

2023春半导体物理习题课

第一章 半导体中的电子状态

宋冰睿 王民泽

2023 年 3 月 24 日

Contents

- 1 题1.1
- 2 题1.2
- 3 题1.3
- 4 题1.4
- 5 题2.7
- 6 补充题1
- 7 补充题2

能带与有效质量的简单计算

设一维晶格的晶格常数为 a . 其导带极小值附近能量 $E_c(k)$ 和价带极大值附近能量 $E_v(k)$ 分别为

$$\begin{cases} E_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{3m_0} + \frac{\hbar^2 (k - k_1)^2}{m_0} \\ E_v(k) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{6m_0} - \frac{3\hbar^2 k^2}{m_0} \end{cases} \quad (1.1)$$

式中, m_0 为电子惯性质量, $k_1 = \frac{\pi}{a}$, $a = 0.314\text{nm}$. 试求:

- ① 禁带宽度;
- ② 导带底电子有效质量;
- ③ 价带顶电子有效质量;
- ④ 价带顶电子跃迁至导带底时准动量的变化.

能带与有效质量的简单计算(1)

禁带宽度

$$E_g = E_{c\min} - E_{v\max} \quad (1.2)$$

故需求出式子右端的两者. 为此, 分别令

$$\frac{dE_c}{dk} = 0 = \frac{dE_v}{dk} \quad (1.3)$$

得到

$$\begin{cases} k_c = \frac{3}{4}k_1 = \frac{3\pi}{4a} \\ k_v = 0 \end{cases} \quad (1.4)$$

再将 $m_0 = 9.109 \times 10^{-31} \text{kg}$ 代入式1.2可算得

$$E_g = E_c(k_c) - E_v(k_v) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4m_0 a^2} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{6m_0 a^2} = \frac{h^2}{48m_0 a^2} \approx 0.637 \text{eV} \quad (1.5)$$

能带与有效质量的简单计算(2)(3)(4)

有效质量

$$\left\{ \begin{array}{l} m_c^* = \frac{\hbar^2}{\left. \frac{d^2 E_c}{dk^2} \right|_{k=k_c}} = \frac{3}{8} m_0 = 3.416 \times 10^{-31} \text{kg} \\ m_v^* = \frac{\hbar^2}{\left. \frac{d^2 E_v}{dk^2} \right|_{k=k_v}} = -\frac{m_0}{6} = -1.518 \times 10^{-31} \text{kg} \end{array} \right. \quad (1.6)$$

准动量变化

$$\hbar \Delta k = \hbar (k_c - k_v) = \frac{3\pi \hbar}{4a} = 7.913 \times 10^{-25} \text{kg} \cdot \text{m/s} \quad (1.7)$$

Contents

- 1 题1.1
- 2 题1.2
- 3 题1.3
- 4 题1.4
- 5 题2.7
- 6 补充题1
- 7 补充题2

能带中电子在外电场中的运动

某一维晶格的晶格常数为 0.25nm . 当外加 10^2V/m , 10^7V/m 的电场时, 试分别计算其中电子自能带底运动至能带顶所需的时间.

能带中电子在外电场中的运动

自能带底运动至能带顶, 电子波矢的变化为1st BZ的半宽 $\frac{\pi}{a}$. 因此

$$T = \frac{\Delta k}{dk/dt} = \frac{\pi/a}{eE/\hbar} = \frac{\pi\hbar}{eEa} \quad (2.1)$$

代入 $a = 0.25\text{nm}$, 当

- $E = 10^2\text{V/m}$ 时, $T = 8.28 \times 10^{-8}\text{s}$;
- $E = 10^7\text{V/m}$ 时, $T = 8.28 \times 10^{-13}\text{s}$.

Contents

- 1 题1.1
- 2 题1.2
- 3 题1.3**
- 4 题1.4
- 5 题2.7
- 6 补充题1
- 7 补充题2

回旋共振实验结果分析

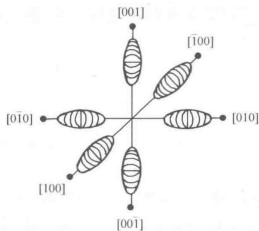
若n型半导体导带的极值在 $[110]$ 轴及相应的对称方向上(即等效取向 $\langle 110 \rangle$), 其回旋共振的实验结果应如何?

