

王家骅 李长健 牛文成 编著

半导体器件物理

科学出版社

半 导 体 器 件 物 理

王家骅 李长健 牛文成 编著

科 学 出 版 社

1 9 8 3

内 容 简 介

本书阐述半导体器件的物理基础、工作原理和特性。书中对变容二极管、PIN二极管、隧道二极管、雪崩二极管、金属-半导体界面器件、绝缘栅场效应器件、电荷耦合器件、太阳电池、光电探测器、发光二极管、半导体激光器、体效应器件等的概念、原理和特性等作了比较系统深入的分析。在分析中主要着重于把物理概念、物理图象及数学解析紧密地结合起来，力求讲述清晰、简洁易懂，并给出了每种器件的重要参考文献。

本书可作为高等院校半导体专业和有关专业的学生和研究生 的教学用书，也可供从事半导体器件教学、研制的教师、科研人员及工程技术人员参考。

半 导 体 器 件 物 理

王家骅 李长健 牛文成 编著

责任编辑 王昌泰

科 学 出 版 社 出 版

北京朝阳门内大街137号

中 国 科 学 院 印 刷 厂 印 刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1983年10月第 一 版 开本：787×1092 1/16

1983年10月第一次印刷 印张：30 3/4

印数：0,001—6,600 字数：710,000

统一书号：13031·2408

本社书号：3290 13—3

定 价：4.70元

前 言

当前半导体器件的生产和应用已非常广泛，半导体器件已成为电子工业、自动控制、计算技术等方面不可缺少的组成部分。半导体器件物理是通过分析半导体中载流子的运动规律来研究半导体器件的工作原理和特性的，它是半导体器件研制和应用的基础和依据，是有关人员必须了解和掌握的知识。

由于半导体器件的种类很多，限于本书的篇幅而不能一一涉及，只能选择其中的一部分加以讲述。在取舍内容时，我们着重考虑了国内研制、应用较普遍的器件，并适当地考虑了发展方向。鉴于双极型晶体管和集成电路国内已有一些专著，故未将它们编入本书。本书第一章和第二章的前半部分作为全书的物理基础，并注意收集了一些常用的数据、图表、曲线、公式等，以备读者查阅。从第二章的后半部分到第九章，分别讲述了变容二极管、PIN 二极管、隧道二极管、雪崩二极管、金属-半导体器件、绝缘栅场效应器件、电荷耦合器件、光电器件、体效应器件等内容。考虑到本书篇幅和器件的发展，将电荷耦合器件单独成为一章，并将光电器件分成二章。由于太阳能电池和光电探测器都是将光能转换为电能的器件，故将它们放在一起成为一章。发光二极管和半导体激光器都是将电能转换为光能的器件，我们也将它们放在一起成为一章。本书在讲述每种器件时，都是以讨论器件的工作机理为主，着重于物理概念和器件特性的分析。在分析中力求把物理概念和数学解析紧密地结合起来，力求讲述清晰、简洁易懂，尽量配合形象化的插图，使读者便于理解讲述的内容；对于每种器件都给出了重要的参考文献，以供查阅。

本书可作为高等学校半导体专业和有关专业的大学生和研究生的教学用书，也可供从事半导体器件教学、研制的教师、科研人员和工程技术人员参考。

本书由王家骅、李长健、牛文成同志共同编写。王家骅同志写第一章的第 1.3 节至第 1.4 节、第二章的第 2.2 节至第 2.4 节、第三章、第八章、第九章的第 9.4 节至第 9.7 节。李长健同志写第一章的第 1.1 节至第 1.2 节、第二章的第 2.1 节、第 2.5 节、第 2.6 节、第四章、第七章、第九章的第 9.1 节至第 9.3 节。牛文成同志写第五章、第六章，牛文成同志又负责修改了第一章。王家骅同志负责修改了第二章，全书由王家骅同志负责组织工作及整理工作。

在本书编写过程中，李育民同志参加了全书大纲的讨论和拟定，并收集了部分关于半导体激光器、体效应器件的资料，有些已被本书采用。钱其璈同志、曾涤同志对本书的编写给了大力支持和帮助。本书承北京大学郭长志同志、韩汝琦同志、中国科学院北京半导体研究所杨玉芬同志、一四一三所张瑞华同志、李安民同志、梁春广同志、张友渝同志、陈孝泽同志、关久辉同志等、天津大学郭维廉同志、王淑荣同志、南京工学院郑其径同志、南京大学郑有焯同志、袁仁宽同志、一四一八所李汶滋同志、李秀文同志等、昆明师范学院陈庭金同志、西北电讯工程学院郭省焕同志、一四一一所董培芝同志、范正风同志、一

