



“十二五”国家重点出版规划项目

国家出版基金项目

NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

现代激光技术及应用丛书

半导体材料和器件的 激光辐照效应

陆启生 江 天 江厚满 编著
许中杰 赵国民 程湘爱

Laser Radiation Effects on
Semiconductor Materials and Devices



国防工业出版社

National Defense Industry Press



“十二五”国家重点出版规划项目

/现代激光技术及应用丛书/

半导体材料和器件的 激光辐照效应

陆启生 江 天 江厚满 编著
许中杰 赵国民 程湘爱

国防工业出版社

·北京·

内 容 简 介

半导体材料与器件的激光辐照效应是高能激光技术的重要应用基础。本书共分七章,介绍了半导体材料的基本特性,激光在半导体材料中的激发状态、耦合形式、光谱特性和传输特性等,激光在半导体材料中各种吸收的类型和机理,以及吸收的能量在材料中的弛豫和转换的机理及规律,激光辐照下载流子在半导体材料中的输运,单元光电探测器的基本特性和激光辐照效应。讨论了阵列光电探测器对于激光的光学和电学响应及损伤机理。最后着重讨论了半导体材料对于激光辐照的热学和力学的响应及损伤机理等问题。

本书针对的读者群体是在相应领域里从事科学技术研究的研究生和相关的科研工作者。

图书在版编目(CIP)数据

半导体材料和器件的激光辐照效应 / 陆启生等编著.

—北京:国防工业出版社,2015.12

ISBN 978-7-118-10184-3

I. ①半… II. ①陆… III. ①半导体材料—激光辐照—光电效应—研究 ②半导体器件—激光辐照—光电效应—研究 IV. ①TN304 ②TN303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 283935 号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

北京嘉恒彩色印刷有限责任公司印刷

新华书店经售

*

开本 710×1000 1/16 印张 22 字数 400 千字

2015 年 12 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—2500 册 定价 98.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

内 容 简 介

半导体材料与器件的激光辐照效应是高能激光技术的重要应用基础。本书共分七章,介绍了半导体材料的基本特性,激光在半导体材料中的激发状态、耦合形式、光谱特性和传输特性等,激光在半导体材料中各种吸收的类型和机理,以及吸收的能量在材料中的弛豫和转换的机理及规律,激光辐照下载流子在半导体材料中的输运,单元光电探测器的基本特性和激光辐照效应。讨论了阵列光电探测器对于激光的光学和电学响应及损伤机理。最后着重讨论了半导体材料对于激光辐照的热学和力学的响应及损伤机理等问题。

本书针对的读者群体是在相应领域里从事科学技术研究的研究生和相关的科研工作者。

图书在版编目(CIP)数据

半导体材料和器件的激光辐照效应 / 陆启生等编著.

—北京:国防工业出版社,2015.12

ISBN 978-7-118-10184-3

I. ①半… II. ①陆… III. ①半导体材料—激光辐照—光电效应—研究 ②半导体器件—激光辐照—光电效应—研究 IV. ①TN304 ②TN303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 283935 号

※

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

北京嘉恒彩色印刷有限责任公司印刷

新华书店经售

*

开本 710 × 1000 1/16 印张 22 字数 400 千字

2015 年 12 月第 1 版第 1 次印刷 印数 1—2500 册 定价 98.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

丛书学术委员会 (按姓氏拼音排序)

主任	金国藩	周炳琨		
副主任	范滇元	龚知本	姜文汉	吕跃广
	桑凤亭	王立军	徐滨士	许祖彦
	赵伊君	周寿桓		
委员	何文忠	李儒新	刘泽金	唐 淳
	王清月	王英俭	张雨东	赵 卫

丛书编辑委员会 (按姓氏拼音排序)

主任	周寿桓			
副主任	何文忠	李儒新	刘泽金	王清月
	王英俭	虞 钢	张雨东	赵 卫
委员	陈卫标	冯国英	高春清	郭 弘
	陆启生	马 晶	沈德元	谭峭峰
	邢海鹰	阎吉祥	曾志男	张 凯
	赵长明			

