对半导体性质的影响是不同的。施主或受主能级可以产生自由电子或自由空穴，特别是浅施主和浅受主杂质原

子对半导体的影响特别大。因为它们在温度不高时，就几乎全部电离而提供了大量的自由载流子，增加了半导体的电导。N型和P型半导体通常就是在本征半导体中掺入适量浅施主或浅受主杂质而得到的。深能级则通常起陷阱和复合中心的作用，前者能俘获自由载流子，减小电导，后者则增加了电子和空穴的复合机会，减小了载流子的寿命。

2) 对自由载流子产生散射

杂质原子的这个影响与晶格振动相同。晶格振动对载流子的散射机制是声子与载流子碰撞（或称散射）使其动量和能量改变，交给晶格一部分。杂质原子的散射机制则是电离后带电杂质原子对自由载流子的库仑散射。二者的效果是相同的，都使自由载流子的运动受到阻碍，从而影响迁移率。

1.2 半导体中的载流子

上一节讨论了理想半导体的晶体结构和能带结构（电子在半导体中的许可能量状态），以及实际晶体中晶格振动和杂质原子对半导体性质的影响。在此基础上，可以进一步讨论半导体的电学性质。为此，首先要了解半导体中可供给传导电流的载流子的性质，包括其数量、产生与消失等方面。本节就简要讨论半导体中载流子的特性。

1.2.1 平衡载流子的统计

首先讨论处于热力学平衡状态下，半导体中自由载流子的数目。在绝对零度下，晶格热振动能量为零，不存在本征激发和杂质电离（材料中含有杂质）因为没有所需能量的供给。因此能够导电的自由电子和自由空穴数量为零。在高于0K的某一温度下，晶格热振动在半导体中产生本征激发和杂质电离过程，在半导体中有了一定数量的自由电子和自由空穴。但同时也存在相反的过程，即自由电子返回价带（相当于一个电子与一个空穴复合）和自

由载流子返回被杂质原子束缚的位置，这一过程又使自由载流子数量减少。在某一温度下，上述两个过程达到平衡时，在半导体中就存在数量一定的自由电子和自由空穴。下面计算平衡态下自由载流子的数目。把单位体积内的自由载流子数目称为其浓度，即密度，自由电子和自由空穴的浓度分别以 n_0 、 p_0 表示。

1.2.1.1 自由电子和自由空穴浓度的基本公式

已经知道，处于导带内的电子为自由电子，处于价带内的空穴为自由空穴。因此只要知道了导带内和价带内的能带结构（允许的能级）和电子占据这些能级的几率，就可以计算出自由电子和自由空穴浓度。以 $N_c(E)dE$ 、 $N_v(E)dE$ 表示单位半导体体积中导带和价带内能量在 E 到 $E + dE$ 区间内的量子态数目， $f(E)$ 表示能量为 E 的量子态被一个电子占据的几率， $1 - f(E)$ 则为该量子态被一个空穴占据（即没有电子占据它）的几率。于是， n_0 和 p_0 可以表示成

$$n_0 = \int_{E_c}^{E_{\text{top}}} N_c(E) f(E) dE \quad (1-1)$$

$$p_0 = \int_{E_b}^{E_v} N_v(E) [1 - f(E)] dE \quad (1-2)$$

式中 E_c 和 E_{top} ——导带底和导带顶；

E_b 和 E_v ——价带底和价带顶。

通常情况下，导带电子（即自由电子）都位于导带底附近。因此 $N_c(E)$ 可用导带底附近的量子态密度近似，对许多半导体，其表达式为

$$N_c(E) = 4\pi \left(\frac{2m_{\text{de}}^*}{h^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (1-3)$$

式中 m_{de}^* ——电子的态密度有效质量。

对 Si 和 Ge, $m_{\text{de}}^{*3/2} = (m_1^* m_t^{*2})^{1/2} M_c$

式中 m_1^* 、 m_t^* ——纵向、横向有效质量；

M_c ——导带内的等效极小值数目。

Ge的 $M_c = 8$, Si的 $M_c = 6$ 。类似的价带空穴(即自由空穴)都位于价带顶附近。因此 $N_v(E)$ 可用价带顶附近的态密度近似, 其表达式为

$$N_v(E) = 4\pi \left(\frac{2m_{dh}^*}{h^2} \right)^{3/2} (E_v - E)^{1/2} \quad (1-4)$$

