半导体物理期中模拟　答案

Semiconductor Physics Midterm Review

Z

集成百川 同“芯”向前
njuic

2025 年 1 月 19 日

晶体结构

1. 什么是晶体点阵? 和晶体结构的关系是什么? 原胞取法唯一吗?

晶体点阵是晶体结构的抽象表示：晶体点阵是一种数学抽象，它体现了晶体内部原子或分子的周期性排列. 格点代表结构单元(基元)，可以代表基元中任意一个等价的点.
晶体结构是晶体点阵的具体实现：当晶格点阵中的格点被具体的基元（如原子、分子或离子）代替后，就形成了实际的晶体结构. 因此，可以说晶体结构是晶体点阵在物理空间中的具体实现.

Lattice + Basis = Crystal

原胞取法不唯一.

晶体结构

2. 晶体的晶面是什么? 密勒指数是什么 (仅考虑立方晶系), 该如何确定?

晶面: 在布拉维格子中所作的一簇互相平行的平面, 平面等间距, 可以将所有的格点包括无遗.

密勒指数: 晶面指数, 标定了晶面簇的方向.

取法:

- **确定截距**: 在晶面簇中任选一晶面计算在三个晶胞基矢上的截距 ($x_1x_2x_3$). 如果晶面与某基矢平行, 则该基矢上的截距视为无穷大.
- **取倒数并化简**: 取这些截距的倒数 $1/x_i$, 并将它们化为最小的简单整数比 ($h:k:l$).
- **表示晶面指数**: 将这组互质的整数用圆括号括起来, 即表示该晶面的密勒指数, 记为 (hkl).

晶体结构

3. 倒空间如何理解? 正空间 WS 原胞与倒空间的第一布里渊区分别是如何选取的?

倒空间:该空间倒空间若其基矢 $\{\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \boldsymbol{b}_3\}$ 与正空间基矢 $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3\}$ 满足

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \qquad i, j = 1, 2, 3$$

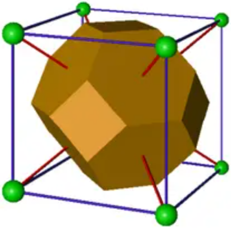
或者，对所有正格矢 $\boldsymbol{R}_n$ 满足 $\boldsymbol{G}_\mathrm{h} \cdot \boldsymbol{R}_n = 2\pi m \ (m \in \mathbb{Z})$ 的全部 $\boldsymbol{R}_\mathrm{h}$ 的端点构成的集合.

另一种理解: 正空间的傅里叶变换空间.

晶体结构

3. 倒空间如何理解? 正空间 WS 原胞与倒空间的第一布里渊区分别是如何选取的?

从任一格点 P 出发的所有格矢的垂直平分面，最靠近格点 P 的垂直平分面所围成的包含格点 P 的最小空间.



能带理论

4. 能带理论中，周期场近似是什么？紧束缚近似是什么？布洛赫波函数是怎样的？

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r})=E\psi(\boldsymbol{r})$$

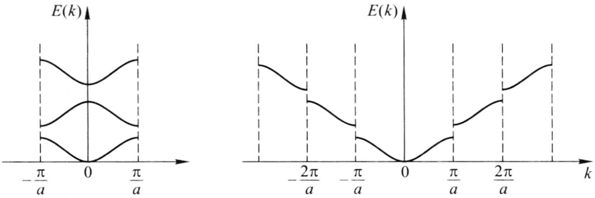
周期场近似：假定单电子所感受到的势场 $U(\boldsymbol{r})$ 具有平移对称性（周期性），即

$$U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_n)=U(\boldsymbol{r})$$

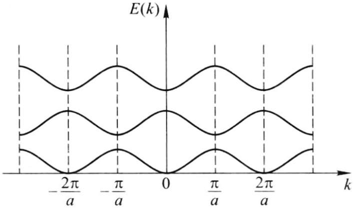
紧束缚近似：假设原子势 $V(\boldsymbol{r})$ 很强，晶体电子基本上是围绕着一个固定原子运动，与其他原子的相互作用很弱可以当作微扰 ΔV 处理. 故认为 $U(\boldsymbol{r})=V(\boldsymbol{r})+\Delta V$.

可以把紧束缚近似与近自由电子近似视作两个极端.

