

大学物理
College Physics
ISSN 1000-0712, CN 11-1910/O4

《大学物理》网络首发论文

题目：第一性原理计算在半导体物理课程教学中的应用
作者：凌发令，李丽，陈江山
DOI：10.16854/j.cnki.1000-0712.240377
收稿日期：2024-08-18
网络首发日期：2024-11-18
引用格式：凌发令，李丽，陈江山. 第一性原理计算在半导体物理课程教学中的应用 [J/OL]. 大学物理. <https://doi.org/10.16854/j.cnki.1000-0712.240377>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字符、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

第一性原理计算在半导体物理课程教学中的应用

凌发令，李丽，陈江山

(重庆邮电大学，理学院，重庆市 400065)

摘要：近年来，随着互联网的飞速发展和计算技术的不断突破，传统大学物理教学迎来了新的变革机遇。半导体物理作为大学物理课程的核心之一，其教学方法的现代化与创新显得尤为重要。本文以单晶硅材料为例，深入探讨了如何有效整合现代先进的第一性原理计算方法，以提升半导体物理课程的教学质量与效果。通过详细阐述第一性原理计算的理论基础及其在半导体晶体结构、电子结构、杂质与缺陷等教学领域的应用，本文旨在为半导体物理课程的教学改革提供实践指导与理论支持，进一步激发学生的学习兴趣与创新能力。

关键词：半导体物理；第一性原理计算；课程教学

中图分类号：O 47 文献标识码：A

【DOI】[10.16854/j.cnki.1000-0712.240377](https://doi.org/10.16854/j.cnki.1000-0712.240377)

在科技日新月异的今天，半导体物理作为现代电子技术的基石，其重要性不言而喻。从计算机芯片到光电子器件，从通信技术到物联网应用，半导体材料及其物理特性研究贯穿于众多高科技领域。然而，半导体物理的复杂性和抽象性使得传统教学模式面临诸多挑战，如何有效地传授半导体物理的核心概念，并激发学生的学习兴趣和创新能力，成为教育工作者亟待解决的问题。

在此背景下，第一性原理计算作为一种先进的计算方法，为半导体物理课程教学提供了全新的视角和工具。第一性原理计算，即从头算方法，仅依赖于基本的物理常数，不依赖任何经验参数，通过量子力学原理直接求解微观体系的电子结构和性质。这种方法不仅能够准确预测材料的各种物理性质，还能够揭示材料性质与微观结构之间的内在联系，为半导体物理研究提供了强有力的理解支持。

将第一性原理计算引入到物理课程教学，不仅能够加深学生对半导体物理基本概念和物理现象的理解，还能够培养学生的计算思维和创新能力。

^[1]. 通过实际操作第一性原理计算软件，学生可以亲身体验到计算模拟在材料科学研究中的应用，从而激发他们对半导体物理研究的兴趣和热情^[2]。此外，第一性原理计算还能够为学生提供一种跨学科的学习体验，将量子力学、电子结构理论、计算机科学等多个学科的知识融合在一起，培养他们的综合素质和创新能力。

本文旨在探讨第一性原理计算在半导体物理课程教学中的应用，分析其在深化理论教学、辅助实验教学、创新课程教学模式等方面的优势和作用。通过具体的教学案例和实践经验，本文将展示第一性原理计算在半导体物理课程教学中的实际应用效果，并探讨其对学生学习效果和创新能力的影响。它不仅能够提高半导体物理课程的教学质量，还能够培养学生的计算思维和创新能力，为培养高素质的半导体物理人才提供有力支持。因此，本文的研究对于推动半导体物理课程教学的改革和创新具有重要意义。本文采用基于密度泛函理论的第一性原理计算软件 Vienna Ab-initio Simulation

收稿日期：2024-08-18；修回日期：2024-08-24

基金项目：高等学校物理专业课程教学研究项目（编号：ZW-23-JW-06）和重庆市高等教育教学改革研究项目（编号：203400）资助

作者简介：凌发令（1990—），男，重庆人，重庆邮电大学应用物理学系讲师，博士，主要从事大学物理理论教学和载流子输运研究工作。

通信作者：李丽，重庆邮电大学教授，E-mail: lili@cqupt.edu.cn

Package (VASP), 结合建模软件 Materials Studio、VESTA, 作图软件 Origin, 以及材料数据库 Materials Project 设计了相关的教学内容, 并从 2019 年开始给物理专业学生开设, 取得了良好的教学效果.

