

高等学校理工科  
电子科学与技术类课程

学习辅导丛书



# 半导体物理学 学习辅导与典型题解

田敬民 张声良 编著

- ▶ 学习要点
- ▶ 习题分析
- ▶ 练习题及参考解答
- ▶ 考研试题详解

学习的帮手 考研的参谋



电子工业出版社  
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY

<http://www.phei.com.cn>

高等学校理工科电子科学与技术类课程学习辅导丛书

# 半导体物理学

学习辅导与典型题解

田敬民 张声良 编著

电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING

## 内 容 简 介

本书以国内高等院校广泛使用的由刘恩科、罗晋生、朱秉升编著的《半导体物理学》为基础,根据教学与考研复习的实际要求,高度概括了各个章节知识重点、难点及重要的物理概念,在此基础上,精选了许多典型例题,并给出了详细解答。

本书可作为高等院校电子科学与技术微电子技术及相关专业学生的学习参考书,也可以作为报考相关专业方向的硕士学位研究生的复习资料。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究。

### 图书在版编目(CIP)数据

半导体物理学学习辅导与典型题解/田敬民等编著. —北京:电子工业出版社,2005.2

(高等学校理工科电子科学与技术类课程学习辅导丛书)

ISBN 7-121-00876-9

I. 半… II. 田… III. 半导体物理学—高等学校—教学参考资料 IV. 047

中国版本图书馆CIP数据核字(2005)第003892号

责任编辑:陈晓莉 特约编辑:李双庆

印 刷:北京天竺颖华印刷厂

出版发行:电子工业出版社

北京市海淀区万寿路173信箱 邮编100036

经 销:各地新华书店

开 本:787×980 1/16 印张:17.5 字数:392千字

印 次:2005年2月第1次印刷

印 数:4000册 定价:24.00元

凡购买电子工业出版社的图书,如有缺损问题,请向购买书店调换。若书店售缺,请与本社发行部联系。联系电话:(010)68279077。质量投诉请发邮件至 zltz@phei.com.cn,盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

# 前 言

半导体物理学是高等院校微电子技术、电子科学与技术、光电子技术、电子材料等专业学生必修的一门专业基础课,也是此类专业硕士学位研究生入学考试的专业课程之一。

由于本课程是一门理论性和系统性较强的课程,要学好这门课程除了深刻理解课程所涉及的概念、理论和方法之外,还必须加强实验和习题方面的训练,从而加深对教学内容的理解,并增强分析问题和解决实际问题的能力。

本书是在编者教学实践的基础上,为密切配合国内高等院校广泛使用的由刘恩科、朱秉升、罗晋生等编著的《半导体物理学》(第六版)的教学而编写的,分章与编排次序均与教材一致。根据教学和考研的要求,对各章节知识重点、难点及重要概念进行分析与概括,形成本课程各章的理论要点及复习重点。在此基础上,参考国内外相关教材编选了许多典型和具有一定难度的例题,例题很有针对性和启发性,它们或者证明一个基本定理,提供一个重要结论;或者建立某个新概念,给出某一类型问题的一般分析与计算的方法。通过解题过程培养观察问题、分析问题和解决问题的能力,对拓展读者的思路会有积极的作用。

本书在出版过程中得到罗晋生教授和朱秉升教授热心的鼓励和帮助,电子工业出版社陈晓莉编辑提出了许多宝贵意见,在此表示诚挚的感谢。

由于编者水平所限,书中难免存在错误之处,恳请读者批评指正。

编 者

2004年9月

# 目 录

第 1 章 半导体中的电子状态	(1)
1.1 理论概要与重点分析	(1)
1.2 典型题解	(3)
第 2 章 半导体中的杂质和缺陷能级	(25)
2.1 理论概要与重点分析	(25)
2.2 典型题解	(26)
第 3 章 半导体中载流子的统计分布	(31)
3.1 理论概要与重点分析	(31)
3.2 典型题解	(36)
第 4 章 半导体的导电性	(57)
4.1 理论概要与重点分析	(57)
4.2 典型题解	(60)
第 5 章 非平衡载流子	(83)
5.1 理论概要与重点分析	(83)
5.2 典型题解	(86)
第 6 章 pn 结	(109)
6.1 理论概要与重点分析	(109)
6.2 典型题解	(113)
第 7 章 金属半导体接触	(128)
7.1 理论概要与重点分析	(128)
7.2 典型题解	(130)
第 8 章 半导体表面与 MIS 结构	(140)
8.1 理论概要与重点分析	(140)
8.2 典型题解	(144)
第 9 章 异质结	(169)
9.1 理论概要与重点分析	(169)
9.2 典型题解	(172)
第 10 章 半导体的光学性质、光电和发光现象	(182)
10.1 理论概要与重点分析	(182)

