

# 第一章作业讲解

1. 金刚石结构和闪锌矿结构的晶格呈立方对称性，纤锌矿结构呈六方对称性。
2. 极性半导体是指结合的性质具有不同程度的离子性的共价性化合物半导体。
3. 单电子近似理论是指假设每个电子是在周期性排列且固定不动的原子核势场及其他电子的平均势场中运动。
4. 用单电子近似法研究晶体中电子状态的理论称为能带论。晶体的能带是由于电子的共有化运动形成的。
5. 半导体中，原子的外层原子轨道交叠程度大，电子的共有化运动强，形成的能带宽，对应的电子的有效质量小；原子的内层原子轨道交叠程度小，电子的共有化运动弱，形成的能带窄，对应的电子的有效质量大。
6. 电子的有效质量的意义概括了半导体内部所有势场的作用；
7. 空穴是价带中空量子态可被看作是带正电性粒子；

# 第一章作业讲解

---

- 8. 本征激发是指价带电子激发成为导带电子的过程；
- 9. 半导体的导电机构是导带的电子和价带的空穴同时参与导电；
- 12. 波矢 $K$ 标志了自由电子和半导体中电子的状态；
- 13. 导带是指 $OK$ 下的半满带和空带；价带是指 $OK$ 下的满带；
- 14. 简并轨道是电子云在空间伸展方向不同但具有相同能量的原子轨道；简并度是简并轨道或简并态的数目。
- 15. 回旋共振实验可以测量半导体中电子的有效质量。

## 16. 描述绝缘体、半导体和导体的能带结构之间的不同，并从能带的角度分析造成其导电性差异的原因。

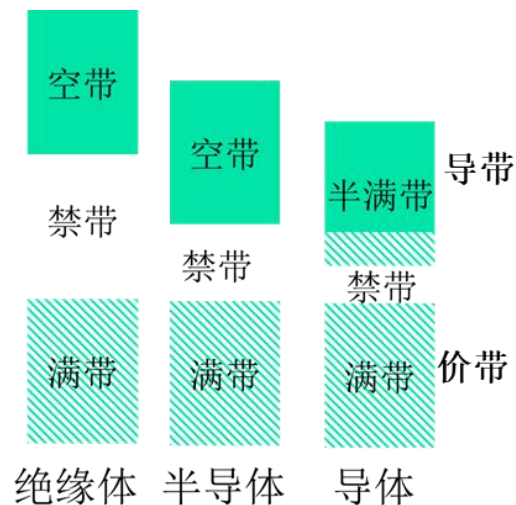
### ① 能带结构的不同

不同点：价带的填充情况；禁带的宽度。

- 导体的价带半满；
- 绝缘体和半导体类似，价带全满导带为空

### ② 导电性差异的原因分析

- 导体导带的自由电子在外电场下定向移动而导电，所以金属是良导体；
- 半导体的禁带宽度窄，当温度升高或有光照时，价带中少量电子被激发到导带中，而参与导电，同时价带的空穴也参与导电。
- 绝缘体的禁带宽度很大，激发电子需要很大的能量，在通常温度下，能激发到导带的电子很少，因而导电性很差。



# 第一章作业讲解

---

· 设晶格常数为  $a$  的一维晶格，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：

$$E_c(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{3m_0} + \frac{\hbar^2 (k - k_1)^2}{m_0}, E_v(k) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{6m_0} - \frac{3\hbar^2 k^2}{m_0}$$

$m_0$  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) 价带顶电子跃迁到导带底时准动量的变化

# 第一章作业讲解

---

## ■ Answers:

1.  $E_g = E_C(k)_{min} - E_v(k)_{max}$

$$\frac{dE_C}{dk} = 0 \Rightarrow k_{min} = \frac{3}{4}k_1 \quad \therefore E_C(k)_{min} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{4m_0}$$

$$\frac{dE_v}{dk} = 0 \Rightarrow k_{max} = 0 \quad \therefore E_v(k)_{max} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{6m_0}$$

$$E_g = E_C(k)_{min} - E_v(k)_{max} = \frac{\hbar^2 k_1^2}{12m_0} = 0.64eV$$

---

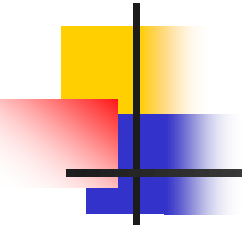
## 2. 导带底电子有效质量;

$$m_n^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E_c(k)}{dk^2}} \quad \frac{d^2 E_c(k)}{dk^2} = \frac{2\hbar^2}{3m_0} + \frac{2\hbar^2}{m_0} = \frac{8\hbar^2}{3m_0}$$

$$m_n^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E_c(k)}{dk^2}} = \frac{\hbar^2}{\frac{8\hbar^2}{3m_0}} = \frac{3}{8} m_0$$

## 3. 价带顶电子有效质量;

$$\frac{d^2 E_v(k)}{dk^2} = -\frac{6\hbar^2}{m_0} \quad m_n^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E_v(k)}{dk^2}} = \frac{\hbar^2}{-\frac{6\hbar^2}{m_0}} = -\frac{1}{6} m_0$$



