

半导体物理第一讲

冀晓斌 jixiaob@mail.sysu.edu.cn

中山大学微电子科学与技术学院

2024年2月27日

课程平台



https://lms.sysu.edu.cn



课程简介



课程学时数:

单数周:每周两讲

双数周:每周一讲

共3学分,54学时。

授课教师:

前九周: 冀晓斌副教授 jixiaob@mail.sysu.edu.cn

办公室地址:公共实验楼A210

后九周:徐政基副教授 <u>xuzhj27@mail.sysu.edu.cn</u>

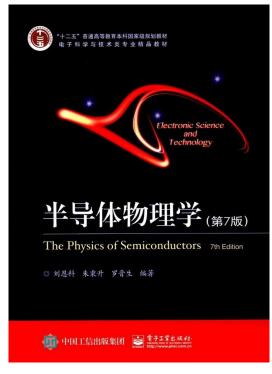
办公室地址:公共实验楼A210

研究生助教: 郑力天 <u>zhenglt9@mail2.sysu.edu.cn</u>

石任午 <u>shirw3@mail2.sysu.edu.cn</u>

<u>教材</u>:《半导体物理学》(第七版),刘恩科、朱秉升、罗晋生

编著, 电子工业出版社,**2017**。

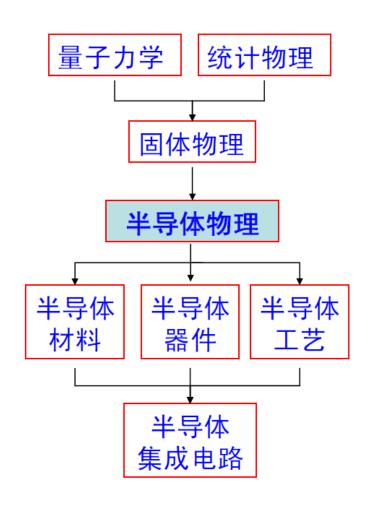


课程大纲



半导体物理课程特点:

内容广,概念多,承上启下。



需要大家掌握的:

物理概念,物理图像,物理模型。 基本公式的推导与应用。

课程大纲



成绩评定方式:

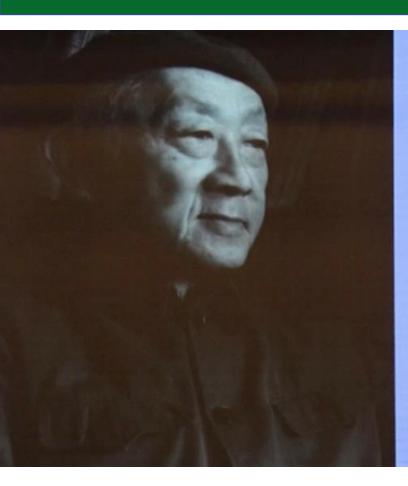
考核项目	比重	考核时间
学习质量跟踪评价 (包括出勤和参与课堂讨论)	10%	每周
平时测评或作业	10%	不定时
期中随堂测试	20%	第九周(4月21日)
期末考试	60%	考试周



固体物理主要研究晶体和晶体中的电子。 在本世纪初期,随着X射线衍射的发现以 及对晶体性质一系列简明 而成功的计算 和预测的公布,固体物理的研究作为原 子物理的一个扩充领域,开始发展起来。

—C. Kittel





黄昆年表

1919年9月2日出生于北京市、祖籍浙江嘉兴。

1932年春从上海转学到北平燕京大学附中就读初中二年级。

1932年秋-1936年夏,河北通县潞河中学,1936年夏高中毕业。

1937年秋-1941年夏, 北平燕京大学物理系, 1941年夏毕业, 获理学学士学位。

1941年秋-1942年夏, 国立西南联合大学物理系助教。

1942年秋-1944年夏,西南联合大学硕士研究生,导师吴大猷。完成《锂原子能态的 Hylleraas 函数变分计算》、《钠之负离子吸收光谱》、《日冕光谱线的激起》三篇 论文。

1944年, 考取第八届"庚子赔款"留英公费生。

1944年秋-1945年夏,任中央研究院昆明凤凰山天文台助理研究员。

1945年秋-1948年初,英国布列斯托尔大学物理系博士研究生,导师莫特爵士,1948年初获哲学博士学位,发表《稀固溶体的X光漫散射》,理论预言了"黄散射";理论计算金银稀固溶体的结合能和残余电阻率,为"Friedel振荡"奠定基础。

1947-1948年, 部分时间访问爱丁堡大学玻恩研究组。

1948-1951年, 英国利物浦大学理论物理系ICI博士后研究员。

1950-1951年,建立了离子晶体长波光学振动的唯象方程——"黄方程",提出了"声子极化激元"的概念。

1950年,和里斯 (Avril Rhys,中文名李爱扶)发表论文《F中心的光吸收与无辐射跃迁理论》,提出晶格弛豫基础上的多声子光跃迁与无辐射跃迁理论,后来被称为"黄-黄昆 (1919.9.2- 里斯理论",是固体中杂质缺陷上的束缚电子态跃迁理论的奠基石。

1947-1952年, 与玻恩教授合著《晶格动力学理论》(牛津出版社1954年)。

1951年底, 途经香港回国。

黄昆(1919.9.2-2005.7.6)

https://www.koushare.com/video/videodetail/2252 25'-29'