四四六所孙膺九同志、厦门大学张声豪同志、黄元庆同志等分别审阅了有关章节的内容，并提出了许多宝贵意见，在此对上述所有同志一并表示衷心的感谢。

由于编者水平所限，书中的缺点、错误在所难免，恳切希望读者批评、指正。

1981年5月

目 录

第一章 半导体物理基础	1
1.1 半导体的能带	1
1.1.1 能带的形成	1
1.1.2 本征半导体和掺杂半导体	5
1.1.3 电子和空穴的有效质量	8
1.1.4 锗、硅、砷化镓等的能带结构	11
1.2 热平衡载流子	14
1.2.1 热平衡载流子	15
1.2.2 掺杂半导体的载流子浓度	17
1.2.3 费米能级随温度的变化	20
1.2.4 半导体的简并化	22
1.2.5 晶格振动和声子	22
1.2.6 迁移率	24
1.2.7 电阻率	28
1.2.8 强电场效应	30
1.3 非平衡载流子	33
1.3.1 非平衡载流子的产生	33
1.3.2 非平衡载流子的复合与寿命	35
1.3.3 非平衡载流子的扩散分布	36
1.3.4 表面复合和陷阱效应	37
1.4 电流方程和连续方程	39
1.4.1 电流方程	40
1.4.2 连续方程	40
参考文献	43
第二章 PN 结二极管	44
2.1 PN 结	44
2.1.1 PN 结的杂质分布	44
2.1.2 平衡 PN 结的能带图	45
2.1.3 平衡 PN 结的电场、电势和结宽	47
2.1.4 PN 结的电流-电压特性	56
2.1.5 PN 结电容	61
2.1.6 PN 结击穿	62
2.2 异质结与高低结	68
2.2.1 异质结	68
2.2.2 高低结	74

2.3	变容二极管	75
2.3.1	一般PN结电容-电压关系	75
2.3.2	变容二极管的结构与参数	77
2.4	开关二极管	83
2.4.1	PN结的瞬变特性	83
2.4.2	高速开关二极管	85
2.5	PIN二极管	88
2.5.1	PIN二极管的能带和电场	88
2.5.2	正向偏置下的I层电阻	90
2.5.3	反向偏压下PIN二极管的电阻、电容和击穿电压	93
2.5.4	PIN二极管的开关时间	93
2.6	隧道二极管和反向二极管	94
2.6.1	隧道过程的定性分析	94
2.6.2	隧道几率和隧道电流	96
2.6.3	过量电流	98
2.6.4	隧道二极管的等效电路	100
2.6.5	反向二极管	100
	参考文献	101
第三章	雪崩二极管	103
3.1	崩越二极管的工作原理	103
3.1.1	负阻概念	104
3.1.2	崩越振荡机理	105
3.2	崩越二极管的小信号分析	110
3.2.1	雪崩区	111
3.2.2	漂移区	113
3.2.3	总阻抗	114
3.3	崩越二极管的特性与制造	116
3.3.1	崩越二极管的效率	116
3.3.2	崩越二极管的噪声	118
3.3.3	崩越二极管的小信号Q值	121
3.3.4	崩越二极管的输出功率	122
3.3.5	崩越二极管制造工艺概况	124
3.4	双漂移崩越二极管、高-低结和低-高-低结崩越二极管	125
3.4.1	双漂移崩越二极管	125
3.4.2	高-低结和低-高-低结崩越二极管	129
3.5	崩越二极管的大信号特性	132
3.5.1	崩越二极管导纳、效率及Q值随信号振幅变化的情况	132
3.5.2	空间电荷效应对IMPATT二极管大信号特性的影响	134
3.5.3	饱和电流对IMPATT二极管大信号特性的影响	136
3.6	俘越二极管	137
3.6.1	俘越模式的工作机理	137

