

# 掺金 N 型硅中静态电荷转移机制的统计研究

颜永美

(厦门大学物理系, 361005)

19980608收稿, 19980910收改稿

**提要** 应用统计方法, 研究了掺金 N 型硅中各杂质能级上的电荷密度及载流子浓度随温度的变化, 探讨了系统的静态电荷转移机制, 所得结果支持了硅中金受主能级与施主能级本属同一金杂质的两个能级的认识

**关键词:** 掺金硅 电荷转移机制 统计方法

**中图分类号:** TN 304 12

## Study on the Charge Transfer Mechanism at Static State in N Type Silicon Doped Gold Using Statistic Method

Yan Yongmei

(Dept. of Phys., Xiamen Univ., 361005 CHN)

**Abstract** It is studied that the concentration of carrier and the charge density on energy levels of impurities in the N type silicon doped gold vary with temperature by statistic method. Thereby the charge transfer mechanism at static state is approached. The results support the knowledge that the gold acceptor level and the gold donor level in silicon essentially originate from the same gold impurity.

**Key Words** Silicon Doped Gold Charge Transfer Mechanism Statistic Method

EEACC 2520

PACC 1220

### 1 引言

位于硅禁带中的金受主能级与施主能级显著影响着硅材料的物理性质和硅器件的电学性能, 因此, 其行为多年来一直是被人们重视和广泛研究的课题之一。然而, 对于硅中金杂质的许多重要特性的认识, 例如金的施主能级和受主能级是否属于同一杂质的两个能级; 当硅的禁带宽度随温度上升而变窄时, 金杂质的受主能级与施主能级是否受温度变化影响等等, 学术界长期以来是有争议的。本文设定了硅中金的受主能级和施主能级本属于同一金杂质的两个能级,

应用统计方法计算了不同温度下掺金 N 型硅中各杂质的离化密度与载流子浓度, 并予以讨论。所得结果对于加深认识掺金硅中的静态电荷转移机制, 进一步探讨硅中金施主能级与受主能级俘获载流子的特性是有一定参考价值的。

根据所得结果的合理性与可解释性, 本文也在一定程度上支持了硅中金的受主能级与施主能级本属同一金杂质的两个能级的认识。

## 2 原理与计算

在无光照、无外场情况下, 掺金 N 型硅中的费米能级可以通过求解电中性条件方程得到, 即有

$$n_o + N_{\bar{A}} + N_{\bar{Au}} = P_o + N_D^+ + N_{Au}^+ \quad (1)$$

其中  $n_o$  为半导体中热平衡电子浓度,  $N_{\bar{A}}$  为离化的受主杂质浓度,  $N_{\bar{Au}}$  为离化的金受主杂质浓度,  $P_o$  为半导体中热平衡空穴浓度,  $N_D^+$  为离化的施主杂质浓度,  $N_{Au}^+$  为离化的金施主杂质浓度。

由于所考虑的是高阻 N 型硅 ( $\rho \approx 30 \Omega \cdot \text{cm}$ ), 有  $N_D^+ \gg N_{\bar{A}}$ , 因而可近似认为  $N_{\bar{A}} = 0$  则 (1) 式可被改写为

$$n_o + N_{\bar{Au}} = P_o + N_D^+ + N_{Au}^+ \quad (2)$$

对于金杂质, 中性原子 ( $Au$ ) 记为  $Au^0$  则应有

$$N_{Au} = N_{Au^0} + N_{Au}^+ + N_{\bar{Au}} \quad (3)$$

其中  $N_{Au^0}$ ,  $N_{Au}^+$ ,  $N_{\bar{Au}}$  分别是金的三个电荷状态的原子、离子浓度。根据文献 [1], 它们有如下关系

$$N_{\bar{Au}} : N_{Au^0} : N_{Au}^+ = \exp[-(E_{Au^0} - E_F)/kT] : 1 : \exp[(E_{Au^+} - E_F)/kT] \quad (4)$$

联立 (3)、(4) 两式, 可得

$$N_{\bar{Au}} = N_{Au} / \{1 + \exp[(E_{Au^0} - E_F)/kT] (1 + \exp[(E_{Au^+} - E_F)/kT])\} \quad (5)$$

$$N_{Au}^+ = N_{Au} / \{1 + \exp[(E_F - E_{Au^+})/kT] (1 + \exp[(E_F - E_{Au^0})/kT])\} \quad (6)$$

又, 非简并情况下

$$n_o = N_C \cdot \exp[(E_F - E_C)/kT] \quad (7)$$

$$P_o = N_V \cdot \exp[(E_V - E_F)/kT] \quad (8)$$

$$N_D^+ = N_D / \{1 + \exp[(E_F - E_D)/kT]\} \quad (9)$$

其中  $E_D$  为浅施主能级,  $E_C$ ,  $E_V$  分别为硅的导带底与价带顶能级, 而导带底、价带顶的态密度  $N_C$  与  $N_V$  分别为

$$N_C = 2(\pi m_e kT / h^2)^{3/2} \quad (10)$$

$$N_V = 2(\pi m_h kT / h^2)^{3/2} \quad (11)$$

当以  $E_V = 0$  为参考值时, 则硅的导带底能级  $E_C$  随温度  $T$  的变化可由文献 [2] 给出, 为

$$E_C = 1.17 - [4.73T^2 / (T + 636)] \times 10^{-4} \text{ (eV)} \quad (12)$$

且文献 [2] 还给出了 N 型硅常用的本底掺杂砷杂质的浅施主能级为  $E_D = E_C - 0.054 \text{ eV}$ 。又由文献 [3] 给出硅中金杂质的受主能级和施主能级分别为  $E_{Au^0} = E_C - 0.54 \text{ eV}$  和  $E_{Au^+} = E_V + 0.34 \text{ eV}$ , 并认为均不随温度变化。再由 N 型硅样品的电阻率  $30 \text{ K} \cdot \text{cm}$  可得本底浅施主杂质浓度为  $N_D = 1.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 。而对于硅的电子与空穴的有效质量  $m_e$  与  $m_h$  同温度的关系, 文献

[4]分别给出,为

$$m_e = \begin{cases} \{1.065 + [(1.18 - 1.065) \times (T - 50)]\} / 250 & T > 50 \text{ K} \\ 1.065 & T < 50 \text{ K} \end{cases} \quad (13)$$

$$m_h = \begin{cases} \{0.59 + [(0.81 - 0.59) \times (T - 40)]\} / 260 & T > 40 \text{ K} \\ 0.59 & T < 40 \text{ K} \end{cases} \quad (14)$$

再根据文献 [5] 计算, 硅单晶在  $1100^\circ\text{C}$  下金扩散  $70'$  (恒定表面源扩散), 可得其掺金浓度为  $N_{Au} = 3.298 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

采用上述简化模型, 将式 (5)~ (14) 及有关的数据代入 (2) 式, 则 (2) 式中只有  $E_F$  作为自变量  $T$  的唯一因变量, 因而可求得不同温度下分别对应的费米能级  $E_F$  值. 但此时 (2) 式为超越方程, 须用数值逼近方法求解, 例如采用自动搜索的区间二分法, 由微机解得不同温度下的  $E_F$  值, 进而以各  $E_F$  值代回 (5)~ (9) 式, 便可求得不同温度下的  $N_{Au}^-, N_{Au}^+, n, p, N_D^+$  值, 从而获得一组所需数据.

采用自动搜索的区间二分法数值逼近求解超越方程 (2) 式获得不同温度下的费米能级  $E_F$  值, 计算精度控制为  $\epsilon = 10^{-6} (\text{eV})$ , 进而得到的一组数据如表 1 所示.

表 1 不同温度下过补偿掺金 N 型硅中 Fermi 能级、各杂质离化浓度、载流子浓度计算值

Tab 1 Calculated values of Fermi level concentration of the ionization impurities and concentration of carriers in N type silicon superdoped gold at various temperatures

