



# 复习

---

- 电子的有效质量
  - ✓ 意义
  - ✓ 正负
  - ✓ 内外层电子的有效质量大小
- 从能带的角度分析导体、半导体、绝缘体的导电性
- 本征激发
- 空穴
- 半导体的导电机构
- 回旋共振实验

# 回旋共振

- 将一块半导体样品置于均匀恒定的磁场中
  - 磁感应强度为 $\mathbf{B}$
  - 半导体中电子初速度为 $\mathbf{v}$
  - $\mathbf{v}$ 与 $\mathbf{B}$ 间夹角为 $\theta$

- 则电子受到的磁场力 $\mathbf{f}$ 为

$$\mathbf{f} = -q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$$

- 力的大小为

$$|\mathbf{f}| = qvB \sin \theta = qv_{\perp} B$$

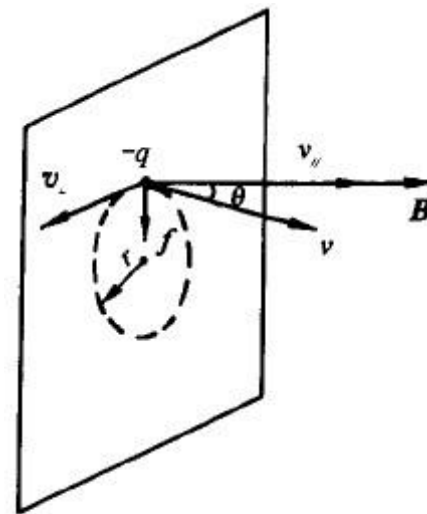


图 1-21 电子在恒定  
磁场中的运动

- 磁场力垂直于速度 $\mathbf{v}$ 和磁场 $\mathbf{B}$

- 在垂直于磁场的平面内作匀速圆周运动，速度

$$v_{\perp} = v \sin \theta$$

- 沿磁场方向做匀速运动，速度

$$v_{\parallel} = v \cos \theta$$

- 运动轨迹为一螺旋线。回旋频率为 $\omega_c$

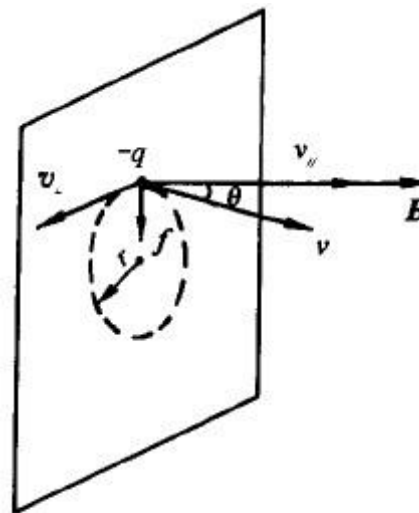


图 1-21 电子在恒定  
磁场中的运动



则  $a = v_{\perp}^2 / r$

$$v_{\perp} = r\omega_c$$

- 若等能面为球面，根据  $a = \frac{f}{m_n^*}$ ，可得

$$\omega_c = \frac{qB}{m_n^*}$$

- 再以电磁波通过半导体，交变磁场频率与回旋频率相等时，发生共振。
- 记录所测得的共振吸收时电磁波频率和测感应强度，即可以求出有效质量。

- 若等能面为椭球面，则有效质量为各向异性的，沿  $k_x, k_y, k_z$  轴方向分别为

$$m_x^*, m_y^*, m_z^*$$

- 设  $\mathbf{B}$  沿  $k_x, k_y, k_z$  的方向余弦分别是

$$\alpha, \beta, \gamma$$

- 可求得  $\omega_c = \frac{qB}{m_n^*}$

$$\frac{1}{m_n^*} = \sqrt{\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*}}$$

# 第一章 半导体中电子的状态

---

1.1 半导体的晶体结构

1.2 半导体中电子的状态

1.3 半导体中电子的运动 有效质量

1.4 导电机构

1.5 回旋共振

1.6 硅和锗的能带结构





# Si的导带结构

---

- B沿[111]晶轴方向，观察到1个吸收峰
- B沿[110]晶轴方向，观察到2个吸收峰
- B沿[100]晶轴方向，观察到2个吸收峰
- B沿对晶轴任意取向，观察到3个吸收峰

**实验现象-物理模型-理论和实验验证**

模型：硅导带底附近的等能面是沿[100]方向的旋转椭球面

# Si的等能面

- ① XOY平面上椭圆沿Z轴旋转
- ② XOZ平面上椭圆沿Y轴旋转
- ③ YOZ平面上椭圆沿X轴旋转

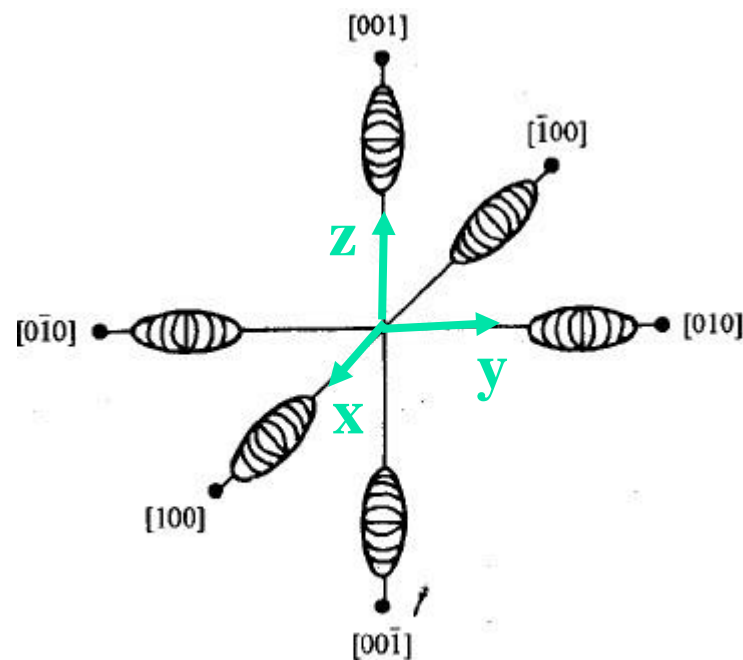


图 1-22 硅导带等能面示意图



# Si的等能面

设导带底位于波矢  $k = k_0$ ，在导带底附近将  $E(k)$  用泰勒级数在极值  $k_0$  附近展开，略去高次方项，得

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right]$$

$E_c$  为能带底，极值附近的能量为：

$$E_s(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{0x}^*)^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y}^*)^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z}^*)^2}{m_z^*} \right]$$

以  $(k_{0x}, k_{0y}, k_{0z})$  为坐标原点的椭球

# k空间中的等能面

$$E_s(k) = \cancel{E_c} + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - \cancel{k_{0x}^*})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - \cancel{k_{0y}^*})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - \cancel{k_{0z}^*})^2}{m_z^*} \right]$$

- $E_c$  为能量零点
- $K_0^s$  为坐标原点，取  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  分别与椭圆主轴重合。
- 使  $K_3$  沿长轴方向
- 等能面为绕  $K_3$  轴旋转的旋转椭球面

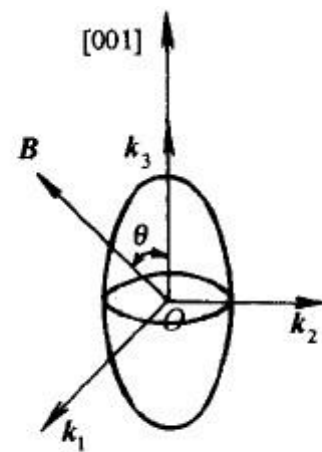


图 1-23  $B$  相对于  $k$  空间坐标轴的取向

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left( \frac{k_1^2}{m_x^*} + \frac{k_2^2}{m_y^*} + \frac{k_3^2}{m_z^*} \right)$$