回旋共振实验结果分析

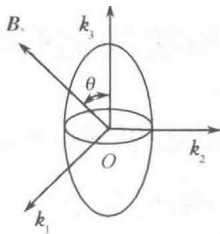
本题与题1.4解法类似, 在本次习题中相对较难, 需要对思路有细致清晰的把握.

参照教材1.6节“硅和锗的能带结构”中的处理, 我们选取 k_1 轴使得 \mathbf{B} 位于 k_1 轴和 k_3 轴所确定的平面内, 如图所示. 所得的有效质量表达式为

$$m_n^* = m_t \sqrt{\frac{m_l}{m_t \sin^2 \theta + m_l \cos^2 \theta}} \quad (3.1)$$



(a) 以Si为例的能带结构图



(b) \mathbf{B} 在 k 空间局域坐标

回旋共振实验结果分析

需要注意的是, 上页图(b)的 k 空间坐标系 $Ok_1k_2k_3$ 只是在材料导带底附近等能面处的**局域坐标系**, 而非在整个倒空间中考察材料时所用的坐标系 $OK_1K_2K_3$ ——后者确定了 $[100]$, $[110]$ 这些具体的方向.

既然是局域坐标系, k_3 便并不一定如教材中所述沿 $[001]$ 方向, 而教材中如此选取只是基于硅这一特定材料的导带底附近等能面是沿 $\langle 001 \rangle$ 的旋转椭球面. 在本题语境下, k_3 需要被选取为所考察的这些不同的 $\langle 110 \rangle$.

经过简单分析不难得知, $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 是 B 的**三类特殊取向**, 因而下面进行分类讨论. 简便起见, 分别取这三类方向中具有代表性的 $[100]$, $[110]$, $[111]$ 即可.

另外需明确, 等效取向 $\langle 110 \rangle$ 包含 $[\pm 1, \pm 1, 0]$, $[\pm 1, 0, \pm 1]$, $[0, \pm 1, \pm 1]$ 共12个取向.

回旋共振实验结果分析

- B 沿 $[100]$ 方向时, 将与

① $[0, \pm 1, \pm 1]$ 共4个方向给出 $\cos^2 \theta = 0$ (注意此时的 k_3 选取为 $[0, \pm 1, \pm 1]$, 下面类似). 相应的 $m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$;

② $[\pm 1, \pm 1, 0], [\pm 1, 0, \pm 1]$ 共8个方向给出 $\cos^2 \theta = \frac{1}{2}$. 相应

$$\text{的 } m_n^* = m_t \sqrt{\frac{2m_l}{m_l + m_t}}.$$

故此时有2个吸收峰.

- B 沿 $[110]$ 方向时, 将与

① $[1, -1, 0], [-1, 1, 0]$ 共2个方向给出 $\cos^2 \theta = 0$. 相应的 $m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$;

② $[\pm 1, \pm 1, 0]$ 共2个方向给出 $\cos^2 \theta = 1$. 相应的 $m_n^* = m_t$;

③ $[\pm 1, 0, \pm 1], [0, \pm 1, \pm 1]$ 共8个方向给出 $\cos^2 \theta = \frac{1}{4}$. 相应

$$\text{的 } m_n^* = m_t \sqrt{\frac{4m_l}{m_l + 3m_t}}.$$

故此时有3个吸收峰.

回旋共振实验结果分析

- B 沿 $[111]$ 方向时, 将与

- ① $[1, 0, -1], [-1, 0, 1], [-1, 1, 0], [1, -1, 0], [0, 1, -1], [0, -1, 1]$ 共6个方向给出 $\cos^2 \theta = 0$. 相应的 $m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$;

- ② $[1, 0, 1], [-1, 0, -1], [1, 1, 0], [-1, -1, 0], [0, 1, 1], [0, -1, -1]$ 共6个方向给出 $\cos^2 \theta = \frac{2}{3}$. 相应的 $m_n^* = m_t \sqrt{\frac{3m_l}{2m_l + m_t}}$.