| $T / \text{K}$ | $E_F / \text{eV}$ | $N_{Au}^- \times 10^{14} / \text{cm}^{-3}$ | $N_{Au}^+ / \text{cm}^{-3}$ | $N_D^+ \times 10^{14} / \text{cm}^{-3}$ | $n_o / \text{cm}^{-3}$ | $P_o / \text{cm}^{-3}$ |
|----------------|-------------------|--|-----------------------------|---|------------------------|------------------------|
| 300            | 0.509 915         | 1 744 309                                  | $4.381 0 \times 10^{12}$    | 1 700 000                               | $1.548 5 \times 10^9$  | $5.038 3 \times 10^0$  |
| 250            | 0.533 903         | 1 703 883                                  | $3.881 2 \times 10^{11}$    | 1 700 000                               | $1.713 8 \times 10^7$  | $2.255 7 \times 10^8$  |
| 200            | 0.557 141         | 1 700 079                                  | $1.065 0 \times 10^{10}$    | 1 700 000                               | $2.263 8 \times 10^4$  | $7.887 6 \times 10^4$  |
| 180            | 0.566 013         | 1 699 986                                  | $1.484 5 \times 10^9$       | 1 700 000                               | $5.888 \times 10^2$    | $1.014 \times 10^3$    |
| 160            | 0.574 605         | 1 700 011                                  | $1.290 2 \times 10^8$       | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 150            | 0.578 788         | 1 699 977                                  | $3.005 4 \times 10^7$       | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 140            | 0.582 893         | 1 700 031                                  | $5.722 3 \times 10^6$       | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 130            | 0.586 916         | 1 700 007                                  | $8.503 6 \times 10^5$       | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 120            | 0.590 853         | 1 700 003                                  | $9.272 8 \times 10^4$       | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 110            | 0.594 702         | 1 699 968                                  | $6.822 \times 10^3$         | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 100            | 0.598 459         | 1 699 985                                  | $3.0 \times 10^2$           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 80             | 0.605 681         | 1 700 062                                  | 0                           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 70             | 0.609 137         | 1 700 007                                  | 0                           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 60             | 0.612 485         | 1 699 938                                  | 0                           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 50             | 0.615 719         | 1 699 988                                  | 0                           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 40             | 0.618 835         | 1 699 973                                  | 0                           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 30             | 0.621 827         | 1 700 040                                  | 0                           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 20             | 0.624 688         | 1 699 765                                  | 0                           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |
| 10             | 0.627 415         | 1 700 024                                  | 0                           | 1 700 000                               | 0                      | 0                      |

### 3 讨论

对于所研究的样品, 其金杂质浓度  $N_{Au}$  远大于样品的本底浓度  $N_D$ , 因而属于金过补偿情

况。在这种情况下,由计算结果可以看出,常温以下掺金杂质只有很少部分作为施主杂质和受主杂质而离化 ( $N_{Au}^- + N_{Au}^+ \ll N_{Au}$ )。这个结果显然是合理的,因根据电中性条件,常温下, N 型硅中起俘获多子电子主要作用的金受主能级,其离化的受主浓度也应受到浅施主杂质离化浓度的主要限制。同时还可以看到:

(1) 常温下 (300 K 附近), 对于未扩散金的同样掺杂浓度 ( $N_D = 1.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ ) 的硅样品, 其费米能级可算为  $E_F = 0.8181 \text{ eV}$ 。样品表现为 N 型, 热平衡多子电子浓度  $n_0 = 1.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , 远大于热平衡少子空穴浓度  $p_0 = 1.2 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ 。然而在此处所考虑的过补偿情况下,  $E_F = 0.50992 \text{ eV}$  处于硅的本征能级  $E_i = E_G/2 = 0.5623 \text{ eV}$  之下, 因而却表现出弱 P 型的性质, 有  $n_0 = 1.5485 \times 10^9 < p_0 = 5.0383 \times 10^{10}$  的结果。这显然是由于 N 型硅中, 多子为电子, 且金杂质的受主能级  $E_{Au}^-$  比起施主能级  $E_{Au}^+$  远为靠近本征能级  $E_i$ , 使其俘获电子的能力远大于金施主能级俘获空穴的能力, 因而有  $N_{Au}^- = 1.744 \times 10^{14} \gg N_{Au}^+ = 4.38 \times 10^{12}$ , 又因处于金过补偿的情况下, 即使浅施主杂质全部离化, 也不足以提供金受主离化所需要的全部电子。这除了还需要接受来自金施主离化所提供的全部电子外, 还需要接受部分的热激发自由电子, 造成了本样品的实际弱 P 型状况。

(2) 当温度降低至 160 K 附近, 硅禁带宽度变宽为  $E_g = 1.1548 \text{ eV}$ , 此时  $E_F = 0.5746 \text{ eV}$ , 趋于本征能级  $E_i$ ; 又因处于低温, 热激发甚微, 使得  $n_0 \approx p_0 \rightarrow 0$  因而明显有  $N_{Au}^- = N_D^+ + N_{Au}^+$ , 亦即金受主能级离化所接受的电子来源于浅施主杂质的全部离化与金施主能级少量离化所提供的电子。

(3) 当温度大约低于 150 K 以后, 费米能级  $E_F$  上升越过本征能级  $E_i$ 。由于  $E_{Au}^-$  比  $E_{Au}^+$  更为接近  $E_i$ , 使其接受电子的能力远大于  $E_{Au}^+$  接受空穴的能力, 因此  $N_{Au}^+$  逐渐减少至零, 而  $N_{Au}^-$  保持与  $N_D^+$  近似相等为  $1.7 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 。当  $T$  小于 80 K 以后,  $N_{Au}^+ = 0$  因而  $N_{Au}^- = N_D^+$ , 而且  $E_F$  趋于  $E_{Au}^-$ 。这显然是由于温度的降低, 使得电子要首先回落到最低能级  $E_{Au}^+$  上, 因而  $N_{Au}^+ \rightarrow 0$ 。由于金受主能级在甚低温下还有很强的电子俘获能力, 使浅施主杂质尚需全部离化, 而所离化的电子全部为金受主能级所接受。或者说, 甚低温下, 浅施主能级  $E_D$  上的电子需全部落入远低于  $E_D$  的金受主能级  $E_{Au}^-$  上, 这就使得  $T \rightarrow 0$  时,  $E_F$  只能逼近于  $E_{Au}^-$  而最终被钉在  $E_{Au}^-$  能级处之上。

总之, 整个体系的电荷转移过程, 正是由于温度降低时, 电子具有从高能态落入低能态的趋势所引起的。当然, 以上过程是发生在 N 型硅的金过补偿的情况下, 金受主能级俘获电子应当在静态电荷转移过程中起主导作用。然而, 如是 P 型硅的情况, 则应是金施主能级俘获空穴在整个静态电荷转移过程中起主导作用。这一情况已为文献 [6] 依据与上述类似的统计原理而作出的计算所确认。

显然, 上述金受主能级在 N 型硅中起俘获电子进而复合载流子的主导作用, 而金施主能级在 P 型硅中起俘获空穴进而复合载流子的主导作用正是与实际情况相符的半导体物理中的一个重要结论。因而根据本文所依据的设定条件, 则是支持了硅中金受主能级与金施主能级本属同一金杂质的两个能级的认识。

文献 [7] 的实验结果也支持了这一认识。

参 考 文 献

1 Moll J L. *Physics of Semiconductors*, New York McGraw Hill Inc, 1964

2 Sze S M. *Physics of Semiconductor Devices* 2nd Edn, New York Wiley, 1981

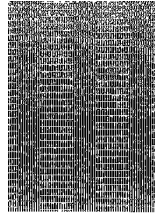
3 Brotherton S D, Lowther J E. *Phys Rev Lett*, 1980, **44**: 606

4 Barber H D. *Solid State Electronics*, 1967, **10**: 1 039

5 W lox W R, Lachapelle T J. *J Appl phys*, 1964, **35**: 240

6 廖英豪. 低温下硅的光伏效应, 厦门大学硕士学位论文, 1988年 8月

7 颜永美. 半导体学报, 1991, **12**: 6



颜永美 (Yan Yongmei) 男, 1942年生, 1965年毕业于厦门大学物理系, 现任该系副教授. 长期从事半导体学科的教学、科研工作. 曾在《Appl Phys Lett》《半导体学报》《固体电子学研究与发展》《厦门大学学报》《半导体技术》等国内外刊物及全国学术会议上发表论文约 30篇.

固体电子信息

输出功率 100W 的 FET

据日本《NEC技报》1998年第 5期报道, NEC公司新开发的异质结场效应管, 最大输出功率达 100W. 计划应用于宽带 CDMA 式移动通信基站的功率发射.

该器件为了在 2GHz 下获得足够的增益和在 10V 电源下工作, 在栅极接触的表面半导体层使用了宽禁带的 AlGaAs 而在电子渡越的沟道层采用迁移率高的 GaAs. 与该公司原 GaAs FET 相比, 可获得高出 20% 的功率密度. 图 1 为该器件的照片. 为了在多种环境温度下能进行稳定的 100W 大功率输出, 进行了 FET 栅图形布列最佳设计, 达到了极低的热阻.

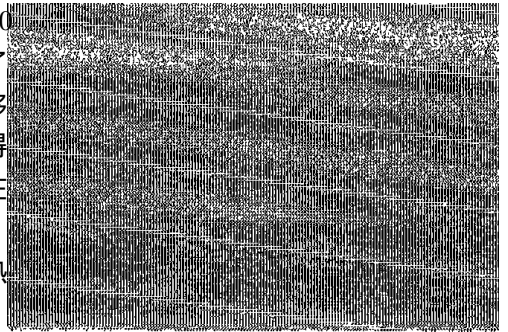


图 1 频率为 2GHz 功率为 100W 的 FET

该器件在频率 2.2GHz 下, 输出 50 dBm (100W) 时, 增益为 10 dB, 功率附加效率为 45%.

(孙再吉)