3.6.2 俘越器件的设计考虑	142
3.6.3 俘越器件的结构	144
3.7 势越二极管	145
参考文献	150
第四章 金属-半导体界面器件	152
4.1 肖特基势垒	153
4.1.1 功函数和电子亲和势	153
4.1.2 肖特基势垒的形成	153
4.1.3 肖特基势垒的巴丁模型	157
4.1.4 势垒高度的一般表达式	160
4.1.5 镜像力使肖特基势垒高度的降低——肖特基效应	162
4.1.6 肖特基势垒高度的控制	164
4.1.7 莫特势垒	165
4.2 肖特基势垒的电流输运理论	166
4.2.1 肖特基势垒中载流子的输运机构	166
4.2.2 热电子发射理论	167
4.2.3 扩散理论	168
4.2.4 热电子发射-扩散理论	170
4.2.5 界面层的影响	171
4.2.6 反向饱和电流	174
4.2.7 空穴注入	175
4.2.8 少子存储效应	176
4.3 肖特基势垒电容	176
4.3.1 肖特基势垒中的电场	176
4.3.2 反向偏压下的肖特基势垒电容	178
4.4 欧姆接触	179
4.5 金属-半导体界面的合金化	181
4.5.1 扩散界面和合金化	181
4.5.2 金属硅化物	182
4.6 肖特基势垒二极管	184
4.6.1 箝位晶体管	185
4.6.2 肖特基势垒二极管检波器和混频器	185
4.7 肖特基场效应晶体管的直流特性	187
4.7.1 结型场效应晶体管的工作原理	187
4.7.2 场效应晶体管的两段模型	188
4.7.3 砷化镓中实际的速度-电场特性对肖特基场效应管直流特性的影响	192
4.8 肖特基场效应晶体管的小信号参数	194
4.8.1 跨导 g_m	195
4.8.2 漏电阻 r_d	195
4.8.3 栅源电容 C_{SG}	196
4.8.4 栅漏电容 C_{DG} 和源漏电容 C_{SD}	197

4.8.5 寄生电阻的影响	197
4.9 肖特基场效应晶体管的频率特性	198
4.10 肖特基场效应晶体管的噪声特性	199
4.11 大功率肖特基势垒栅场效应晶体管	205
参考文献	208
第五章 绝缘栅场效应器件	210
5.1 MIS结构的性质	210
5.1.1 理想MIS结构及其特性	210
5.1.2 对理想MIS结构特性的修正	224
5.2 绝缘栅场效应晶体管	228
5.2.1 MOS晶体管的基本结构和原理	229
5.2.2 非平衡状态的MOS结构	230
5.2.3 沟道电导和表面迁移率	232
5.2.4 MOS晶体管的电特性	237
5.2.5 MOS晶体管的频率特性	252
5.3 短沟道MOS场效应晶体管	255
5.3.1 短沟道效应对阈电压和漏源击穿电压的影响	255
5.3.2 短沟道效应的抑制	258
5.3.3 短沟道器件	260
5.4 不挥发半导体存储器	264
5.4.1 浮栅型不挥发存储器	265
5.4.2 双介质不挥发存储器	269
参考文献	274
第六章 电荷耦合器件	276
6.1 CCD的工作原理	276
6.1.1 MOS电容的瞬态特性	276
6.1.2 表面势阱	277
6.1.3 三相CCD的工作	279
6.1.4 二相硅铝交迭栅CCD	280
6.2 器件结构	282
6.2.1 降低电极间隙势垒	282
6.2.2 减少时钟脉冲相数	284
6.2.3 减少界面态的影响	285
6.3 器件的输入和输出特性	287
6.3.1 输入方式	287
6.3.2 输出方式	290
6.4 CCD的特性参数	292
6.4.1 电荷转移效率	292
6.4.2 器件的工作频率	312
6.4.3 电荷存储容量	314

6.4.4 噪声	317
6.4.5 暗电流	325
6.4.6 功耗	329
参考文献	330
第七章 半导体太阳电池和光电探测器	332
7.1 PN结的光生伏特效应	332
7.1.1 光电转换的物理过程	332
7.1.2 光照下理想PN结方程和特性曲线	334
7.1.3 短路电流和开路电压	336
7.1.4 太阳电池的结构	338
7.2 太阳常数和大气质量	338
7.2.1 太阳常数和太阳光谱	338
7.2.2 大气质量	339
7.3 太阳电池的光电转换效率	340
7.3.1 理想PN结的光电转换效率	340
7.3.2 光电转换效率与材料参数的关系	342
7.3.3 吸收系数和收集系数	346
7.3.4 串连电阻和栅指状电极	347
7.4 高效太阳电池	347
7.4.1 绒面太阳电池	348
7.4.2 背表面场太阳电池	349
7.4.3 紫电池——浅结电池	351
7.5 太阳电池的光谱响应和辐照效应	352
7.5.1 太阳电池的光谱响应	352
7.5.2 太阳电池的辐照效应	353
7.6 其他形式的太阳电池	355
7.6.1 砷化镓异质面太阳电池	355
7.6.2 硫化镉-硫化亚铜异质结太阳电池	357
7.6.3 非晶硅太阳电池	358
7.6.4 MIS肖特基势垒太阳电池	361
7.7 半导体光电探测器	366
7.7.1 光电探测器的一般参数	366
7.7.2 光电导探测器	368
7.7.3 光伏探测器	373
7.7.4 雪崩光电探测器	377
参考文献	379
第八章 发光二极管和半导体激光器	382
8.1 发光过程中的激发与复合	383
8.1.1 发光过程中的激发	383
8.1.2 发光过程中的复合	384
8.2 辐射复合与非辐射复合	387

8.2.1	辐射复合	387
8.2.2	非辐射复合	394
8.3	发光二极管的材料、制备与特性	396
8.3.1	发光二极管的材料	396
8.3.2	发光二极管的制备	399
8.3.3	发光二极管的参数	400
8.4	红外上转换发光和异质结电致发光	408
8.4.1	红外上转换发光	409
8.4.2	异质结的电致发光	411
8.5	半导体激光器及其结构	413
8.6	半导体受激光发射条件	415
8.6.1	粒子数的反转分布	415
8.6.2	光学谐振腔	417
8.6.3	阈值条件	418
8.7	半导体激光器的输出光功率、转换效率和光谱	421
8.7.1	输出光功率和转换效率	421
8.7.2	光谱分布	423
8.8	半导体异质结激光器	425
8.8.1	单异质结激光器	426
8.8.2	双异质结激光器	427
8.8.3	分别限制光子和载流子异质结激光器	431
8.9	半导体激光器的模式	432
8.10	双异质结激光器的退化	436
8.10.1	快退化	436
8.10.2	慢退化	437
8.10.3	应力等对激光器寿命的影响	438
	参考文献	439
第九章	体效应器件	442
9.1	转移电子器件的物理基础	442
9.1.1	双谷模型和砷化镓的能带结构	442
9.1.2	在强电场作用下电子的谷间转移和速度-电场特性	444
9.1.3	能量弛豫现象	447
9.2	不稳定性和畴模	448
9.2.1	介电弛豫现象	448
9.2.2	高场畴的形成	449
9.2.3	稳定畴的分析	450
9.2.4	畴的形成条件	455
9.3	延迟畴模和猝灭畴模	456
9.3.1	延迟畴模	456
9.3.2	猝灭畴模	457
9.3.3	功率-频率特性的限制	457

9.4 限累模 (LSA 模) 和混合模	458
9.4.1 限累模及其实现条件	458
9.4.2 积累层	461
9.4.3 混合模	462
9.5 耿氏效应放大器	462
9.5.1 稳定放大器	462
9.5.2 渡越畴放大器	467
9.6 不同工作模式的关系、器件的结构、效率和功率	468
9.6.1 不同工作模式的关系	468
9.6.2 器件的结构	469
9.6.3 器件的效率	470
9.6.4 器件的功率	471
9.7 耿氏二极管的可靠性	472
9.7.1 突发失效	472
9.7.2 缓慢退化	472
9.7.3 为提高器件可靠性所作的工艺改进	474
参考文献	478

第一章 半导体物理基础

近几十年来,随着科学技术的发展,各种具有特殊性能的半导体器件不断涌现。所有这些器件都是根据半导体中的各种效应制成的,例如利用半导体PN结的单向导电效应、光电效应、雪崩倍增效应、隧道效应等,可以制成各种半导体结型器件;利用半导体中载流子的能谷转移效应,可以制成所谓体效应器件;利用半导体与其他材料之间的界面效应,可以制成各种界面器件等。

半导体中所呈现的各种效应,都是由半导体内部的电子运动产生的,因此要了解半导体器件的工作机理,就必须掌握构成半导体器件物理基础的半导体中的电子运动规律。为此,本章在固体物理的基础上扼要地叙述一下半导体的能带、载流子的分布及其输运等方面的内容,并给出对分析半导体器件工作机理和特性非常有用的各种公式、图表和数据,以使我们半导体的特性有一个基本的认识,并做为全书的物理基础。