#### 4. 价带顶电子跃迁到导带底时准动量的变化

$$p = \hbar k$$

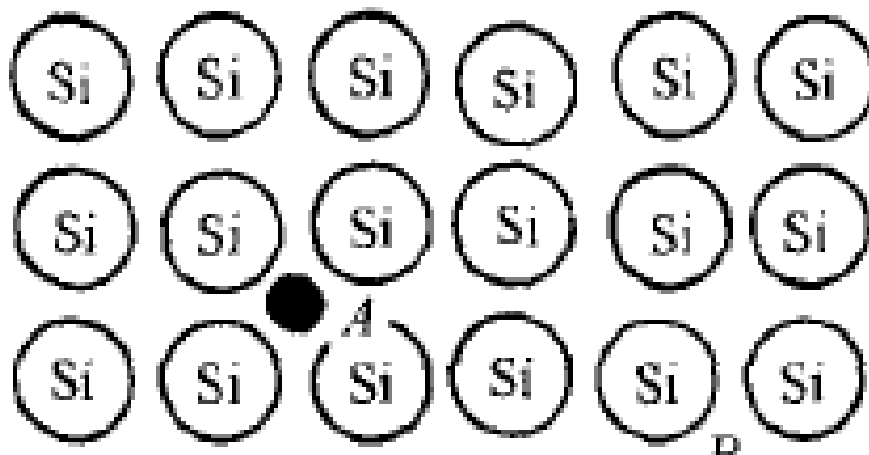
$$\begin{aligned}\Delta p &= \hbar \Delta k = \hbar(k_{min} - k_{max}) \\ &= \hbar \left( \frac{3}{4} k_1 - 0 \right) = \frac{3\hbar}{8a}\end{aligned}$$

## 第二章 半导体中的杂质和缺陷 能级



# 间隙式杂质

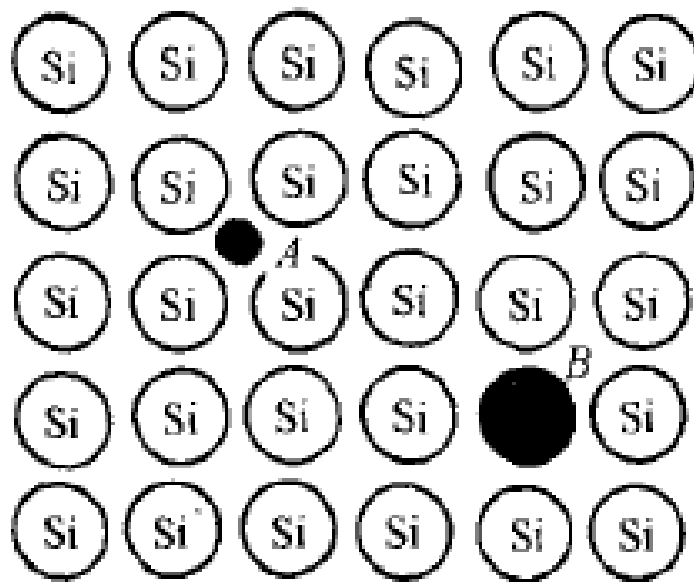
- 间隙式杂质：杂质原子位于晶格原子间的间隙位置，一般体积比较小。



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

# 杂质的类型

## 第一种、按对载流子的贡献：

- ①**施主杂质**——为半导体材料提供导电电子的杂质
- ②**受主杂质**——对半导体材料提供导电空穴的杂质
- ③**中性杂质**——不提供载流子
- ④**双性杂质**——有时是施主杂质，有时又是受主杂质

## 第二种、按能级的深浅：

- ①**浅能级杂质**
- ②**深能级杂质**

# 替位式杂质----施主杂质

Si: 14个质子、4个价电子

P: 15个质子、5个价电子

替位: 多余一个正电荷  
一个负电荷

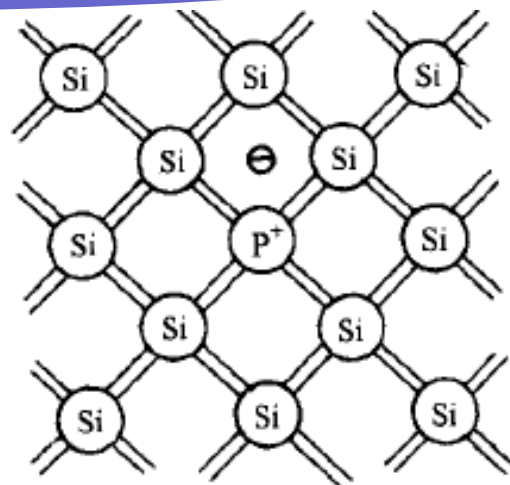


图 2-3 硅中的施主杂质

**施主杂质**: 掺入到半导体中的杂质原子, 能够向半导体提供导电的**电子**, 并成为带**正电的离子**。  
如: V族元素(磷)在IV半导体中形成的杂质

- **杂质电离**：电子挣脱杂质原子的束缚成为导电电子的过程称为杂质电离
- **杂质电离能**：电子挣脱束缚成为导电电子所需的能量称为杂质电离能，用  $\Delta E_D$  表示。
- **施主电离**
  1. 电子挣脱施主杂质束缚的过程
  2. 施主向导带释放电子的过程