NFE vs TBA



(a) 简约区 (b) 扩展区



(c) 重复区

能带理论

4. 能带理论中，周期场近似是什么？紧束缚近似是什么？布洛赫波函数是怎样的？

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r})$$

Bloch 波函数：若势能 $U(\boldsymbol{r})$ 具有晶格周期性，即 $U(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{R}_n) = U(\boldsymbol{r})$，则满足上式的波函数一定具有如下形式

$$\varPsi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x}) = u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}$$

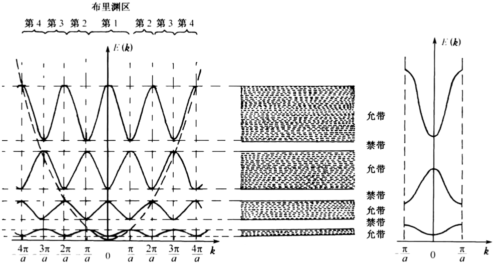
其中，$u_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{x})$ 是与 $U(\boldsymbol{r})$ 具有相同周期性的函数，$\boldsymbol{k}$ 是波矢.
在周期势场中运动的单电子的波函数是调幅平面波，其振幅按晶体的周期而周期变化.

能带理论

5. 如何理解电子共有化运动? 能带是连续的吗?

电子共有化运动：原子组成晶体后，不同原子的内外层波函数之间存在一定程度的交叠，故电子不再完全局限在某一个原子上，而是可以在整个晶体中运动.

能带不是连续的，是准连续的.



(a) E(k)和k的关系　(b) 能带　(c) 简约的布里渊区

能带结构

6. 如何定义有效质量？其意义是什么？什么是间接带隙半导体？

有效质量：在 $E(k)$ 极值附近做泰勒展开，得到二阶项 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$，与自由电子能量做类比得到．可以代表能带中电子受到外力时外力与加速度关系的比例系数．

意义：概括了半导体内部势场对于电子的作用，使得在解决半导体中电子在外力作用下的运动规律时，可以不涉及半导体内部势场的作用．可以引入经典力学的一些方式来分析电子．

间接带隙半导体：导带最小值（导带底）和价带最大值在 k 空间中处于不同位置的半导体材料．

杂质与缺陷能级

7. 晶体的本征缺陷有哪些? 掺杂为什么能够改变半导体导电性能?

本征缺陷：点缺陷、线缺陷、面缺陷（、体缺陷）.

原因：杂质提供了额外的载流子，同时破坏了晶格周期性从而改变了能带结构，使得费米能级位置改变，从而改变了导电性.

What is Semiconductor?

***. 你如何理解什么是半导体?**

- 材料
- 电阻率
- 能带结构
- …

衍射分析

Bragg 定律 & Laue 条件

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda$$

$$\boldsymbol{k}_0 - \boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{G}$$

$$\boldsymbol{k}_0 \cdot \boldsymbol{G} = \frac{1}{2}\boldsymbol{G}^2$$

衍射分析

1. 常见的铝晶体是一种面心立方堆积结构，Z 同学用 $\lambda_1 = 1.54 \times 10^{-10}\mathrm{m}$ 的 X 射线做衍射分析，结果得到 (110) 面的衍射角 θ_1 约为 22.3°. 请给出晶体中一个铝原子的最近邻原子数，并分析上述结果的合理性.

最近邻原子数是 12.

$$d_{110} = \frac{n\lambda_1}{2\sin\theta_1} = \frac{1 \times 1.54 \times 10^{-10}}{2\sin 22.3^\circ} \approx 2.86 \times 10^{-10}\mathrm{m} \quad ?$$

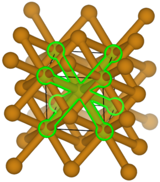
Selection Rules for Reflection in Cubic Crystals

(hkl)	$h^2+k^2+l^2$	SC	BCC	FCC
100	1	✓	✖	✖
110	2	✓	✓	✖
111	3	✓	✖	✓

衍射分析

2. Z 同学又使用波长 $\lambda_2 = 0.071\text{nm}$ 的射线对一铁晶体做衍射分析，发现随着衍射角从零开始增大，最早在 $\theta_2 = 10.1^\circ$ 时出现衍射峰. 查阅资料知常温下铁晶体结构如下，晶格常数为 2.87Å. 请给出该衍射峰对应晶面的晶面指数，并计算铁晶体原胞的体积.

