

# 半导体物理

张乐天

221900182



# 作业HW1

1.1 以刚性原子球堆积模型，计算以下各结构的致密度（%）：(1) 简单立方；(2) 体心立方；(3) 面心立方；(4) 六角密排；(5) 金刚石。

1.2 试证六方密排密堆积结构中  $c/a = (8/3)^{1/2} \approx 1.633$

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$$

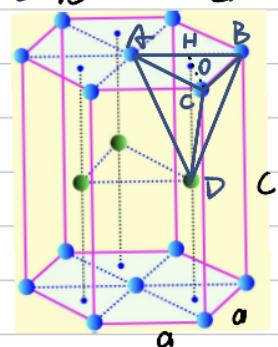
1.3. 画出体心立方和面心立方晶格结构的金属在(100), (110)和(111)面上的原子点阵排列(格点分布)，并分别指出哪个面具有最大的面密度。

1.4. 指出立方晶格(111)面与(110)面、(111)面与(100)面的交线的晶向，画出示意图。

## 1.1 用字母 $\rho$ 表示致密度

- (1) 简单立方  $\rho_1 = \frac{4}{3}\pi(\frac{1}{2}a^3)/a^3 = \frac{\pi}{6} \approx 0.524$
- (2) 体心立方  $\rho_2 = 2 \times \frac{4}{3}\pi r^3 / (\frac{4r}{\sqrt{3}})^3 = \frac{\sqrt{3}}{8}\pi \approx 0.680$
- (3) 面心立方  $\rho_3 = 4 \times \frac{4}{3}\pi r^3 / (\frac{4r}{\sqrt{2}})^3 = \frac{\sqrt{2}}{6}\pi \approx 0.740$
- (4) 六角密排  $\rho_4 = \rho_3 = 0.740$  ( $\rho_4 = 2 \times \frac{4}{3}\pi r^3 / (2r \times \sqrt{3}r \times \frac{4}{3}\sqrt{6}r) = \frac{5}{6}\pi = 0.740$ )
- (5) 金刚石  $\rho_5 = 8 \times \frac{4}{3}\pi r^3 / (\frac{8}{3}r)^3 = \frac{\sqrt{3}}{16}\pi \approx 0.340$

## 1.2 记： 如图 正四面体ABC中 向平面ABC作投影



$D \perp \text{面 } ABC$  易知  $C \perp AB$  且  $C \cap AB = H$

$H$  为  $AB$  中点  $\therefore HC = \frac{\sqrt{3}}{3}a$   $OC = \frac{2}{3}CH = \frac{\sqrt{3}}{3}a$

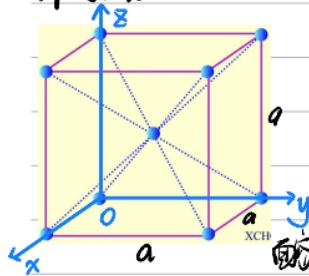
$$\therefore DO = \sqrt{1 - (\frac{\sqrt{3}}{3})^2}a = \frac{\sqrt{6}}{3}a$$

$$\therefore C = 2DO = \frac{2}{3}\sqrt{6}a = \sqrt{\frac{8}{3}}a$$

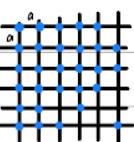
记毕

1.3

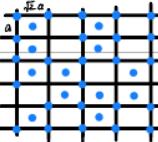
体心立方



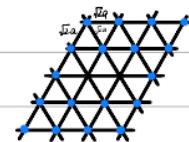
(100)



(110)



(111)



$$\text{其中 } 4r = \sqrt{3}a$$

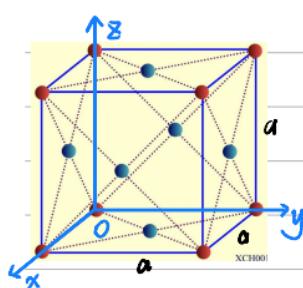
$$\frac{\pi r^2}{a^2} = \frac{\sqrt{3}}{16}\pi$$

$$\frac{2\pi r^2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{\sqrt{6}}{16}\pi$$

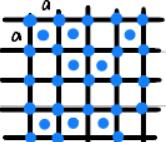
$$\frac{\frac{1}{2}\pi r^2}{\frac{\sqrt{3}}{4}(2a)^2} = \frac{1}{16}\pi$$

则面 (110) 有最大面密度

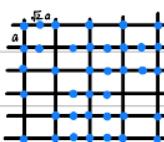
面心立方



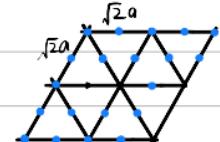
(100)



(110)



(111)

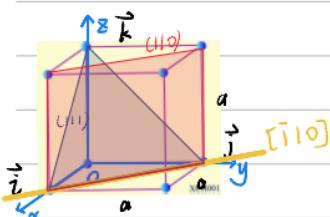


面 (111) 为面最密堆积. 故面 (111) 有最大面密度

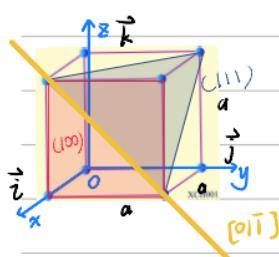
1.4

如图建系

(111) 与 (110) 交线



$$\begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} = (-1, 1, 0) \quad \text{该线晶向 } [1\bar{1}0] \quad (\text{或 } [\bar{1}10])$$



(111) 与 (100) 交线

$$\begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{vmatrix} = (0, 1, -1) \quad \text{该线晶向 } [01\bar{1}] \quad (\text{或 } [0\bar{1}1])$$

## 作业HW2

1. 证明：体心立方晶格的倒格子是面心立方；面心立方晶格的倒格子是体心立方。

2. 证明：倒格子原胞体积是 $(2\pi)^3/\Omega$ ，其中 $\Omega$ 是正格子原胞体积。

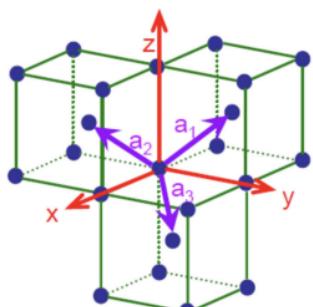
3. 证明对于六角晶系， $hkl$ 面族的面间距为

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2) + \left(\frac{a}{c}\right)^2 l^2}}, a = b \neq c$$

4. 写出体心立方和面心立方晶格结构的金属中，最近邻和次近邻的原子数。若边长为a，写出单胞体积、原胞体积、最近邻和次近邻的原子间距

1.

证明：(1) 体心立方倒格子是面心立方



如图 取  $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \left(\frac{a}{2}\right)^3 \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix} = \frac{a^3}{2} \left(\frac{V}{2}\right)$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega} = \frac{4\pi}{a^3} \cdot \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{vmatrix}$$

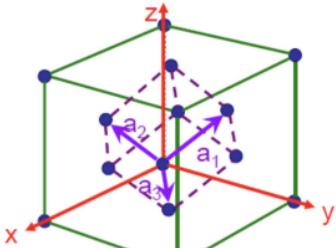
$$= \frac{\pi}{a} \cdot (0\hat{x} + 2\hat{y} + 2\hat{z}) = \frac{2\pi}{a} (\hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (\hat{z} + \hat{x}) \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y}) \quad \text{则 } \vec{b}_1 \text{ 面心}$$

说明 Reciprocal Lattice to BCC  $\Rightarrow$  FCC

(2) 面心立方的倒格子是体心立方

由倒格子的倒格子是本身 及(1)可直接得证



另：如图 取  $\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$  有  $\Omega = \frac{V}{4} = \frac{a^3}{4}$

$$\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(\hat{z} + \hat{x})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\therefore \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 = \frac{8\pi}{a^3} \frac{a^2}{4} \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{2\pi}{a} (-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\text{由对称性可知 } \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} - \hat{y} + \hat{z}) \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