1 第一性原理的计算的理论基础

半导体作为一个复杂的多粒子体系, 其核心构建单元是原子, 而原子又由原子核和围绕其运动的电子组成. 这些微观粒子之间的相互作用, 包括核与核、核与电子、电子与电子之间的相互作用, 对材料的宏观性质, 如力学、热学、光学、电学和磁学特性, 有着深远的影响. 理论上, 我们可以通过解析描述这一多粒子体系动态行为的 Schrödinger 方程来洞悉和预测这些性质. 然而, 由于 Schrödinger 方程包含与粒子总数 N 成正比的 $3N$ 个变量, 当粒子数增多时, 求解难度会呈指数级上升, 远远超出了当前计算技术的极限. 为了解决这一难题, Hohenberg 和 Kohn 在 1964 年提出了密度泛函理论 (DFT) [3]. 这一理论的核心思想在于, 用仅含 3 个变量的电子密度的空间分布的函数来替代传统上复杂的多体波函数, 作为描述体系基态性质的基本量. 他们指出, 所有基态性质都可以视为电子密度的唯一函数, 从而极大地简化了计算复杂度. 随后, 在 1965 年, Kohn 和 Sham 进一步发展了这一理论, 通过引入 Kohn-Sham 方程, 成功地将

复杂的多体问题转化为一系列非相互作用的电子在有效势场中运动的问题^[4]. 这一转化极大地降低了计算难度, 使得求解成为可能. 在实际计算中, 采用迭代法来求解 Kohn-Sham 方程. 首先, 设定一个电子密度的初始猜测值, 然后将其代入 Kohn-Sham 方程进行求解. 通过求解得到单粒子的本征函数和本征值, 进而计算出新的电子密度分布. 然后将这个电子密度与初始猜测值进行比较. 如果两者之间的差异显著, 就继续迭代这个过程, 直到两者收敛到足够接近为止. 此时, 我们就可以认为已经找到了体系的基态电子密度分布, 并据此计算出所需的物理性质.

2 第一性原理计算在半导体物理教学中应用

2.1 半导体材料的晶体结构和成键性质

深入理解晶体结构是探索半导体性质前提. 传统半导体物理教学偏重文字描述, 不足以构建学生对晶体结构直观认知. 以单晶硅这一典型金刚石结构半导体为例, 其每个原子被四个等距原子环绕, 形成复杂的正四面体空间排列, 而课本中的二维图示难以全面展现其三维构型及周期性晶体结构的全貌, 增加了学生的学习难度. 为克服这一局限, 我们可运用可视化技术辅助教学. 具体而言, 首先利用 Materials Project 这一开源数据库获取单晶硅的初始晶胞模型 A. 随后, 将模型 A 导入 Materials

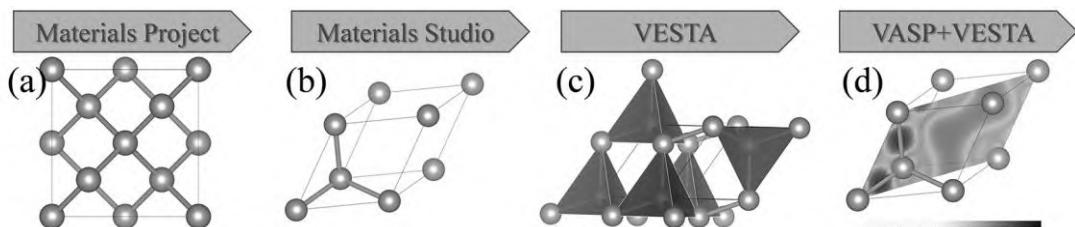


图 1 单晶硅的(a)超胞结构, (b)单胞结构, (c)空间构型和(d)电子局域函数图像.