世界上第一台激光器于1960年诞生在美国,紧接着我国也于1961年研制出第一台国产激光器。激光的重要特性(亮度高、方向性强、单色性好、相干性好)决定了它五十多年来在技术与应用方面迅猛发展,并与多个学科相结合形成多个应用技术领域,比如光电技术、激光医疗与光子生物学、激光制造技术、激光检测与计量技术、激光全息技术、激光光谱分析技术、非线性光学、超快激光学、激光化学、量子光学、激光雷达、激光制导、激光同位素分离、激光可控核聚变、激光武器等。这些交叉技术与新的学科的出现,大大推动了传统产业和新兴产业的发展。可以说,激光技术是20世纪最具革命性的科技成果之一。我国也非常重视激光技术的发展,在《国家中长期科学与技术发展规划纲要(2006—2020年)》中,激光技术被列为八大前沿技术之一。

近些年来,我国在激光技术理论创新和学科发展方面取得了很大进展,在激光技术相关前沿领域取得了丰硕的科研成果,在激光技术应用方面取得了长足的进步。为了更好地推动激光技术的进一步发展,促进激光技术的应用,国防工业出版社策划组织编写出版了这套丛书。策划伊始,定位即非常明确,要“凝聚原创成果,体现国家水平”。为此,专门组织成立了丛书的编辑委员会,为确保丛书的学术质量,又成立了丛书的学术委员会,这两个委员会的成员有所交叉,一部分人是几十年在激光技术领域从事研究与教学的老专家,一部分是长期在一线从事激光技术与应用研究的中年专家;编辑委员会成员主要以丛书各分册的第一作者为主。周寿桓院士为编辑委员会主任,我们两位被聘为学术委员会主任。为达到丛书的出版目的,2012年2月23日两个委员会一起在成都召开了工作会议,绝大部分委员都参加了会议。会上大家进行了充分讨论,确定丛书书目、丛书特色、丛书架构、内容选取、作者选定、写作与出版计划等等,丛书的编写工作从那时就正式地开展起来了。

历时四年至今日,丛书已大部分编写完成。其间两个委员会做了大量的工作,又召开了多次会议,对部分书目及作者进行了调整。组织两个委员会的委员对编写大纲和书稿进行了多次审查,聘请专家对每一本书稿进行了审稿。

总体来说,丛书达到了预期的目的。丛书先后被评为国家“十二五”重点出

版规划项目和国家出版基金资助项目。丛书本身具有鲜明特色：一)丛书在内容上分三个部分,激光器、激光传输与控制、激光技术的应用,整体内容的选取侧重高功率高能激光技术及其应用;二)丛书的写法注重了系统性,为方便读者阅读,采用了理论—技术—应用的编写体系;三)丛书的成书基础好,是相关专家研究成果的总结和提炼,包括国家的各类基金项目,如973项目、863项目、国家自然科学基金项目、国防重点工程和预研项目等,书中介绍的很多理论成果、仪器设备、技术应用获得了国家发明奖和国家科技进步奖等众多奖项;四)丛书作者均来自于国内具有代表性的从事激光技术研究的科研院所和高等院校,包括国家、中科院、教育部的重点实验室以及创新团队等,这些单位承担了我国激光技术研究领域的绝大部分重大的科研项目,取得了丰硕的成果,有的成果创造了多项国际纪录,有的属国际首创,发表了大量高水平的具有国际影响力的学术论文,代表了国内激光技术研究的最高水平。特别是这些作者本身大都从事研究工作几十年,积累了丰富的研究经验,从书中不仅有科研成果的凝练升华,还有着大量作者科研工作的方法、思路和心得体会。

综上所述,相信丛书的出版会对今后激光技术的研究和应用产生积极的重要作用。

感谢丛书两个委员会的各位委员、各位作者对丛书出版所做的奉献,同时也感谢多位院士在丛书策划、立项、审稿过程中给予的支持和帮助!