故此时有2个吸收峰.

- B 沿其他一般方向时, 不难得知 $\cos^2 \theta$ 最多将给出6个(12/2)不同值, 故有6个吸收峰.

Contents

- 1 题1.1
- 2 题1.2
- 3 题1.3
- 4 题1.4**
- 5 题2.7
- 6 补充题1
- 7 补充题2

回旋共振实验结果分析

已知n型Ge导带极值在[111]轴及相应的对称方向上(即等效取向 $\langle 111 \rangle$), 其回旋共振的实验结果应如何?

回旋共振实验结果分析

需明确, 等效取向 $\langle 111 \rangle$ 包含 $[\pm 1, \pm 1, \pm 1]$ 共8个取向.

与上题类似, 就 B 的取向情况进行分类讨论:

- B 沿 $[100]$ 方向时, 将与全部的8个方向给出 $\cos^2 \theta = \frac{1}{3}$. 相应

的 $m_n^* = m_t \sqrt{\frac{3m_l}{m_l + 2m_t}}$. 故此时有1个吸收峰.

- B 沿 $[110]$ 方向时, 将与

- ① $[-1, 1, \pm 1], [1, -1, \pm 1]$ 共4个方向给出 $\cos^2 \theta = 0$. 相应的 $m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$;

- ② $[1, 1, \pm 1], [-1, -1, \pm 1]$ 共4个方向给出 $\cos^2 \theta = \frac{2}{3}$. 相应

的 $m_n^* = m_t \sqrt{\frac{3m_l}{2m_l + m_t}}$.

故此时有2个吸收峰.

回旋共振实验结果分析

• B 沿 $[111]$ 方向时, 将与

- ① $[1, 1, 1], [-1, -1, -1]$ 共2个方向给出 $\cos^2 \theta = 1$. 相应的 $m_n^* = m_t$;
- ② $[-1, 1, 1], [1, -1, 1], [1, 1, -1], [-1, -1, 1], [-1, 1, -1], [1, -1, -1]$ 共6个方向给出 $\cos^2 \theta = \frac{1}{9}$. 相应的 $m_n^* = m_t \sqrt{\frac{9m_l}{m_l + 8m_t}}$.

故此时有2个吸收峰.

• B 沿其他一般方向时, 不难得知 $\cos^2 \theta$ 最多将给出4个(8/2)不同值, 故有4个吸收峰.

Contents

- 1 题1.1
- 2 题1.2
- 3 题1.3
- 4 题1.4
- 5 题2.7**
- 6 补充题1
- 7 补充题2

类氢模型应用

已知锑化铟的禁带宽度 $E_g = 0.18\text{eV}$, 相对介电常数 $\epsilon_r = 17$, 电子有效质量 $m_n^* = 0.015m_0$, m_0 为电子惯性质量. 求:

- ① 施主杂质电离能;
- ② 施主的弱束缚电子基态轨道半径.

类氢模型应用(1)(2)

参照教材2.1.4节及课件中的讨论, 施主杂质电离能

$$\Delta E_D = \frac{m_n^*}{m_0} \frac{E_0}{\varepsilon_r^2} = 0.015 \times \frac{13.6}{17^2} \approx 7.06 \times 10^{-4} (\text{eV}) \quad (5.1)$$

施主的弱束缚电子基态轨道半径

$$a^* = \frac{m_0}{m_n^*} \varepsilon_r a_0 = 17 \times 0.53 / 0.015 \approx 601 (\text{\AA}) \quad (5.2)$$

◇ 轨道半径表达式可由Bohr的简单氢原子模型导出. 在该模型中, Bohr半径

$$a_0 = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 E_0} \quad (5.3)$$

现在需要作替换 $\varepsilon_0 \rightarrow \varepsilon_0 \varepsilon_r$, $E_0 \rightarrow \Delta E_D$, 得到

$$a^* = \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 \varepsilon_r \Delta E_D} \quad (5.4)$$

再将式5.1代入即可.