施主杂质未电离时是中性的，称为**束缚态或中性态**，电离后成为正电中心，成为**离化态**

# 施主能级

- 施主能级
  - 将施主杂质束缚的电子的能量状态；
  - 施主能级是离散的

$$\Delta E_D = E_c - E_D$$

$$\Delta E_D \ll E_g$$

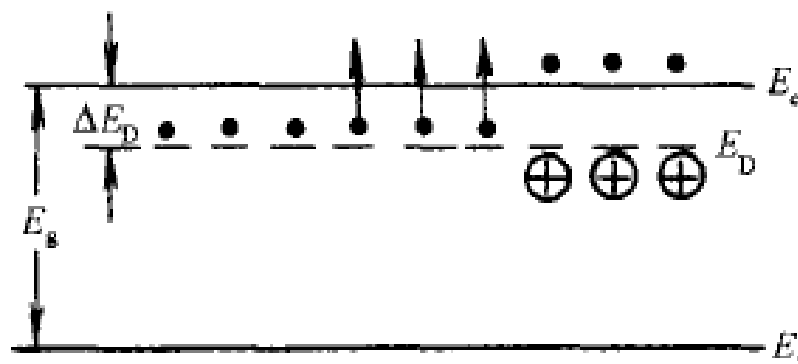


图 2-4 施主能级和施主电离

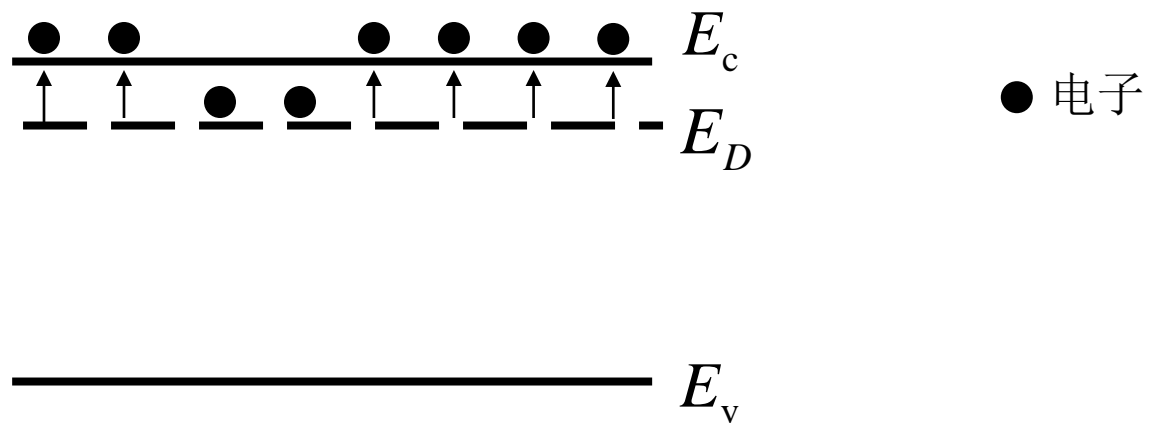
- 施主能级位于离导带底很近的禁带中

| Si、Ge中V族杂质的电离能 $\Delta E_D$ (eV) |        |        |        |
|----------------------------------|--------|--------|--------|
| 晶体                               | 杂质     |        |        |
|                                  | P      | As     | Sb     |
| Si                               | 0.044  | 0.049  | 0.039  |
| Ge                               | 0.0126 | 0.0127 | 0.0096 |

施主杂质的电离能很小，在常温下基本电离



# n型半导体



# 受主杂质

Si: 14个质子、4个价电子

B: 13个质子、3个价电子

替位:

少一个正电荷  
一个电子

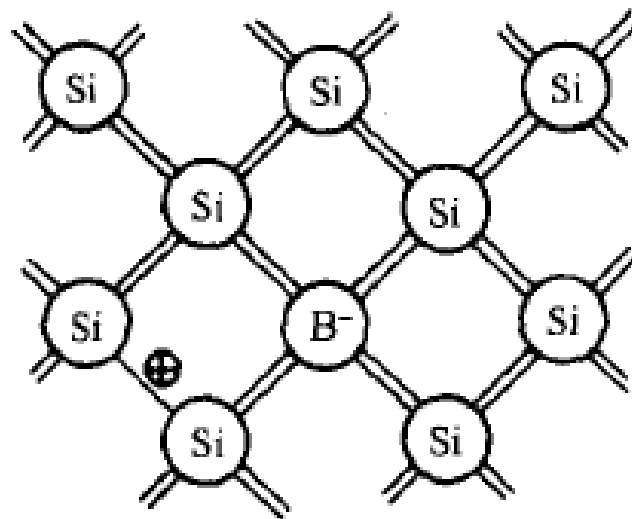


图 2-5 硅中的受主杂质

**受主杂质**: 掺入到半导体中的杂质原子, 能够向半导体提供导电的**空穴**, 并成为带**负电的离子**。

# 受主电离

- 受主电离

1. 空穴挣脱受主杂质束缚的过程
  2. 受主向价带释放空穴（从价带接受电子）的过程
- 受主杂质未电离时是中性的，称为**束缚态或中性态**，电离后成为负电中心，成为**离化态**

- **受主电离能**：使空穴挣脱受主杂质束缚成为导电空穴所需要的能量，称为受主杂质的电离能。 $\Delta E_A$

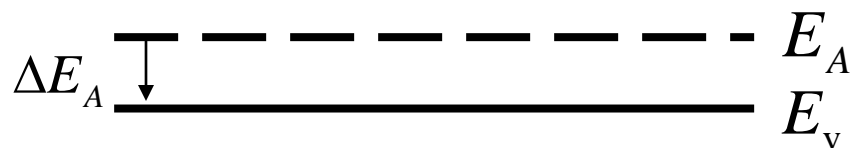
# 受主能级

**受主能级：** 被受主杂质所束缚的空穴的能量状态  $E_A$

$$\Delta E_A = E_A - E_v$$



$$\Delta E_A \ll E_g$$



受主能级位于离价带顶很近的禁带中

| Si、Ge中III族杂质的电离能 $\Delta E_A$ (eV) |       |       |       |       |
|------------------------------------|-------|-------|-------|-------|
| 晶体                                 | 杂质    |       |       |       |
|                                    | B     | Al    | Ga    | In    |
| Si                                 | 0.045 | 0.057 | 0.065 | 0.16  |
| Ge                                 | 0.01  | 0.01  | 0.011 | 0.011 |