10.2 典型题解·····	(186)
<b>第 11 章 半导体的热电性质</b> ·····	<b>(202)</b>
11.1 理论概要与重点分析·····	(202)
11.2 典型题解·····	(203)
<b>第 12 章 半导体磁和压阻效应</b> ·····	<b>(218)</b>
12.1 理论概要与重点分析·····	(218)
12.2 典型题解·····	(220)
模拟试题(一)·····	(244)
模拟试题(一)参考答案·····	(247)
模拟试题(二)·····	(250)
模拟试题(二)参考答案·····	(253)
模拟试题(三)·····	(257)
模拟试题(三)参考答案·····	(260)
模拟试题(四)·····	(263)
模拟试题(四)参考答案·····	(266)
参考文献·····	(271)

# 第 1 章 半导体中的电子状态

## 主题词

晶体结构,单电子近似,能带(导带、价带、禁带及其宽度),布里渊区,有效质量,空穴,回旋共振,硅、锗、砷化镓的能带结构。

## 1.1 理论概要与重点分析

(1) 固体可分为晶体、非晶体两大类。晶体是其原子按一定规律周期性重复排列而组成的,周期性是晶体结构的主要特征。半导体硅、锗是金刚石结构,它的晶胞是正立方体,可看成是由两个面心立方沿体对角线方向移动  $1/4$  套构而成的。闪锌矿结构与金刚石结构相似,惟一差别是在体对角线  $1/4$  处的四个原子和格点上其他原子不同,Ⅲ-V 族化合物半导体如 GaAs 即为此例。

(2) 晶体的周期性决定了晶体中电子势场的周期性,在周期性势场中电子的运动状态,可用单电子近似来描写,其薛定谔方程所决定的波函数为布洛赫函数,即

$$\psi_k(r) = u_k(r)e^{i2\pi k \cdot r} \quad (1.1)$$

式中

$$u_k(r) = u_k(r + na)$$

是与晶格周期相同的周期性函数。它反映了周期势场对电子运动的影响,晶体中的电子在某一原胞中的不同位置出现几率不同,而在不同的原胞的各等价位置出现几率相同。平面波因子  $e^{i2\pi k \cdot r}$  表明晶体中的电子不再是局域化,而是扩展到整个晶体中。布洛赫函数表明了晶体中各原子层电子的共有化运动。

(3) 单电子近似结果直接表明孤立原子凝聚成为晶体时其中的电子状态形成能带,这就是通常所说的能带论。根据能带论的结果,晶体中电子能量随其电子波波矢  $k$  的不同而变化,即  $E(k)$  关系。能量  $E$  在波矢  $k = \frac{n}{2a}$  处出现不连续而发生阶跃,这部分不允许电子存在的能量范围,称为禁带。其他部分  $E$  随  $k$  连续变化,形成允带,晶体中的电子处在一系列的允带中。 $k = \frac{n}{2a}$  处的界面把  $k$  空间分割成若干个相等的区域,这些区域称为布里渊区。对有限大的晶体,利用周期性边界条件,在布里渊区中  $k$  的取值是量子化的,其可能取值为

$$k_x = \frac{n_x}{L} \quad (n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$k_y = \frac{n_y}{L} \quad (n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (1.2)$$

$$k_z = \frac{n_z}{L} \quad (n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

式中,  $L$  为立方晶体的边长, 因而能带中的能级是不连续或准连续的, 其能级的数目等于晶体中的原胞数。

(4) 由于实际晶体中其内部势场难于找出具体的表达形式, 因而整个能带中  $E(k)$  关系难于确定。所幸的是导带中的电子和价带的空穴仅存在于能带底和能带顶附近。将  $E(k)$  在导带极小和价带极大值附近展开, 取至二次项。由于晶体的各向异性,  $E(k)$  关系一般是各向不同的, 设导带极小值发生在  $k_0$  点, 在三维  $k$  空间中,  $E(k)$  关系近似表达为

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right] \quad (1.3)$$

式中

$$\begin{cases} m_x^* = \left( \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \right)^{-1} \\ m_y^* = \left( \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \right)^{-1} \\ m_z^* = \left( \frac{1}{\hbar^2} \cdot \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \right)^{-1} \end{cases} \quad (1.4)$$