1.1 半导体的能带

半导体的各种应用都和半导体中的电子状态有关。能带理论是描述半导体中的电子状态的基础。

1.1.1 能带的形成

本节从晶体中电子共有化运动、单电子近似和 k 空间等几个方面来说明能带的形成。

1. 晶体中电子的共有化运动^[1]

晶体是由大量的原子结合而成的,因此各个原子的电子轨道将有不同程度的交叠。电子不再局限于某个原子,而可能转移到其他原子上去,使电子可能在整个晶体中运动。晶体中电子的这种运动称为电子的共有化。共有化电子并非自由电子,它仍受原子运动的制约,即电子共有化运动只能在原子的相应轨道上进行。例如,各个原子的 $3s$ 轨道上的电子只能形成 $3s$ 轨道的共有化运动。

由于电子共有化,使得本来处于同一能量的电子发生了能量的差异。对于由 N 个原子组成的晶体,它的某一能级上的电子本来都具有相同的能量,但当它们转化为共有化状态之后,就各自有不同的能量了。也就是说,在这个能级附近出现 N 个新的能级,使这个能级由单一值分裂成 N 个新的能级。由于 N 个新能级彼此之间的差异很小,而 N 值又非常之大,于是 N 条新能级就变成了有一定宽度的能带。晶体中的电子都处于一定的能带中的某一共有化状态。象用能级概念描述孤立原子中的电子状态一样,能带是描述晶体中电子状态的重要方法。

由于原子能级彼此分立,由它分裂成的能带之间也互有间隔,不许电子存在的能量间

隔称为禁带，与原子内层轨道对应的能带和内层能级一样被电子占满，称为满带。与原子的价电子对应的能带称为价带，价带可能被填满，也可能未被填满。比价电子能级更靠外层的能级对应的能带全是空的，称为空带。最靠近价带的空带称为导带。半导体物理涉及的主要是价带、导带和它们之间的禁带的问题。人们常利用如图 1.1 所示的简化能带图来讨论这些问题。图中 E_c 表示导带底的能量， E_v 表示价带顶的能量， E_g 表示禁带宽度。图中向上表示电子能量的增加，向下表示空穴能量的增加。

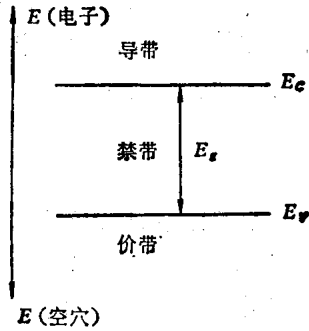


图 1.1 简化能带图

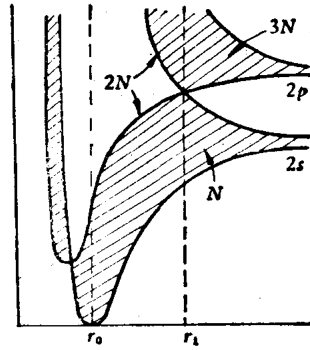


图 1.2 金刚石能带图

能带的宽窄由原子间距决定，而与组成晶体的原子数目无关。一般说来，外层轨道对应的能带较宽，说明它的共有化运动较强。原子数目 N 的大小只决定带中能级密集的程度。

能带与原子能级间并不一定总有一一对应的关系。当共有化运动很强时，能带可能很宽而发生能带间的交叠。图 1.2 为用量子力学方法算出的金刚石的能带与原子间距的关系^[2]。由图可以看出，随着原子间距的减小，能带宽度越来越大，在 $r = r_1$ 处 2p 能带与 2s 能带交叠起来。 r 进一步减小两能带再次分开，但分开的上下两能带不再与 2s 或 2p 对应，而是成为各有 $4N$ 个状态的新能带了。在金刚石中，实际原子间距 $r = r_0 = 2.35$ 埃处禁带宽度等于 5.47 电子伏特。金刚石 $4N$ 个价电子正好填满下面的能带使之成为满带，上面的带成为空带。

2. 单电子近似方法^[3]