1952年4月、李爱扶来华、黄昆与李爱扶结婚。

1951年底-1977年8月,任北京大学物理系教授,先后主要从事普通物理、固体物理和半导体物理的教学工作。

1953年-1960年,任"物理通报"副主编

1954年-1956年,任北大物理系固体物理教研室主任。

1955年、遊选为中国科学院数理学部学部委员。

1956年, "晶格动力学理论" 获中国科学院自然科学奖(即第一届国家自然科学奖) 三等奖。

1956年,参与制定国家十二年科学技术发展规划,参与制定《发展计算技术、半导体技术、无线电电子学、自动学和远距离操纵技术的紧急措施方案》。

1956年-1966年, 任北大物理系半导体物理教研室主任。

1956-1958年,任北京大学、复旦大学、吉林大学、南京大学和厦门大学五校联合举办的半导体专门化主任。

1958年、与谢希德合著《半导体物理学》、由科学出版社出版。

1959年,加入中国共产党。作为特邀代表出席全国群英会。

1960-1966年,任北京大学物理系副系主任,主管科学研究工作。

1962年,与谢希德联合提出加强我国固体能谱基础研究的建议。

1963-1966年, 筹建北京大学能谱研究室和实验室。

1964年、被选为中华人民共和国第三届全国人民代表大会代表。

1966年-1976年, 文革期间遭受冲击。1969年到北大200号参加劳动, 后参加半导体

器件生产和



2001年,与郑厚植,甘子钊,李志坚,王启明,陈良惠等院士,联名向领导部门建议,国家应当组织充分的人力、财力和物力,发展我国的纳米电子科学与技术。2001年,获中华人民共和国最高科学技术奖。2002年2月1日,人民大会堂隆重举行全国科学技术奖励大会,江泽民主席亲自为黄昆颁奖。500万奖金,本人允许支配50万,其它450万奖金后来被用来设置"中国物理学会——黄昆固体物理半导体物理奖",奖励在半导体物理及固体物理研究中的优秀者。

2003年年初,中国中央电视台首次举办"感动中国2002年度人物"评选活动,黄昆被观众和专家选为十位感动中国2002年度人物之一。

2005年7月6日因病在北京逝世,享年86岁。美国物理学会会长科思(M. L. Cohen) "言电称他为"固体物理学理论和半导体物理学的一位先驱",认为他作出了"超凡(extraordinary)的贡献"。德国马普学会固体物理研究所前任所长卡多纳来电称:"他是一个伟大的人。"

2013年2月12日,李爱扶因病在三亚逝世,享年87岁。

缅怀李爱扶先生(1926-2013)







李爱扶名言:

"黄昆是黄昆,我是我。"

"请尊重我的隐私权"(有记者问半个世纪前是什么原因促使她远渡重洋来中国)。 不同意我的一段话:"她为了爱情,宁愿舍弃一切,操持家务,十分俭朴。许多认识 李爱扶的人都说,'她比中国的贤妻良母还要贤妻良母'":

1.我觉得工作对女的很重要;我退休后还被返聘,后来做修改中译英文献的工作。

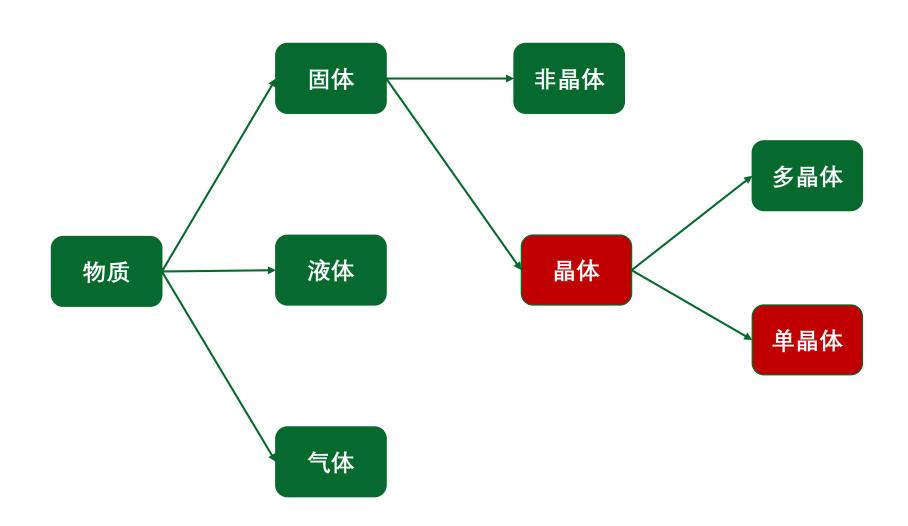
2.家里不能搞得太复杂,如有小时工我还得陪伴她!

3.可能我中文不好,但一听人说我是"贤妻良母",我觉得他(女的不那样说)有封 建思想!

4.忘了,到75岁哪有那么多爱情!有责任感,有好多年一起生活。

5.还有, 我不"十分俭朴", 就是还没有学逛大商店, 喜欢逛展销会!