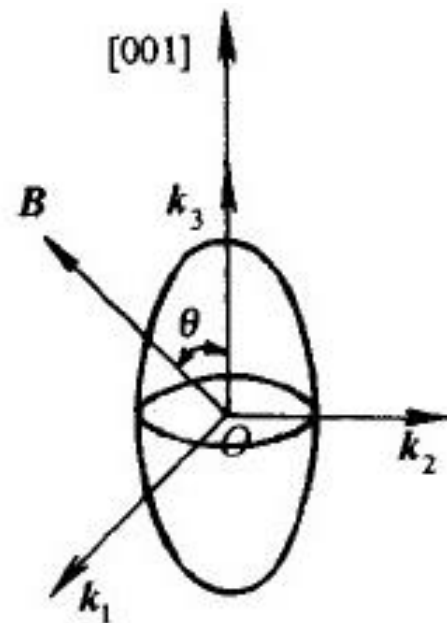
# $E(k) \sim k$

- 以沿[001]方向的旋转椭球面为例。
- $K_3$ 沿[001]方向， $K_1$ 、 $K_2$ 在（001）面内
- 沿 $K_1$ 、 $K_2$ 轴的有效质量相同。

设 $m_x^* = m_y^* = m_t$ 横向有效质量

$m_z^* = m_l$ 纵向有效质量

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{k_1^2 + k_2^2}{m_t} + \frac{k_3^2}{m_l} \right]$$



$$\frac{1}{m_n^*} = \sqrt{\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*}}$$

- 选取 $\mathbf{K}_1$ ,  $\mathbf{K}_2$ 使得 $\mathbf{B}$ 在 $\mathbf{K}_1$ 与 $\mathbf{K}_3$ 组成的平面内, 与 $\mathbf{K}_3$ 夹角 $\theta$ .
- $\mathbf{B}$ 的方向余弦 $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ 分别为

$$\alpha = \sin \theta$$

$$\beta = 0$$

$$\gamma = \cos \theta$$

$$\text{则 } m_n^* = m_t \sqrt{\frac{m_l}{m_t \sin^2 \theta + m_l \cos^2 \theta}}$$

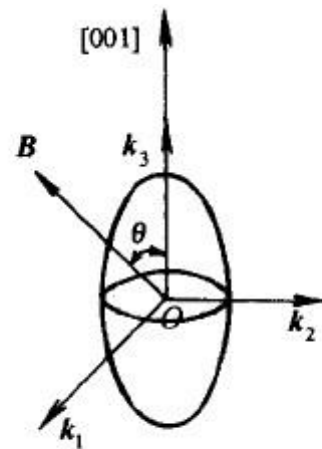


图 1-23  $\mathbf{B}$  相对于  $\mathbf{k}$  空间坐标轴的取向

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

- B沿[111]面，则B与六个旋转椭球的 $k_3 < 100 >$ 方向的夹角都相同，为

$$\cos^2 \theta = 1/3; \sin^2 \theta = 2/3$$

$$\text{得 } m_n^* = m_t \sqrt{\frac{3m_l}{2m_t + m_l}}$$

则  $\omega = \omega_c = \frac{qB}{m_n^*}$ , 只有一个值

当B变化时，只能观察到一个吸收峰

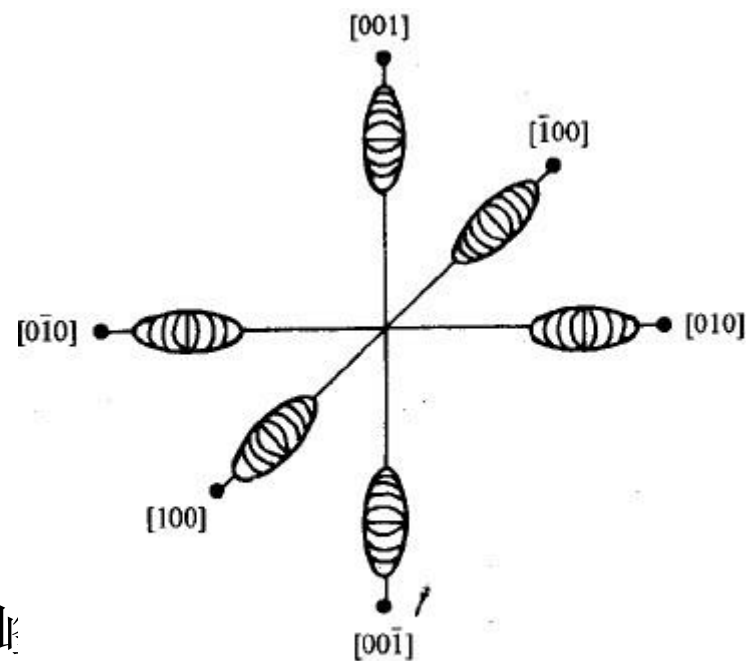


图 1-22 硅导带等能面示意图

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

■ B沿[110]方向

$B$ 与 $[100]$ ,  $[\bar{1}00]$ ,  $[010]$ ,  $[0\bar{1}0]$ 的夹角为 $\cos^2 \theta = 1/2$

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

$B$ 与 $[001]$ ,  $[00\bar{1}]$ 的夹角为 $\cos^2 \theta = 0$

$$\text{对应 } m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$$

可以观察到两个吸收峰

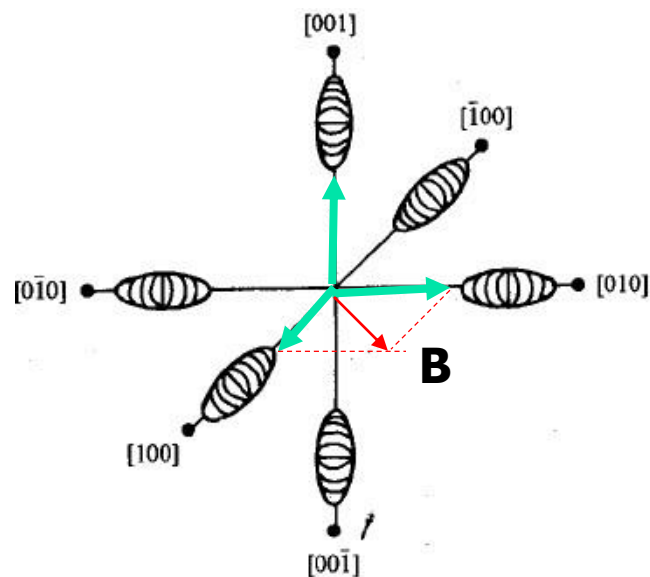


图 1-22 硅导带等能面示意图

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

■ B沿[100]方向

$B$ 与 $[100]$ ,  $[\bar{1}00]$ 的夹角为 $\cos^2 \theta = 1$

对应 $m_n^* = m_t$

$B$ 与 $[010]$ ,  $[0\bar{1}0]$ ,  $[001]$ ,  $[00\bar{1}]$ 的夹角为 $\cos^2 \theta = 0$

对应 $m_n^* = \sqrt{m_l m_t}$

可以观察到两个吸收峰

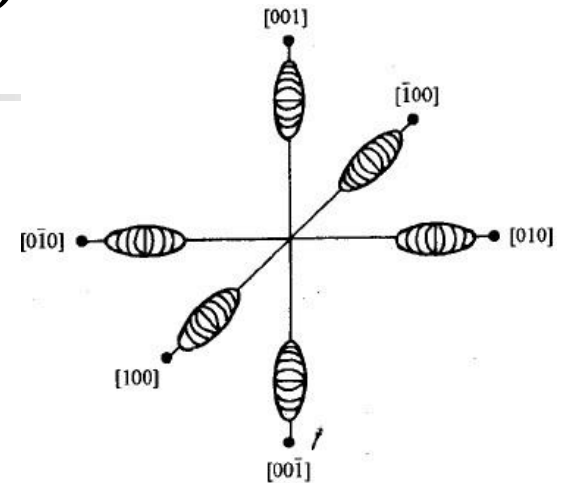


图 1-22 硅导带等能面示意图

# 硅的价带结构

- 价带计入自旋六度简并，再考虑自旋轨道耦合

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{四度简并 } E(k) = -\frac{h^2}{2m_0} \left\{ Ak^2 \pm \left[ B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) \right]^{1/2} \right\} \\ \text{二度简并 } E(k) = -\Delta - \frac{h^2}{2m_0} Ak^2 \end{array} \right.$$