则 F. 依于体心

说明 Reciprocal Lattice to FCC  $\Rightarrow$  BCC

2.

$$\text{证明: } \nabla = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} \vec{a}_2 \times \vec{a}_3 \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} \vec{a}_3 \times \vec{a}_1 \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \end{cases} \quad \therefore \nabla^* = \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3)$$

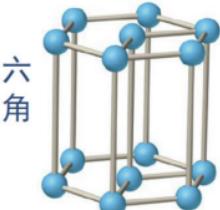
$$\text{利用 } \vec{A} \times (\vec{B} \times \vec{C}) = (\vec{A} \cdot \vec{C}) \vec{B} - (\vec{A} \cdot \vec{B}) \vec{C}$$

$$\begin{aligned} \text{有 } \vec{b}_2 \times \vec{b}_3 &= \frac{4\pi^2}{\sqrt{2}} (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \times (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) = \frac{4\pi^2}{\sqrt{2}} [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_2] \vec{a}_1 - [(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1) \cdot \vec{a}_2] \vec{a}_1 \\ &= \frac{4\pi^2}{\sqrt{2}} [\nabla \cdot \vec{a}_1 - (\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1) \vec{a}_1] \quad (\vec{a}_1 = \vec{a}_3 \times \vec{a}_1, \text{ 且 } \vec{a}_1 \perp \vec{a}_1, \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_1 = 0) \\ &= \frac{4\pi^2}{\sqrt{2}} \vec{a}_1 \\ \therefore \nabla^* &= \vec{b}_1 \cdot (\vec{b}_2 \times \vec{b}_3) = \frac{4\pi^2}{\sqrt{2}} \cdot \frac{2\pi}{\sqrt{2}} (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) \cdot \vec{a}_1 = \frac{(2\pi)^3}{\sqrt{2}} \cdot \nabla = \frac{(2\pi)^3}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

3.

证明:

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a \quad |\vec{c}| = c \quad \gamma = 120^\circ$$



$$\begin{aligned} \text{六角} \\ a &= b \neq c \\ \alpha &= \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ \end{aligned}$$

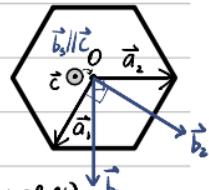
$$\nabla = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{c}) = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c$$

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} \vec{a}_2 \times \vec{c} \\ \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} \vec{c} \times \vec{a}_1 \\ \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} \vec{a}_1 \times \vec{a}_2 \end{cases} \quad \therefore \begin{cases} \vec{b}_1 \perp \vec{b}_3, \vec{b}_2 \perp \vec{b}_3 \\ \vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 = |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| \cos(180^\circ - \gamma) \\ = |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| \cos 60^\circ = \frac{1}{2} |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| \end{cases}$$

$$\text{且有 } |\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} a c \quad |\vec{b}_3| = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} a^2 \sin 120^\circ = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} a^2 \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$\vec{G} = h \vec{b}_1 + k \vec{b}_2 + l \vec{b}_3$$

$$\begin{aligned} \therefore |\vec{G}| &= \sqrt{\vec{G} \cdot \vec{G}} = \sqrt{h^2 |\vec{b}_1|^2 + k^2 |\vec{b}_2|^2 + l^2 |\vec{b}_3|^2 + 2hk \vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2} \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{2}} \sqrt{h^2 a^2 c^2 + k^2 a^2 c^2 + \frac{3}{4} l^2 a^4 + 2hk |\vec{b}_1| |\vec{b}_2| \frac{1}{2}} = \frac{2\pi}{\sqrt{2}} \sqrt{a^2 c^2 (h^2 + hk + k^2) + \frac{3}{4} l^2 a^4} \\ &= \frac{2\pi}{a^2 c} \sqrt{\frac{4}{3} a^2 c^2 (h^2 + hk + k^2) + l^2 a^4} = \frac{2\pi}{a} \sqrt{\frac{4}{3} (h^2 + hk + k^2) + l^2 \left(\frac{a}{c}\right)^2} \\ \therefore d &= \frac{2\pi}{|\vec{G}|} = \frac{a}{\sqrt{\frac{4}{3} (h^2 + hk + k^2) + l^2 \left(\frac{a}{c}\right)^2}} \end{aligned}$$



4.

	体心立方	面心立方
最近邻原子数	8	12
次近邻原子数	6	6
单胞体积	$a^3$	$a^3$
原胞体积	$a^3/2$	$a^3/4$
最近邻的原子间距	$\frac{\sqrt{3}}{2}a$	$\frac{\sqrt{2}}{2}a$
次近邻的原子间距	$a$	$a$
(边长为 $a$ )		

# 作业HW3

1. 使用  $\lambda = 1.54 \times 10^{-10}$  m 的 X 射线照射晶体，

a. 已知具有 fcc 结构的 Al 多晶 (111) 面的衍射角为 38.4 度，试求 (111) 面的面间距。

b. 已知具有 bcc 结构的 Fe 多晶 (110) 面的衍射角为 44.6 度，试求其晶胞长度。

2. 试给出金刚石的结构因子，并指出衍射强度消失的晶面指数。

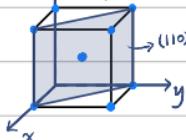
$$1. \lambda = 1.54 \times 10^{-10} \text{ m} \quad 2d \sin \theta = n\lambda$$

解 a. FCC 的 (111) 面出现衍射峰

$$d = \frac{n\lambda}{2 \sin \theta} \quad \text{取 } n=1 \quad d_{111} = \frac{1.54 \times 10^{-10}}{2 \sin 38.4^\circ} \text{ m} = 1.24 \times 10^{-10} \text{ m}$$

b. BCC (110) 面出现衍射峰

$$\text{取 } n=1 \quad d_{110} = \frac{1.54 \times 10^{-10}}{2 \sin 44.6^\circ} = 1.10 \times 10^{-10} \text{ m}$$



$$\text{如图可知 } a = \sqrt{2} d_{110} = 1.55 \times 10^{-10} \text{ m}$$

2. 解：对应金刚石的结构因子 可视为两源系统

$$F_{HKL} = f_a [1 + \exp(i\pi(H+K)) + \exp(i\pi(K+L)) + \exp(i\pi(L+H))]$$

$$+ \exp(i\frac{\pi}{2}(H+K+L)) + \exp(i\frac{\pi}{2}(3H+3K+L)) + \exp(i\frac{\pi}{2}(3H+K+3L)) + \exp(i\frac{\pi}{2}(H+3K+3L))]$$

$$= f_a [1 + \cos \pi(H+K) + \cos \pi(K+L) + \cos \pi(L+H)] [1 + \exp^{\frac{i\pi}{2}(H+K+L)}]$$

1° H, K, L 奇偶混杂 则  $A=0 \therefore F_{HKL}=0$  衍射面消光

2° H, K, L 均为奇数 则  $A=4 \quad |B|=\sqrt{2} \therefore |F_{HKL}|=4\sqrt{2}f_a$  出现衍射峰

3° H, K, L 均为偶数 则  $A=4 \quad B=1 + \cos \frac{H+K+L}{2} \cdot \pi$

1)  $\frac{H+K+L}{2}$  为奇数，此时  $H+K+L=2(2m+1)$  则  $B=0 \therefore F_{HKL}=0$  衍射面消光

2)  $\frac{H+K+L}{2}$  为偶数 此时  $H+K+L=4m$  ( $m=0, 1, 2, \dots$ ) 则  $B=2 \therefore F_{HKL}=8f_a$  出现衍射峰