量子力学方法可以对能带的形成给出理论上的说明。由于晶体中包含有大量的原子，在原子核与原子核之间、电子与电子之间、原子核与电子之间都有相互作用。欲建立这样一个多体问题的薛定格方程，并求出描述电子状态的精确解是很困难的，一般都采用各种近似方法。单电子近似方法是将周期排列的原子核看作静止不动，并认为每个电子都在原子核的固定的周期势场和其他电子形成的平均势场中运动。

满足单电子近似的一维薛定格方程是

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi = 0, \quad (1.1)$$

其中 ψ 是电子的波函数， m 是电子的质量， $V(x) = V(x + na)$ 是周期性势场，其中 a 为晶格常数， n 为整数。方程 (1.1) 的解是

$$\psi(x) = u_k(x)e^{i2\pi kx}, \quad (1.2)$$

其中 $u_k(x) = u_k(x + na)$ 。从而可知

$$\psi(x+na) = e^{i2\pi k(x+na)} u_k(x+na) = \psi(x) \cdot e^{i2\pi k_x na}. \quad (1.3)$$

由式(1.3)可知, 晶体中电子的波函数是波矢为 k 的平面波, 它的振幅受周期性势场的调制。波函数遍及整个晶体, 表示电子是共有化的。周期性函数 $u_k(x)$ 反映着电子受每个原子的影响, 指数部分反映共有化运动的特征。

式(1.3)表明, 波函数在晶体的各周期单元是完全相似的。由一单元过渡到另一单元波函数只改变相角 $e^{i2\pi k_x a}$, 而振幅不变。 k 值就描述这个位相差。因此, 电子的共有化运动状态可用 k 来描述。处于某一能带中的电子有 N 个共有化运动状态, 就对应应有 N 个不同的 k 值。由于晶体结构的周期性, 用 k 表示的波函数也有周期性。对于一维情况, 当 k 改变 $1/a$ 时不影响表示位相差的因子。如 $k = k_1$ 时位相差因子是 $e^{i2\pi k_1 a}$, 而 $k = k_1 + n/a$ 时的位相差因子为 $e^{i2\pi(k_1 + n/a)a} = e^{i2\pi k_1 a}$ 。这表明 k_1 和 $k_1 + n/a$ 两个状态的电子具有相同的波函数。所以, 描述晶体中电子的运动状态并不需要从 $-\infty$ 到 $+\infty$ 的全部 k 值, 而只要考虑从 $-1/2a$ 到 $1/2a$ 之间的 k 值即可。常称这个 k 值的区间为第一布里渊区。

3. k 空间和态密度

在第一布里渊区里 k 并不能连续取值, 而只能取一些分立的值。为了说明这种情况, 我们设想晶体中的电子被封闭于体积为 $V = L^3$ 的容器之中。电子虽能在其中作共有化运动却不能穿出容器, 因此电子共有化状态受边界条件的限制, 使 k 只能取分立值。作为零级近似。设薛定格方程中的势场等于一个平均值 \bar{V} , 则三维情况下的薛定格方程为

$$\nabla^2 \psi - \frac{2m}{\hbar^2} [E - \bar{V}] \psi = 0. \quad (1.4)$$

由此得到自由粒子的解

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i2\pi k \cdot r}, \quad (1.5)$$

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} = \bar{V} + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (1.6)$$

k 满足的边界条件是

$$\left. \begin{aligned} k_x &= \frac{n}{L}, \\ k_y &= \frac{l}{L}, \\ k_z &= \frac{m}{L}, \end{aligned} \right\} \quad (1.7)$$

其中 n, l, m 均为任意整数。式(1.7)表明, 晶体中的电子由于受到有限体积的限制, k 值只能取式(1.7)决定的分立值。

实用上常用几何方法标志晶体中电子的共有化运动状态。以 k_x, k_y, k_z 为轴画出一个三维“ k 空间”(如图 1.3 所示), 每一组 (n, l, m) 值对应 k 空间中的一个点, 有一个确定的 k 值就代表一个确定的电子共有化运动状态。

取不同的 (n, l, m) 值可在 k 空间中得到许多点, 它们就代表许多不同的电子状态。因此, k 空间中点的密度就代表电子的状态密度。根据式(1.7), k_x, k_y, k_z 轴上都是每隔 $1/L$ 有一个状态, 故在 $dk_x dk_y dk_z$ 内的状态数为