$\Delta$ 是自旋-轨道耦合的分裂能量，A,B,C由回旋共振实验定出

一个 $k$ 对应两个 $E(k)$ ,  $k=0$ 时能量相重合

对应于极大值相重合的两个能带，表明有两种有效质量不同的空穴

$\left\{ \begin{array}{l} \text{重空穴：根式前取负，有效质量大; } (m_p)_h \\ \text{轻空穴：取正，有效质量小; } (m_p)_l \end{array} \right.$



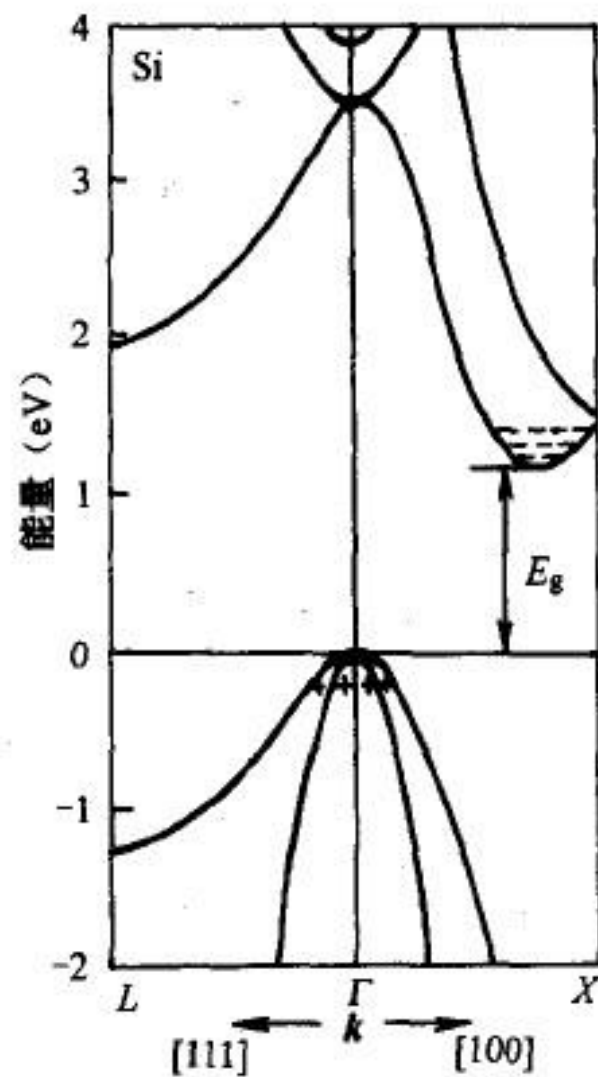
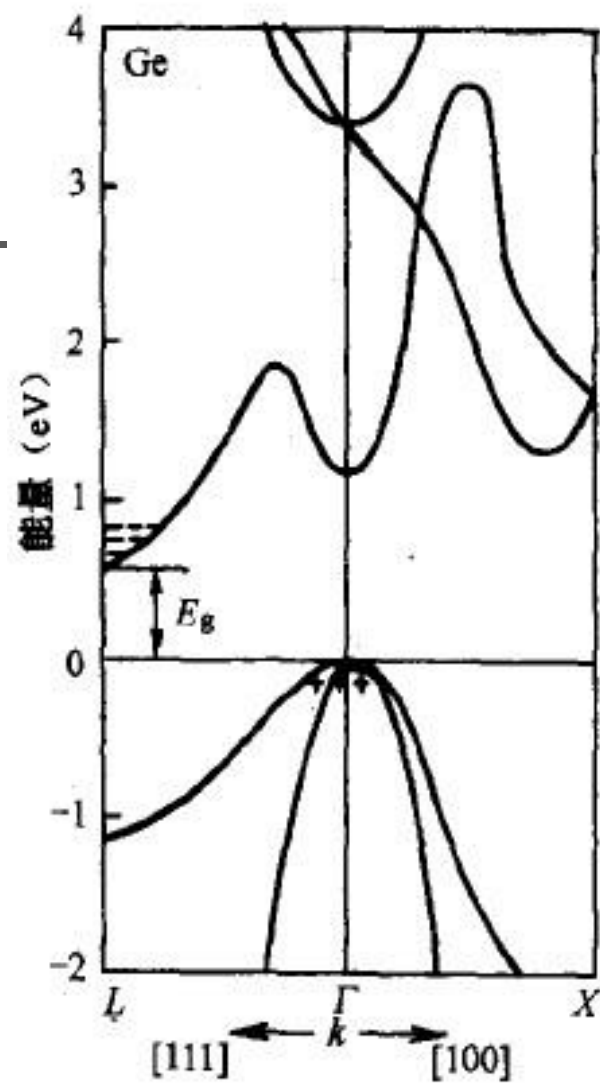