受主杂质的电离能很小，在常温下基本电离

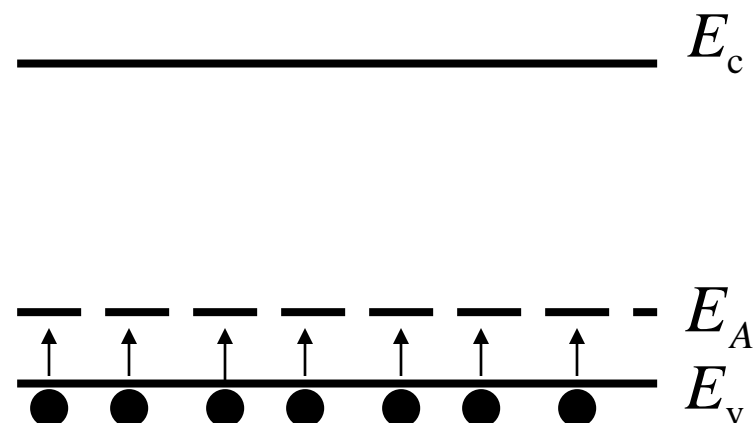
# p型半导体

受主电离：

价带电子跃迁

留下空穴

产生不可移动负离子

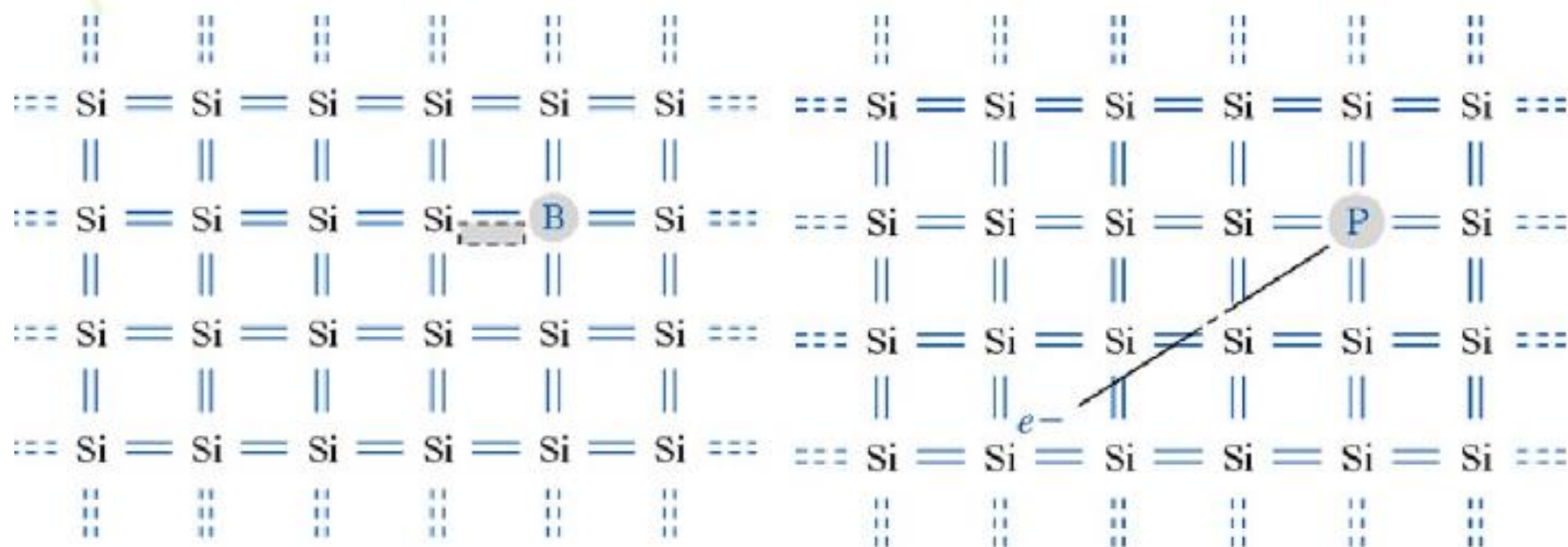


结果：

参加导电的空穴增加

p型半导体

# 总结



(a)

(b)