该 Fe 为体心立方 (BCC)，结合布拉格定律



$$\left.\begin{aligned} 2\,d_{hkl}\sin\theta &= n\lambda \\ d_{hkl} &= \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \end{aligned}\right\} \Rightarrow \sin\theta = \frac{n\lambda}{2a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

最早的衍射峰 θ_2 对应了最小的 $n\sqrt{h^2+k^2+l^2}$，
故取 $n=1$、$\sqrt{h^2+k^2+l^2}=\sqrt{2}$，计算有 $\tilde{a} \approx 0.286\text{ nm} \approx 2.87\text{Å}$.
故晶面族为 {110}.

原胞体积为 $\frac{1}{2}a^3 = 1.18\times10^{-29}\text{m}^3$.

相互作用

考虑一个由两种二价离子（各 N 个，$N \to +\infty$）等间距组成的一维晶体，相互作用能为

$$U(r) = -\frac{1}{2} \cdot 2N \left[\frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} \sum_{i(\neq j)}^{2N} (\pm \frac{1}{a_i}) - \frac{B}{r^n} \right]$$

1. 请计算该晶体的 **Madelung** 常数 $\alpha = \sum_{i(\neq j)}^{N} (\pm \frac{1}{a_i})$.

$$\begin{aligned}
\alpha &= \lim_{N\to\infty} 2 \left[\frac{1}{1} - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \cdots + \frac{(-1)^{N+1}}{N} \right] \\
&= 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} x^n \bigg|_{x=1} \\
&= 2 \ln(1+x)|_{x=1} \\
&= 2 \ln 2
\end{aligned}$$

相互作用

考虑一个由两种二价离子（各 N 个，$N \to +\infty$）等间距组成的一维晶体，相互作用能为

$$U(r) = -\frac{1}{2}\cdot 2N\left[\frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}2\ln 2 - \frac{B}{r^n}\right]$$

2. 若 $n = 4$，请计算单离子的结合能 $E = u(r_0)$，可用平衡间距 r_0 表示.

$$\text{计算 } \left.\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}r}\right|_{r_0} = 0\text{，有 } B = \frac{z_1 z_2 \alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 n} r_0^{n-1} = \frac{e^2 r_0^3 \ln 2}{2\pi\varepsilon_0}$$

$$\Rightarrow \quad U(r_0) = -N\frac{3e^2\ln 2}{2\pi\varepsilon_0 r_0}$$

或者利用结论 $U(r_0) = -\frac{1}{2}\cdot 2N\frac{z_1 z_2\alpha e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}\left(1-\frac{1}{n}\right) = -N\frac{3e^2\ln 2}{2\pi\varepsilon_0 r_0}$.

相互作用

考虑一个由两种二价离子（各 N 个，$N \to +\infty$）等间距组成的一维晶体，相互作用能为

$$U(r) = -\frac{1}{2} \cdot 2N \left[\frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} 2\ln 2 - \frac{B}{r^n} \right]$$

2. 若 $n = 4$，请计算单离子的结合能 $E = u(r_0)$，可用平衡间距 r_0 表示.

单粒子结合能需要除以粒子数量 $2N$.

$$U(r_0) = -N \frac{3e^2 \ln 2}{2\pi\varepsilon_0 r_0}$$

$$\Rightarrow \quad E = u(r_0) = \frac{U(r_0)}{2N} = -\frac{3e^2 \ln 2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}$$

(或许需要考虑符号的问题)

相互作用

3. 若 $r_0 = 0.3\text{nm}$，结合能 $E = 3\ \text{eV}$，试求 B.

$$\left.\begin{aligned} B &= \frac{e^2 r_0^3 \ln 2}{2\pi\varepsilon_0} \\ E &= \frac{3e^2 \ln 2}{4\pi\varepsilon_0 r_0} \end{aligned}\right\} \Rightarrow B = \frac{2r_0^4}{3}E$$

计算有 $B = 2.60 \times 10^{-58}\text{J}\cdot\text{m}^4$ 或 $1.62 \times 10^{-2}\text{eV}\cdot\text{nm}^4$

半导体掺杂

考虑室温 300 K 环境下一硅材料，其 $N_c = 2.8\times10^{19}\text{cm}^{-3}$，$E_g = 1.12\text{eV}$.

1. 半导体中首先掺杂了磷原子，使其费米能级来到导带底部下侧 0.3 eV 处，试计算磷的掺杂浓度并绘制能带图，体现出电离过程. 设杂质磷的电离能为 0.04 eV.

由题意，$E_c - E_F = 0.3$ eV. 结合 $\Delta E_D = 0.04$ eV，有

$$E_D - E_F = 0.26\text{eV} \gg k_0T$$

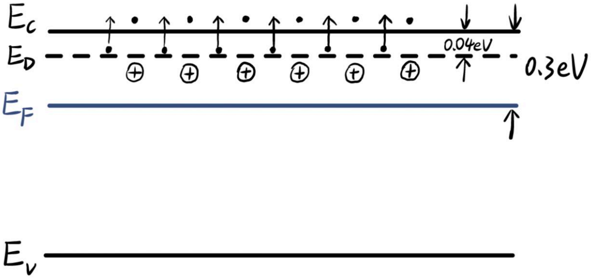
故材料在强电离区，$n_0 \approx n_D^+ \approx N_D$.

$$N_D \approx n_0 = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0T}\right) \approx 2.6\times10^{14}\ \text{cm}^{-3}$$

半导体掺杂

考虑室温 300 K 环境下一硅材料，其 $N_c = 2.8 \times 10^{19}\mathrm{cm}^{-3}$，$E_g = 1.12\mathrm{eV}$.

1. 半导体中首先掺杂了磷原子，使其费米能级来到导带底部下侧 0.3 eV 处，试计算磷的掺杂浓度并绘制能带图，体现出电离过程. 设杂质磷的电离能为 0.04 eV.



半导体掺杂

考虑室温 300 K 环境下一硅材料，其 $N_\mathrm{c} = 2.8 \times 10^{19}\mathrm{cm}^{-3}$，$E_\mathrm{g} = 1.12\mathrm{eV}$.

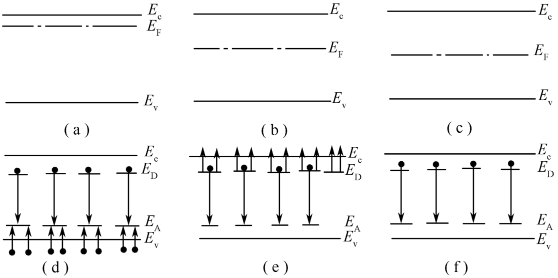
2. 对上述硅继续掺杂硼原子，使得费米能级降低了 0.1 eV，试计算硼的掺杂浓度. 假设均能全部电离.

由题意，$E_\mathrm{c} - E_\mathrm{F}' = 0.4\ \mathrm{eV}$. 由于全部电离，视 $n_0 = N_\mathrm{D} - N_\mathrm{A}$.

$$N_\mathrm{D} - N_\mathrm{A} = N_\mathrm{c}\exp(-\frac{E_\mathrm{c} - E_\mathrm{F}'}{k_0 T}) \approx 5.3 \times 10^{12}\ \mathrm{cm}^{-3}$$

半导体掺杂

3. 请简述下列各个能带图分别表明半导体处于何种掺杂情况，并分别指出哪个符合上述 1、2 小题的半导体掺杂情况.



(a) 强 n 型掺杂；(b) 弱 n 型掺杂；(c) 本征半导体
(d) 受主多于施主；(e) 施主多于受主；(f) 施主与受主恰好相等.

杂质电离

一杂质补偿硅材料，已知掺入受主密度 $N_{\mathrm{A}}=1\times10^{15}\mathrm{cm}^{-3}$，室温下测得其 E_{F} 恰好与 E_{D} 重合，并得知平衡电子密度为 $n_0=5\times10^{15}\mathrm{cm}^{-3}$. 已知室温下硅的本征载流子密度 $1\times10^{10}\mathrm{cm}^{-3}$，导带底有效态密度 $2.8\times10^{19}\mathrm{cm}^{-3}$.