图 1-26 硅和锗的能带结构



# 硅锗的禁带宽度

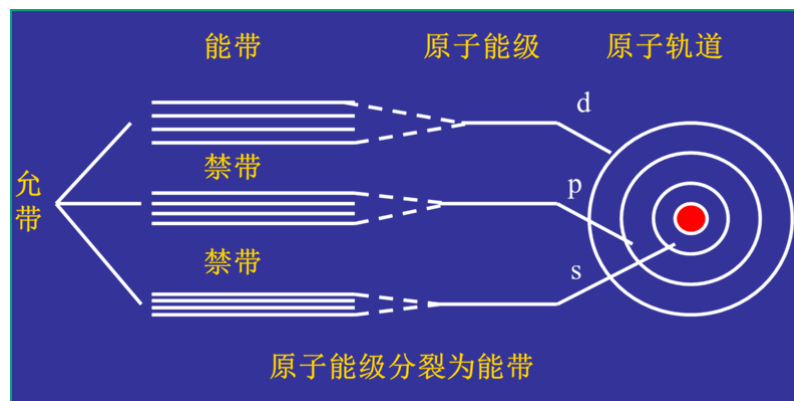
---

- 随温度变化

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

# 本章小结

- ① 常见的半导体的结构（金刚石、闪锌矿、纤锌矿）和其化学键
- ② 原胞和晶胞的概念
- ③ 单电子近似；简并
- ④ 能级分裂是基于电子的什么运动形成的？
- ⑤ 能带结构的特点（允带、禁带；能带宽度）



- ⑤ 导带与价带
- ⑥ 电子的有效质量（意义、正负、内外层电子的有效质量大小）
- ⑦ 从能带的角度分析导体、半导体、绝缘体的导电性
- ⑧ 本征激发
- ⑨ 空穴
- ⑩ 半导体的导电机构
- ⑭ 回旋共振实验的目的
- ⑮ 轻空穴、重空穴
- ⑯ 禁带宽度随温度变化

# 作业

1. 金刚石结构和闪锌矿结构呈（ ）对称性，纤锌矿结构呈（ ）对称性。
2. 极性半导体是指（ ）。
3. 单电子近似理论是指（ ）。
4. 用单电子近似法研究晶体中电子状态的理论称为（ ）。晶体的能带是由于电子的（ ）运动形成的。
5. 半导体中，原子的外层原子轨道交叠程度（ ），电子的共有化运动（ ），形成的能带（ ），对应的电子的有效质量越（ ）；原子的内层原子轨道交叠程度（ ），电子的共有化运动（ ），形成的能带（ ），对应的电子的有效质量越（ ）。
6. 电子的有效质量的意义是（ ）。
7. 空穴是（ ）。

# 作业

---

8. 本征激发是指（）；
9. 半导体的导电机构是（）；
10. （）标志了自由电子和半导体中电子的状态；
11. 导带是指（）；价带是指（）；
12. 简并轨道是（）；简并度是（）；
13. 回旋共振实验的目的是测量（）。
14. 描述金属、半导体和导体的能带结构之间的不同点，并从能带的角度分析造成其导电性差异的原因。
15. 课后习题第1题。

# 作业要求

---

1. QQ群里线上提交，不要发给我。
2. 在作业本上做完后，拍照提交，不接受电子版提交的作业。
3. 本周六（9.18）之前提交作业，过期不接受。
4. 独立、认真完成作业，下次课讲解作业会找同学解答。
5. 作业完成情况记入平时成绩。
6. 可以不抄题目。