分别为三主轴方向的电子有效质量, 一般情况下  $m_x^*, m_y^*, m_z^*$  不等, 显示出它的各向异性。式(1.3)可改写为

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2}{2m_x^*(E - E_0)} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{2m_y^*(E - E_0)} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{2m_z^*(E - E_0)} = 1 \quad (1.5)$$

为  $k$  空间中的一椭球方程。

当  $E$  一定时, 所有  $k_x, k_y, k_z$  的可能取值构成一个能量为  $E$  的封闭椭球面, 称为等能面。

当  $m_x^* = m_y^* = m_1, m_z^* = m_2$  时, 式(1.5)变为

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2}{2m_1(E - E_0)} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{2m_2(E - E_0)} = 1 \quad (1.6)$$

为旋转椭球等能面。

当  $m_x^* = m_y^* = m_z^* = m_n^*$ , 且  $k_0 = 0$  时

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m_n^*} \quad (1.7)$$

为极值在原点各向同性的球形等能面。

由于晶体的对称性, 能带在某一方向上有极值点, 在其他对应方向的对应点也有极值点, 极值附近有相同的等能面。



(5) 在外加电场作用下,半导体中的电子除了受外电场的作用力  $f = -q|\epsilon|$  的作用外,还受到内部势场的作用。但内部势场难以精确确定,可以引入有效质量的概念来概括晶体内部势场的总作用。这样就只需将外部电场力和电子的有效质量相结合仍能用经典力学的方法来描写晶体中电子运动规律,即

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{f}{m_n^*} \quad (1.8)$$

式中,  $m_n^*$  为电子的有效质量,它是由电子的  $E(k)$  关系确定的,具体表达式如式(1.4)所示。可见在能带中能量极小值附近  $m_n^* > 0$ , 在能量极大值附近  $m_n^* < 0$ 。

应用有效质量的概念不仅能像自由电子一样很方便地用牛顿定律讨论晶体中电子的运动规律,而且因它与能带结构有关,借此有助于对半导体能带结构进行研究。

有效质量可以通过回旋共振实验测得,并据此推出半导体的能带结构。

根据半导体中电子在磁场作用下的运动规律推出回旋共振频率与磁感应强度  $B$  和有效质量之间的关系为

$$\omega_c = \frac{qB}{m_n^*} \quad (1.9)$$

式中,  $m_n^*$  为电子回旋共振有效质量,等能面为一般椭球情况,其表达式为

$$m_n^* = \left( \frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.10)$$

式中,  $\alpha, \beta, \gamma$  分别为磁感应强度  $B$  与三轴方向的方向余弦。对等能面为旋转椭球时,其表达式为

$$m_n^* = m_l \left( \frac{m_t}{m_t \sin^2 \theta + m_l \cos^2 \theta} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.11)$$

$m_t, m_l$  分别为横向和纵向有效质量,  $\theta$  为  $B$  与椭球长轴的夹角。

实验中测出  $B$  在不同方向上半导体对电磁波共振吸收时的频率  $\omega_c$  代入式(1.9),算出  $m_n^*$ ,再代入式(1.11)从而确定  $m_t, m_l$ 。

将实验结果与理论分析相结合,即可了解半导体的能带结构,它包括能量极值点出现在布里渊区的位置,极值点附近等能面的形状,能量椭球的主轴方向,极值对称点出现的个数等。以 Si, Ge, GaAs 为例说明其导带,价带结构。

(6) 空穴是几乎被电子充满的能带中未被电子占据的少数空量子态,这少量的空穴总是处于能带顶附近。我们把半导体中的空穴看成一个带有电荷为  $+q$ ,并以该空穴状态相应电子的速度  $v(k)$  运动的粒子,它具有正的有效质量,价带中大量电子的导电作用可用这少数空穴的导电作用来描写。因此半导体中有两种载流子,即导带中的电子和价带中的空穴,这是半导体导电最显著的特征。