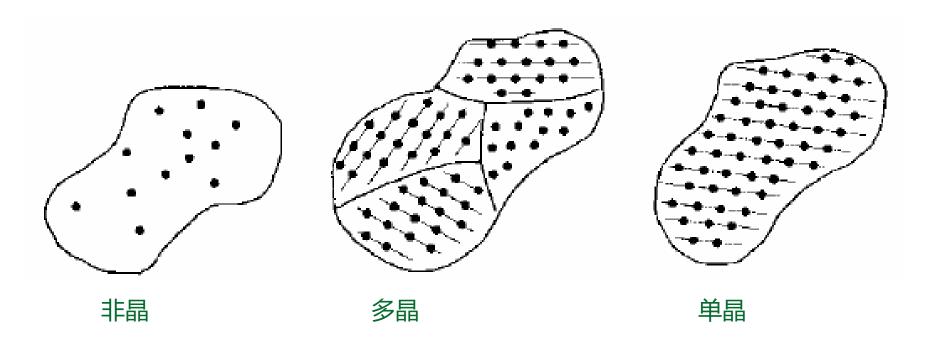
晶体和非晶体的区别:组成它们的微粒是否是按照规则排列的。

非晶体:组成非晶体的微粒的排列是不规则的,指结构无序或者近程有序而长程无序的物质。

晶体:组成它们的原子(也可能是分子或者是离子),是按照一定规则排列的,具有空间上的周期性,

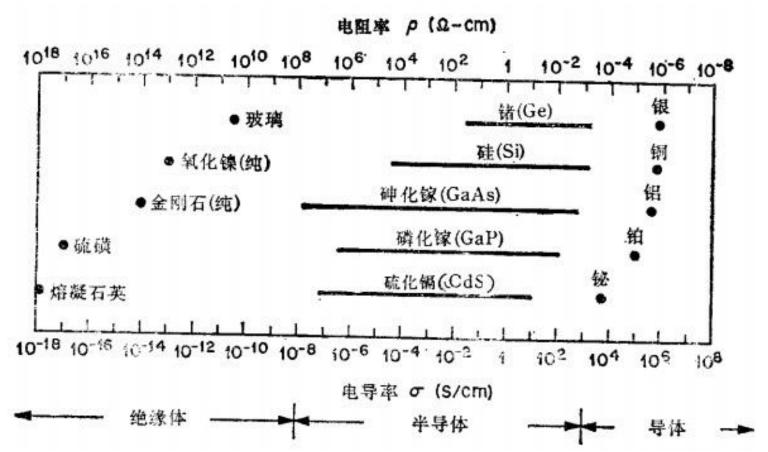
单晶体:整块材料中原子都是规则的周期性排列的,一种结构贯穿了整体。

多晶体:由大量微小单晶体(晶粒)随机堆砌而成的整块材料。





半导体



半导体材料(semiconductor material)是一类具有半导体性能(导电能力介于导体与绝缘体之间)可用来制作半导体器件和集成电路的电子材料。

半导体的关键是 可变性:

能在绝缘体与导体之间转化。 「非绝非导、时绝时导」。 一言以蔽之,对立与统一。

导体、半导体、绝缘体的电导率(电阻率)典型范围



(1) 本征半导体

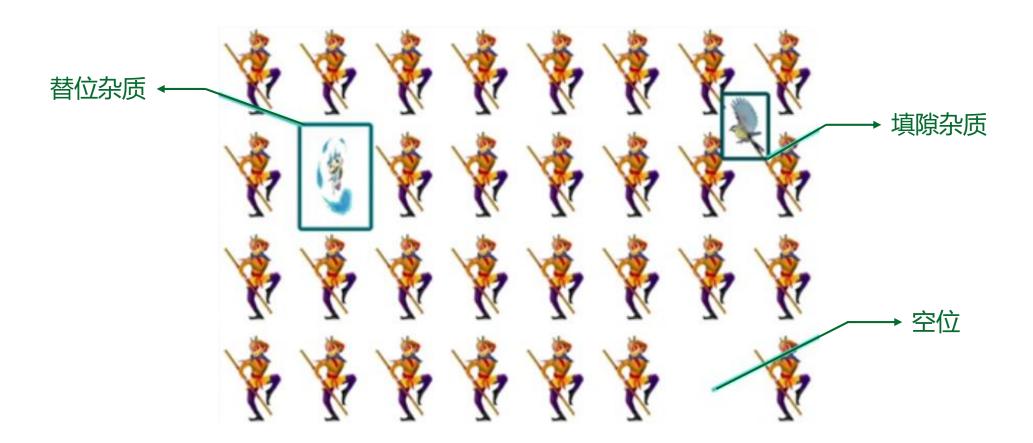
本征半导是理想的单晶,没有杂质和缺陷。





(2) 非本征半导体

即杂质半导体,含杂质、缺陷的周期性晶格。





理想单晶是由全同的结构单元在空间无限重复而构成的。

- 结构单元组成:

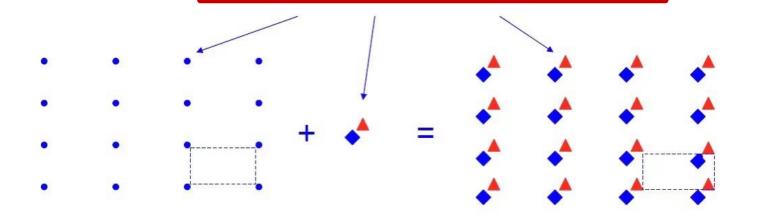
单个原子(铜、铁等简单晶体) 多个原子或分子(NaCd2;蛋白质晶体的结构单元往往由上万个原子或分子组成!)