丛书起点高、内容新、覆盖面广、写作要求严,编写及组织工作难度大,作为丛书的学术委员会主任,很高兴看到丛书的出版,欣然写下这段文字,是为序,亦为总的前言。

金国藩 周如琨

2015年3月

20 世纪起, 半导体科学与技术得到了蓬勃的发展, 到目前为止, 已形成了如 IT、光伏和照明等产业群, 现在半导体材料和半导体器件已非常普遍地应用于国民经济、科学研究、国防技术和人们的日常生活等方方面面。半导体科学与技术仍在迅猛向前发展, 技术水平越来越高, 应用越来越广泛。半导体材料的一项重要应用是光电检测, 对于光电检测而言, 激光虽然是强光, 但因激光可以衰减以后再检测, 所以光电器件设计者们主要研究光电探测器的弱光探测性能。现在, 在半导体的激光加工和光电对抗等应用领域里, 涉及强激光与半导体材料和器件的相互作用, 人们对于该领域所涉及的基础理论、基础知识和具体应用的需求也越来越紧迫。周寿桓院士建议, 让我们写一本以“半导体材料和器件的激光辐照效应”为内容的科学专著, 并且为我们制定了“起点高、质量好、指导性强”的指导思想。半导体材料和器件的基础是半导体物理, 半导体物理是固体物理的一个分支。半导体材料和器件的方方面面均与固体物理的基础理论、基本概念等密切相关。根据周院士的指导思想, 从科研与教学的实际出发, 本书内容围绕着半导体材料和光电探测器的激光辐照效应的范围, 追求局部的系统性和完整性, 力求达到基础理论、基本概念与半导体材料和器件的激光辐照效应之间的有机结合, 既要介绍当前国内外的研究成果和前沿热点研究课题, 又要让本书在学术上达到一定的水平, 对读者起指导作用。我们接受了该任务, 把它当成荣誉、信任和责任。虽然我们在该领域曾经做过一些研究, 也承担了相关的研究生课程的教学任务, 但是要系统地写成一本专著, 却显得力不从心。我们要学习很多新知识, 将在科研和教学中获得的零散的知识融合在一起, 形成一个较为完整和系统的认识, 我们深知这是一项非常艰巨和高难度的任务。本书针对的读者群体是在相应领域里从事科学技术研究的研究生和相关的科研工作者。在基础理论方面, 本书突出介绍半导体材料和器件的基本特性及原理, 对于激光与半导体材料和探测器相互作用问题, 突出介绍普遍原理和效应, 以认识和理解效应中出现的各种现象及规律作为本书的主要内容, 而认为读者在光学特别是激光方面已有相当强的基础。对于激光与半导体材料和探测器相互作用中的纯基础问题的进一步学习及研究, 可进一步研读本书提供的相关参考文献, 也期望读者在这方面有更大作为。

本书紧紧围绕半导体材料和器件的激光或强激光辐照效应展开。第 1 章介

绍半导体材料的基本特性,然后针对激光与半导体材料和器件相互作用期间的热力学参数的激光影响问题进行了讨论。第2章介绍激光在半导体材料中的激发状态、耦合形式、光谱特性和传输特性等。第3章介绍激光在半导体材料中各种吸收的类型和机理,以及吸收的能量在材料中的弛豫和转换的机理及规律。第4章介绍载流子在半导体材料中的输运问题,特别是存在激光激发的载流子输运问题等。第5章介绍单元光电探测器的基本工作原理和热学、电学和光学方面的基本特性,然后讨论了它在激光辐照下的各种效应。第6章介绍阵列光电探测器的基本工作原理,然后讨论激光辐照下的各种响应及损伤机理等问题。第7章着重讨论半导体材料对于激光辐照的热学和力学的响应及损伤机理等问题。其中第1章、第2章和第3章由陆启生执笔,第4章由江厚满和许中杰执笔,第5章由江天、程湘爱和许中杰执笔,第6章由程湘爱执笔,第7章由赵国民执笔,全书由陆启生组织、管理和协调,许中杰负责全书的统稿和整理。书中的每一章都是共同讨论的结果,是集体的贡献,封面署名除陆启生为第一作者外,其他为并列第二作者(按姓氏笔画排序)。我们要感谢曾经在我们这里学习过的许多研究生,他们是曾雄文、郭少锋、王睿、马丽芹、李修乾、邓少永、贺元兴、周萍、濮俊艳、李莉、朱永祥、刘亮、张震和朱志武等,虽然他们没有参与本书的写作,但他们的研究工作和论文为我们提供了大量的素材,为本书增添了许多亮点。