综上，衍射强度消失的晶面指数 (HKL) 为

$H, K, L$  奇偶混杂 或  $H+K+L=2(2m+1) \quad m=0, 1, 2, \dots$

如 (100) (110) (200) (210) (211) (300) (310) (222) (320) (321) 等

# 作业HW4

2.1. 证明两种一价离子等间距组成的一维晶格的马德隆常数为:  $\alpha = 2\ln 2$ 。

2.2. 利用Evjen中性原胞法(取8个单胞)计算CsCl晶体的马德隆常数。

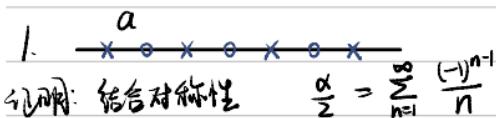
2.3. 若两原子间的相互作用能可以表示为:  $u(r) = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n}$

若取  $m=3, n=10$ , 当两原子构成稳定的分子后, 其核间距  $r_0 = 3 \times 10^{-10} \text{ m}$ , 离解能为4eV(已知1 eV =  $1.602 \times 10^{-19} \text{ J}$ )。

试求出(1) $\alpha, \beta$ 的数值; (2)使该分子分裂所必须的力; (3)当分裂时原子核间的临界间距。

2.4. 2.1题所示一维离子晶体, 交替载有电荷为 $\pm q$ 的 $2N$ 个离子, 其最近邻之间的排斥势为  $b/r^m$ ,

$$\text{证明在平衡间距下 } U(r_0) = -\frac{2Nq^2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right)$$



$$\text{则 } S(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n} \quad \text{收敛域为 } (-1, 1) \quad S(0) = 0$$

$$\text{则 } S'(x) = \sum_{n=1}^{\infty} x^{n-1} = \frac{1}{1-x} \quad \text{可取 } S(x) = \int_0^x S'(x) dx + S(0) = -\ln(1-x)$$

$$\text{则 } S(-1) = \lim_{x \rightarrow -1} S(x) = -\ln 2$$

$$\therefore \alpha = -2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} = -2 \times (-\ln 2) = 2 \ln 2$$

(或)  $(-1, 1]$  上, 存在 Taylor 展开  $\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} x^n$

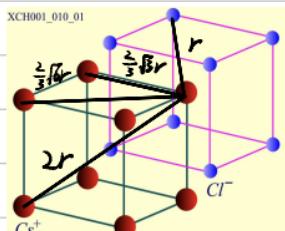
$$\text{令 } x=1 \text{ 有 } \frac{\alpha}{2} = \ln 2 \Rightarrow \alpha = 2 \ln 2$$

2.

不选取8个顶角为  $Cs^+$  的单胞, 中心为  $Cs^+$

$$\begin{aligned} \alpha &= 8 \times \frac{1}{2} - 6 \times \frac{1}{2} \times \frac{1}{\frac{2}{3}\sqrt{3}} - 12 \times \frac{1}{4} \times \frac{1}{\frac{2}{3}\sqrt{6}} - 8 \times \frac{1}{8} \times \frac{1}{2} \\ &= 8 - \frac{3\sqrt{3}}{2} - \frac{3\sqrt{6}}{4} - \frac{1}{2} = 3.0648 \end{aligned}$$

(与 1.7627 相差甚远)



3.

$$(1) m=3, n=10 \quad U(r) = -\frac{\alpha}{r^m} + \frac{\beta}{r^n} = -\frac{\alpha}{r^3} + \frac{\beta}{r^{10}}$$

$$\left. \frac{du}{dr} \right|_{r_0} = \frac{3\alpha}{r_0^4} - \frac{10\beta}{r_0^{11}} = 0 \Rightarrow \frac{3\alpha}{r_0^3} - \frac{10\beta}{r_0^{10}} = 0 \quad (\star) \quad (r_0 = 3.0 \times 10^{-10} m)$$

$$U(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0^3} + \frac{\beta}{r_0^{10}} = -4 \text{ eV}$$

$$\begin{cases} \frac{\alpha}{r_0^3} = \frac{40}{7} \text{ eV} \\ \frac{\beta}{r_0^{10}} = \frac{12}{7} \text{ eV} \end{cases} \Rightarrow \alpha = 154.29 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$$

$$\beta = 1.01 \times 10^5 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{10}$$

$$(2) F(r) = -\frac{d}{dr} U(r) = \frac{3\alpha}{r^4} - \frac{10\beta}{r^{11}}$$

$$\left. \frac{dF}{dr} \right|_{r_0} = -\frac{12\alpha}{r^5} + \frac{110\beta}{r^{12}} = 0$$

$$r^7 \cdot 12\alpha = 110\beta$$

$$\text{有 } r_m = \left( \frac{55\beta}{6\alpha} \right)^{\frac{1}{7}}$$

$$\text{而由 } (\star) \quad r_0 = \left( \frac{10\beta}{3\alpha} \right)^{\frac{1}{7}} \quad \therefore r_m = \left( \frac{11}{4} \right)^{\frac{1}{7}} r_0 \quad \frac{1}{r_0^2} = \frac{11}{4} \frac{1}{r_m^2}$$

$$\therefore F_m = F(r_m) = \frac{1}{r_m^4} \left( 3\alpha - \frac{10\beta}{r_m^3} \right) = \frac{1}{r_m^4} \left( 3\alpha - 3\alpha \frac{4}{11} \right)$$

$$= \frac{\alpha}{r_0^4} \cdot \frac{21}{11} \times \left( \frac{4}{11} \right)^{\frac{4}{7}} = \frac{154.29 \times 1.602 \times 10^{-19} \times 10^{-30}}{81 \times 10^{-40}} \times \frac{21}{11} \times \left( \frac{4}{11} \right)^{\frac{4}{7}} N$$

$$= 3.268 \times 10^{-9} N$$

$$(3) \text{ 如上 } r_m = \left( \frac{11}{4} \right)^{\frac{1}{7}} r_0 = 3.466 \times 10^{-10} m$$

4.

$$U = -\frac{1}{2} \times 2N \left[ \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \sum_{i(j)}^{2N} \left( \pm \frac{1}{a_i} \right) - \frac{1}{r^n} \sum_{i(j)}^{2N} \frac{b}{a_i^n} \right] \quad r_{ij} = a_i r$$

$$\simeq -N \left[ \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \alpha - \frac{B}{r^n} \right]$$

$$\frac{1}{2} \alpha = \sum_{i(j)}^{2N} \left( \pm \frac{1}{a_i} \right) \simeq 2 \ln 2$$

$$\text{平衡时. } \left. \frac{du}{dr} \right|_{r=r_0} = N \left( \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} \alpha - \frac{nB}{r_0^n} \right) = 0$$

$$B = \frac{2N}{n} \frac{b}{a_0^n} \quad (N \text{ 常数})$$

$$\therefore \frac{B}{r^n} = \frac{1}{n} \times \frac{q^2 \alpha}{4\pi\epsilon_0 r_0^n} \quad R \cdot 1 \quad U(r_0) = -N \cdot \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \alpha \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

$$\text{而 } \alpha = 2 \ln 2$$

$$\therefore U(r_0) = -\frac{2Nq^2 \ln 2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left( 1 - \frac{1}{n} \right)$$

1. 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

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

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

2. 晶格常数为  $0.25\text{nm}$  的一维晶格, 当外加  $10^2\text{V/m}$ ,  $10^7\text{V/m}$  的电场时, 试分别计算电子自能带底运动到能带顶所需的时间。

3. 如果 n 型半导体导带的极值在  $[1\ 1\ 0]$  轴上及相应的对称方向上, 回旋共振的实验结果应如何?

1.