- 周期性重复结构单元抽象成一个几何点来表示,几何点的集合称之为<mark>晶体点阵</mark>, 又称布拉菲格子(Bravais lattice),简称<mark>晶格</mark>(忽略具体结构单元内容而集中反 映周期重复方式)。晶体结构用点阵来描述。
- -具体结构单元内容(每个阵点上的一群原子), 称为基元。



基本关系:

lattice + basis = crystal structure



- 1. 每个阵点上附加一个基元,就构成晶体结构:
- 2. 每个基元的组成、位形和取向都是全同的:
- 3. 相对一个阵点,将基元放在何处是无关紧要的。

简单晶格(布拉菲格子): 基元只有一个原子的晶体

复式晶格:

基元由两个或两个以上的原 子构成的晶体(两套或多套 布拉菲格子构成)



- 给定三个基本平移矢量 a, b, c

$$\vec{r}' = \vec{r} + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$
 (u,v,w是整数)

- 结果:从任意一个点r去观察几何点排列时,同从r'点去观察所 看到的几何点排列在各方面都是一样的。
- <mark>点阵</mark>的定义: 让u, v, w取<mark>所有整数</mark>值,由上述方程所确定的一族点r就定义了一个点阵。
 - 点阵就是点在空间中周期性的规则排列。
 - 点阵是一种数学上的抽象,只有当基元以同样方式安置于每个阵点上,才能形成晶体结构。



给定三个基本平移矢量 a, b, c

$$\vec{r}' = \vec{r} + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$
 (u,v,w是整数)

初基平移矢量(简称基失)的定义:若有任意两个点r和r',通过适当选择 整数u,v,w,它们始终满足点阵的定义方程,而且从这两个点所观察到 的原子排列是一样的,那么这个点阵的平移矢量a,b,c就称为初基的。

- 定义确保了没有比这组初基平移矢量所构成的体积更小的晶胞存在于这 个点阵中。
- 常用初基平移矢量来定义晶轴,但如果非初基晶轴更简单些,则采用非 初基晶轴。
- 晶轴a, b, c构成一个平行六面体的三个邻边, 如果只在平行六面体的 角隅上有阵点, 那么它就是个初基平行六面体



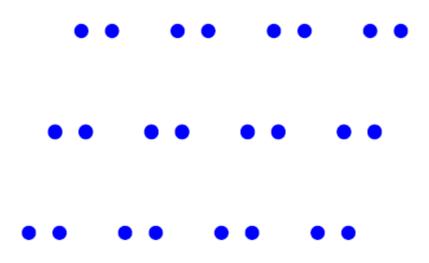
$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

点阵平移操作定义:晶体通过晶体平移矢量T进行平行于自身的位移。

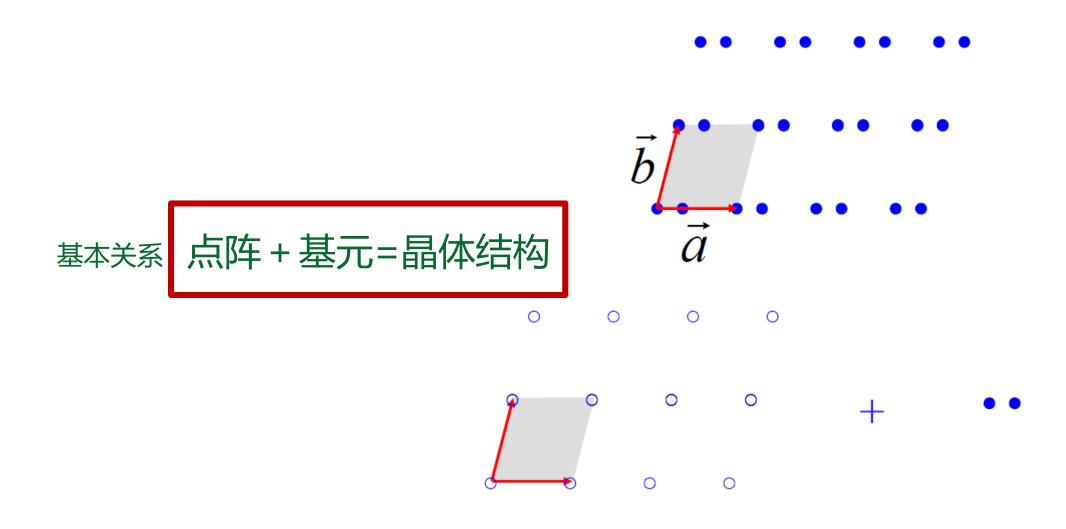
晶体中任意两个等效格点都可以通过这种平移矢 量连接起来。



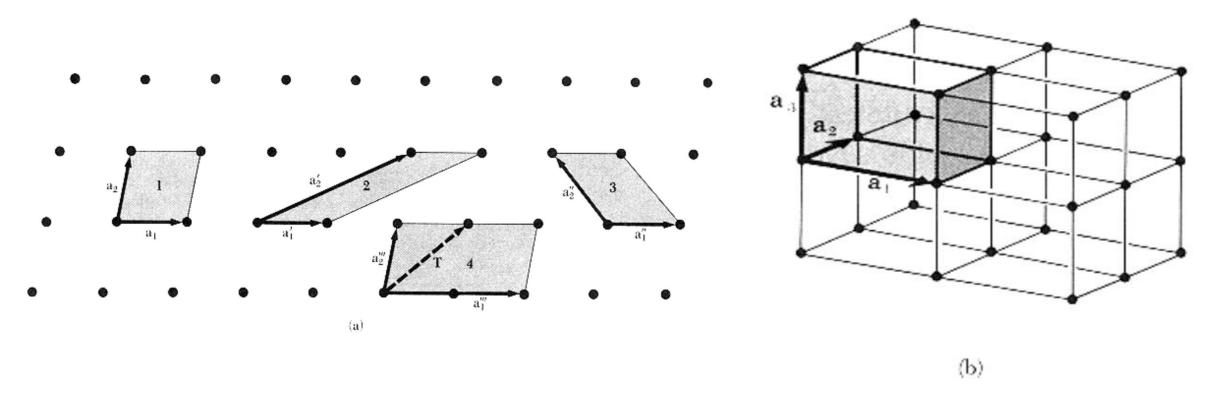
练习:初基平移矢量的选择假设这些点都是全同的,请画出一组阵点,选择初基轴和一个初基晶胞,以及与一个阵点相联系的原子基元











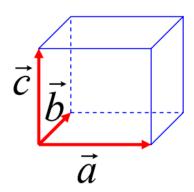
Lattice points of space lattices in: (a) two dimension and (b) 3 dimension.