受主杂质

施主杂质

# 总结

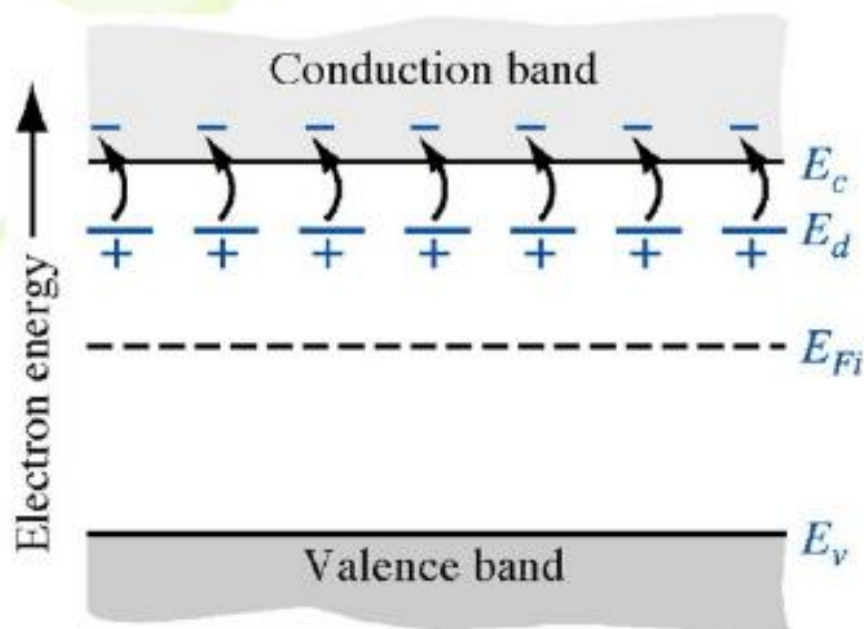
**施主:** Donor, 掺入半导体的杂质原子向半导体中提供导电的电子, 并成为带正电的离子。如 Si 中掺的 P 和 As

**受主:** Acceptor, 掺入半导体的杂质原子向半导体中提供导电的空穴, 并成为带负电的离子。如 Si 中掺的 B

**施主和受主浓度:**  $N_D$ 、 $N_A$

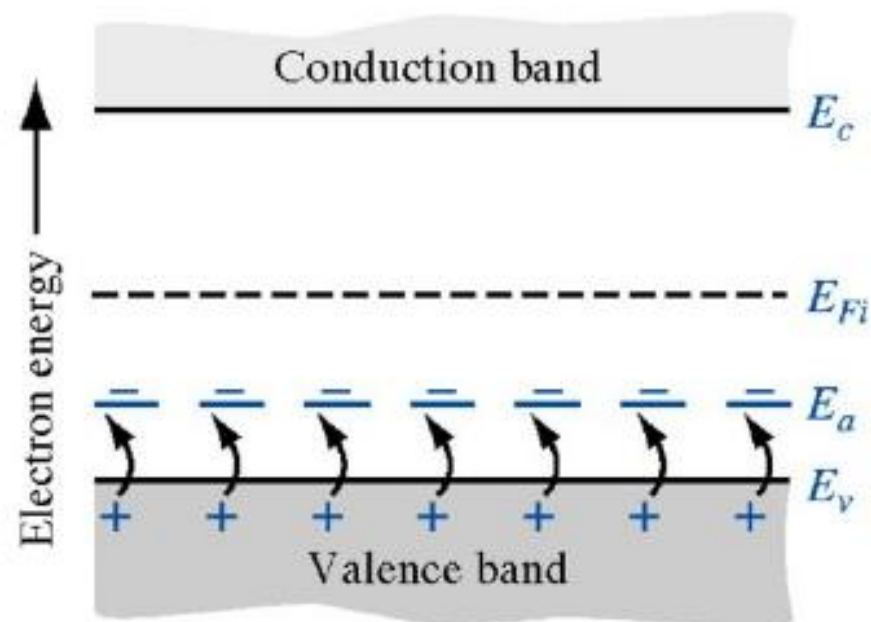
**杂质浓度:** 单位体积中的杂质原子数。





(a)

施主能级电离能带图



(b)

受主能级电离能带图

# 施主杂质与受主杂质的比较

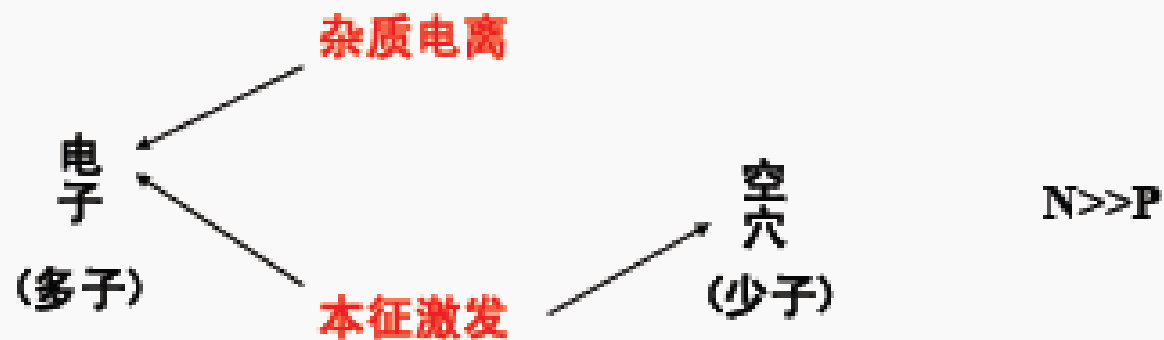
|          |     | 施主  | 受主  |
|----------|-----|-----|-----|
| 带电性      | 电离前 | 电中性 | 电中性 |
|          | 电离后 | 正电  | 负电  |
| 杂质能级电子填充 | 电离前 | 满   | 空   |
|          | 电离后 | 空   | 满   |
| 载流子数量    | 掺杂后 | 电子多 | 空穴多 |