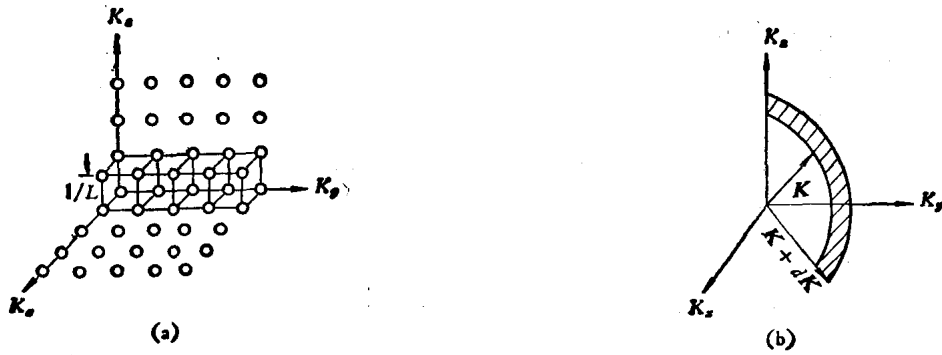


图1.3 k空间示意图

$$\frac{dk_x dk_y dk_z}{(1/L)^3} = V dk_x dk_y dk_z \quad (1.8)$$

可见在 k 空间状态是均匀分布的，其密度为晶体体积 V 。考虑到一个能级上可以容纳自旋相反的两个电子，故在小体元 dk 中可容纳的电子数为 $2Vdk$ 。而在 k 到 $k+dk$ 这个球壳中的状态数为 $4\pi k^2 V dk$ 。

现在求能量间隔 E 到 $E+dE$ 中的状态数。设 $Z(E)$ 为能量空间的状态密度。由于 E 和 k 有一一对应的关系，所以有

$$Z(E)dE = 4\pi k^2 V dk.$$

已知

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m, \quad dE = \hbar^2 k dk / m, \quad dk = mdE / \hbar^2 k, \quad k = (2mE)^{1/2} / \hbar,$$

所以有

$$Z(E)dE = \frac{4\pi m^3 V}{\hbar^3} (2m)^{1/2} E^{1/2} dE. \quad (1.9)$$

考虑到电子的自旋，可以得到单位体积中能量为 E 到 $E+dE$ 中的电子状态数为

$$Z(E)dE = 4\pi / \hbar^3 (2m)^{3/2} E^{1/2} dE, \quad (1.10)$$

其中 $Z(E) = 4\pi / \hbar^3 (2m)^{3/2} E^{1/2}$ ，称为状态密度，有时也称为能级密度。要注意的是，式中的 m 对于具体问题要换用相应的有效质量。

利用 k 空间的概念，一维晶格相当于“体积”为 Na 的晶体， k 空间即为 x 轴。它的第一布里渊区为 $-1/2a$ 到 $+1/2a$ ，总长度为 $1/a$ 。故第一布里渊区的状态数为 $(1/a)Na = N$ 。这表明一维晶格第一布里渊区允许能带的状态密度，等于组成晶体的原子数 N 。

三维晶格的情况是类似的。标志状态的 k 值也描述波函数在各个周期单元的位相差。描述所有状态也只需考虑 k 空间原点附近的一个有限区域，也称为第一布里渊区。这里不同的是 k 值的总数等于晶体的原胞数目 N 。金刚石结构的第一布里渊区的形状是个截角八面体。可以看成正八面体的六个角被截去后形成的14面体，原来的八个面变成正六边形，截去角的结果又形成六个正方形的面，如图1.4所示。

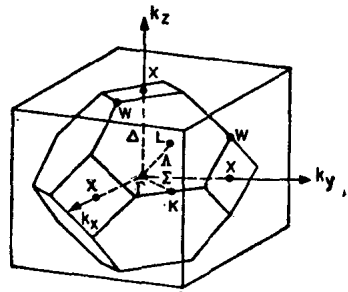


图1.4 金刚石晶格布里渊区
 Γ : $2\pi/a(0, 0, 0)$ 区的中心;
 L : $2\pi/a(1/2, 1/2, 1/2)$ 区边沿与 $\langle 111 \rangle$ 轴(Δ)交点;
 X : $2\pi/a(0, 0, 1)$ 区边沿与 $\langle 100 \rangle$ 轴(Δ)的交点;
 K : $2\pi/a(3/4, 3/4, 0)$ 区边沿与 $\langle 110 \rangle$ 轴(Σ)的交点。