## 1.2 典型题解

**【例 1-1】** 平面正三角形晶格的相邻间距是  $a$ (见图 1-1)。(1)试求其正格子基矢和

倒格子基矢；(2)画出其第一布里渊区,并求此区域的内切圆半径。

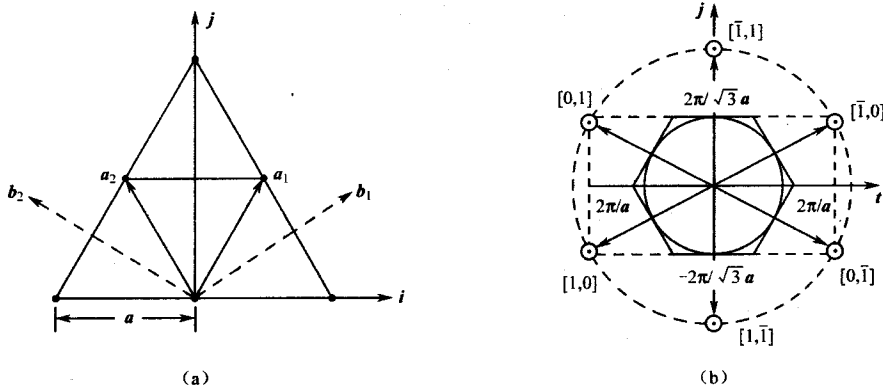


图 1-1 例 1-1 图

解：

(1) 由于每个原子周围的情况完全相同,所以格点可以取原子本身。这种结构的布拉伐格子是二维六角格子。选取图 1-1(a)所示的直角坐标系,正格子基矢  $a_1$  和  $a_2$  可写为

$$\begin{cases} a_1 = \frac{a}{2}(i + \sqrt{3}j) \\ a_2 = \frac{a}{2}(-i + \sqrt{3}j) \end{cases}$$

为了确定倒格子基矢,我们假设  $a_3 = k$ 。于是

$$\begin{cases} a_2 \times a_3 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}i + j) \\ a_3 \times a_1 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}i + j) \end{cases}$$

正格子的原胞体积为

$$\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$

其倒格子的基矢

$$\begin{cases} b_1 = \frac{2\pi}{a}\left(i + \frac{1}{\sqrt{3}}j\right) \\ b_2 = \frac{2\pi}{a}\left(-i + \frac{1}{\sqrt{3}}j\right) \end{cases}$$

(2) 倒格矢  $K_n = n_1 b_1 + n_2 b_2$  及其长度为

$$\begin{aligned} K_n &= -[(n_1 + n_2)2\pi/a]i + [(n_2 - n_1)2\pi/\sqrt{3}a]j \\ |K_n| &= 4\pi(n_1^2 + n_2^2 + n_1 n_2)^{1/2}/\sqrt{3}a \end{aligned}$$

最短倒格矢长度为  $|\mathbf{K}_n|_{\min} = 4\pi/\sqrt{3}a$ , 最近邻倒格点共六个, 它们的  $[n_1, n_2]$  值分别是  $[1, 0], [\bar{1}, 0], [0, 1], [0, \bar{1}], [1, \bar{1}], [\bar{1}, 1]$ ;

相应的最短倒格矢为

$$\mathbf{K}_{10} = -\frac{2\pi}{a}\mathbf{i} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j}, \quad \mathbf{K}_{\bar{1}0} = \frac{2\pi}{a}\mathbf{i} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j},$$

$$\mathbf{K}_{01} = -\frac{2\pi}{a}\mathbf{i} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j}, \quad \mathbf{K}_{0\bar{1}} = \frac{2\pi}{a}\mathbf{i} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j},$$

$$\mathbf{K}_{1\bar{1}} = -\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{i}, \quad \mathbf{K}_{\bar{1}1} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j}$$

由以上最短倒格矢的中垂线围成的正六边形即为第一布里渊区, 如图 1-1(b) 所示。

显然, 第一布里渊区的内切圆半径是最短倒格矢的  $1/2$ , 即  $2\pi/\sqrt{3}a$ 。

**【例 1-2】** 一个二维正方格子:

- (1) 能量的极小值在第一布里渊区的中心;
- (2) 能量的极大值在第一布里渊区的顶角上。

试在以上两种情况下, 分别画出极值附近的等能线, 并求出在单位面积的晶体中, 能量在  $E-E+dE$  范围内的状态数  $N(E)dE$ 。

解:

二维正方格子的倒格子和第一布里渊区如图 1-2 所示。

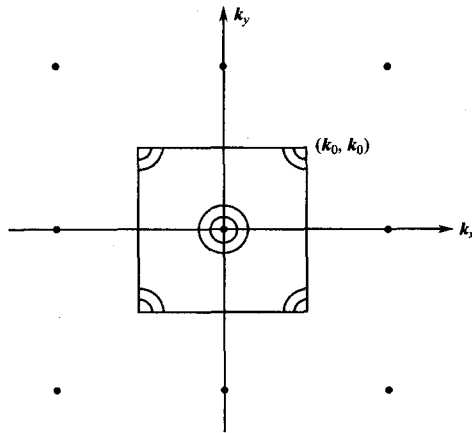


图 1-2 例 1-2 图

考虑到电子的自旋可以有两种不同的取向, 因而, 在单位面积的晶体中,  $k$  空间的状态密度为  $2/(2\pi)^2$ 。

- (1) 极小值在布里渊区中心, 在极值附近的等能线是圆, 其方程为

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_n} \quad (1)$$

式中,  $m_n$  是电子的有效质量(标量)。在单位面积的晶体中, 在  $k-k+dk$  范围内的状态数

$$N(k)dk = \frac{2}{(2\pi)^2} \cdot 2\pi k dk$$

由式(1)可得出

$$dE = \frac{\hbar^2 k}{m_n} dk$$

或

$$k dk = \frac{m_n}{\hbar^2} dE$$

所以

$$N(E)dE = \frac{4\pi m_n}{\hbar^2} dE \quad (2)$$

(2) 极大值在布里渊区顶角上。根据正方格子的对称性, 彼此对称的极大值有四个, 但是它们相互之间只差一个倒格矢, 所以独立的极大值只有一个。在极值附近的等能线是圆, 其方程为

$$E(k) = E_v - \frac{\hbar}{2m_p} [(k_x - k_0)^2 + (k_y - k_0)^2] \quad (3)$$

设

$$k'_x = k_x - k_0, \quad k'_y = k_y - k_0$$

则

$$\begin{aligned} E(k') &= E_v - \frac{\hbar^2 (k')^2}{2m_p} \\ dE &= -\frac{\hbar^2 k'}{m_p} dk' \end{aligned} \quad (4)$$

式(4)前面的负号表明, 随着  $k'$  的增加能量减小, 在考虑间隔  $dE$  和  $dk'$  之间的状态数目时, 可以把它去掉。

在单位面积的晶体中, 在  $k'-k'+dk'$  范围内的状态数

$$N(k')dk' = \frac{2}{(2\pi)^2} \cdot 2\pi k' dk'$$

利用式(4), 则得

$$N(E)dE = \frac{4\pi m_p}{\hbar^2} dE \quad (5)$$

由式(2)和式(5)两式可以看出, 在二维情况下, 单位能量间隔的状态数与能量  $E$  无关。

**【例 1-3】** 试求面心立方晶体的第一布里渊区。

解: 面心立方晶格基矢为

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j})$$

其倒格子基矢为

$$b_1 = \frac{1}{a}(-i + j + k), \quad b_2 = \frac{1}{a}(i - j + k), \quad b_3 = \frac{1}{a}(i + j - k)$$

倒格矢为

$$K_n = \frac{1}{a}[(-n_1 + n_2 + n_3)i + (n_1 - n_2 + n_3)j + (n_1 + n_2 - n_3)k]$$

由  $K_n \cdot (k - \frac{K_n}{2}) = 0$  得布里渊区边界方程为

$$\begin{aligned} & (-n_1 + n_2 + n_3)k_x + (n_1 - n_2 + n_3)k_y + (n_1 + n_2 - n_3)k_z \\ &= -\frac{1}{2a}[(-n_1 + n_2 + n_3)^2 + (n_1 - n_2 + n_3)^2 + (n_1 + n_2 - n_3)^2] \end{aligned}$$

离原点最近的倒格点为

$$(111), (11\bar{1}), (1\bar{1}1), (\bar{1}11), (1\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}1\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), (\bar{1}\bar{1}\bar{1})$$