半导体材料与探测器的激光辐照效应的特殊性问题我们研究得还不够深刻,有的地方仅提出了问题,有的地方摆出了观点,还没有时间和条件开展深入的验证和研究。全书采用了国际单位制,对于原来使用高斯单位制的素材,我们采用时做了转换处理。在写作中力求全书在概念、内容和数学符号上做到系统一致,由于各章的执笔人不相同,我们在统稿时虽然做到了概念和内容的系统一致,但数学符号未能完全一致,不过在正文中均做了必要的交待。为了提高书的质量,力求不犯或少犯错误,写作组在写作过程中经常展开讨论,对所写的内容多次做了认真的相互审查,每次审查都会发现一些错误和论述不到位的问题,对此均做了认真的修改。由于我们的水平和能力有限,书中的错误和论述不到位的问题还是不可避免的,诚恳地希望读者提出批评意见或者及时与我们联系,开展必要的讨论,共同提高该领域的研究和发展水平。

在写作本书的过程中,我们还与同事们展开了许多讨论,得到了许多建设性的意见和帮助,我们对他们的建议和帮助表示感谢。最后我们还要感谢支持我们工作的领导和亲属们。

作者
2015年10月

第 1 章 半导体材料的基本特性

1.1 半导体内电子能态	1
1.2 金属、半导体和绝缘体的能带结构	3
1.3 半导体内载流子的有(等)效质量与迁移率	4
1.4 半导体材料内电子和声子的统计特性	6
1.4.1 电子和声子的统计分布函数	6
1.4.2 费米子的统计特性	7
1.4.3 玻色子的统计特性	9
1.5 热容	10
1.5.1 声子对热容的贡献	11
1.5.2 半导体中传导电子对热容的贡献	13
1.5.3 半导体材料的总热容	15
1.6 热膨胀	16
1.7 热传递	18
1.7.1 热传导	18
1.7.2 热对流	20
1.7.3 热辐射	21
1.8 热学参数的尺度效应	22
1.8.1 热容的尺度效应	23
1.8.2 热传递的尺度效应	24
1.9 半导体中离子扩散与晶体熔化	26
1.9.1 半导体中离子扩散	26
1.9.2 半导体材料的熔化	29
参考文献	30

第 2 章 激光在半导体材料中的传播

2.1 光在半导体中传播的一般规律	31
-------------------------	----

2.2	介质在电磁场中的极化	32
2.3	光与半导体材料耦合的量子力学叙述	33
2.4	半导体材料的极化率张量	34
2.5	半导体材料中极化电磁波的色散关系	37
2.6	极化激元波在半导体材料中的传播	39
2.7	光在半导体内等离子体中的传播	41
2.8	光与半导体内激子的耦合	42
2.9	半导体内表面极化激元和表面等离子体激元波的传播	44
	参考文献	47

第3章 激光在半导体材料中的吸收与弛豫

3.1	激光在半导体材料中的线性吸收	48
3.1.1	电子的线性吸收	48
3.1.2	半导体材料中等离子体对激光的吸收	53
3.1.3	激子对激光的吸收	54
3.1.4	晶格对激光的线性吸收	56
3.1.5	选择定则	61
3.2	半导体材料对激光的非线性吸收	61
3.2.1	多光子过程	62
3.2.2	受激拉曼散射	63
3.2.3	受激布里渊散射	64
3.3	激光施加给半导体的基本作用力	67
3.3.1	激光场与带电粒子的相互作用力	67
3.3.2	激光场引起的电致伸缩力	68
3.3.3	辐射压力	68
3.3.4	有质动力	69
3.4	吸收的激光能量在半导体材料内的弛豫	71
3.4.1	电子与声子相互作用引起的弛豫过程	72
3.4.2	电子与电子相互作用的弛豫过程	75
3.4.3	声子与声子相互作用的弛豫过程	78
3.5	载流子的复合与弛豫	80
3.5.1	载流子的直接复合与产生	81
3.5.2	载流子的级联(复合中心)复合	82
3.5.3	载流子的辐射复合与温度和辐射场的关系	83

参考文献	87
------------	----

第4章 半导体中的载流子输运

4.1 玻耳兹曼方程	90
4.1.1 玻耳兹曼方程	90
4.1.2 弛豫时间近似	92
4.2 能量平衡模型	93
4.2.1 主要物理量的数学表述	94
4.2.2 能量平衡模型的数学表述	97
4.3 漂移-扩散模型	100
4.4 漂移扩散模型的数值解法	103
4.4.1 基本方程	104
4.4.2 边界条件	105
4.4.3 稳态分析	106
4.4.4 瞬态计算	108
参考文献	110