Contents

- 1 题1.1
- 2 题1.2
- 3 题1.3
- 4 题1.4
- 5 题2.7
- 6 补充题1**
- 7 补充题2

电子-空穴对的产生

某一半导体材料价带顶附近电子能量可表示为 $E(k) = -10^{-36}k^2(\text{J})$, 能量零点取在价带顶. 此时, 若 $-k_0 = 10^8\text{m}^{-1}$ 处的电子被激发到导带, 而在该处产生一个空穴. 试求此空穴的:

- ① 有效质量;
- ② 准动量;
- ③ 共有化运动速度和能量.

电子-空穴对的产生(1)(2)

有效质量

$$m_p^* = \left| \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2} \Big|_{k=k_0}} \right| \approx 5.56 \times 10^{-33} \text{kg} \quad (6.1)$$

电子被激发至导带后, 在原处产生空穴的波矢 $k_p = k_0 = 10^8 \text{m}^{-1}$. 空穴准动量

$$-\hbar k_p \approx -1.055 \times 10^{-26} \text{kg} \cdot \text{m/s} \quad (6.2)$$

电子-空穴对的产生(3)

空穴能量应为

$$E_p(k) = -E(k) = 10^{-36}k^2 = 10^{-20}(\text{J}) \quad (6.3)$$

共有化运动速度与电子相同, 为

$$v_p = \frac{1}{\hbar} \left. \frac{dE(k)}{dk} \right|_{k=k_0} = -\frac{1}{\hbar} \left. \frac{dE_p(k)}{dk} \right|_{k=k_p} \approx -1.90 \times 10^6 \text{m/s} \quad (6.4)$$

◇ 有关空穴各性质的符号约定请参见教材1.4节或课件P82-83.

Contents

- 1 题1.1
- 2 题1.2
- 3 题1.3
- 4 题1.4
- 5 题2.7
- 6 补充题1
- 7 补充题2

类氢模型应用

已知硅的电子有效质量为 $m_l = 0.98m_0$, $m_t = 0.19m_0$, 相对介电常数为11.9. 现掺入施主杂质, 利用类氢模型估算:

- ① 杂质电离能;
- ② 杂质的等效Bohr半径;
- ③ 当相邻杂质原子的电子轨道发生交迭时的施主浓度.

类氢模型应用(1)(2)

根据教材4.3.2节(P104)的讨论, 有效质量

$$m_n^* = \frac{3}{\frac{1}{m_l} + \frac{2}{m_t}} \approx 0.26m_0 \quad (7.1)$$

因而由式5.1, 杂质电离能

$$\Delta E_D = \frac{m_n^*}{m_0} \frac{E_0}{\varepsilon_r^2} \approx 0.26 \times \frac{13.6}{11.9^2} \approx 0.025(\text{eV}) \quad (7.2)$$

等效Bohr半径

$$a^* = \frac{m_0}{m_n^*} \varepsilon_r a_0 = 11.9 \times 0.53 / 0.26 \approx 24.26(\text{\AA}) \quad (7.3)$$

类氢模型应用(3)

所谓相邻杂质原子的电子轨道发生交迭, 不妨理解为杂质原子的分布为“密堆积”, 即两杂质原子的离子实间距为 $2a^*$.

因此根据“密堆积”的结构不同(杂质的排布方式不必严格与硅晶格主体保持一致), 估算结果可以有多种.

- 假设为SC结构, 则施主浓度为

$$N_D = \frac{1}{(2a^*)^3} \approx 8.76 \times 10^{24} \text{m}^{-3} \quad (7.4)$$

- 粗略地考虑, 也可以认为

$$N_D = \frac{1}{V_D} = \frac{3}{4\pi (a^*)^3} \approx 1.67 \times 10^{25} \text{m}^{-3} \quad (7.5)$$

总之, 只需给出数量级约为 10^{25}m^{-3} 即可.