由原点指向上述倒格点的倒格矢的垂直平分面为

$$\pm k_x \pm k_y \pm k_z = \frac{3}{2a}$$

因为这八个倒格矢的中垂面围成的正八面体的体积比倒格原胞体积大。所以再考虑邻近的倒格点：

$$(2, 0, 0), (0, 2, 0), (0, 0, 2), (-2, 0, 0), (0, -2, 0), (0, 0, -2)$$

到次邻近倒格点的倒格矢的中垂面的六个方程为

$$k_x = \pm \frac{1}{a}, k_y = \pm \frac{1}{a}, k_z = \pm \frac{1}{a}$$

这六个中垂面和前面八个中垂面围成截角八面体(14面体)。所以面心立方晶体的第一布里渊区为一截角八面体,如图 1-3 所示。

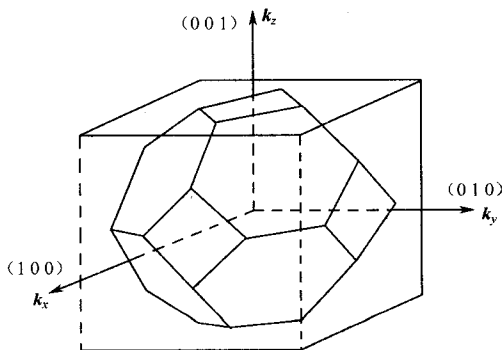


图 1-3 例 1-3 图

**【例 1-4】** 试证明面心立方晶格的第一布里渊区的六边形界面起因于(111)原子平面的布喇格反射, 四边形界面则起因于(200)原子平面的布喇格反射。

**证明:** 布里渊区界面方程为

$$\mathbf{K}_n \cdot \left( \mathbf{k} + \frac{\mathbf{K}_n}{2} \right) = 0$$

它代表能量的不连续面,这些面垂直平分倒格矢  $\mathbf{K}_n$ ;当波长  $\lambda = 1/|k|$  的电子波入射到该面时,遭受到全反射。由于倒格矢  $\mathbf{K}_n$  与对应的面系的晶面间距  $d$  存在着如下关系

$$d = \frac{1}{|\mathbf{K}_n|}$$

故由  $|\mathbf{K}_n|$  的值便可求得  $d$  值。

面心立方晶格的倒格子是一个边长为  $2/a$  的体心立方格子,它的第一布里渊区是一个由 8 个六边形面和 6 个正方形面所围成的十四面体(见习题 6.6),布里渊区中心到六边形面的距离等于

$$\frac{|\mathbf{K}_n|}{2} = \frac{\sqrt{3}}{4} \left( \frac{2}{a} \right) = \frac{\sqrt{3}}{2a}$$

即

$$|\mathbf{K}_n| = \frac{\sqrt{3}}{a}$$

于是

$$d = \frac{1}{|\mathbf{K}_n|} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

在立方晶系中,面间距公式为

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

而且,在面心立方晶格中,只有面指数  $h, k, l$  全为奇数或全为偶数才可能产生反射,因此,当

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

时,对应的晶面族为  $\{111\}$ 。

同理,对于正方形的界面,  $|\mathbf{K}_n| = 2/a, d = a/2$ ,它对应于  $\{200\}$  面族的布喇格反射。

**【例 1-5】** 试证明:若只计及最近邻的相互作用,用紧束缚近似方法导出体心立方晶格的  $s$  态电子的能带为

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - A - \delta J (\cos\pi a k_x \cos\pi a k_y \cos\pi a k_z)$$

式中,  $J$  为交迭积分。

解:如只计及最近邻的相互作用,采用紧束缚近似处理晶体中的  $s$  态电子时,其能量由下式确定

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - A + \sum_{R_n}^{\text{最近邻}} \exp(i2\pi \mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s)) J_{sn} \quad (1)$$

式中,  $\mathbf{R}_s$  和  $\mathbf{R}_n$  分别是参考原子及其各个最近邻的位矢。在体心立方晶格中,每个原子有 8 个最近邻。若取参考原子为坐标原点,即  $\mathbf{R}_s = 0$ ,则 8 个最近邻的坐标分别为

$$\frac{a}{2}(1,1,1), \frac{a}{2}(1,1,\bar{1}), \frac{a}{2}(1,\bar{1},1), \frac{a}{2}(\bar{1},1,1),$$

$$\frac{a}{2}(1,\bar{1},\bar{1}), \frac{a}{2}(\bar{1},\bar{1},1), \frac{a}{2}(\bar{1},1,\bar{1}), \frac{a}{2}(\bar{1},\bar{1},\bar{1})$$