解: ①  $\nabla E_c(k) = \frac{2\hbar^2}{m_0} \left( \frac{1}{3}k + k - k_1 \right) = 0$  有  $k = \frac{3}{4}k_1$   
而  $E_c''(k) = \frac{8\hbar^2}{3m_0} > 0$  恒成立 故  $E_c(\frac{3}{4}k_1) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{4m_0}$  为极小值  
 $\nabla E_v(k) = -\frac{6\hbar^2 k}{m_0} = 0$  有  $k=0$   
而  $E_v''(k) = -\frac{6\hbar^2}{m_0} < 0$  故  $E_v(0) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{6m_0}$  为极大值

$$E_g = E_v(0) - E_c(\frac{3}{4}k_1) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{12m_0} = 0.636\text{eV}$$

$$\textcircled{2} \quad \frac{1}{m_e} E_c''(k_1) = \frac{1}{m_{nc}^*} \Rightarrow m_{nc}^* = \frac{\hbar^2}{E_c''(k_1)} = \frac{3}{8}m_0$$

$$\textcircled{3} \quad m_{nv}^* = \frac{\hbar^2}{E_v''(0)} = -\frac{1}{6}m_0$$

$$\textcircled{4} \quad \Delta p = \hbar k \Big|_{\frac{3}{4}k_1} - \hbar k \Big|_0 = \frac{3}{4}\hbar k_1 = 7.91 \times 10^{-25} \text{ kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-1}$$

2.

解:  $a = 0.25\text{nm}$  从能带底到能带顶  $\Delta k = \frac{\pi}{a}$   
 $eE = \frac{dE}{ds} = \frac{dE}{vdt} = \hbar \frac{dE}{AE} \frac{dk}{dt}$

$$\therefore dt = \frac{\hbar}{eE} dk \Rightarrow \Delta t = \frac{\hbar}{eE} \frac{\pi}{a}$$

$$\Delta t_1 = \frac{\hbar}{eE_1} \frac{\pi}{a} = 8.27 \times 10^{-8} \text{ s}$$

$$\Delta t_2 = \frac{\hbar}{eE_2} \frac{\pi}{a} = 8.27 \times 10^{-13} \text{ s}$$

3.

解：认为  $m_x^* = m_y^* = m_t$      $m_z^* = m_l$     并认为  $m_t \neq m_l$   
则  $m_n^* = m_t \sqrt{\frac{m_t}{m_t \sin^2 \theta + m_l \cos^2 \theta}}$      $\begin{cases} m_l \text{ 为径向有效质量} \\ m_t \text{ 为横向有效质量} \end{cases}$

对  $(a, b, c)$  的磁感应方向 和 极值所在方向  $(x, y, z)$

$$\omega s\theta = \frac{(ax+by+cz)^2}{(a^2+b^2+c^2)(x^2+y^2+z^2)} \quad \text{而 } x^2+y^2+z^2 = 1^2 + 1^2 + 0 = 2$$

①  $\vec{B}$  沿  $[1, 0, 0]$  方向  $\cos^2 \theta$  有  $\frac{1}{2}, 0$  两种取值  $\Rightarrow m_n^*$  两种  
故 2 个共振吸收峰

②  $\vec{B}$  沿  $[1, 1, 0]$  方向  $\cos^2 \theta$  有  $1, \frac{1}{2}, 0$  三种取值  $\Rightarrow m_n^*$  三种  
故 3 个共振吸收峰

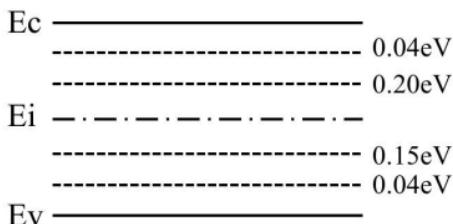
③  $\vec{B}$  沿  $[1, 1, 1]$  方向  $\cos^2 \theta$  有  $\frac{2}{3}, 0$  两种取值  $\Rightarrow m_n^*$  两种  
故 2 个共振吸收峰

④  $\vec{B}$  沿 任意方向 为方向，取  $a^2+b^2+c^2$  定值 ( $a \neq b \neq c$ )  
 $|ax+by+cz|$  有  $|a+b|, |a+c|, |b+c|$   
 $|a-b|, |a-c|, |b-c|$  6 种取值

故  $m_n^*$  有 6 种    故 6 个共振吸收峰

作业：

- 简述半导体单晶硅中的主要缺陷
- 简述控制元素半导体（如硅锗）、III-V族化合物半导体、II-VI族化合物半导体导电类型的方法
- 什么叫施主和受主？施主和受主电离以后有什么特征？并画出对应的能带图
- 下图给出了金在锗中所引入的能级的位置，请标明它们分别是施主能级还是受主能级？这些杂质能级是深能级还是浅能级？简要说明为什么金在锗中可以产生多次电离？金在锗中共有哪几种荷电状态？



1.

- ① 点缺陷，如空位、间隙原子
- ② 线缺陷，如位错
- ③ 面缺陷，伴缺陷等

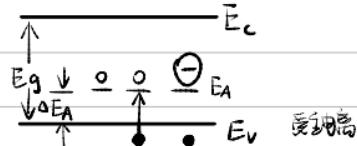
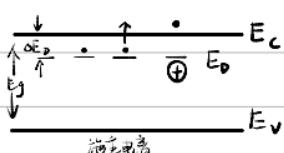
2.

掺杂：引入杂质：施主杂质或受主杂质。它们在禁带中引入施主能级或受主能级。杂质电离电离能较小，更容易发生。导电能力增强  
(对于 III-V, II-VI 化合物，还可以调节元素配比)

3.

施主，能够释放电子而产生导电电子并形成正电中心

一般如V族杂质，电离后成为正电中心，称为离化态



受主，能够接受电子而产生导电空穴，并形成负电中心

一般如Ⅴ族杂质，电离后成为负电中心，称为受主离化态

4.

如图，杂质能级均为深能级

$E_c$	—	—
受主 $E_{A_3}$	—	0.04 eV
受主 $E_{A_2}$	—	0.20 eV
$E_i$	—	—
受主 $E_A$	—	0.15 eV
施主 $E_D$	—	0.04 eV
$E_v$	—	—

金为Ⅰ族 中性金原子 ( $Au^0$ ) 只有一个价电子，比锗少三个

$Au^0$  取代一个 Ge，这一个价电子被共价键束缚，故施主电离形成  $Au^+$ ， $\Delta E_D$  较大。施主能级  $E_D$  很低

此外， $Au^0$  与周围 Ge 形成共价键时，所能接受三个电子。

依次变为  $Au^-$ ， $Au^0$ ， $Au^+$ 。受主能级依次为  $E_A$ ， $E_{A_2}$  与  $E_{A_3}$ ，且依次升高。电离能  $\Delta E_{A_3} < \Delta E_{A_2} < \Delta E_A$ ，这是因为由于库仑排斥力，每多接受一个电子受到的排斥力就越大，需要能量更大。