1. 请计算平衡少子浓度与 E_{F} 的位置.

$$p=\frac{n_{\mathrm{i}}^2}{n_0}=2\times10^4\,\mathrm{cm}^{-3}$$

由 $n_0=N_{\mathrm{c}}\exp(-\dfrac{E_{\mathrm{c}}-E_{\mathrm{F}}}{k_0T})$，可计算

$$E_{\mathrm{F}}=E_{\mathrm{c}}+k_0T\ln\frac{N_{\mathrm{c}}}{n_0}=E_{\mathrm{c}}-0.22\,\mathrm{eV}$$

同时知，$E_{\mathrm{F}}\gg E_{\mathrm{A}}$，故受主强电离.

杂质电离

一杂质补偿硅材料，已知掺入受主密度 $N_A = 1 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$，室温下测得其 E_F 恰好与 E_D 重合，并得知平衡电子密度为 $n_0 = 5 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$. 已知室温下硅的本征载流子密度 $1 \times 10^{10}\text{cm}^{-3}$，导带底有效态密度 $2.8 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$.

2. 请计算掺入材料中的施主杂质浓度以及电离程度.

由 $E_F = E_D$，可知 $1 - f_D(E) = \frac{1}{1+2\exp(\frac{E_F - E_D}{k_0 T})} = \frac{1}{3}$ 为电离程度，结合电荷平衡有

$$n_0 + N_A = n_D^+ = N_D[1 - f_D(E)] = \frac{N_D}{3}$$

而 $n_D^+ = N_D - n_D$，可计算

$$N_D = 3(n_0 + N_A) = 1.8 \times 10^{16}\,\text{cm}^{-3}$$

杂质电离

一杂质补偿硅材料，已知掺入受主密度 $N_A = 1 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$，室温下测得其 E_F 恰好与 E_D 重合，并得知平衡电子密度为 $n_0 = 5 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$. 已知室温下硅的本征载流子密度 $1 \times 10^{10}\text{cm}^{-3}$，导带底有效态密度 $2.8 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$.

3. 已知 $N_c \propto T^{\frac{3}{2}}$，证明强电离时有 $E_F = E_c + kT \ln \dfrac{N_D - N_A}{N_c}$，并简单说明该硅材料在 $T = 400\text{K}$ 时的电离情况.

强电离区，$n_0 = N_D - N_A$，结合下式易证明.

$$n_0 = N_c \exp\left(\frac{E_F - E_c}{k_0 T}\right)$$

升温至 400K，若 E_F 不变，由上式

$$n_0' = 6.66 \times 10^{16}\,\text{cm}^{-3} > N_D - N_A$$

杂质电离

3. 已知 $N_c \propto T^{\frac{3}{2}}$，证明强电离时有$E_F = E_c + kT\ln\dfrac{N_D - N_A}{N_c}$，并简单说明该硅材料在 $T = 400\text{K}$ 时的电离情况.

若升温至 400K，杂质均强电离

$$E_F = E_c + k_0 T \ln\frac{N_D - N_A}{N_c} = E_c - 0.27\text{eV}$$

下式检验 $f_D(E)$，不满足强电离，实际 E_F 要降低.

$$f_D(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{2}\exp(\frac{E_D - E_F}{k_0 T})} = 0.33 > 0.1$$

再检验本征载流子浓度变化后得出，施主仍然中等电离，但电离程度近翻倍；受主仍然强电离.

杂质电离

弱电离至强电离区，有

$$N_A + N_c \exp(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}) = \frac{N_D}{1 + 2\exp(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T})}$$

令 $x = \frac{N_c}{2N_D}\exp(-\frac{E_c - E_D}{k_0 T})$、$y = 2\exp(-\frac{E_D - E_F}{k_0 T})$. 400K 下，$x = 1.850$. 则上式变为

$$\frac{1}{18} + xy = \frac{1}{1+y}$$

解得 $y = 0.3658$，进一步计算有 $E_F - E_D = -0.0586$ eV 、$n_0' = 1.22 \times 10^{16}\,\mathrm{cm}^{-3}$.

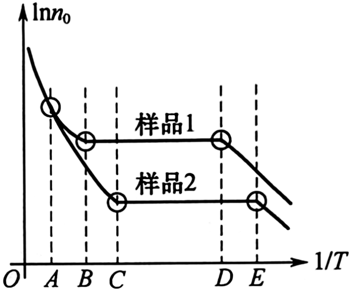
电离分析

Z 同学采购了两块硅材料，是杂质相同但浓度不同的两块 n 型硅. 测量得到其电子浓度与温度的关系如图所示.

1. 两样品掺杂浓度较高的是哪个，在 T_A 左侧为什么两曲线近似重合.

样品 1 掺杂浓度更高.

在 T_A 以左区域，两样品处在高温本征激发区，本征激发产生的载流子数远多于杂质电离产生的载流子数，掺杂浓度对载流子浓度几乎无影响，故两曲线近似重合.



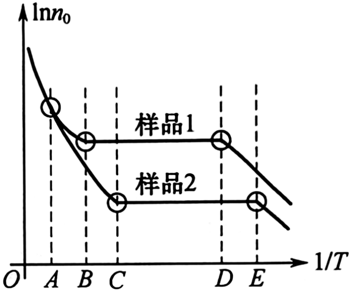
电离分析

Z 同学采购了两块硅材料，是杂质相同但浓度不同的两块 n 型硅. 测量得到其电子浓度与温度的关系如图所示.

2. 两曲线在 T_C 与 T_D 之间为什么近乎平行，为什么两平行曲线的起点 T_B、T_C 的不一致，终点 T_D、T_E 也不一致.

T_C 与 T_D 之间两种样品均处于强电离区域，杂质几乎全部电离，且远大于本征激发程度，因此载流子数量基本不发生变化，故两条曲线趋于平行.

样品杂质浓度越高，本征激发起主要作用的温度也越高，因此 T_B 在 T_C 左侧；达到强电离的温度也越高，因此 T_D 在 T_E 左侧.



电离分析

Z 同学采购了两块硅材料，是杂质相同但浓度不同的两块 n 型硅. 测量得到其电子浓度与温度的关系如图所示.

3. 若低温下，N_c 近乎不变，则在 T_E 右侧两曲线是否平行，其斜率的含义是什么.

低温电离区，有

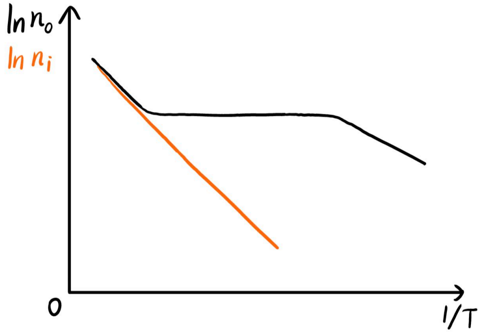
$$\left.\begin{aligned} E_F &= \frac{E_c + E_D}{2} + \frac{k_0 T}{2}\ln\frac{N_D}{2N_c} \\ n_0 &= N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{k_0 T}\right) \end{aligned}\right\} \Rightarrow \ln n_0 = \frac{1}{2}\ln\frac{N_D N_c}{2} - \frac{\Delta E_D}{2k_0 T}$$

由于低温下 N_c 保持不变，故有直线 $\ln n_0$—$1/T$，斜率为 $-\dfrac{\Delta E_D}{2k_0}$.

电离分析

Z 同学采购了两块硅材料，是杂质相同但浓度不同的两块 n 型硅. 测量得到其电子浓度与温度的关系如图所示.

4. 请直接在图中绘制样品 2 的本征载流子浓度与温度的关系（纵坐标为 $\ln n_\mathrm{i}$）.



导电率

Z 同学有一个 n 型锗样品，在 300K 环境下，其电子浓度 $n_0 = 5 \times 10^{14}\mathrm{cm}^{-3}$，试计算上述温度时掺杂锗的电导率 σ. 已知 $\mu_\mathrm{n} = 3800\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s})$、$\mu_\mathrm{p} = 1900\mathrm{cm}^2/(\mathrm{V}\cdot\mathrm{s})$、$n_\mathrm{i} = 2.33\times10^{12}\mathrm{cm}^{-3}$.

少子浓度

$$p_0 = \frac{n_\mathrm{i}^2}{n_0} = 1.086 \times 10^{10}\mathrm{cm}^{-3}$$

故

$$\sigma = n_0 q \mu_\mathrm{n} + p_0 q \mu_\mathrm{p} = 0.304\,\mathrm{S/cm}$$

Thanks!

$\mathscr{Z}$