## 半导体中载流子的来源

### ➤ 本征半导体:



### ➤ 杂质半导体（以N型为例）:



# 杂质的类型

## 第一种、按对载流子的贡献：

- ①**施主杂质**——为半导体材料提供导电电子的杂质
- ②**受主杂质**——对半导体材料提供导电空穴的杂质
- ③**中性杂质**——不提供载流子
- ④**双性杂质**——有时是施主杂质，有时又是受主杂质

## 第二种、按能级的深浅：

- ①**浅能级杂质**
- ②**深能级杂质**



# 浅能级杂质

- 浅能级杂质：电离能很小的杂质
- 浅能级：受主能级接近价带顶；施主能级接近导带底

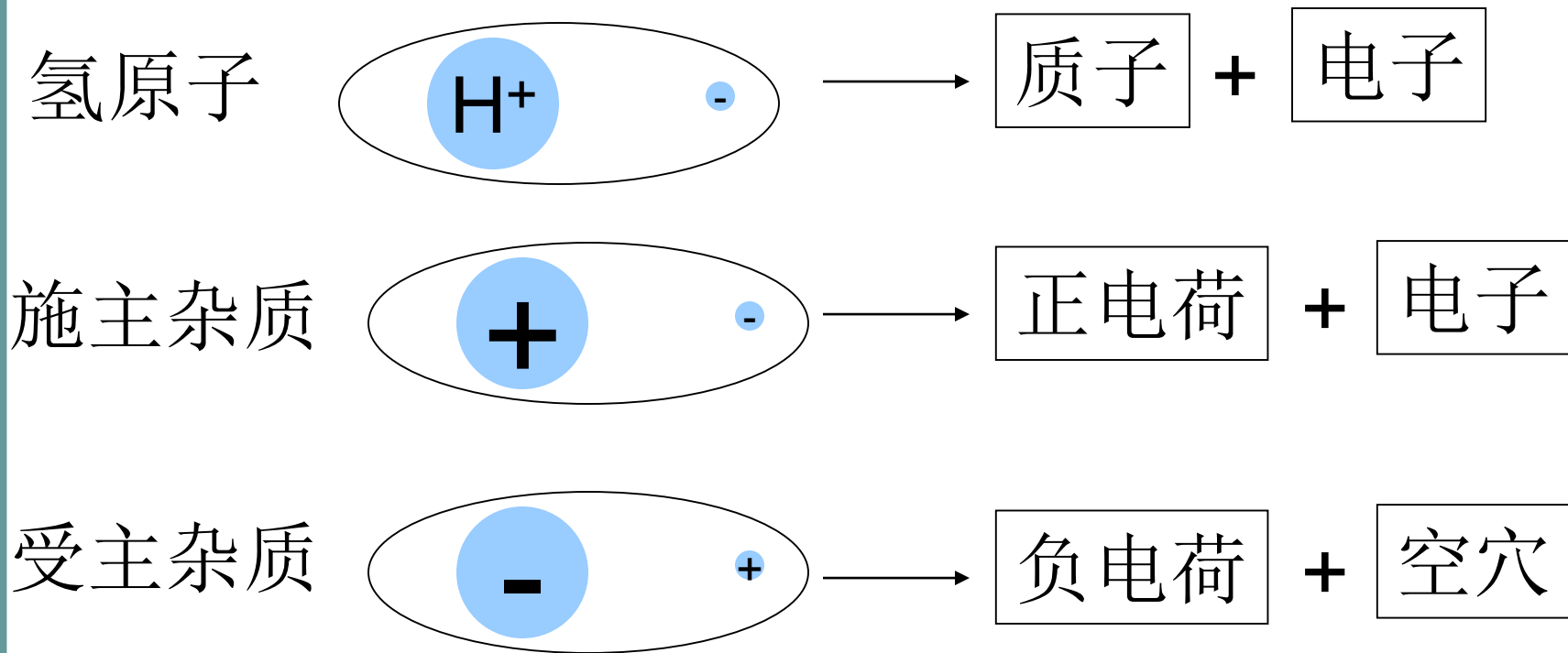
$$\Delta E_A \ll E_g$$

$$\Delta E_D \ll E_g$$

- 浅能级杂质的特点：

室温下，晶格热振动的能量传递给电子，掺杂浓度不高的情况下，杂质完全电离。

# 类氢模型



类氢模型计算浅能级杂质电离能

# 氢原子基态的电离能

氢原子电子: 
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi(\vec{r}) = E_n \psi(\vec{r})$$

$$E_n = -\frac{m_0 q^4}{32\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \quad E_1 = -\frac{m_0 q^4}{32\epsilon_0^2 \hbar^2} \quad E_\infty = 0$$

基态电子的电离能:

$$E_0 = E_\infty - E_1 = \frac{m_0 q^4}{32\epsilon_0^2 \hbar^2} = 13.6 \text{ eV}$$

类氢模型估算杂质电离能：

$$E_0 = \frac{m_0 q^4}{32 \epsilon_0^2 \hbar^2}$$

$$\mathcal{E} = \epsilon_0 \epsilon_r$$

$$m_0 \rightarrow m_n^*, m_p^*$$



施主电离能

$$\Delta E_D = \frac{m_n^* q^4}{32 \varepsilon_0^2 \varepsilon_r^2 \hbar^2} = \frac{m_n^*}{m_0} \bullet \frac{E_0}{\varepsilon_r^2}$$

受主电离能

$$\Delta E_A = \frac{m_p^* q^4}{32 \varepsilon_0^2 \varepsilon_r^2 \hbar^2} = \frac{m_p^*}{m_0} \bullet \frac{E_0}{\varepsilon_r^2}$$