交迭积分  $J_{sn}$  对各个最近邻均相等, 令  $J_{sn} = -J$ , 从式(1)便得

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= E_0 - A - J[e^{i\pi a(k_x+k_y+k_z)} + e^{i\pi a(k_x+k_y-k_z)} + e^{i\pi a(k_x-k_y+k_z)} + \\ &\quad e^{i\pi a(k_x-k_y-k_z)} + e^{i\pi a(-k_x+k_y+k_z)} + e^{i\pi a(-k_x+k_y-k_z)} + e^{i\pi a(-k_x-k_y+k_z)} + e^{i\pi a(-k_x-k_y-k_z)}] \\ &= E_0 - A - 2J[e^{i\pi a(k_x+k_y)} \cos\pi a k_z + e^{i\pi a(k_x-k_y)} \cos\pi a k_z + \\ &\quad e^{i\pi a(-k_x+k_y)} \cos\pi a k_z + e^{i\pi a(-k_x-k_y)} \cos\pi a k_z] \\ &= E_0 - A - 4J[e^{i\pi a k_x} \cos\pi a k_y \cos\pi a k_z + e^{-i\pi a k_x} \cos\pi a k_y \cos\pi a k_z] \\ &= E_0 - A - 8J(\cos\pi a k_x \cos\pi a k_y \cos\pi a k_z) \end{aligned}$$

即得证之。

**【例 1-6】** 根据上题结果, 试求

- (1) 体心立方晶格的能带宽度。
- (2) 能带底部和顶部电子的有效质量。
- (3) 画出沿  $k_x$  方向 ( $k_y = k_z = 0$ )  $E(k_x)$  和  $U(k_x)$  的曲线。

解: 对于体心立方晶格有

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - A - 8J(\cos\pi a k_x \cos\pi a k_y \cos\pi a k_z) \quad (1)$$

(1) 由余弦函数的性质, 用观察法即可断定, 当  $k_x = k_y = k_z = 0$  时, 能带中的能量取最小值

$$E_{\min} = E_0 - A - 8J$$

当  $k_x = \pm 1/a, k_y = \pm 1/a, k_z = \pm 1/a$  时, 能量取最大值

$$E_{\max} = E_0 - A + 8J$$

因而能带的宽度

$$\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 16J$$

(2) 在能带底附近,  $k$  值很小, 利用公式

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \dots$$

将  $E(\mathbf{k})$  展开到  $k$  的二次项, 得

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &\approx E_0 - A - 8J \left[ 1 - \frac{(\pi a k_x)^2}{2} \right] \cdot \left[ 1 - \frac{(\pi a k_y)^2}{2} \right] \left[ 1 - \frac{(\pi a k_z)^2}{2} \right] \\ &= E_0 - A - 8J \left[ 1 - \frac{\pi^2 a^2}{2} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \right] \\ &= E_{\min} + 4\pi^2 a^2 J (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ &= E_{\min} + \frac{\hbar^2}{2m_b^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ &= E_{\min} + \frac{\hbar^2}{2m_b^*} k^2 \end{aligned}$$

式中,

$$m_b^* = \frac{h^2}{8\pi^2 a^2 J}$$

为能带底部电子的有效质量。

在能带顶部附近,  $k_x = \pm \frac{1}{a} + \delta k_x$ ,  $k_y = \pm \frac{1}{a} + \delta k_y$ ,  $k_z = \pm \frac{1}{a} + \delta k_z$ , 代入式(1)并按级数展开, 得

$$\begin{aligned} E(k) &= E_0 - A - 8J[\cos(\pm\pi + \pi a\delta k_x)\cos(\pm\pi + \pi a\delta k_y)\cos(\pm\pi + \pi a\delta k_z)] \\ &= E_0 - A + 8J[\cos(\pi a\delta k_x)\cos(\pi a\delta k_y)\cos(\pi a\delta k_z)] \\ &\approx E_0 - A + 8J\left\{1 - \frac{(\pi a)^2}{2}[(\delta k_x)^2 + (\delta k_y)^2 + (\delta k_z)^2]\right\} \\ &= E_{\max} - 4\pi^2 a^2 J[(\delta k_x)^2 + (\delta k_y)^2 + (\delta k_z)^2] \\ &= E_{\max} + \frac{h^2}{2m_t^*}[(\delta k_x)^2 + (\delta k_y)^2 + (\delta k_z)^2] \end{aligned}$$

式中,

$$m_t^* = -\frac{h^2}{8\pi^2 a^2 J}$$

为能带顶部电子的有效质量。因为  $J > 0$ , 有  $m_t^* < 0$ , 即能带顶部电子的有效质量为负值。

(3) 当  $k_y = k_z = 0$  时, 沿  $k_x$  方向的能量和速度分别为

$$\begin{aligned} E(k_x) &= E_0 - A - 8J\cos\pi a k_x \\ u(k_x) &= \frac{1}{h} \frac{dE}{dk_x} = \frac{8\pi a J}{h} \sin\pi a k_x \end{aligned}$$