根据量子力学的计算，满足一维薛定格方程 (1.1) 的 $E(k)$ 关系可用图 1.5 来表示。图 1.5(a) 为计算的 $E(k)$ 关系，它在 $k = \pm n/2a$ 处不连续，表明晶体中的电子与自由电子不同，出现能量的禁区。不连续区的宽度与禁带对应，其他区域则对应于允许能带。由于第一布里渊区以外的电子状态都可以用第一布里渊区内的电子状态来描述，故在图 1.5(b) 中把第一布里渊区以外的 $E(k)$ 曲线移动 $\pm n/a$ ，折合到第一布里渊区内。

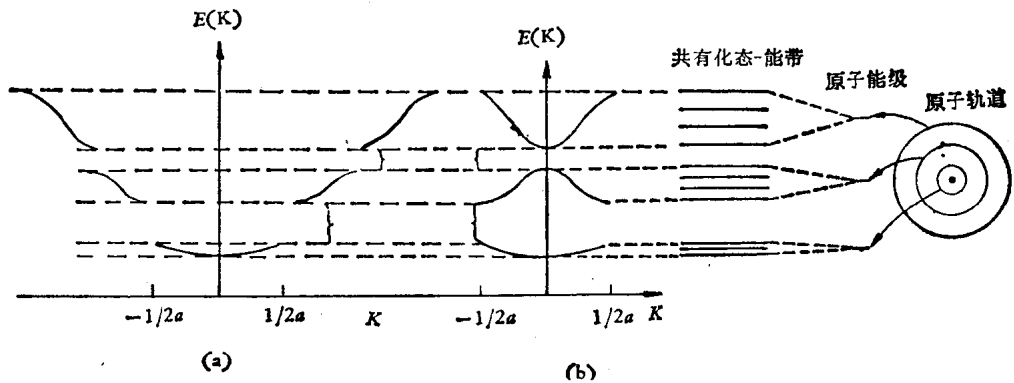


图1.5 $E(k)$ 关系和能带图

1.1.2 本征半导体和掺杂半导体

利用能带理论可以说明金属、半导体和绝缘体之间的区别，也可以说明半导体的导电性。应当指出，晶体中的电子虽然都分布于各个能带之中，但它们对电导的贡献却迥然不同。完全空的能带没有任何电子，自然对电导毫无贡献，而被电子完全填满的能带中的电子也对电导毫无贡献。由于 $E(k)$ 函数的对称性，在布里渊区总有 $E(k) = E(-k)$ 关系存在。如果 k 和 $-k$ 状态都有电子占据，由于它们的运动速度大小相等、方向相反 [$E(k)$ 的斜率为电子速度]，所以形成的电流刚好互相抵消。只有那些虽含有电子却未充满的能带才具有一定的导电性。

分析各种原子结合成晶体的情况时可以看出，金属外层电子的能带彼此重叠，中间没有禁带阻隔，所以金属具有良好的导电性能。图 1.6 为铜的能带，它的价带未被填满成为导带。金刚石和锗、硅有相同的能带结构，但它们却有不同禁带宽度，所以在室温下金刚石是绝缘体，而锗和硅却是半导体。纯净半导体的导电性主要来源于本征热激发。本征热激发是由于热运动使满带电子获得大于禁带宽度的能量而跃入空带的过程。正是由于锗、硅的禁带宽度比金刚石小得多，所以在室温下它们能产生比较多的电子。但是，由于室温下电子的热振动能 $kT = 0.026$ 电子伏特，比锗、硅的禁带宽度也小得多，所以它们的热激发产生的电子比金属

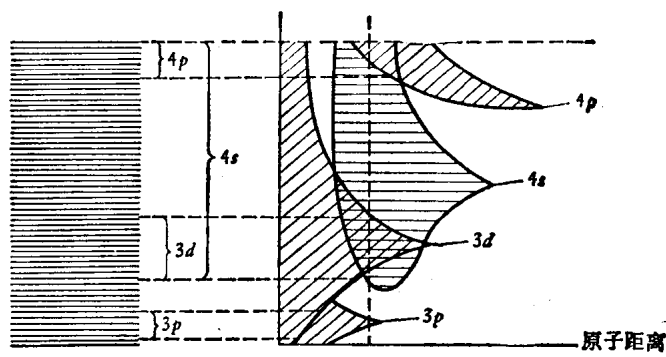


图1.6 铜的能带图(4)