- 一初基轴a, b, c确定的平行六面体称为一个初基晶胞(原胞)
- —通过适当平移操作, 晶胞可以填充整个空间
- ——个初基晶胞是一个体积最小的晶胞
- —同一点阵,可以有许多方式选择初基轴和对应的初基晶胞;但
- 初基晶胞中的原子数目(密度)都是一样的
- 一初基晶胞中只含有一个阵点(平行六面体的8个角隅,1/8共享)

a, b, c确定的平行六面体的体积为

$$v_c = \left| \vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c} \right|$$

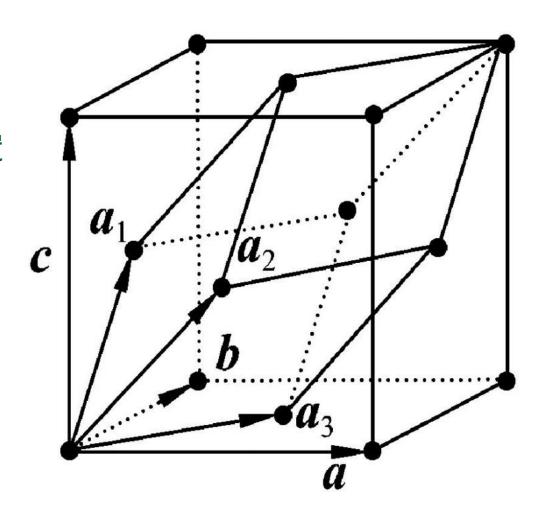




• 例子: 布喇非点阵中使用的晶胞, 不一定总是初基晶胞

面心立方晶体的初基晶胞是一个菱面体。

 a_1, a_2, a_3 的轴间夹角为60度。





原胞和晶胞的区别是什么?



小结: 原包与晶胞的区别

- 一、形态不同
- 1、原胞(固体物理学原胞):在晶格取一个格点为顶点,以三个不共面的方向上的基矢为边长形成的<u>平行六面体</u>作为重复单元。这个平行六面体沿三个不同的方向进行周期性平移,就可以充满整个晶格形成晶体,这个平行六面体即为原胞。
- 2、<u>晶胞</u>: 其形状、大小与空间格子的平行六面体单位相同,保留了整个晶格的所有特征。
- 二、结点不同
- 1、原胞:结点在原胞的顶角上(只含有一个阵点)。
- 2、晶胞:结点可以在顶角上,还可以在体心或者面心上(含有一或多个阵点)。
- 三、重复单元不同
- 1、原胞:原胞是体积的最小重复单元,它反映的是晶格的周期性,原胞的选取不是
- 唯一的,但是它们的体积都是相等的。
- 2、晶胞:为了同时反映晶体的对称性,结晶学上所取的重复单元,体积不一定最小。



基元中的原子数目,可以少到一个原子,如许多金属和惰性气体晶体;也可以是多个,并且具有很多结构。基元中第j个原子的中心位置相对于一个阵点的空间位置表达式:

$$\overrightarrow{r_j} = \chi_j \overrightarrow{a} + y_j \overrightarrow{b} + z_j \overrightarrow{c} \quad (0 \le \chi_j, \ y_j, \ z_j \le 1)$$

常见半导体晶体结构



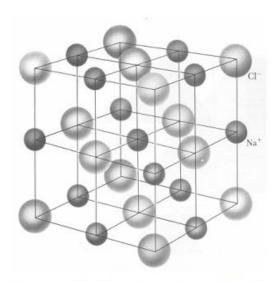


Figure 1.15. Crystal structure of NaCl.

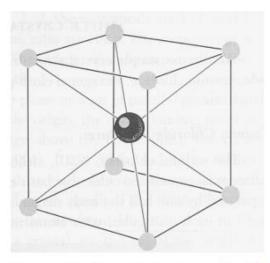


Figure 1.16. Crystal structure of CeCl.

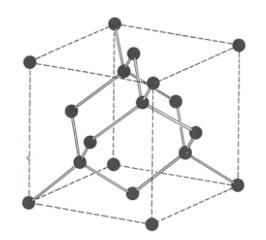


Figure 1.17. Crystal structure of diamond, showing the tetragonal bond arrangement.

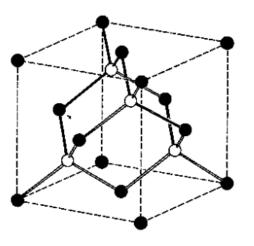
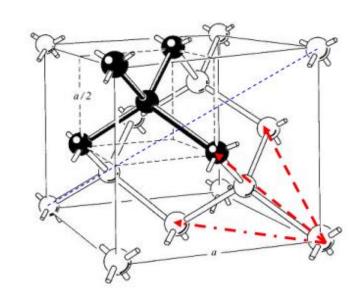


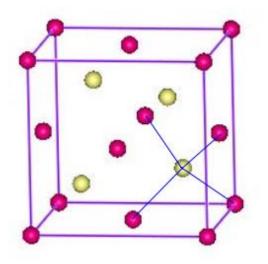
Figure 1.18. Crystal structure of cubic zinc sulfide.

常见半导体晶体结构





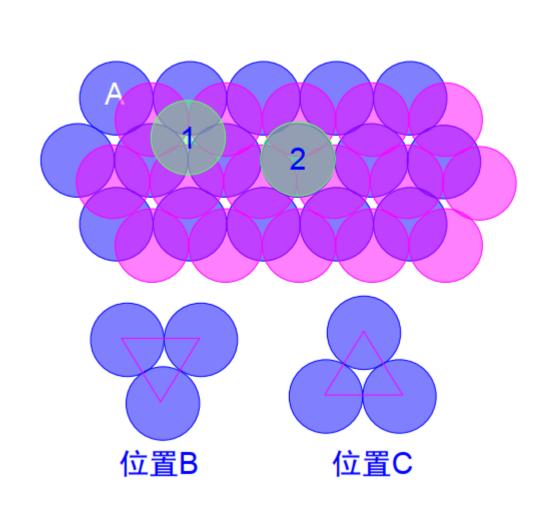
Si金刚石结构 面心立方+2Si原子

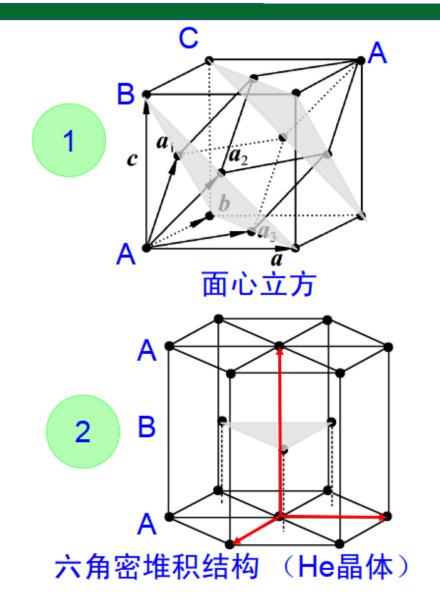


闪锌矿结构(ZnS) GaAs,.....

常见半导体晶体结构









•晶列、晶向、晶面

- 晶列: 点阵中的所有阵点全部位于一系列相互平行的直线上, 这些

直线系称为晶列.



- 晶向: 表示晶列的方向

从一个阵点O沿某个晶列到另一阵点P作位移矢量 $\vec{R} = l_1 \vec{a} + l_2 \vec{b} + l_3 \vec{c}$

 $l_1: l_2: l_3 = m: n: p$



—**晶向指数[mnp]**: 晶向矢量在三晶轴上投影的互质整数

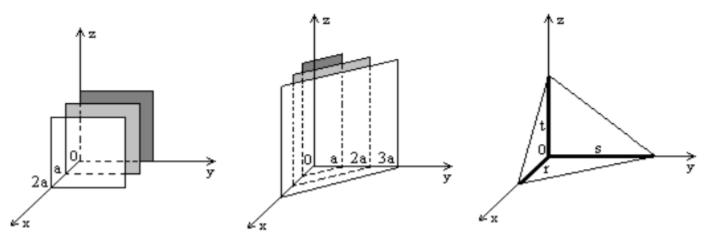
Axis Index

同类晶向记为<mnp>

<100>代表了[100],[100],[010],[010],[001],[001]

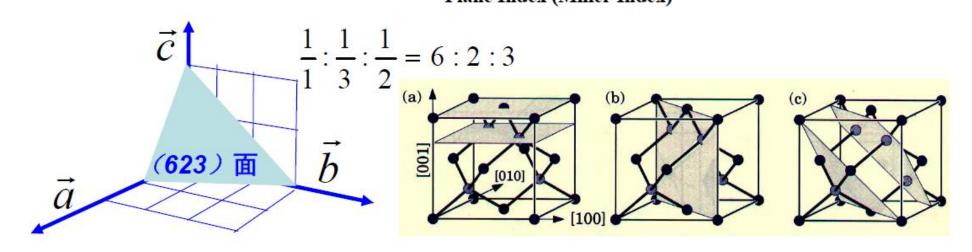
<111>对角线的8个晶向; <110>代表12个面对角线的晶向

一 **晶面**: 点阵中的所有阵点全部位于一系列相互平行等距的平面上, 这样的平面系称为**晶面**。





一晶面指数(hkl): h、k、l是晶面与三晶轴的截距r、s、t的倒数的互质整数,也称为密勒指数。
Plane Index (Miller Index)



- 1、找出在轴a, b, c上, 以点阵常数量度的截距。这些轴可以是初基的也可以是非初基的
- 2、取这些截距地倒数,然后化成与之具有同样比率的三个互质整数,将结果写在括号里 (hkl)
- 3、截距为无限大,相应的指数就是零;
- 4、若一个晶面截晶轴与原点的负侧,则相应的指数就是负的,在其上方放置负号作为标记,例如 $(h\bar{k}l)$ 。



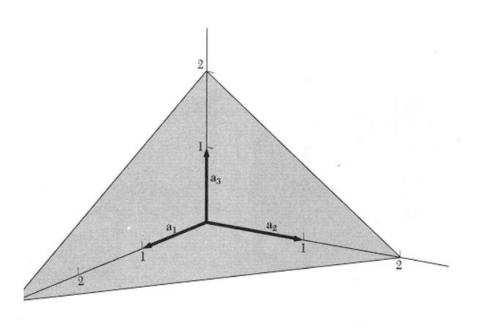


Figure 1.13. This plane intercepts the a_1 , a_2 , a_3 axes at $3a_1$, $2a_2$, $2a_3$ axes. The reciprocals of these number are 1/3, 1/2, 1/2. The smallest three integers having the same ratio are 2,3,3, thus the indices of the plane are (233).

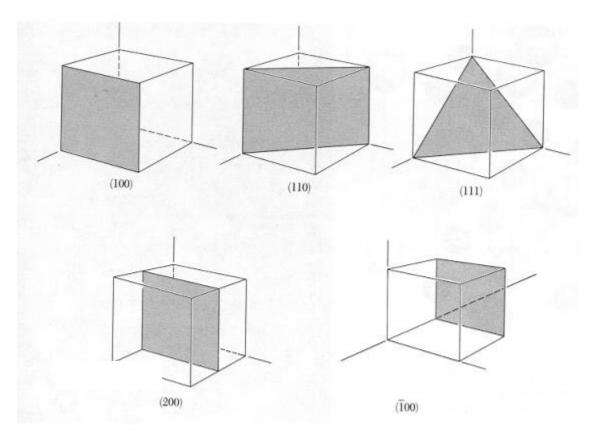


Figure 1.14. Indices of important planes in a cubic crystal.



一晶体性质的周期性:

$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

- 在晶体平移操作下作用下,晶体的任何物理性质都不变
- 电荷浓度、电子数密度、质量密度和磁矩密度在T作用下不变
- 电子数密度n(r)是r的周期性函数,存在

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$$



- 晶体的大部分性质都可以同电子密度的傅立叶分量联系起来
- 将周期为a的一维周期函数n(x) 做傅里叶变换
- 将n(x)展开为含有余弦和正弦的傅立叶级数

$$- n(x) = n_0 + \sum_{p>0} [C_p \cos(\frac{2\pi px}{a}) + S_p \sin(\frac{2\pi px}{a})]$$

- p是正整数; Cp、Sp是实常数, 称为展开式的傅立叶系数
- 幅角中的2π/a保证n(x)具有周期a, 即n(x+a)=n(x)
- 2πp/a被称为晶体的倒易点阵中或傅立叶空间中的一个点



$$n(x) = n_0 + \sum_{p} \left[C_p \cos(\frac{2\pi px}{a}) + S_p \sin(\frac{2\pi px}{a}) \right] \qquad \longrightarrow \qquad n(x) = \sum_{p} n_p e^{i2\pi px/a}$$

2πρ 倒易点阵中的阵点 n(x) $-\frac{4\pi}{2\pi} \frac{2\pi}{0} \frac{2\pi}{2\pi} \frac{4\pi}{4\pi}$



$$n(x) = \sum_{p} n_{p} e^{i2\pi px/a}$$
 1D拓展为3D
$$n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$$n(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\vec{G}} \mathbf{n}_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{\mathbf{r}}}$$

寻求一组矢量G,满足
$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$$



寻求一组矢量G,满足 $n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$

定义倒易点阵的轴矢

$$\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{\mathbf{b}} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot \vec{\mathbf{b}} \times \vec{c}}$$

$$\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}}$$

$$\vec{a}$$

$$\vec{c} \leftarrow \vec{h}$$

- 若a, b, c为初基的,则A, B, C就是倒易点阵的初基矢量
- A,B,C每个矢量与晶体点阵的两个轴矢正交
- 对于一个给定晶体点阵的一组任意设定的初基矢量a, b, c, 都能导出同样的一组倒易点阵
- 每个晶体结构都有两个点阵同它联系着,一个是晶体点阵, 一个是对应的倒易点阵
- 晶体的衍射图样是晶体的倒易点阵的映象
- 晶体点阵中的矢量具有[长度]的量纲,倒易点阵中的矢量具 有[长度]^-1的量纲



定义倒易点阵矢量

$$\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$$
 (h,k,l是整数)

$$\vec{T} = u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$$

$$\vec{G} \cdot \vec{T} = 2\pi(hu + kv + lw)$$

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{T}}$$

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$$

$n(x) = \sum_{n} n_{p} e^{i2\pi px/a}$

1D拓展为3D

$$n(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\vec{G}} \mathbf{n}_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{\mathbf{r}}}$$

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$$

找到了一组矢量G,满足 $n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$



什么是倒格子和倒空间,和晶格有什么关系?

从数学观点看,倒格子是原来晶格的傅里叶变化。

傅里叶变化将通常的坐标空间变成了波矢空间,对应于坐标空间中的晶格变换为波 矢空间的**倒格子**。

正格子和倒格子都属于布拉菲点阵,正格子和倒格子在对称性方面相互关联。

形象化的类比:乐谱表示音乐;光谱表示各种颜色;



为什么引入倒格矢的概念?