估算结果与实际测量值有相同数量级

(1) : 氢原子中的电子的运动轨道半径为:

$$r_H = \frac{\varepsilon_r \varepsilon_o h^2}{m_o \pi q^2} n^2$$

n=1 为基态电子的运动轨迹

Si 中受正电中心  $P^+$  束缚的电子的运动轨道半径, 考虑正负电荷处在介电常数不同的介质中以及晶格周期性势场的影响



对上述氢原子模型修正

- 施主所束缚电子的基态轨道半径

$$r = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 h^2}{m_n^* \pi q^2}$$

- 受主所束缚空穴的基态轨道半径

$$r = \frac{\epsilon_r \epsilon_0 h^2}{m_p^* \pi q^2}$$

# 杂质的补偿作用

- **杂质的补偿作用：**半导体中同时存在着施主和受主杂质时，两种杂质之间有相互抵消的作用，称为杂质的补偿作用。

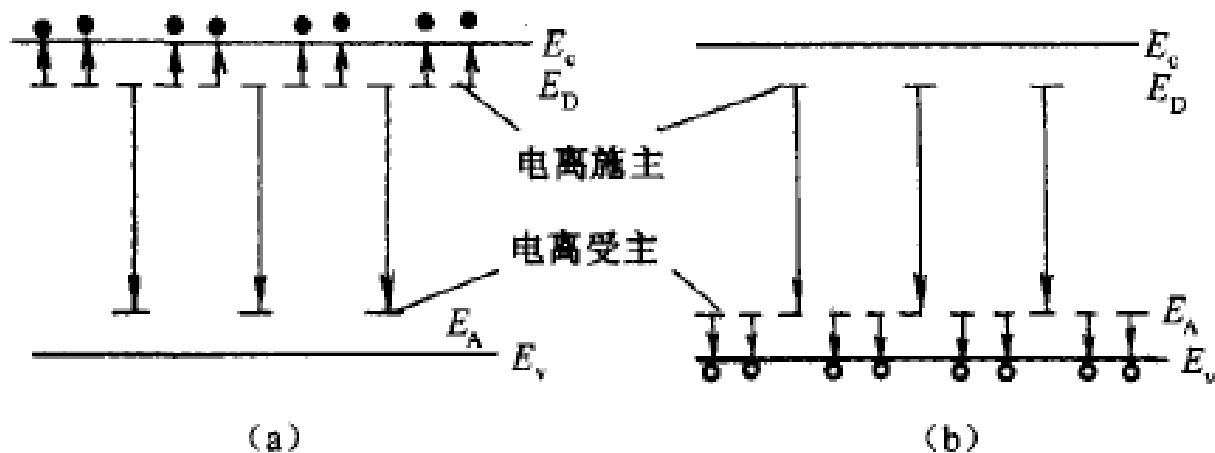