## 第二章 半导体中的杂质和缺陷 能级



理想半导体	实际半导体
晶格结构完整无缺	存在着各种缺陷
原子静止在晶格格点上	原子在格点平衡位置附近振动
纯净的	含有杂质

- 杂质：

在半导体晶体中引入的新的原子或离子

- 缺陷：

晶体按周期性排列的结构受到破坏；

- 1.点缺陷
- 2.线缺陷
- 3.面缺陷

# 杂质和缺陷的双重作用

- 改变半导体的电阻率

在硅晶体中，若以 $10^5$ 个硅原子中掺入一个杂质原子的比例掺入硼原子，则纯硅晶体的电导率在室温下将增加 $10^3$ 倍

- 改变半导体的导电类型

- 影响着半导体器件的质量

用于生产一般硅平面器件的硅单晶，位错密度要小于 $10^3\text{cm}^{-2}$

# 杂质的主要来源

- 无意掺入：  
制造半导体的原材料纯度不够，加工工艺
- 有意掺入：  
为了控制半导体的某些性质，人为掺入某种原子

Si 能得到广泛应用的重要原因：可对其杂质实现可控操作，从而实现对半导体性能的精确控制。

- 为什么极微量的杂质和缺陷，能够对半导体材料的物理、化学性质产生决定性的影响？

- 杂质和缺陷的存在，会使周期性势场受到破坏，有可能在禁带中引入允许电子具有的能量状态（能级），从而对半导体的性质产生决定性的影响。



杂质在晶格中是以什么样的方式存在呢？

# 硅、锗晶体中的杂质能级

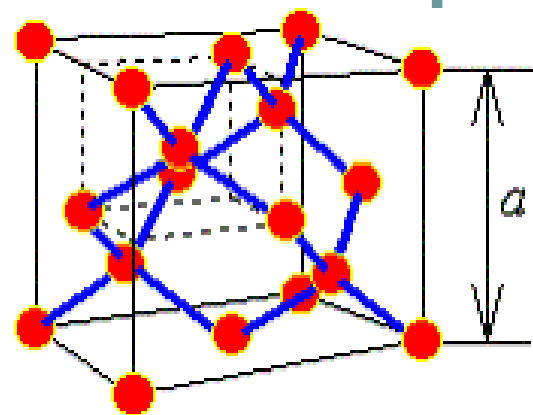
例：如图所示为一晶格常数为 $a$ 的**Si**晶胞，求：

(a) **Si**原子半径

(b) 晶胞中所有**Si**原子占据晶胞的百分比

解： (a) 
$$r = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{4} \times \sqrt{3}a \right) = \frac{\sqrt{3}}{8} a$$

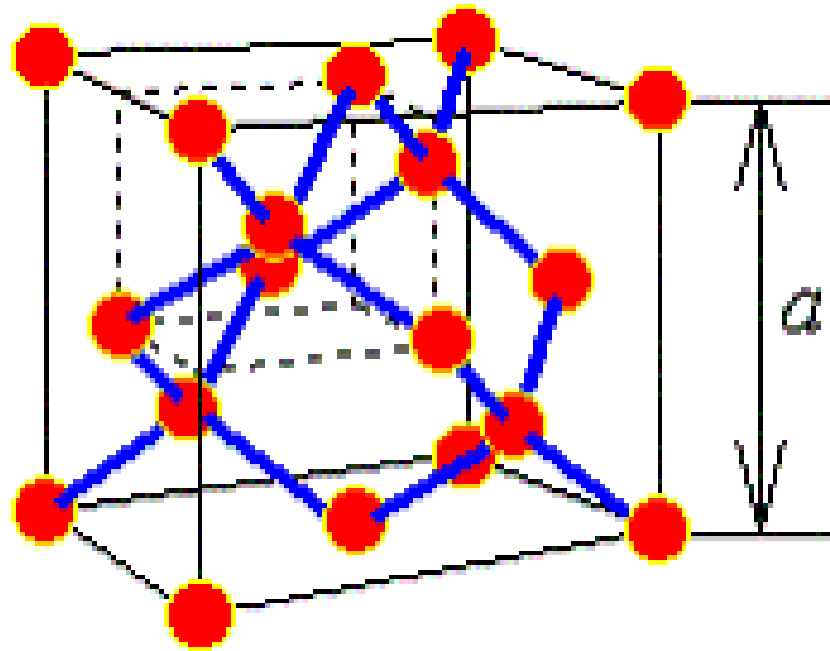
(b) 
$$\frac{8 \times \frac{4}{3} \pi r^3}{a^3} = \frac{\sqrt{3}}{16} \pi = 0.34$$