Studio 软件，利用其强大的对称性分析能力，构建出硅的单胞结构 B. 最后，将单胞 B 导入 VESTA 软件，可任意旋转结构，使学生能够直观、生动地观察到单晶硅晶胞的精细结构，包括原子间的配位关系、周期性超胞的立体形态等，从而极大地促进了对晶体结构及其特性的理解。详见图 1(a)-1(c)。此外，我们可以借助第一性原理计算软件 VASP 的强大功能探究半导体材料的成键特性。首先，对硅单胞进行精细的结构优化，这一过程涵盖了原子位置的微调以及晶格常数的精确确定，确保了研究对象的准确性。随后，在 VASP 的配置文件 INCAR 中，通过设置 `LELF = .TRUE.` 指令，启动对优化后晶胞结构的自洽计算。这一步骤旨在捕获并解析体系中的电子局域函数（ELF）信息，该信息被存储在生成的 ELFCAR 文件中。接下来，利用 VESTA 软件的 `Edit→Lattice Planes` 模块，我们能够轻松地从 ELFCAR 文件中提取并直观展示电子局域函数的信息。ELF 的数值范围介于 0 到 1 之间，它直观地反映了电子的定域化程度：数值越高，表明电子越倾向于集中在某一特定区域，即定域性越强；反之，数值越低，则电子的定域性越弱。如图 1(d)所示，通过 VESTA 的呈现，我们可以清晰地观察到 Si-Si 成键的中间区域呈现出黑色，这代表该区域 ELF 值较高，电子定域性显著。尤为重要的是，该区域并

未展现出电子形态向任何一方偏聚的趋势，这直接证明了 Si-Si 键为非极性共价键。这不仅仅加深了我们对硅材料成键特性的理解，也为后续半导体性质的学习提供了坚实的理论基础。

2.2 半导体材料的能带结构和电子态密度

半导体的电子结构，尤其是其能带结构，是塑造半导体多方面性质的基石，因此深入探究其电子结构显得尤为关键。然而，传统半导体物理教学中对能带结构的探讨多局限于文字层面，难以让学生全面而深刻地理解其形成机制。为此，引入第一性原理计算为揭示半导体材料的电子结构特征——包括带隙类型、大小、带边形状及其构成——提供了强有力工具。以单晶硅为例，具体流程如下：首先，将经过结构优化处理的单晶硅单胞模型导入 Materials Studio 软件，利用 `Tools→Brillouin Zone Path` 模块精准绘制出其布里渊区的形状，并标识出关键的高对称点坐标，如图 2(a)所示。接着，借助 VASP 软件，沿着布里渊区内选定的高对称点路径，进行详细的能带结构计算。图 2(b)展示了计算得到的能带结构图，从中我们可以直观地识别出单晶硅的半导体类型（直接带隙或半间接带隙）、带隙的具体大小，以及带边特别是价带顶和导带底的精细形状与走势。这些信息对于理解半导体材料的导电性、光吸收与发射等性质至关重要。此外，为了更

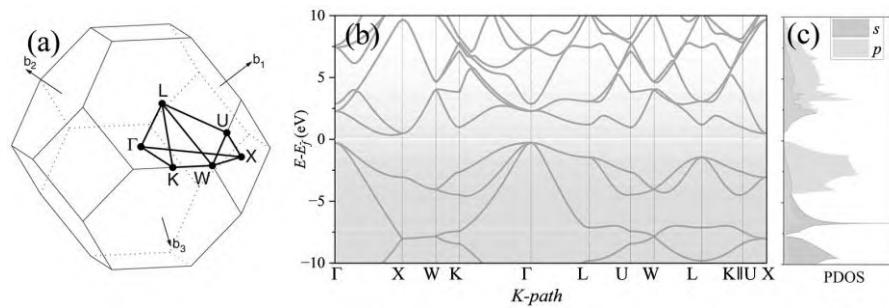


图 2 单晶硅的(a)第一布里渊区，(b)能带结构和(c)投影态密度图。

深入地揭示带边电子的轨道构成，我们进一步计算了单晶硅的投影电子态密度。如图 2(c)所示，结果表明，单晶硅的导带底部主要由硅原子的 s 轨道贡献，而价带顶部则主要由 p 轨道构成。这一发现不仅加深了我们对单晶硅电子结构的认识，还为学习半导体内部电子跃迁的物理机制提供了重要线索。因此，第一性原理计算对于认识半导体的电子结构十分有效。

此外，根据准经典近似理论，晶体电子可以作具有一定有效质量 (effective mass) 的经典粒子 (能量与动量的平方成正比)。有效质量把晶体周期性势场的作用概括到电子的质量中去，使得在引入有效质量之后，就可把运动复杂的晶体电子看作为简单的自由电子，使讨论晶体电子运动时，问题变得很简单。因此，有效求解半导体材料的有效质量 (尤其是带边极值附近) 对于研究它的输运性质尤为重要。在获得材料的能带结构后，找出价带顶 (VBM) 和导带底 (CBM) 的位置。如图 2(b)所示，单晶硅的 CBM 和 VBM 位于在第一布里渊区的 Γ 和 $X \rightarrow W$ ，具体的坐标可通过查看能带数据获得。理论上计算有效质量可通过求 $E(k)$ 在极值 (CBM 和 VBM) 附近展开式的二次项^[5]:

$$m_{\alpha}^* = \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_{\alpha}^2}$$

除了手动计算，目前还可以通过 VASPKIT 中 913 模块实现自动计算。另外，根据有效质量的定义，学生可以从半导体 VBM 和 CBM 附近的能带曲线变化情况推断有效质量的变化情况。比如导带底 (价带顶) 越尖锐，曲率变大，导带 (价带) 中的电子(空穴)有效质量相对越小，反之越大。

2.3 半导体材料中的杂质和缺陷能级

半导体材料的特性深受其中杂质与缺陷能级的影响，这些微观因素构成了半导体性能调控的关键基石。为了精准调控半导体性能，满足多元化应用需求，我们需精确控制杂质的种类与浓度，并有效减少缺陷的数量与种类。在半导体材料的研发历程中，对杂质与缺陷能级的深刻理解与精准操控显得尤为关键。然而，传统半导体物理教学往往侧重于理论阐述，难以让学生直观感受杂质引入与缺陷形成所伴随的附加能级变化。为弥补这一不足，本节将探讨如何运用第一性原理计算这一先进工具，辅助半导体杂质与缺陷能级的教学实践。以单晶硅为例，我们首先利用 Materials Studio 软件对优化后的硅单晶胞进行扩展，构建出一个包含 16 个原子的 $2 \times 2 \times 2$ 超晶胞 (如图 3(a)所示)，此举旨在确保掺杂浓度的合理性，同时超胞尺寸可根据具体研究需求灵活调整。随后，我们分别进行了两种类型的模拟操作：一是将超晶胞中的一个硅原子替换为氮原子或硼原子，以此模拟 n 型或 p 型掺杂场景 (如图 3(b)和 3(c)所示)；二是直接移除一个硅原子，以模拟本征空位缺陷的情形 (如图 3(d)所示)。

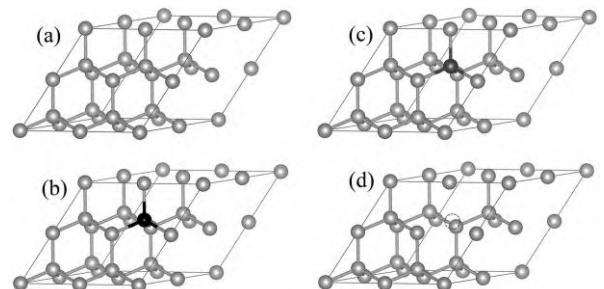


图 3 单晶硅的(a) $2 \times 2 \times 2$ 超晶胞结构和(b) 硼掺杂，(c) 氮掺杂和(d) 空位掺杂结构。

接下来，我们将构建的掺杂与缺陷模型的晶体结构数据导入 VASP 软件中，进行结构优化。优化完成后，导出优化后的晶胞文件 (CONTCAR)，并

重新导入 Materials Studio 中，利用该软件的强大功能，精确测量掺杂或缺陷位点周边的键长变化，深入分析掺杂原子或原位缺陷对半导体晶格结构的微妙影响。此外，在 VASP 的输入文件 INCAR 中设置 LAECHG=T 参数，对优化后的晶胞执行自治计算。计算完成后，进行 Bader 电荷分析，这一步骤旨在揭示引入杂质原子和原位缺陷后，硅原子周围电荷分布的微妙变化，从而深入理解电子重排现象。进一步地，利用自治计算过程中获得的电荷密度信息（CHGCAR），我们计算了各体系的能带结构。这一步骤旨在深入探究杂质或缺陷的引入如何影响半导体材料的电子能带结构。通过对比无掺杂、无缺陷的原始结构能带图（图 4(a)），我们发现掺杂显著改变了体系的费米能级位置。具体而言，如图 4(b) 所示，硼掺杂导致费米能级向下移动（空穴掺杂），同时在禁带中引入了杂质能级，甚至可能导致带隙的消失。相反，氮掺杂则使费米能级明显上移（电子掺杂），如图 5(c) 所示，并观察到晶体场变化引起的带边能级劈裂现象。至于本征缺陷体系（图 5(d)），其带隙发生显著变化，且禁带中出现了缺陷能级，进一步证实了缺陷对电子结构的深刻影响。第一性原理计算为我们提供了强有力的工作

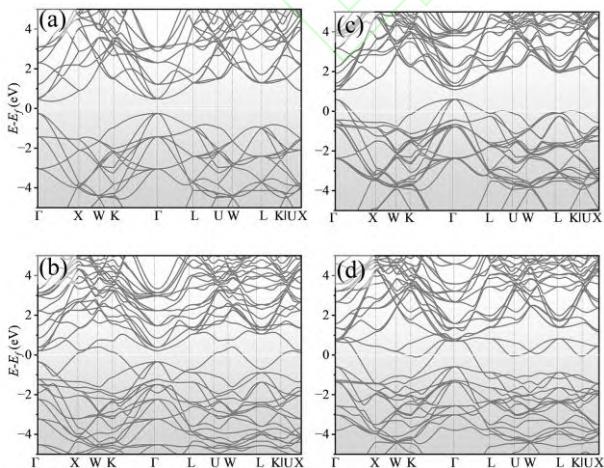


图 4 (a)无掺杂、(b)硼掺杂、(c)氮掺杂和(d)含空位单晶硅的

能带结构。

具，能够清晰揭示掺杂与缺陷对半导体材料电子结构的深刻影响。

3 教学方法改革讨论

将第一性原理方法引入到半导体物理课堂涉及两部分：理论介绍和软件操作。在实际的课堂教学中，我们鼓励学生结合已修的量子力学和固体物理知识，自学完成与第一性原理相关的理论部分学习。此外，为了平衡理论教学与实践操作，需要在传统教学的基础之上增加 4-6 学时。其中，2-3 学时用于软件基本操作培训，使学生能够熟练掌握必要的计算工具；另外 2-3 学时用于补偿上课过程中计算占用的时间，确保学生有足够的时间学习理论知识。此外，教师可提前完成计算时的参数设置，学生在计算时无需做额外调整，从而节省时间并降低出错率。其次，教师还可以将下一次课需要用到的晶体结构或电子结构作为课后练习，鼓励学生提前进行计算，这样模拟计算就不再占用上课时间，而是成为了一种预习和准备的过程，提高学习效率。

4 总结

本文以单晶硅材料为例，探讨了第一性原理计算方法在半导体物理教学中的应用。作者着重阐述了该方法在三大核心领域—半导体材料的晶体结构与成键特性、能带结构与态密度，以及异质原子掺杂与本征缺陷影响中的关键作用。通过解析计算原理、梳理计算流程、指导数据处理方法，并结合结果分析，本文不仅展示了第一性原理计算在半导体物理研究中的强大功能，更为半导体物理课程的教学改革与提升开辟了新思路。

参考文献：

- [1] 周梦, 陶应奇, 程才. 将第一性原理计算方法引入大学物理仿真实验教学[J]. 大学物理, 2024, 43(4): 40-43.
- [2] 于洋. 第一性原理在固体物理晶体结构教学中的应用[J]. 大学物理, 2022, 41(7): 43-45.
- [3] Hohenberg P, Kohn W. Inhomogeneous electron gas [J]. Physical Review, 1964, 136(3B): B864-B871.
- [4] Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects [J]. Physical Review, 1965, 140(4A): A1133-A1138.
- [5] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1998.

Integrating first-principles calculations into semiconductor physics education

LING Fa-ling, LI Li, CHEN Jiang-shan

(School of Science, Chongqing University of Posts and Telecommunications, Chongqing 400065, China)

Abstract: Recent advancements in internet technology and computing have opened new avenues for transforming traditional university physics education. Semiconductor physics, a fundamental aspect of these courses, stands to gain significantly from modern, innovative teaching approaches. This paper explores the integration of advanced first-principles computational methods with single-crystal silicon materials to enhance the quality and effectiveness of semiconductor physics instruction. By elucidating the theoretical foundations of first-principles calculations and their practical applications in teaching semiconductor crystal structures, electronic properties, impurities, and defects, this study provides practical insights and theoretical support for reforming semiconductor physics education. The aim is to improve educational outcomes and foster greater student engagement and creativity in the field.

Key words: semiconductor physics; first-principles calculations; educational innovation