因为晶体的空间平移对称性(或者说周期性),位置坐标是冗余的. 已知 \vec{r} 处有一个晶格原子,我们自然就知道了 \vec{r} + \vec{T} 处有一个相同的原子。

对于这种具有一定周期性的系统,傅里叶变换可以去掉冗余的信息。倒格矢就是晶格空间位置函数傅里叶变换的结果。

三维周期函数的傅里叶级数中,只出现倒格矢的项。

$$n(\vec{\mathbf{r}}) = \sum_{\vec{G}} \mathbf{n}_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{\mathbf{r}}}$$

对于函数 $n(\vec{r})$,需要知道在所有 \vec{r} 的取值才能知道得到对应函数值。经过傅里叶变换以后,只需要知道它的离散的傅里叶分量 \vec{G} 就可知道所有取值,从而使问题可**简** 化处理。



在固体物理学中:实际观测很难直接观测晶格结构测量正点阵,倒格子的引入能够更好的描述很多晶体问题,更适于处理声子与电子的晶格动量。

在X射线或电子衍射技术中:一种点阵的每一个结点都对应着正点阵中的一个晶面,不仅反映该晶面的取向,还反映着晶面间距。

任何一个晶体结构都有两个格子:一个是正格子空间(位置空间),另一个为倒格子空间(动量空间),通过傅里叶变换,二者互为倒格子。

晶格振动及晶体中电子的运动都是在倒空间中的描述。



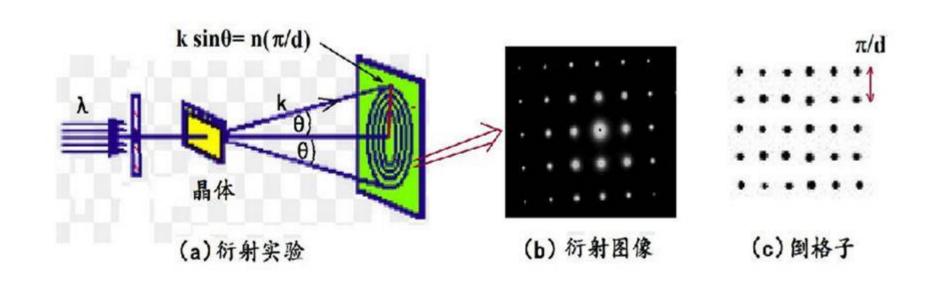


图 (a) 为对晶体进行衍射试验;图 (b) 为试验衍射图像,为某种格点空间的映像。图 (b) 中格点空间不是被测晶体晶格本身,其格点间距正比于晶体晶格原子间距的**倒数**。量纲也互为倒数 (m、m⁻¹)。

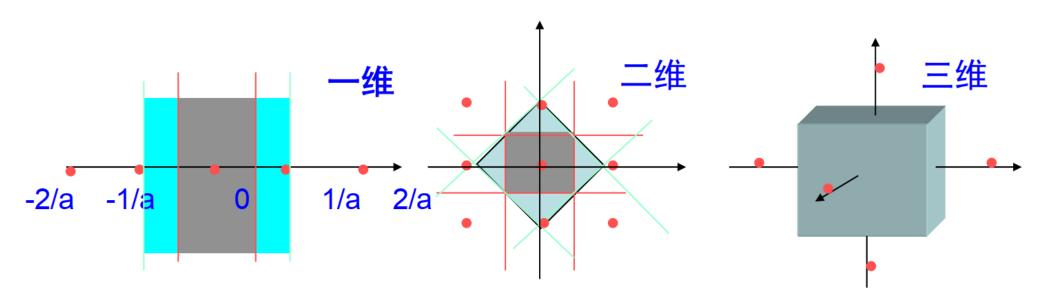
数值与量纲都互为倒数,继而为**倒空间**。

维格纳一赛茨初基晶胞



初基晶胞的另一种选择方式

- —Wigner-Seitz primitive cell (维格纳—赛茨初基晶胞)
 - 把某个阵点同所有与它相邻的阵点用直线连接起来
 - 在连线的中点处,作垂线和垂面
 - 以这种方式围成的最小体积就是维-赛初基晶胞(维-赛原包)



布里渊区



- 布里渊区是什么?

布里渊区是动量空间中(倒空间, k空间)晶体倒易点阵的维-赛原胞。

- 每个布里渊区只包含一个倒阵点。每个布里渊区都具有相同的体积
- 布里渊区的体积应等于倒易点阵初基晶胞的体积

- 第一布里渊区

- 在倒易点阵的中央晶胞称为第一布里渊区。
- 作由原点出发的诸倒易点阵矢量的垂直平分面,为这些平面所完全封闭的多面体中,离原点最近的多面体区域为第一布里渊区。

倒易点阵的范例



简单立方点阵的倒易点阵

$$\Omega = \vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c} = a^3$$

- 仍是一个简立方点阵,
 点阵常数为2π/a
- 第一布里渊区是个以原 点为体心,边长为 $\frac{2\pi}{a}$ 的立方体。

$$\vec{a} = a\hat{x}$$

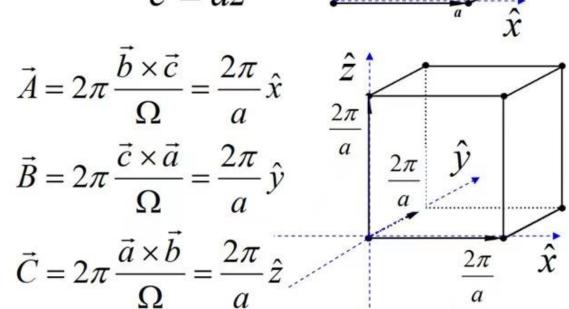
$$\vec{b} = a\hat{y}$$

$$\vec{c} = a\hat{z}$$

$$\frac{\vec{c}}{\alpha} = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\frac{\hat{z}}{\alpha} = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$

$$\frac{\hat{z}}{\alpha} = \frac{2\pi}{a} \hat{x}$$





半导体物理第一讲

谢谢大家!