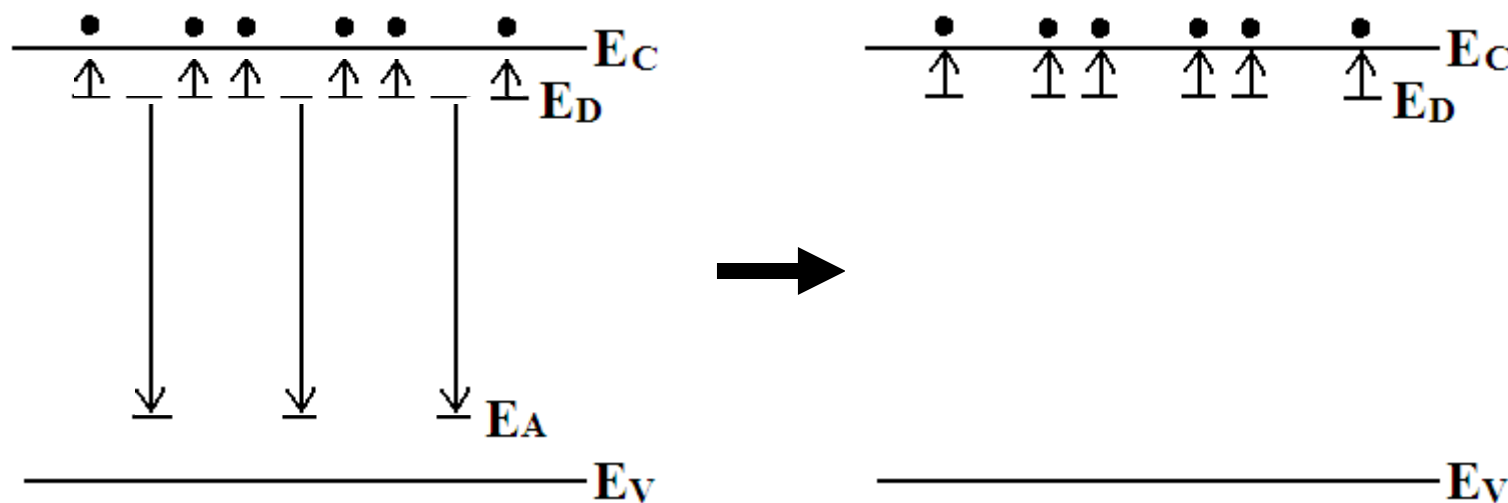
图 2-7 杂质的补偿作用

$N_D$ : 施主杂质浓度  
 $N_A$ : 受主杂质浓度  
 $n$ : 导带中电子的浓度  
 $p$ : 价带中空穴浓度

$$N_D \gg N_A$$

$$n = N_D - N_A$$

- 半导体中同时存在施主和受主杂质，  
且  $N_D \gg N_A$ 。



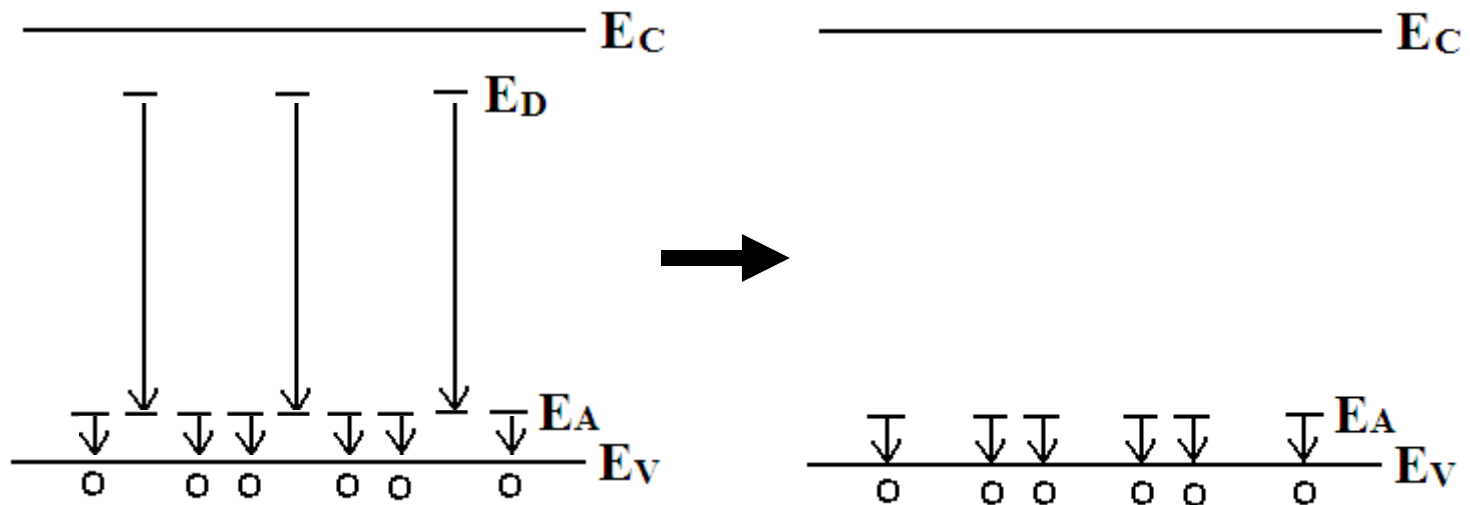
n型半导体



$$N_A \gg N_D$$

$$p = N_A - N_D$$

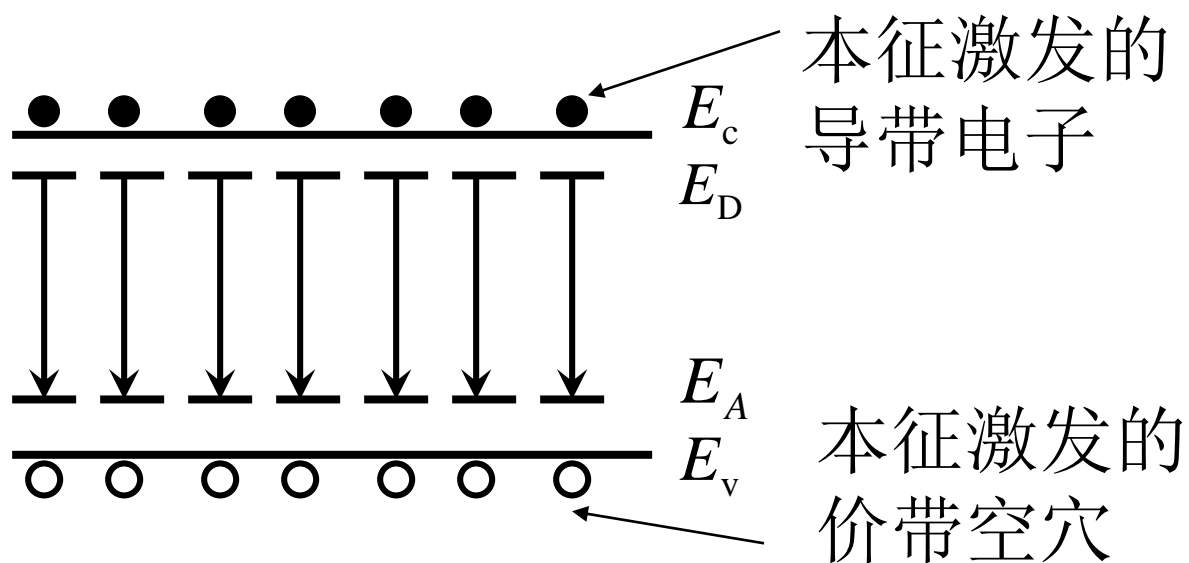
- 半导体中同时存在施主和受主杂质，且  $N_A \gg N_D$ 。



p型半导体



$N_A \cong N_D$  杂质的高度补偿



杂质多、性能差，不适合做半导体器件



# 杂质的补偿作用

利用杂质补偿原理，通过半导体工艺，选择性改变半导体局部区域导电类型或导电能力，制作半导体器件。如PNP晶体管：