第5章 单元光电器件的激光辐照效应

5.1 光导型探测器的工作原理	111
5.1.1 光电导的激发机制	112
5.1.2 光导型探测器的工作模式	114
5.2 光伏型探测器工作原理	116
5.2.1 热平衡状态下的PN结	116
5.2.2 PN结的电学响应	124
5.2.3 PN结的光学响应	130
5.3 光电探测器的光学饱和效应	139
5.3.1 光导型探测器的光学饱和效应	139
5.3.2 光伏型探测器的光学饱和效应	140
5.4 激光辐照光电探测器的温度效应	145
5.4.1 探测器结构对探测器温度变化的影响	146
5.4.2 光导型探测器中的温升效应	148
5.4.3 光伏型探测器中温升对信号的影响	149
5.5 波段外激光辐照光电探测器的响应机理	152

5.5.1	光导型探测器对波段外激光的响应机理	152
5.5.2	光伏型探测器对波段外激光的响应机理	158
5.6	单元光电探测器的激光损伤机理	162
5.6.1	连续激光对单元光电探测器的致损机理	163
	参考文献	168

第6章 激光与阵列光电器件相互作用

6.1	可见光 CCD 成像器件的工作原理	171
6.1.1	CCD 的单元结构及其功能	172
6.1.2	典型可见光 CCD 成像器件	179
6.1.3	CDS 技术及 A/D 转换简介	184
6.2	可见光 CCD 的激光致眩效应与机理	185
6.2.1	基本激光致眩效应	186
6.2.2	特殊激光致眩效应	200
6.3	激光对 CCD 器件的损伤效应	204
6.3.1	脉冲激光对 CCD 损伤的一般过程	204
6.3.2	脉冲激光对 CCD 的损伤机理	205
6.3.3	脉冲激光对 CCD 材料的损伤	209
	参考文献	210

第7章 激光对半导体材料的热和力学损伤

7.1	连续激光辐照半导体材料引起的热和力学损伤	213
7.2	脉冲激光辐照半导体材料引起的热和力学损伤	220
7.2.1	脉冲激光对硅的热和力学损伤	220
7.2.2	脉冲激光对砷化镓的热和力学损伤	228
7.2.3	脉冲激光对碲镉汞的热和力学损伤	234
7.2.4	脉冲激光对铋化铟的热和力学损伤	238
7.2.5	脉冲激光对其他半导体材料的热和力学损伤	241
7.2.6	脉冲激光辐照半导体材料产生的周期状波纹	248
7.3	激光辐照半导体材料热效应的基本方程	249
7.3.1	热传导基本方程	249
7.3.2	激光辐照半导体材料引起的熔化和汽化	253
7.3.3	非傅里叶热传导简介	258

7.4	激光辐照半导体材料力学效应的基本方程	262
7.4.1	热弹性力学基本方程	262
7.4.2	激光辐照下半导体表面剧烈汽化的力学效应	267
7.5	超短脉冲激光辐照半导体材料引起的热和力学损伤	270
7.5.1	超短脉冲激光对硅的热和力学损伤	270
7.5.2	超短脉冲激光辐照其他半导体材料产生的热和力学损伤	277
7.5.3	超短脉冲激光辐照半导体材料产生的周期状波纹	283
7.6	超短脉冲激光损伤半导体材料的理论模型简介	287
7.6.1	超短脉冲激光对半导体材料的损伤模型	288
7.6.2	超短脉冲激光辐照下半导体材料的超快动力学响应	294
	参考文献	299
附录 A	非各向同性介质中介电张量与折射率	303
附录 B	特殊函数	306
附录 C	一些积分表达式的计算	307
附录 D	能量平衡模型中主要物理量的推导	309
附录 E	式(4-102)的推导	315
附录 F	CCD 输出波形参考电压值的推导	316
附录 G	体沟道 CCD 包含信号电荷状态的一维解析模型	318
附录 H	重频激光引起 CCD 视频图像中次光斑漂移运动规律	322
附录 I	动态电子快门中主光斑振荡与稳定的条件分析	325