综上，共有  $Au^+$ ， $Au^0$ ， $Au^-$ ， $Au^0$ ， $Au^+$  五种荷电状态

7. ① 在室温下，锗的有效态密度  $N_c = 1.05 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N_v = 3.9 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 试求锗的载流子有效质量  $m_n^*$ ,  $m_p^*$ 。计算 77K 时的  $N_c$  和  $N_v$ 。已知 300K 时,  $E_g = 0.67 \text{ eV}$ 。77K 时  $E_g = 0.76 \text{ eV}$ 。求这两个温度时锗的本征载流子浓度。② 77K 时，锗的电子浓度为  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ，假定受主浓度为零，而  $E_c - E_D = 0.01 \text{ eV}$ ，求锗中施主浓度  $N_D$  为多少？

$$3\text{p}: ① N_c = 2 \left( \frac{m_n^* k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \Rightarrow m_n^* = 2\pi \left( \frac{N_c}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{k_B T} = 5.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$\text{同理 } m_p^* = 2\pi \left( \frac{N_v}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar^2}{k_B T} = 2.63 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

$$N_c, N_v \propto T^{\frac{3}{2}} \quad \text{故 } N_c|_{77K} = 1.05 \times 10^{19} \times \left( \frac{77}{300} \right)^{\frac{3}{2}} = 1.37 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_v|_{77K} = 3.9 \times 10^{18} \times \left( \frac{77}{300} \right)^{\frac{3}{2}} = 5.07 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_i|_{300K} = (N_c N_v)^{\frac{1}{2}} \exp \left( \frac{-E_g}{2k_B T} \right) = 1.51 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$$

$$n_i|_{77K} = (N_c N_v)^{\frac{1}{2}} \exp \left( -\frac{E_g}{2k_B T} \right) = 1.12 \times 10^{-7} \text{ cm}^{-3}$$

$$② n_D^+ = 10^{17} \text{ cm}^{-3} = \frac{N_D}{1 + 2 \exp \left( -\frac{E_D - E_F}{k_B T} \right)} \gg n_i|_{77K} \quad \therefore n \approx n_D^+$$

$$E_D - E_F = E_D - E_C + E_C - E_F = -0.01 \text{ eV} + E_C - E_F$$

$$\text{而 } n = N_c \exp \left( -\frac{E_C - E_F}{k_B T} \right) \quad \therefore \frac{n}{N_c} = \exp \left( -\frac{E_C - E_F}{k_B T} \right)$$

$$\therefore N_D = N_D^+ \left( 1 + 2 \exp \left( -\frac{E_D - E_C}{k_B T} \right) \frac{n}{N_c|_{77K}} \right) = 1.66 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

9. 计算施主杂质浓度分别为  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  的硅在室温下的费米能级，并假定杂质是全部电离。再用算出的费米能级核对一下上述假定是否在每一种情况下都成立。计算时，取施主能级在导带下面 0.05eV 处。

$$3\text{p}: T=300K \quad \text{杂质全部电离认为 } n \approx N_D \quad N_c = 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{而 } n = N_c \exp \left( -\frac{E_C - E_F}{k_B T} \right) = N_D \quad \text{故 } E_F = E_C + k_B T \ln \frac{N_D}{N_c}$$

$$\text{而 } f_D(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{f_D} \exp \left( \frac{E_C - E_F}{k_B T} \right)}$$

$$① N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3} \quad E_F = E_C - 0.205 \text{ eV} < E_D \quad \text{则 } E_F - E_F = 0.155 \text{ eV}$$

$$f_D(E) = 1 / \left( 1 + \frac{1}{2} \exp \frac{0.155 \text{ eV}}{k_B T} \right) = 5.0 \times 10^{-3} < 0.1 \quad \text{成立}$$

$$② N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3} \quad E_F = E_C - 0.086 \text{ eV} < E_D \quad \text{则 } E_F - E_F = 0.036 \text{ eV}$$

$$f_D(E) = 1 / \left( 1 + \frac{1}{2} \exp \frac{0.036 \text{ eV}}{k_B T} \right) = 0.33 > 0.1 \quad \text{不成立}$$

$$③ N_D = 10^{19} \text{ cm}^{-3} \quad E_F = E_C - 0.026 \text{ eV} > E_D \quad \text{则 } E_F - E_F = 0.024 \text{ eV} > 0$$

$$\text{则一定不成立} \quad \text{也可算得 } f_D(E) = 0.84 > 0.1$$

18. 掺磷的 n 型硅, 已知磷的电离能为 0.044eV, 求室温下杂质一半电离时费米能级的位置和磷的浓度。

解: 室温下, n型硅  $N_c = 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  一半电离时  $n \approx n_p^+$

$$f_0(E) = 1 / (1 + \frac{1}{2} \exp(\frac{E_F - E_F}{kT})) = 0.5$$

$$\text{则 } E_D - E_F = kT \ln 2 \quad \therefore E_F = E_D - 0.018 \text{ eV} = E_c - 0.062 \text{ eV}$$

$$n_p^+ \approx n = N_c \exp(-\frac{E_c - E_F}{kT}) = 2.8 \times 10^{19} \exp(-\frac{0.062}{kT}) = 2.55 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$\text{则 } N_D(p) = 2n_p^+ = 5.10 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

20. 制造晶体管一般是在高杂质浓度的 n 型衬底上外延一层 n 型外延层, 再在外延层中扩散硼、磷而成的。

$$E_c - E_F = 0.039 \text{ eV}$$

$$E_c - E_F = 0.026 \text{ eV}$$

① 设 n 型硅单晶衬底是掺锑的, 锑的电离能为 0.039eV, 300K 时的  $E_F$  位于导带底下面 0.026eV 处, 计算锑的浓度和导带中电子浓度。

② 设 n 型外延层杂质均匀分布, 杂质浓度为  $4.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , 计算 300K 时  $E_F$  的位置及电子和空穴浓度。

③ 在外延层中扩散硼后, 硼的浓度分布随样品深度变化。设扩散层某一深度处硼浓度为  $5.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , 计算 300K 时  $E_F$  的位置及电子和空穴浓度。

④ 如温度升高到 500K, 计算③中电子和空穴的浓度(本征载流子浓度数值查图 3-7)。

解 ① 300K. 有  $n \approx n_p^+$   $N_c = 2.8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

$$\text{由于 } E_c - E_F = 0.026 \text{ eV} < 2kT \quad \text{为弱简并情况} \quad \frac{1}{2} F_1(x) = \int_0^{100} \frac{\sqrt{x}}{1 + e^{x-x}} dx$$

$$n = N_c \frac{2}{\sqrt{\pi}} F_{1/2} \left( \frac{E_F - E_c}{kT} \right) = 2.8 \times 10^{19} \times \frac{2}{\sqrt{\pi}} \times F_{1/2} \left( -\frac{0.026}{0.026} \right) \approx 9.13 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$$

$$N_D = \frac{n_p^+}{F_0(E)} = n \left( 1 + 2 \exp \left( \frac{E_F - E_F}{kT} \right) \right) = 9.13 \times 10^{18} \times \left( 1 + 2 \times \exp \left( \frac{0.039 \text{ eV}}{kT} \right) \right) \approx 3.93 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$$

② 杂质浓度较小 认为非简并 假设杂质完全电离  $n \approx n_p^+ \approx N_D$

$$\text{则 } N_c \exp \left( -\frac{E_c - E_F}{kT} \right) = N_D \Rightarrow E_F = E_c + k_T \ln \frac{N_D}{N_c}$$

$$\therefore E_F = E_c - 0.166 \text{ eV} < E_c - 2kT$$

故可认为杂质完全电离  $n = 4.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

$$\text{查图 3-7 与表 3-2, 可取 } n_i|_{300K} = 1.02 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$$

$$\therefore p = \frac{n_i^2}{n} = 2.26 \times 10^4 \text{ cm}^{-3}$$

$$③ N_A = 5.2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3} > N_D = 4.6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

故此时可认为是 P 型半导体

$$\therefore N_A - N_D = 6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3} \gg n_i|_{300K}$$

$$\therefore p = N_A - N_D = 6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

$$n = \frac{n_i^2}{p} = 1.73 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-3}$$

