

〔美〕施敏 著

# 半导体器件物理

PHYSICS OF SEMICONDUCTOR DEVICES  
SECOND EDITION

电子工业出版社

# 半 导 体 器 件 物 理

[美]施 敏 著

黄振岗 译

魏策军 校

電 子 工 業 出 版 社

## 内 容 提 要

本书深入阐释半导体器件的物理原理。全书分五篇，共十四章。第I篇为半导体物理；第II篇为双极器件，计有 $p-n$ 结二极管、双极晶体管、晶闸管三章；第III篇为单极器件，计有金属-半导体接触、MESFET和JFET、MOS二极管、MOSFET四章；第IV篇为特殊微波器件，计有隧道二极管、IMPATT和相关渡越时间二极管、转移电子器件三章；第V篇为光子器件，计有激光器和发光二极管、光电探测器、太阳电池三章。全书材料丰富、脉络分明、概念清晰、说理透彻。

本书适合从事半导体器件和集成电路研究和生产的广大科技人员和高等院校有关专业的师生阅读。

## 半 导 体 器 件 物 理

[美]施敏 著

责任编辑 丁光未

电子工业出版社出版（北京市万寿路）

北京昌平沙河建华印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

开本：787×1092 1/16 印张：39.25 字数：957千字

1987年12月第1版 1987年12月第1次印刷

印数：1—3,000册 定价：7.60元

ISBN·7—5053—0048—2/TN28

统一书号：15290·166

## 译 者 序

美籍华裔学者施敏(S. M. Sze)教授编著的《半导体器件物理》一书自1969年第一版问世后立即被欧美各大学有关院系采用,作为高年级学生教科书,从事半导体器件和集成电路研究和制造方面的工程师也以此书为主要参考书。本书旁征博引,搜罗宏富,涉及各种重要的半导体器件,并且概念清晰,说理透彻,就广度和深度而言,世界各国后来出版的同类书籍似都没有超出它的范围。本书第一版早在十年前就有日译本问世,在我国虽然没有正式出版发行中译本,但从各高等院校半导体专业组织编写的众多半导体器件物理讲义中,无疑能看出本书的巨大影响。

经过十余年日新月异的发展,又出现了许多新型半导体器件,在原理、结构和制造工艺方面均有重大创新,因此,本书第一版的许多内容就显得有些过时。作者在第一版的基础上保留精粹,增加了许多新颖的重要内容,并重新加以组织,在1981年出版了第二版。第二版把所有半导体器件划分为双极器件、单极器件、特殊微波器件和光子器件四大部分,然后逐一叙述。经如此提纲挈领后,与第一版相比,全书脉络更加分明,更有利于读者抓住要领,加深理解。

半导体器件是大规模集成电路的基石,随着信息化时代的到来,半导体器件和集成电路在我国国民经济中的地位愈来愈重要。相信本书中译本的出版,一定会使我国从事研究和生产半导体器件和集成电路的广大科技人员以及高等院校有关专业的师生大有裨益。

本书第一章由王谅儒翻译,以后各章均由黄振岗翻译在翻译过程中,对于书中出现的明显错误已随手作了订正,其中需要特别说明的皆加译者注简释,其余则概未加注,以免冗赘。全书由中国科学院半导体研究所魏策军同志审校。译者因水平所限,错漏之处在所难免,恳请各界读者不吝教正。

译 者

## 前 言

自1947年发明晶体管以来，半导体器件的领域迅速扩大。与此同时，半导体器件的文献也大量涌现，并且种类繁多。为了找到处理如此大量资料的门径，需要有一本书对器件物理和工作原理进行全面的介绍性说明，并附以参考文献。为满足这一要求，“半导体器件物理”第一版于1969年问世。多少有点意外的是，本书作为近代大学高年级学生和研究生课程的主要教科书之一，并作为从事半导体器件研究和开发的科学家的主要参考书长时间保有自己的地位。

近十年内，在半导体器件方面已经发表了四万多篇论文，在器件的概念和性能方面有许多突破。本书如欲继续达到既定的目标，显然要作相当大的修订。在“半导体器件物理”第二版中，对百分之八十的材料作了修订更新，同时将这些材料全部重新组织。这一版中援引了近一千篇参考文献，其中百分之七十是近十年内发表的；还收进了六百多幅技术插图，其中百分之六十五是新的。

本书包罗了大多数重要的半导体器件，这些器件可分成四组：双极器件、单极器件、微波器件和光子器件。在每章的引言中进行了简要的历史回顾。以后各节则介绍器件的物理原理和数学表述。各节按合乎逻辑的顺序排列而不太依赖于原始文献。每章与其余各章程度不同地相互独立，故读者可利用本书作为参考资料，教师可对半导体器件的各章重新排列，或选讲与所授课程相适合的若干章节。

在本书的写作过程中，许多人士曾对我提供帮助和支持。首先，我要向贝尔实验室的主管表示感谢，感谢他们向我提供写作本书的环境；如果没有他们的支持，本书是无法写成的。我从许多评论者的建议中得益非浅，他们是：贝尔实验室的J.M. Andrews 博士，D.E. Aspnes博士，W.E. Beadle博士，J.R. Brews博士，H.J. Boll博士，C.C. Chen博士，W. Fichtner博士，H. Fukui博士，H.K. Gummel博士，D. Kahng博士，T.P. Lee博士，M.P. Lepselter博士，E.H. Nicollian博士，W.C. Niehaus博士，P.T. Panousis博士，T. Pao博士，R.M. Ryder博士，M. Shoji博士，G.F. Smith博士，K.K. Thornber博士和S.H. Wemple博士；杜克大学的H.C. Casey教授，南加利福尼亚大学的C.R. Crowell教授，台湾大学的W.S. Feng教授，伦西拉多科性工业学院的S.K. Gandhi教授，加利福尼亚大学的H. Kroemer教授，普林斯顿大学的M. Lampert教授，瑞士联邦工学院的H. Melchior教授，麻萨诸塞工学院的R.H. Rediker教授，维也纳技术大学的H.W. Thim教授；IBM公司的L.L. Chang博士，普勒塞研究有限公司的G. Gibbons博士和通用电气公司的R.N. Hall博士。

我还要感谢D. McGrew女士，J. Chee女士，K.R. Funk女士和M. Lynch先生对全部手稿进行了技术编辑加工，感谢E. Labate，B.A. Stevens和H.H. Teitelbaum诸位先生

我进行了文献检索，感谢A. W. Talcott女士为我提供了经贝尔实验室 Murray Hill 图书馆编目的五千余篇半导体器件方面的技术文献。我也要感谢普迪尔大学情报和数据分析综合中心 (CINDAS) 的 W. H. Shafer 先生为我提供了迄今为止半导体性质方面的最新参考文献。我要感谢 J. T. McCarthy 女士和 V. J. