

# 高掺杂半导体中补偿程度和注入水平对带尾结构的影响

郭长志 李国华

(北京大学 物理系)

1981年11月18日收到

## 提 要

本文分析了影响高掺杂半导体中杂质势能涨落大小的因素。建立了较简便的自洽计算近似方法。计算了不同补偿度下的势能涨落均方差及 Halperin-Lax 带尾,得到随补偿程度增加势能涨落和带尾迅速变大的结论。研究了注入水平和较深受主能级对势能涨落的影响,得到注入将使带尾变小而较深受主能级将会加大带尾的结论。

## 一、引 言

高掺杂半导体能带结构的研究在理论上和实际上都有重要意义。在电发光器件及隧道二极管中都用到高掺杂材料,它的能带结构对这些器件的特性有重要影响。高掺杂半导体是介于有序和无序之间的材料,对它的研究有助于无序材料的研究。

高掺杂半导体由于掺杂浓度高,杂质势场已互相交叠,杂质分布的无规性及载流子的相互作用都会对电子能谱产生影响,在基本带边形成态密度拖尾。已有不少作者从不同模型出发,对高掺杂后态密度拖尾的形成及结构作了分析<sup>[1-12]</sup>。其中对载流子的处理主要有 Bonch-Bruevich<sup>[4]</sup>, Wolff<sup>[5]</sup> 等的多电子处理和 Halperin-Lax<sup>[1]</sup>, Kane<sup>[2]</sup>, Parmenter<sup>[6]</sup> 等的单电子近似二种。对无规分布的杂质场的处理主要有 Parmenter<sup>[6]</sup>, Wolff<sup>[5]</sup> 和 Bonch-Bruevich<sup>[4]</sup> 等的微扰法, Kane<sup>[2]</sup>, Bonch-Bruevich<sup>[4]</sup> 的 Thomas-Fermi 或半经典近似和 Halperin-Lax<sup>[1]</sup> 的极小值计数法三种。

本文主要采用 Halperin-Lax 带尾模型,讨论了不同补偿度下带尾的变化,分析了注入水平和较深受主能级对带尾的影响。在第二节中讨论了高掺杂半导体中影响势能涨落的因素,建立了较简便的自洽计算方法。在第三节中用 Halperin-Lax 模型和 Kane 模型计算了不同补偿度下的势能涨落均方差和带尾结构。在第四节中分析了注入水平和较深受主能级对势能涨落的影响。

## 二、影响势能涨落的因素

高掺杂半导体中电子和空穴可看作在晶格周期场和杂质离子库仑场作用下的多粒子

体系。在有效质量近似和单电子近似下<sup>[1,2]</sup>，其行为可用单电子薛定谔方程描述：

$$[-(\hbar^2/2m_i^*)\nabla^2 + V(\mathbf{r})]\psi = E\psi, \quad (1)$$

其中  $m_i^*$ , ( $i = c, v$ ) 分别是电子和空穴有效质量，

$$V(\mathbf{r}) = - \sum_{a,j} (Z_a e^2 / \epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|) \exp[-Q|\mathbf{r} - \mathbf{R}_j|] \quad (2)$$

是各杂质离子的屏蔽库仑势的和<sup>[1]</sup>， $\mathbf{R}_j$  是杂质位置， $Z_a$  是杂质离子电荷数， $e$  是电子电量， $\epsilon$  是纯半导体的介电常数， $Q$  是屏蔽长度的倒数， $a$  表示不同的杂质种类。

高掺杂时各杂质离子的场互相交叠，每个电子同时受很多杂质的作用。当杂质离子是完全无规分布时， $V(\mathbf{r})$  围绕平均值涨落的几率分布可用高斯分布近似。表征势能涨落大小的均方差在屏蔽库仑场时为<sup>[1]</sup>

$$V_{rms}^2 = \langle V^2 \rangle = \frac{2\pi e^4}{\epsilon^2 Q} \sum_a N_a Z_a^2, \quad (3)$$