而 300K 时  $N_V = 1.1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  由  $p = N_A - N_D \gg n_i$  和

$$E_F = E_V - k_B T \ln \left( \frac{N_A - N_D}{N_V} \right) = E_V + 0.254 \text{ eV}$$

$$\begin{aligned} (E_F &= E_i - k_B T \ln \left\{ \frac{(N_A - N_D) + [(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2]^{\frac{1}{2}}}{2n_i} \right\} )_{N_A - N_D \gg n_i} \\ &\approx E_i - k_B T \ln \left( \frac{N_A - N_D}{n_i} \right) = E_i - k_B T \ln \left[ \frac{N_A - N_D}{N_V \exp \left( \frac{E_F - E_i}{k_B T} \right)} \right] \\ &= E_i - k_B T \ln \frac{N_A - N_D}{N_V} + k_B T \frac{E_V - E_i}{k_B T} = E_V - k_B T \ln \left( \frac{N_A - N_D}{N_A} \right) \end{aligned}$$

$$④ 500K \text{ 时 } n_i|_{500K} = 4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3} \text{ 数量级与 } N_A - N_D \text{ 相当}$$

由  $\left\{ \begin{array}{l} p + N_D = n + N_A \\ n \cdot p_o = n_i^2 = 1.6 \times 10^{29} \text{ cm}^{-6} \end{array} \right.$

$$\text{有 } \left\{ \begin{array}{l} p_o = \frac{N_A - N_D}{2} + \frac{[(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2]^{\frac{1}{2}}}{2} = 8 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3} \\ n_o = \frac{N_A - N_D}{2} + \frac{[(N_A - N_D)^2 + 4n_i^2]^{\frac{1}{2}}}{2} = 2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3} \end{array} \right.$$

## 第五章

7. 掺施主浓度  $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  的 n 型硅, 由于光的照射产生了非平衡载流子  $\Delta n = \Delta p = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ 。试计算这种情况下准费米能级的位置, 并和原来的费米能级作比较。

$\text{解: } n_0 = N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$        $n = n_0 + \Delta n = 1.1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

$$P_0 = \frac{n_0^2}{n_0} = 1.04 \times 10^5 \text{ cm}^{-3}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} n = n_i \exp \left( - \frac{E_i - E_{Fn}}{k_B T} \right) \\ P = P_0 \exp \left( - \frac{E_{Fp} - E_i}{k_B T} \right) \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} E_{Fn} = E_i + k_B T \ln \frac{n_0}{n_i} = E_i + 0.300 \text{ eV} \\ E_{Fp} = E_i - k_B T \ln \frac{P_0}{n_i} = E_i - 0.238 \text{ eV} \end{array} \right.$$

$$\therefore \left\{ \begin{array}{l} n = n_0 \exp \left( - \frac{E_F - E_{Fn}}{k_B T} \right) \\ P = P_0 \exp \left( - \frac{E_{Fp} - E_F}{k_B T} \right) \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} E_{Fn} = E_F + k_B T \ln \frac{n}{n_0} = E_F + 0.002 \text{ eV} \approx E_F \\ E_{Fp} = E_F - k_B T \ln \frac{P}{P_0} = E_F - 0.535 \text{ eV} \end{array} \right.$$

$$(E_F = E_i + k_B T \ln \frac{n_0}{n_i} = E_i + 0.297 \text{ eV}) \quad (T=300K)$$

13. 室温下, p 型锗半导体中的电子的寿命为  $\tau_n = 350 \mu\text{s}$ , 电子的迁移率  $\mu_n = 3600 \text{ cm}^{+2}/(\text{V}\cdot\text{s})$ , 试求电子的扩散长度。

$\text{解: } L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \quad \therefore \frac{D_n}{\mu_n} = \frac{k_B T}{q} \quad \therefore L_n = \sqrt{\mu_n \frac{k_B T}{q} \tau_n}$

$\therefore \text{扩散长度 } L_n \approx 0.18 \text{ cm} \quad (T=300K)$

14. 设空穴浓度是线性分布, 在  $3\mu\text{m}$  内浓度差为  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ,  $\mu_p = 400 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ 。试计算空穴扩散电流密度。

$\text{解: } \because \frac{D_p}{\mu_p} = \frac{k_B T}{q} \quad \therefore D_p = 1.04 \text{ cm}^2/\text{s}$

$$\therefore \left| \frac{\partial}{\partial x} (\Delta p) \right| = \frac{10^{15}}{3} \text{ cm}^{-3}/\mu\text{m} = \frac{10^{19}}{3} \text{ cm}^{-2}$$

$$\therefore \left| (J_p)_\text{扩散} \right| = \left| \frac{q}{\mu_p} \cdot S_p \right| = \left| \frac{q}{\mu_p} \left[ -D_p \frac{\partial}{\partial x} (\Delta p) \right] \right|$$

$$= \left| -\mu_p k_B T \times \frac{10^{19}}{3} \right| \approx 5.52 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$$

8. 设硅线性缓变结的杂质浓度梯度为  $5 \times 10^{23} \text{ cm}^{-4}$ ,  $V_D$  为 0.7V, 求反向电压为 8V 时的势垒区宽度。

$$\text{解: } \alpha_j = \left| \frac{1}{q} \frac{\partial}{\partial x} p(x) \right| = 5 \times 10^{23} \text{ cm}^{-4}$$

$$\therefore V_b - V = \frac{q \alpha_j X_p^3}{12 \epsilon_r \epsilon_0} \quad \text{即} \quad X_p = \sqrt[3]{\frac{12 \epsilon_r \epsilon_0 (V_b - V)}{q \alpha_j}}$$

$$V_b = 0.7 \text{ V} \quad V = -8 \text{ V} \quad \epsilon_r = 11.9$$

$$\therefore X_p = 1.11 \times 10^{-7} \text{ cm} = 1.11 \times 10^{-5} \text{ cm}$$

9. 已知突变结两边杂质浓度为  $N_A = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $N_D = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ , ①求势垒高度和势垒宽度; ②画出  $\epsilon(x)$ 、 $V(x)$  图。

$$\text{解: } \textcircled{1} \quad V_b = \frac{k_B T}{q} \ln \frac{N_D N_A}{n_i^2} = 0.95 \text{ V} \quad N_A = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

$$\because N_D \gg N_A$$

$$\therefore X_D \approx X_p = \sqrt{\frac{2 \epsilon_r \epsilon_0 V_b}{q N_A}} = 3.54 \times 10^{-7} \text{ m} = 3.54 \times 10^{-5} \text{ cm}$$

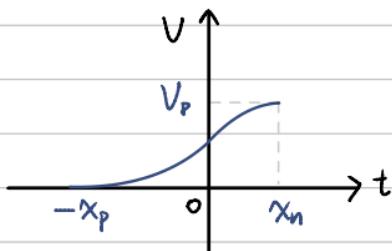
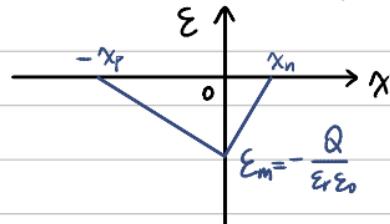
$$\textcircled{2} \quad \begin{cases} \frac{d^2}{dx^2} V_1(x) = \frac{q N_A}{\epsilon_r \epsilon_0} & (-X_p < x < 0) \\ \frac{d^2}{dx^2} V_2(x) = -\frac{q N_D}{\epsilon_r \epsilon_0} & (0 < x < X_n) \end{cases} \quad \text{且 } \epsilon(-X_p) = \epsilon(X_n) = 0$$

$$\text{故两端相接} \quad (其中 X_n = \frac{N_A}{N_D} \cdot X_p = 3.54 \times 10^{-9} \text{ cm})$$

$$\therefore \begin{cases} \epsilon_1(x) = -\frac{dV_1(x)}{dx} = -\frac{q N_A}{\epsilon_r \epsilon_0} (x + X_p) & (-X_p < x < 0) \\ \epsilon_2(x) = -\frac{dV_2(x)}{dx} = \frac{q N_D}{\epsilon_r \epsilon_0} (x - X_n) & (0 < x < X_n) \end{cases}$$

$$\therefore \begin{cases} V_1(-X_p) = 0 & V_2(X_n) = V_b \\ V_1(0) = V_2(\infty) \end{cases}$$

$$\therefore \begin{cases} V_1(x) = \frac{q N_A}{2 \epsilon_r \epsilon_0} (x + X_p)^2 & (-X_p < x < 0) \\ V_2(x) = V_b - \frac{q N_D}{2 \epsilon_r \epsilon_0} (x - X_n)^2 & (0 < x < X_n) \end{cases}$$