式中 m_{dh}^* ——空穴的态密度有效质量。

对 Ge、Si 和 GaAs, $m_{dh}^{*3/2} = m_{lh}^{*3/2} + m_{hh}^{*3/2}$, 下标 l 和 h 分别指轻、重空穴。

由于电子是费米子, 研究由许多电子组成的热力学系统的统计性质应使用费米-狄拉克(F-D)统计。按照 F-D 统计, 一个能量为 E 的量子态被一个电子占据的几率为

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/kT}} \quad (1-5)$$

这个量子态被一个空穴占据, 即没有电子占据该量子态的几率则为

$$1 - f(E) = \frac{1}{1 + e^{-(E-E_F)/kT}} \quad (1-6)$$

式中 $f(E)$ 叫做 F-D 分布函数, 它与 E 的关系如图 1-11(a) 所示。从图中及式(1-5)可见, 在任何温度下, 能量越低的能级被电子占据的几率越大。占据能量等于 E_F (费米能级, 在热力学中称为化学势) 的一个量子态的几率为 $1/2$ 即 $f(E_F) = 1/2$ 。 $1 - f(E)$ 与 E 的关系如图 1-11(b) 所示。

在非简并半导体中, E_F 位于禁带之内。只要 E_F 低于 E_c 几个 kT 的情形 F-D 分布式(1-5)退化为

$$f_{(E)} \approx e^{-(E-E_F)/kT} \quad (1-7)$$

上式右端是经典的玻耳兹曼统计。这表明, 在非简并半导体中, 电子的统计性质可近似用经典的玻耳兹曼分布来描述(见图 1-11 中

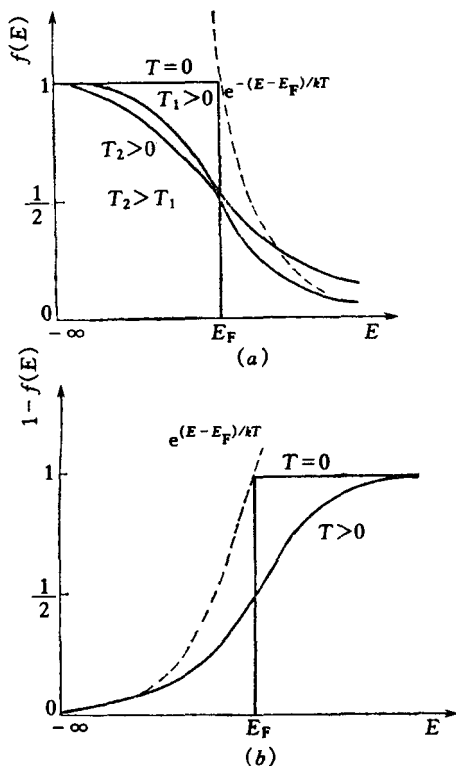


图 1-11 F-D 分布函数 $f(E)$

(a) $f(E)$ 与 E 的关系; (b) $1-f(E)$ 与 E 的关系。

虚线所示)

将式 (1-3) 和式 (1-7) 代入式 (1-1) 就可以得到自由电子的浓度。由于 E 增加时 $f(E)$ 迅速减小, 所以式 (1-1) 中主要是能量 E 较小的那一段区间 (即导带底附近的区间) 对积分有贡献, 能量较高的区间对积分贡献很少。这也是 $N_c(E)$ 可由导带底附近态密度近似的原因, 同时积分上限 E_{top} 不妨改为 $+\infty$ 积分结果不会引起太大的误差, 故

$$n_0 = \int_{E_c}^{+\infty} N_c(E) f(E) dE = N_c e^{-(E_c - E_F)/kT} \quad (1-8)$$