其中  $N_a$  是第  $a$  种杂质的浓度。由于涨落， $V(\mathbf{r})$  成为空间起伏的势场，使电子能谱与未掺杂时不同，在带边形成态密度拖尾。其形状和大小主要由  $V_{rms}$  决定。

在高掺杂补偿半导体中，施主和受主对  $V_{rms}$  的贡献是相加的，而起屏蔽作用的载流子却由于补偿而减少。因而在这种半导体中随补偿程度增加，势能涨落变大，带尾也变大。

在线性屏蔽近似下，自由载流子屏蔽的屏蔽长度由下式决定<sup>[1]</sup>：

$$Q_i^2 = (4\pi e^2 / \epsilon kT) \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_i(E) f_i(E) [1 - f_i(E)] dE, \quad (4)$$

其中  $\rho_i$ , ( $i = c, v$ ) 分别是导带、价带态密度， $f_i$ , ( $i = c, v$ ) 分别是电子、空穴费米分布函数。以下讨论空穴屏蔽长度，所有结论对电子同样适用。利用

$$P = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_v(E) f_v(E) dE, \quad (5)$$

并令

$$P' = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_v(E) f_v(E) [1 - f_v(E)] dE, \quad (6)$$

$$\gamma = P'/P \quad (7)$$

则式(4)可写成

$$Q_v^2 = (4\pi e^2 / \epsilon kT) P \gamma, \quad (8)$$

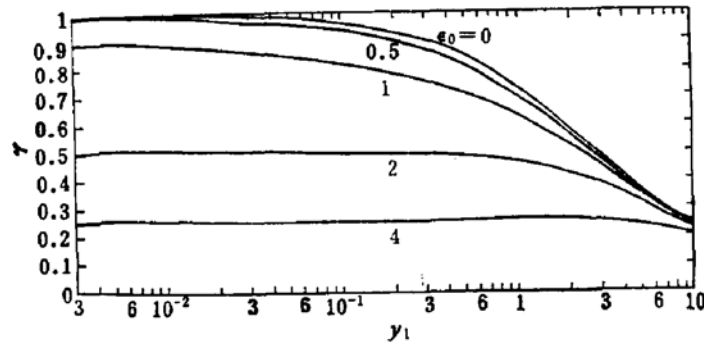
其中  $\gamma$  函数反映了空穴简并的程度，它与温度、空穴浓度、带结构都有关系。对抛物带和抛物-指数带计算了各温度通用的  $\gamma$  与空穴浓度、带尾大小的关系如图1。所用的抛物带态密度为

$$\rho_{v0}(E) = A_v E^{1/2}, \quad (9)$$

抛物-指数带态密度为

$$\rho_v(E) = \begin{cases} A_v E^{1/2} & E \geq E_0/2 \\ A_v (E_0/2e)^{1/2} \exp[E/E_0], & E < E_0/2 \end{cases} \quad (10)$$

其中  $A_v = (2\pi^2)^{-1} (2m_v^*/\hbar^2)^{3/2}$ 。图中  $\epsilon_0 = \frac{E_0}{kT}$  是反映带尾大小的无量纲参数， $\gamma_1 = P/[A_v (kT)^{3/2}]$  是无量纲化的空穴浓度。利用此  $\gamma - \gamma_1$  曲线，对不同温度、不同空穴浓度、不

图1 抛物带和抛物指数带的  $\gamma$ - $y_1$  曲线

同带尾大小可以很方便地求得屏蔽长度。

由于势能涨落、带尾大小均与屏蔽长度有关,而屏蔽长度又与带尾大小有关,故带尾计算通常用自洽方法计算。利用上面算得的  $\gamma$  函数,并用适当的指数带尾来近似 Halperin-Lax 带尾或 Kane 带尾,可以较方便地计算势能涨落和屏蔽长度。计算过程为:对给定的总掺杂浓度和空穴浓度,用抛物带作零级近似,从图 1 得相应  $\gamma$  值并算得  $Q^{-1}$  和  $V_{rms}$ ,将 Halperin-Lax 带尾和 Kane 带尾分别用  $E_0 = V_{rms}/2.7$  和  $E_0 = V_{rms}/\sqrt{2}^{[13]}$  的指数带尾来近似,把所得的  $\epsilon_0$  值作为一级近似重复上面计算直至自洽。由于  $V_{rms} \propto \gamma^{-1/4}$ ,故采用指数带尾近似对计算  $V_{rms}$  的影响并不大。