10. 已知电荷分布  $\rho(x)$  为: ①  $\rho(x) = 0$ ; ②  $\rho(x) = c$ ; ③  $\rho(x) = qax$  ( $x$  在  $0 \sim d$  之间), 分别求电场强度  $E(x)$  及电位  $V(x)$ , 并作图。

$$3\text{P} \quad \frac{d^2}{dx^2} V(x) = -\frac{1}{\epsilon_0 \epsilon_r} \rho(x)$$

$$\textcircled{1} \quad \rho(x) = 0$$

$$\frac{d^2}{dx^2} V(x) = 0 \therefore \frac{d}{dx} V(x) = -E(x) = C_1$$

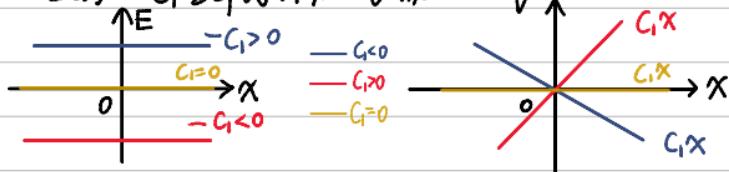
$$E(x) = -C_1$$

$$V(x) = C_1 x + C_2$$

$$\text{不妨令 } C_2 = 0 \quad \text{则 } V(x) = C_1 x \quad (\text{即规定 } x=0 \text{ 时 } V=0)$$

实际上 由于  $\rho(x)=0$  故内建电场  $E \equiv 0$

$$E(x) = -C_1, \text{ 全部为外加电场}$$



$$\textcircled{2} \quad \rho(x) = c$$

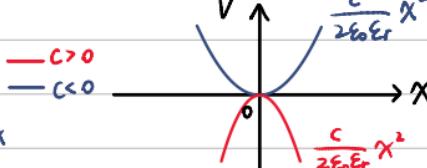
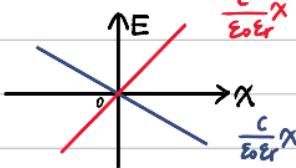
$$\frac{d^2}{dx^2} V(x) = -\frac{c}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (\text{不妨令 } c \neq 0)$$

$$\therefore \frac{d}{dx} V(x) = -E(x) = -\frac{c}{\epsilon_0 \epsilon_r} x + C_1 \quad E(x) = \frac{c}{\epsilon_0 \epsilon_r} x - C_1$$

$$\therefore V(x) = -\frac{c}{2\epsilon_0 \epsilon_r} x^2 + C_1 x + C_2$$

不妨  $C_1 = 0$  (可通过平移坐标得到, 令  $x' = x - \frac{C_1 \epsilon_0 \epsilon_r}{c}$ ),  $C_2 = 0$

$$E(x) = \frac{c}{\epsilon_0 \epsilon_r} x \quad V(x) = \frac{c}{2\epsilon_0 \epsilon_r} x^2$$



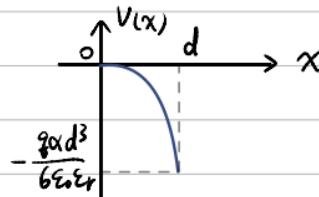
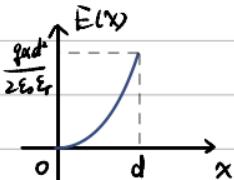
$$\textcircled{3} \quad p(x) = q\alpha x \quad (0 \leq x \leq d) \quad \frac{d^2}{dx^2} V(x) = -\frac{q\alpha x}{\epsilon_0 \epsilon_r}$$

$$\therefore \frac{d}{dx} V(x) = -E(0) = -\frac{q\alpha x^2}{2\epsilon_0 \epsilon_r} + C_1, \quad E(x) = \frac{q\alpha x^2}{2\epsilon_0 \epsilon_r} - C_1$$

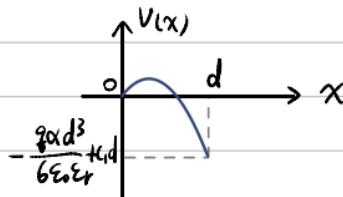
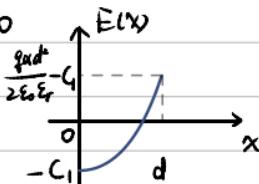
$$\therefore V(x) = -\frac{q\alpha x^3}{6\epsilon_0 \epsilon_r} + C_1 x + C_2$$

不妨令  $C_2 = 0$   $\alpha > 0$

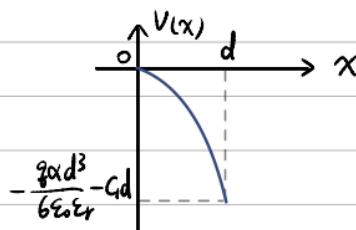
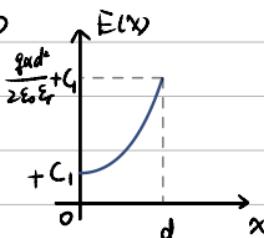
$$C_1 = 0$$



$$C_1 > 0$$



$$C_1 < 0$$



# 金属半导体接触

3. 施主浓度  $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  的 n 型硅，室温下的功函数是多少？若不考虑表面态的影响，它分别同 Al, Au, Mo 接触时，形成阻挡层还是反阻挡层？硅的电子亲和能取 4.05eV。

解： $E_F = E_c + k_B T \ln \left( \frac{N_D}{N_c} \right) < E_c$

$$\therefore E_n = k_B T \ln \left( \frac{N_c}{N_D} \right) = 0.146 \text{ eV}$$

$$\therefore W_s = E_n + \chi = 4.20 \text{ eV}$$

$$W_{Al} = 4.28 \text{ eV} \quad W_{Au} = 5.1 \text{ eV} \quad W_{Mo} = 4.6 \text{ eV}$$

对 n 型， $W_m > W_s$  时 形成 阻挡层  
故均为阻挡层

4. 受主浓度  $N_A = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  的 p 型锗，室温下的功函数是多少？若不考虑表面态的影响，它分别同 Al, Au, Pt 接触时，形成阻挡层还是反阻挡层？锗的电子亲合能取 4.13eV。

解： $E_F = E_v - k_B T \ln \left( \frac{N_A}{N_V} \right) > E_v$

$$\therefore E_p = k_B T \ln \left( \frac{N_V}{N_A} \right) = 0.122 \text{ eV}$$

$$\therefore W_s = E_p + \chi + E_g = 0.122 + 4.13 + 0.66 = 4.91 \text{ eV}$$

$$W_{Al} = 4.28 \text{ eV} \quad W_{Au} = 5.1 \text{ eV} \quad W_{Pt} = 5.65 \text{ eV}$$