$E(k_x)$  和  $v(k_x)$  的曲线如图 1-4 所示。

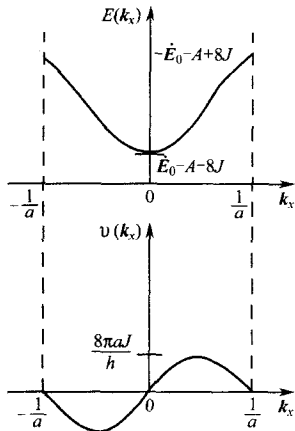


图 1-4  $E(k_x)$  和  $U(k_x)$  的曲线图

**【例 1-7】** 设导带底电子的有效质量倒数张量可以表示为如下形式

$$\begin{pmatrix} a_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & a_{yy} & a_{yz} \\ 0 & a_{yz} & a_{zz} \end{pmatrix} \quad (1)$$

试求出导带底附近的能谱和有效质量张量的分量。

解:

(1) 在导带底附近,  $E(k)$  可以展开为泰勒级数(取导带底对应的  $k$  值为原点, 展开到二次项):

$$E(k) = E_0 + \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} k_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} k_i k_j$$

由于原点是导带的极小值, 所以一次微商为零, 取导带底为能量零点, 则  $E_0 = 0$ 。根据有效质量倒数张量的定

义有



$$\frac{1}{m_{ij}} = \hbar^{-2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j}$$

利用式(1)可得出

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} (a_{xx}k_x^2 + a_{yy}k_y^2 + a_{zz}k_z^2 + 2a_{yz}k_yk_z)$$

(2) 倒数张量的分量是

$$(a^{-1})_{ij} = \frac{A_{ji}}{\text{deta}}$$

所以,有效质量张量的分量

$$m_{ij} = \frac{A_{ji}}{\text{deta}} \quad (2)$$

式中  $A_{ji}$  是  $a_{ij}$  的余因式,而

$$\text{deta} = a_{xx}(a_{yy}a_{zz} - a_{yz}^2) \quad (3)$$

是(a)对应的行列式值。

由式(1)、式(2)和式(3)可得

$$m_{xx} = \frac{1}{a_{xx}}, m_{yy} = \frac{a_{zz}}{a_{yy}a_{zz} - a_{yz}^2}, m_{zz} = \frac{a_{yy}}{a_{yy}a_{zz} - a_{yz}^2},$$

$$m_{yz} = m_{zy} = \frac{-a_{yz}}{a_{yy}a_{zz} - a_{yz}^2}, m_{xy} = m_{yx} = m_{xz} = m_{zx} = 0$$

**【例 1-8】** 试证明,如只考虑最近邻的相互作用,用紧束缚方法导出简单的立方晶体中的 s 态电子的能带为

$$E(k) = E_0 - A - 2J(\cos 2\pi ak_x + \cos 2\pi ak_y + \cos 2\pi ak_z)$$

试求:(1) 能带的宽度( $\Delta E=12J$ );

(2) 能带底和能带顶附近电子有效质量。

**解:** (1) 若只计及最近邻的相互作用,用紧束缚近似法处理晶体中的 s 态电子所得结果是

$$E(k) = E_0 - A + \sum_{R_n}^{\text{最近邻}} e^{i2\pi k \cdot (R_n - R_s)} J_{sn}$$

式中,  $R_s$  和  $R_n$  分别是参考原子及其最近邻的位矢。在简单立方晶格中,有 6 个最近邻。如选取  $R_s=0$ ,即以参考原子为坐标原点,则这 6 个最近邻的坐标是

$$a(1,0,0), a(\bar{1},0,0), a(0,1,0)$$

$$a(0,\bar{1},0), a(0,0,1), a(0,0,\bar{1})$$

这里  $a$  是晶格常数。对于 s 态电子,交迭积分对各个最近邻都相等,令  $J_{sn} = -J$ ,则得

$$E(k) = E_0 - A - J(e^{i2\pi ak_x} + e^{-i2\pi ak_x} + e^{i2\pi ak_y} + e^{-i2\pi ak_y} + e^{i2\pi ak_z} + e^{-i2\pi ak_z})$$

$$= E_0 - A - 2J(\cos 2\pi ak_x + \cos 2\pi ak_y + \cos 2\pi ak_z)$$

在能带底处,  $k_x = k_y = k_z = 0$ ,对应的能量有最小值:

$$E_{\min} = E_0 - A - 6J$$