晶胞体积中的66%是空隙——空隙位置

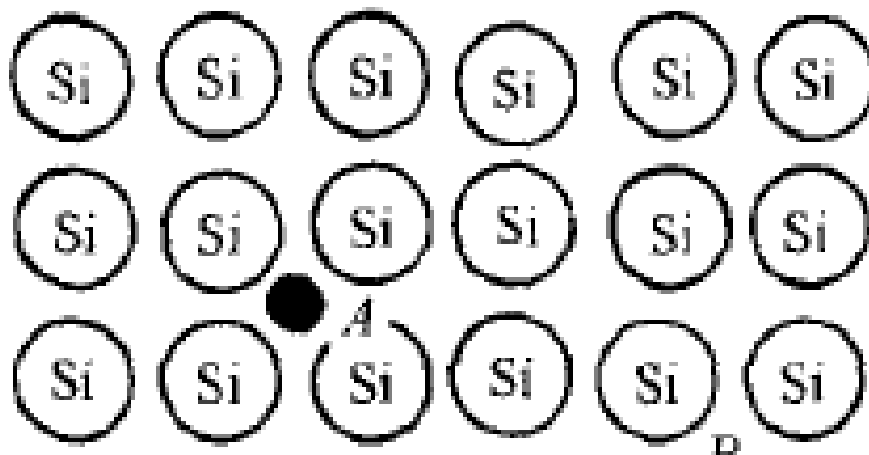
# 硅、锗晶体中的杂质能级

- 杂质存在的方式
  - ✓ 间隙式杂质
  - ✓ 替位式杂质



# 间隙式杂质

- 间隙式杂质：杂质原子位于晶格原子间的间隙位置，一般体积比较小。

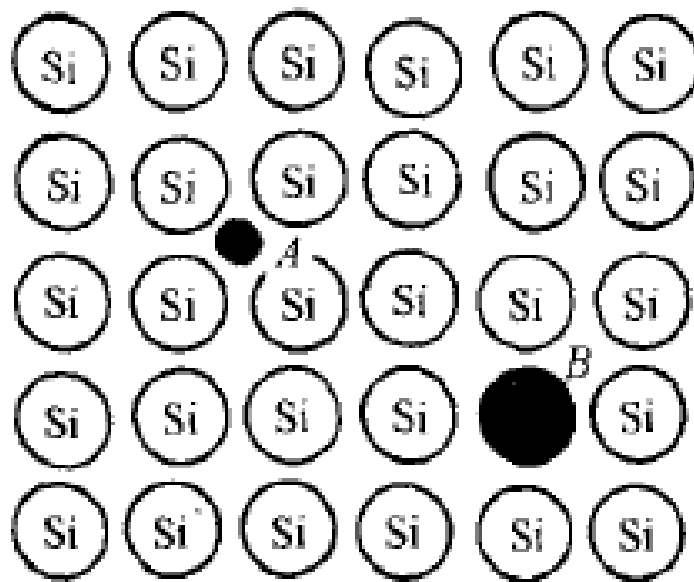


Li离子的半径0.068 nm，体积很小，在硅、锗、砷化镓中是以间隙式杂质存在



# 替位式杂质

- 替位式杂质：杂质原子取代晶格原子而位于格点处。与被取代的原子大小比较接近。



III、V 族元素体积与硅、锗IV族元素的价电子壳层相近、大小相似  
III、V 族元素在硅锗中形成替位式杂质

# 间隙式杂质与替位式杂质

- 间隙杂质原子的存在会造成其附近的晶格畸变，整个晶体倾向膨胀；
- 间隙杂质原子在晶格间隙间迁移时所需的激活能比较小，因此扩散速率比较快；
- Li, H在硅、锗、砷化镓中以间隙式杂质的形式存在；
- 但是碱金属原子在半导体中，尤其是硅，很容易扩散，引起器件性能的恶化。
- 替位式杂质