对 p 型  $W_m < W_s$  时 形成 阻挡层

与 Al 接触形成 阻挡层

与 Au, Pt 接触形成 反阻挡层

5. 某功函数为 2.5eV 的金属表面受到光的照射。

① 这个面吸收红色光或紫色光时，能放出光电子吗？

② 用波长为 185nm 的紫外线照射时，从表面放出的光电子的能量是多少 eV？

解：认为红光 700nm 紫光 400nm  $W_s = 2.5 \text{ eV}$

① 对  $\lambda_1 = 700 \text{ nm}$   $E_1 = h\nu_1 = \frac{hc}{\lambda_1} = 1.77 \text{ eV} < 2.5 \text{ eV}$

故吸收红光，不能放出电子

对  $\lambda_2 = 400 \text{ nm}$   $E_2 = h\nu_2 = \frac{hc}{\lambda_2} = 3.10 \text{ eV} > 2.5 \text{ eV}$

故吸收紫光，可以放出电子

② 对  $\lambda_3 = 185 \text{ nm}$   $E_3 = h\nu_3 = \frac{hc}{\lambda_3} = 6.70 \text{ eV}$

$\therefore E = E_3 - W_s = 4.2 \text{ eV}$

- 6. 电阻率为  $10 \Omega \cdot \text{cm}$  的 n 型锗和金属接触形成的肖特基势垒高度为 0.3eV。求加上 5V 反向电压时的空间电荷层厚度。

解：n型硅 离子载流子为电子  $\mu_n = 3800 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$

$$\because \rho = 10 \Omega \cdot \text{cm} \quad \sigma = n q \mu_n = \frac{1}{\rho}$$

$$\therefore n = 1.64 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3} \gg n_i \quad (n = 1.64 \times 10^{20} \text{ m}^{-3})$$

故  $N_D \cong n = 1.64 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  而  $V_0 = 0.3 \text{ V}$   $V = -5 \text{ V}$

$$\therefore X_d = \sqrt{-\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0 [V_0 + HV]}{q N_D}} \quad (V_s)_0 = -V_D = -0.3 \text{ V}$$

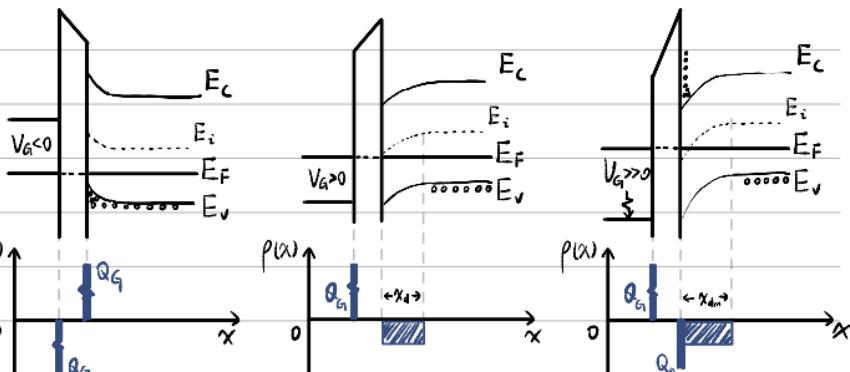
$$\therefore X_d = 7.61 \mu\text{m} \quad (\varepsilon_r = 16.2)$$

# 作业

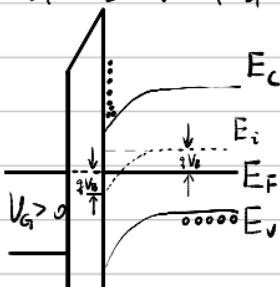
1、对于p型半导体形成的理想MIS结构在不同的外加电压下，表面状态分别出现积累、耗尽、反型和强反型4种类型。

- (1) 分析当出现上述4种状态时所加的外加电压的方向；
- (2) 分别画出出现积累层、耗尽层和反型层时的能带及空间电荷分布图；
- (3) 画出开始出现强反型时的能带图

解：(1)	表面状态	外加电压 $V_G$	方向
	积累	$V_G < 0$	半导体接正、金属接负
	耗尽	$V_G > 0$	金属接正、半导体接负
	反型	$V_G \gg 0$	金属接正、半导体接负
	强反型	$V_G \gg 0$ 且使 $V_S \geq 2V_B$	金属接正、半导体接负
(2)	积累层		

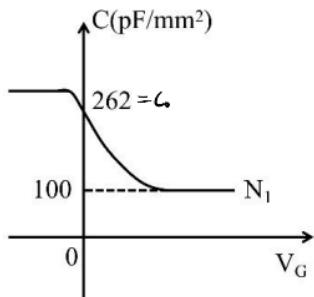


(3) 强反型时  $|V_S| = 2V_B$



2、如下图所示为一半导体硅的MOS结构的高频CV特性，问：

- (1) 此半导体是什么导电类型？
- (2) 氧化层厚度是多少？
- (3) 此结构强反型时，耗尽层宽度是多少？
- (4) 当该半导体的杂质浓度增加时，其MOS结构的相应高频CV特性有何变化？为什么？画一下简图



3d-11 P型

$$(2) C_0 = \frac{\epsilon_r \epsilon_0}{d_0} \quad \text{认为 } V_s \ll 0 \text{ 时} \quad C \approx C_0 = 262 \text{ pF/mm}^2$$

$$\therefore \frac{\epsilon_r \epsilon_0}{d_0} = 262 \text{ pF/mm}^2 = 262 \times 10^{-6} \text{ F/m}^2$$

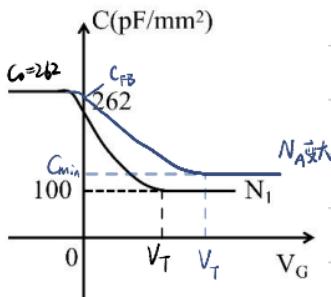
$$\therefore d_0 = 1.318 \times 10^{-7} \text{ m} = 131.8 \text{ nm}$$

$$(3) X_{dm} \text{ 满足} \quad \frac{C_{min}}{C_0} = \frac{1}{1 + \frac{\epsilon_r X_{dm}}{\epsilon_0 d_0}} = \frac{100}{262}$$

$$\therefore \frac{\epsilon_r X_{dm}}{\epsilon_0 d_0} = 1.62 \quad \therefore X_{dm} = \frac{\epsilon_r}{\epsilon_0} \times 1.62 \times d_0 = 6.515 \times 10^{-7} \text{ m}$$

$$\therefore X_{dm} = 651.5 \text{ nm}$$

(4)



如图中添蓝色线， $C_0$ 不变

$$N_A \text{ 增大 } P_D \text{ 增大 } L_D = \left( \frac{\epsilon_r \epsilon_0 k_b T}{q^2 P_D} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ 减小}$$

$$\textcircled{1} \quad V_G < 0 \text{ 时} \quad \frac{C}{C_0} = \frac{1}{1 + \frac{\epsilon_r X_{dm}}{\epsilon_0 d_0} \left( \frac{q V_G}{2 k_b T} \right)}$$

即在  $V_s$  更接近 0 时， $C$  突然从  $C_0$  开始降

$$\textcircled{2} \quad V_G = 0 \text{ 时} \quad C_{FB} = \frac{C_0}{1 + \frac{\epsilon_r}{\epsilon_0} \left( \frac{\epsilon_r \epsilon_0 k_b T}{q^2 N_A d_0} \right)^{\frac{1}{2}}} \text{ 减小}$$

当  $V_G$  较大时，达到  $V_T$  时  $C \rightarrow C_{min}$

$V_G = V_T$  时 满足  $|V_s| > 2|V_B|$  而  $V_B$  增大故  $V_T$  增大

$$\text{由于} \quad C_{min} = \frac{C_0}{1 + \frac{\epsilon_r X_{dm}}{\epsilon_0 d_0}} \quad \text{而} \quad X_{dm} \text{ 随} N_A \text{ 增大而减小}$$

$$\therefore C_{min} \text{ 增大}$$