第 1 章

半导体材料的基本特性

本书的范围限制在激光对半导体材料和器件的辐照效应,顾名思义,本书应涉及激光、半导体材料和器件以及它们之间的相互作用。本书的重点是激光与半导体材料和器件的相互作用,必然会涉及参与相互作用的两个方面的基本特性,每一个特性都会对相互作用过程产生影响。在书的前言中已阐明,本书面向的读者应该对激光比较熟悉,因此本书不再系统介绍激光方面的知识。但是熟悉激光的读者不一定均熟悉半导体材料和器件,本章介绍半导体材料和器件与激光相互作用相关的一些半导体材料的基本特性,为读者很好地理解本书的内容提供一些方便。

1.1 半导体内电子能态

半导体内的能带结构可在相关文献和教科书中查到,非常详细,有时也非常复杂。本书要说清楚,光在半导体材料中传播时,光与半导体材料中各种准粒子与元激发耦合的规律。说清规律,没有必要使用复杂的物理模型,我们以最简单,又最重要而且能说明问题的周期性晶格为例。假定在一个周期性晶格中的一个电子的势能 V 满足周期性条件:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (1-1)$$

式中: \mathbf{R} 为晶格格点的位置矢量; \mathbf{r} 为一个电子在原胞中的位置矢量,它以 \mathbf{R} 为原点。

一个真空中自由电子(无周期性势场)的能量 $E(\mathbf{k})$,利用量子力学由下式表示:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (1-2)$$

式中: \mathbf{k} 为波矢; m 为电子质量; \hbar 为约化普朗克常数。这就是真空中自由电子的色散关系,能量随 \mathbf{k} 连续分布。

为了说明原理,使用最简单的一维模型,将真空中自由电子的色散关系用图 1-1(a)^[1]中虚线表示。对于周期性晶格中的电子,引进一个弱的周期性势

场后,在晶格常数为 a 的一维晶格布里渊区的边界处,在 $\frac{\pi}{a}$ 的整数倍处出现能量的不连续,即带隙,如图 1-1(a) 中实线所示,这是弱周期性势场中的近自由电子模型的色散关系。量子力学还告诉我们,单个原子势场中的电子的能量按不连续的能级分布,如图 1-1(d) 所示。若采用紧束缚近似,在周期性晶格离子势场中,电子的能量按带有带隙的具有分离能级的能带分布,如图 1-1(c) 所示。由于倒格矢空间的周期性,图 1-1(a) 的实线部分可用图 1-1(b) 的简约形式表示。图 1-1(b) 和图 1-1(c) 从不同的模型出发,实际上描述了同一件事。设一维晶体中有 N 个粒子,当 N 很大时,图 1-1(b) 中的色散曲线可以近似为连续的,当 N 不大时, k 应是不连续的,图 1-1(b) 中的每一个 k 值就对应一个 E 值,图 1-1(b) 中 $k = \frac{n}{N} \frac{2\pi}{a}$, 其中 $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}$, 应与图 1-1(c) 的紧束缚近似能带中的分离状态一一对应。图 1-1 说明了它们的对应关系。详细推导已由文献[2]和其他书籍给出,因不是本书的重点,不再重复其推导,但其内涵和结论对本书所涉及内容的理解很有帮助。

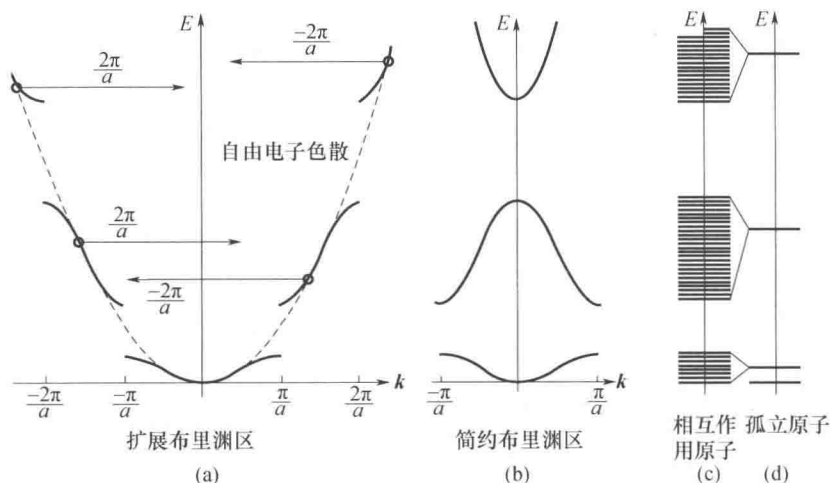


图 1-1 (a) 晶体中电子能带扩展布里渊区;(b) 简约布里渊区;
(c) 相互作用原子;(d) 孤立原子

在周期性晶格离子势场中,电子的本征态由布洛赫态描述,它的波函数的具体形式如下:

$$\psi_{k,j} = e^{ik \cdot r} u_{k,j}(\mathbf{r}) \quad (1-3)$$

其中

$$u_{k,j}(\mathbf{r}) = u_{k,j}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (1-4)$$

式中: \mathbf{k} 为电子态的波矢; j 为能带的指标; \mathbf{R} 为晶体中某格点的空间坐标,它具有

有周期性。在 \mathbf{k} 空间中能量的周期性由下式表示：

$$E(\mathbf{k}, j) = E(\mathbf{k} + \mathbf{G}, j) \quad (1-5)$$

式中： \mathbf{G} 为 \mathbf{R} 的倒格矢，是波矢空间的周期。对应的波函数在波矢空间的周期性表示为

$$\psi_{\mathbf{k}, j}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k} + \mathbf{G}, j}(\mathbf{r}) \quad (1-6)$$

作如下运算 $\int_{\mathbf{r}} |\psi_{\mathbf{k}, j}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}$ ，便可得到图 1-1(b) 或图 1-1(c) 中第 j 能带动量 \mathbf{k} 处电子占据的概率。能带中的状态是允许电子占据的状态，其占据概率不等于零，能带外电子占据的概率为零，称为禁带。作如下运算 $\sum_j \int_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}, j}(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{k}$ 即可得到空间 \mathbf{r} 方向，距离晶格格点为 $|\mathbf{r}|$ 的概率分布函数。以上我们给出了适用于半导体晶体的关于能带、状态和概率等基本概念，并没有针对具体的实例，但是它们是分析和认识具体实例的基础。

1.2 金属、半导体和绝缘体的能带结构

金属(导体)、半导体和绝缘体的区分主要看物质导电的性能，电导率是区分它们的指标。金属的电导率一般都在 $10^6 \sim 10^4 (\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$ 之间，而典型的绝缘体的电导率则小于 $10^{-10} (\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$ ，电导率在 $10^{-10} \sim 10^4 (\Omega \cdot \text{cm})^{-1}$ 之间的固体材料称为半导体。当光与物质相互作用时，可能在物质中产生光学、电子学、热学和力学等各种效应，仅用电导率来理解是不够的。为了说明激光与半导体材料和器件相互作用的原理，从电子占据能带的结构来理解什么是导体、半导体和绝缘体更简捷，更能揭示它们的物理本质。

从图 1-1 我们得到了固体，特别是晶体能带的概念。电子是费米子，它服从费米统计，其统计分布函数与温度有关(见 1.4 节)。理论上，当温度 $T=0\text{K}$ 时，电子占满能带中底部的状态，没有一个在激发态。此时，被电子完全占据的能带称为价带，而完全空着或部分被电子占据的能带称为导带。一般情况下，半导体材料可以有多个价带和多个导带。在图 1-2^[1] 中，用 $T=0\text{K}$ 电子占据能带的情况来区分什么是导体、什么是半导体和什么是绝缘体。图 1-2(a) 和图 1-2(b) 表示导体，VB 和 CB 分别表示价带和导带，它们的特点是都具有未被电子充满的导带。有的金属，如碱金属锂和钠，外层轨道允许两个电子占据，可是它们的外层轨道只有一个电子，因此它们的导带中有 1/2 是空的，导带中的电子均为可传导电子，如图 1-2(a) 所示。还有一种金属，如钙、镁等，外层均有两个电子，充满了外层轨道，这种轨道对应的能带应是满带，可是它与另一个完全空着的轨道相对应的导带部分地重叠，使得空着的导带中也有了可传导的电子，所以钙和镁也是导体，如图 1-2(b) 所示。以上仅仅是理论叙述，技术上不