### 三、不同补偿度下的带尾

在高掺杂补偿 P 型半导体中,设总掺杂浓度为  $N$ ,施主浓度为  $N_D$ ,受主浓度为  $N_A$ ,补偿度为  $K$ ,平衡空穴浓度为  $P_0$ ,有

$$N = N_A + N_D, \quad (11)$$

$$K = \frac{N_D}{N_A} \leq 1, \quad (12)$$

$$P_0 = N_A - N_D = \frac{1-K}{1+K} N, \quad (n_0 \ll P_0) \quad (13)$$

$$V_{rms}^2 = \frac{2\pi e^4 N}{\epsilon^2 Q}. \quad (14)$$

平衡情况下

$$Q^{-1} = \left( \frac{4\pi e^2}{\epsilon k T} \right)^{-1/2} P_0^{-1/2} \gamma^{-1/2}, \quad (15)$$

$$V_{rms} = \left( \frac{2\pi e^4}{\epsilon^2} \right)^{1/2} \left( \frac{4\pi e^2}{\epsilon k T} \right)^{-1/4} N^{1/2} P_0^{-1/4} \gamma^{-1/4}. \quad (16)$$

根据 Halperin-Lax 模型,带尾态密度

$$\rho_{it}(E) = (QE_{Qi})^3 \xi^{-2} a(\nu_i) \exp[-E_{Qi}^2 b(\nu_i)/2\xi]^{[1]}, \quad (17)$$

其中  $\xi = V_{rms}^2$ ,  $E_{Qi} = \hbar^2 Q^2 / 2m_i^*$ ,  $\nu_c = \frac{E_c - E}{E_{Qc}}$ ,  $\nu_v = \frac{E - E_v}{E_{Qv}}$ ,  $i = c, v$ .  $a(\nu)$ ,  $b(\nu)$

是两个无量纲变量,在[1]中已用表列出。由于 Halperin-Lax 模型中所用的近似,式(17)只

在带尾深处成立。通常认为  $E > E_c$  时电子能谱受杂质影响较小, 仍可用抛物带态密度<sup>[1,7]</sup>。在抛物带和 Halperin-Lax 带尾间的部分有各种插入法, 本文采用 Hwang<sup>[7]</sup> 的插入方法: 在半对数坐标纸上用一根既与抛物带相切又与 Halperin-Lax 带尾相切的直线作为插入函数, 这种插入实际上是在这一段用指数带尾来近似。

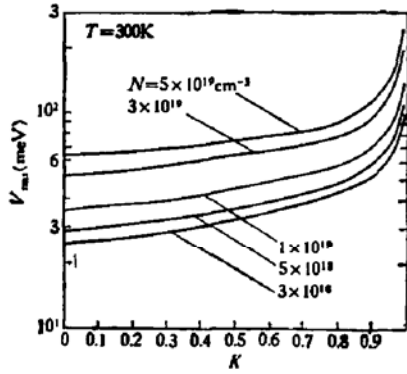


图 2  $V_{ms}$  随补偿度的变化

在 Kane 模型中, 带尾态密度为<sup>[2]</sup>

$$\rho_{ik}(E) = A_i \eta^{1/2} y(E'/\eta), \quad (18)$$

其中  $\eta = \sqrt{2 V_{rms}}$ ,

$$y(x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^x (x-z)^{1/2} e^{-z^2} dz, \quad (19)$$

$E'$  从带边算起, 向带内为正。用前节所述自洽计算方法, 用 Halperin-Lax 模型计算了室温下总掺杂浓度  $3 \times 10^{18} - 5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  的不同补偿度下的  $V_{rms}$  如图 2, 可以看到, 随补偿度增加, 势能涨落变大。同时计算了  $N = 3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$  时不同补偿程度下的带尾态密度如图 3。

$K = 0.6$  时不同  $N$  的带尾态密度如图 4。图中  $E_1, E_2$  分别是导带底和价带顶算起的能量, 向带内为正, 细虚线即 Hwang 的插入函数。可以看到, 随补偿度的增加, 带尾逐渐变大。当  $K$  接近 1 时这种增大尤其显著。这是由于补偿度大时自由载流子浓度变小, 屏蔽减弱, 势能涨落变大, 带尾也随之变大。

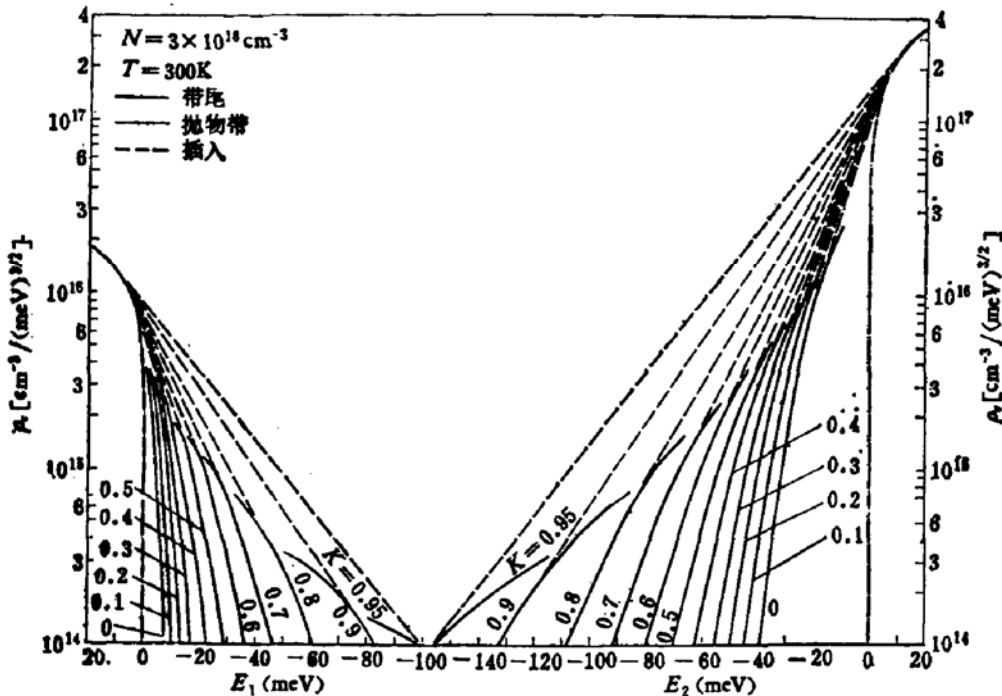


图 3 Halperin-Lax 模型下带尾态密度随补偿度的变化

为了对照, 用 Kane 模型计算了室温下  $N = 3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$  不同补偿度下的带尾态密度如图 5, 其中  $E_1, E_2$  定义同图 3, 4。可见与 Halperin-Lax 带尾相比, Kane 带尾要大得多, 这是由于 Kane 模型中没有考虑到带尾深处电子的定域性, 因而过高估计了态密度。

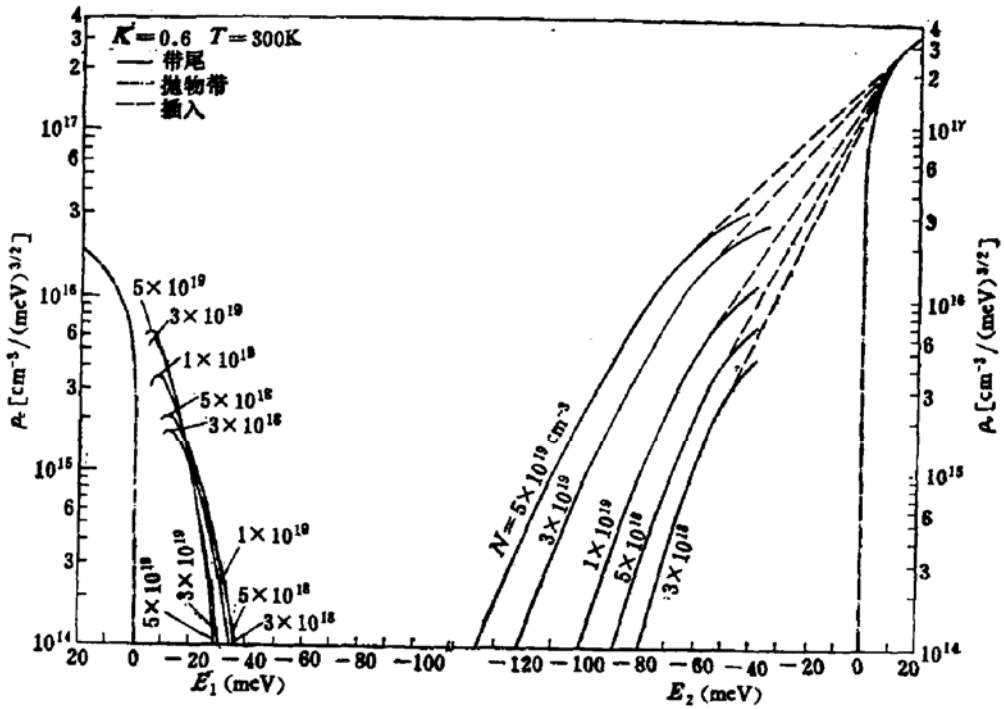


图4 Halperin-Lax 模型下带尾态密度随总掺杂浓度的变化

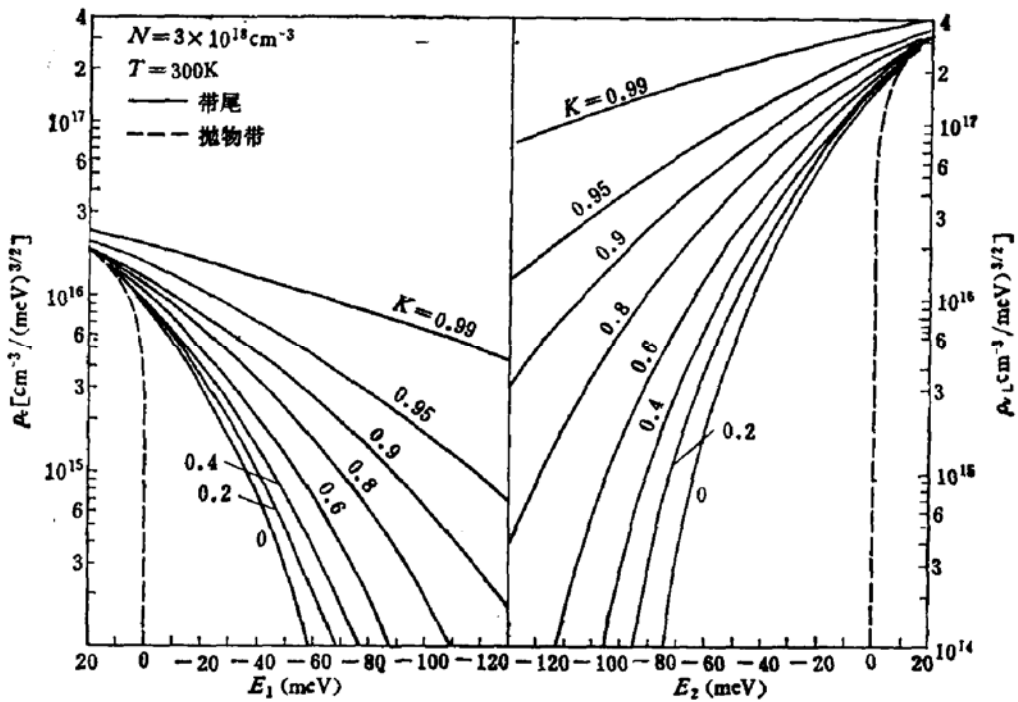


图5 Kane 模型下带尾态密度随补偿度的变化

#### 四、注入水平和较深受主能级的影响

在有载流子注入时,参加屏蔽的载流子增多,屏蔽势变小,势能涨落变小,带尾也随之变小。此时电子和空穴的总屏蔽由

$$Q^2 = Q_p^2 + Q_n^2 = \frac{4\pi e^2}{\epsilon kT} (P\gamma_p + n\gamma_n) \quad (20)$$

给出,其中  $\gamma_p, \gamma_n$  分别是第一节中定义的空穴和电子的  $\gamma$  函数,

$$P = P_0 + \Delta P, \quad n = n_0 + \Delta n \approx \Delta n, \quad \Delta n = \Delta P.$$

此时 
$$V_{rms} = \left(\frac{2\pi e^4}{\epsilon^2}\right)^{1/2} \left(\frac{4\pi e^2}{\epsilon kT}\right)^{-1/4} N^{1/2} (P\gamma_p + n\gamma_n)^{-1/4}. \quad (21)$$

用 Halperin-Lax 模型和自洽方法计算了  $\Delta P$  为  $1 \times 10^{15} - 1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  时  $V_{rms}$  随  $\Delta P$  的变化如图 6. 从图中可见小注入条件下  $P \approx P_0, n \ll P_0$ , 势能涨落与平衡时相同, 大注入时势能涨落随注入增加而逐渐减小, 对补偿度高的样品, 大注入条件容易达到, 因而容易观察到势能涨落随注入的变化.

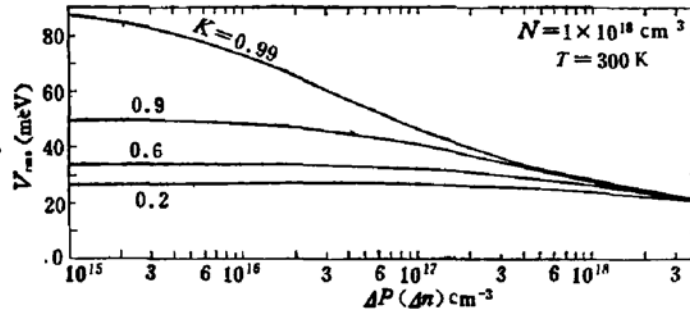


图 6 Halperin-Lax 模型下  $V_{rms}$  随注入载流子浓度  $\Delta P$  的变化

当高掺杂半导体中除了掺有浅施主和浅受主外,还掺有产生较深受主能级的杂质时,可以认为杂质势  $V = V_1 + V_2$ , 其中  $V_1$  是浅杂质的势,  $V_2$  是较深受主的势. 由于较深受主能级束缚较紧,可以认为势能的涨落主要是由  $V_1$  的涨落决定,故  $V_{rms}$  仍可用式(3)近似地计算,只是求和时只计及浅杂质. 而较深受主能级随势能涨落而起伏. 因而在态密度上扩展为高斯型杂质带. 图 7 画出了这时的能带结构示意图. 由于较深受主能级的存在,平衡时一部分空穴束缚在较深受主能级上,价带中空穴减少,屏蔽作用减弱,而且屏蔽长度将与较深受主能级的位置和浓度有关.

对掺 Si 的 GaAs, 通常认为 Si 取代 Ga 位时产生浅施主能级 ( $\sim 3\text{meV}$ ), Si 取代 As 位时产生浅受主能级 ( $\sim 30\text{meV}$ ), 取代 Ga 的 Si 和取代 As 的 Si 相邻时(Si-Si 对)产生较深受主能级 ( $\sim 100\text{meV}$ )<sup>[14,15]</sup>. 设总掺杂浓度为  $N$ , 其中浅施主浓度为  $N_{D1}$ , 浅受主浓度为  $N_{A1}$ , Si-Si 对浓度为  $N_{D2} = N_{A2}$ , 则

$$N = N_{D1} + N_{A1} + N_{D2} + N_{A2}, \quad (22)$$

$$K = (N_{D1} + N_{D2}) / (N_{A1} + N_{A2}), \quad (23)$$

$$P_0 = (N_{A1} + N_{A2}) - (N_{D1} + N_{D2}) = \frac{1-K}{1+K} N, \quad (24)$$

$$L = N_{D2} / (N_{D1} + N_{D2}), \quad (0 \leq L \leq 1), \quad (25)$$

$$N_{A1} + N_{D1} = \left(1 - \frac{2LK}{1+K}\right) N, \quad (26)$$

$$N_{A2} = N_{D2} = \frac{LK}{1+K} N, \quad (27)$$

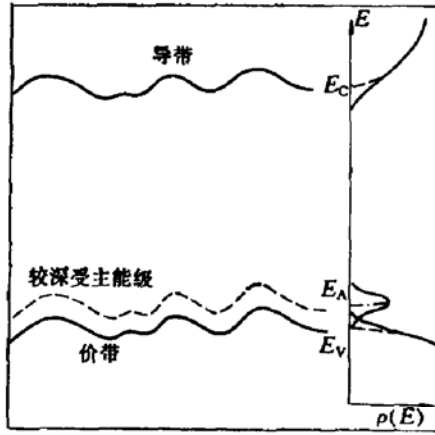
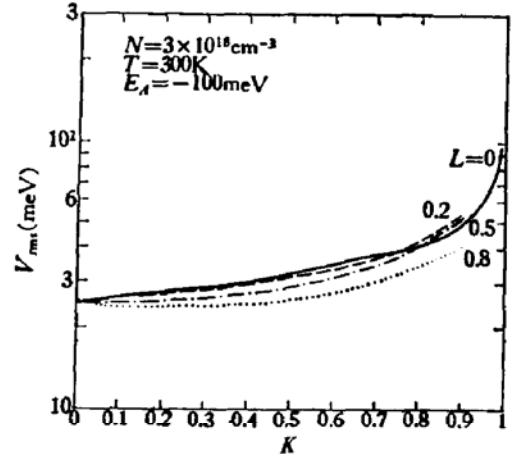


图7 有较深受主能级时能带结构示意图

图8 有深受主能级时  $V_{tm}$  随补偿度的变化

其中  $L$  反映 Si-Si 对所占比例的多少. 此时

$$V_{tm} \approx \left( \frac{2\pi e^4}{\epsilon^2} \right)^{1/2} \left( \frac{4\pi e^2}{\epsilon kT} \right)^{-1/4} (N_{D1} + N_{A1})^{1/2} P_v^{-1/4} \gamma^{-1/4}, \quad (28)$$

$$P_0 = P_v + P_A = A_v (kT)^{3/2} \gamma_1 + \zeta N_{A2}, \quad (29)$$

其中  $P_v$  是价带(包括带尾)中空穴数,  $P_A$  是较深受主能级中空穴数,  $\zeta = P_A/N_{A2}$  是较深受主能级中空穴占据比例. 较深受主能级的态密度为<sup>[3]</sup>

$$\rho_A(E) = (N_{A2}/\sqrt{\pi E_{21}}) \exp \left[ - \left( \frac{E - E_A}{E_{21}} \right)^2 \right], \quad (30)$$

其中  $E_{21} = \sqrt{2} V_{tm}$ , 所有能量均从价带顶算起向价带为正. 利用式(22)–(30)和自洽方法, 采用 Halperin-Lax 模型计算了室温下  $L = 0.2, 0.5, 0.8$ ,  $N = 3 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ ,  $E_A = -100 \text{meV}$  不同补偿度下的  $V_{tm}$  如图8. 从图中可以看到, 在总掺杂浓度和补偿度不变的条件下, 有较深受主能级时浅杂质数减小将使  $V_{tm}$  减小, 价带中空穴数减小将使  $V_{tm}$  增大, 最终效果由两者共同决定. 补偿度高的样品  $V_{tm}$  将变大.

## 五、结 论

在总掺杂浓度不变时, 随补偿度增加, 参加屏蔽的自由载流子减少, 势能涨落变大, 带尾也变大.

注入使参加屏蔽的载流子增多, 从而使势能涨落变小.

较深受主能级随浅杂质的无规场起伏而形成高斯型杂质带. 使价带中空穴数减少, 屏蔽减弱, 势能涨落变大.

掺 Si-GaAs 材料由于 Si 是双性杂质, 补偿度较高, 并存在较深受主能级, 故这种材料中势能涨落特别大, 带尾效果特别明显.

带尾的存在将对高掺杂半导体的自发发射光谱和辐射复合寿命等产生影响. 而从自发发射光谱的实验测量可以得到带尾形状和大小信息<sup>[26]</sup>.

## 参 考 文 献

- [1] B. I. Halperin and M. Lax, *Phys. Rev.*, 148, 722(1966); 153, 802 (1967).  
 [2] E. O. Kane, *Phys. Rev.*, 131, 79(1963).  
 [3] T. N. Morgan *Phys. Rev.*, 139, A343(1965).  
 [4] V. L. Bonch-Bruевич. *Semiconductors and Semimetals* 1, 101(1966); *The Electronic Theory of Heavily Doped Semiconductors*. American Elsevier Publishing Co. Inc. New York (1966).  
 [5] P. A. Wolff, *Phys. Rev.*, 126, 405(1962).  
 [6] R. H. Parmenter, *Phys. Rev.*, 97, 587(1955); 104, 22(1956).  
 [7] C. J. Hwang, *Phys. Rev.*, B2, 4117(1970); *J. Appl. Phys.*, 41, 2668(1970).  
 [8] R. Eymard, G. Duraffourg, *J. Phys.*, D6, 66(1973).  
 [9] Z. G. Koinov, I. Y. Yanchev, *J. Phys.*, C11, L253(1978).  
 [10] M. Cross, M. J. Adams, *Opto-electronica*, 6, 199(1974).  
 [11] 王启明、杜宝勋, 半导体通讯, 1979年 第2—3期 43页。  
 [12] V. S. Bagaev, Y. N. Berozashvili, V. L. Keldysh, A. P. Shotov, B. M. Vul. E. L. Zavaritskaya. 7th. Int. Conf. on the Phys. of Semiconductors, Vol. 4, Radiative Recombination in Semiconductors, Paris (1964), 149.  
 [13] 杜宝勋, 半导体学报, 第3卷 第6期 (1982).  
 [14] H. Kressel, J. V. Dunse, H. Nelson, F. Z. Hawrylo. *J. Appl. Phys.* 39, 2006(1968)  
 [15] 北京大学物理系发光管组, “P型砷化镓中补偿程度对杂质能带的影响”(1975), 1978年全国发光学学术会议文集 《国外发光与电光》 1979年 第1—2期 106—114页。  
 [16] 郭长志、李国华、张敬明、郑宝贞, 《发光与显示》 1981年 第2期 12页。

## Influence of Compensation Degree and Injection Level on Bandtail-Structure in Heavily Doped Semiconductors

Guo Changzhi and Li Guohua

(Department of Physics, Peking University)

### Abstract

The factors influencing the fluctuation of impurity potential energy in heavily doped semiconductors have been analysed. A simple approximate method for a self-consistent calculation has been proposed. The rms potential energy fluctuation and the Halperin-Lax bandtail have been calculated for samples of various degrees of compensation. It has been found that the potential energy fluctuation and the size of the bandtail increase rapidly with the degree of compensation. The influences of injection level and deeper acceptors on potential energy fluctuation have been analysed, and it is found that the injection will reduce the size of the bandtail, whereas the deeper acceptors will make it bigger.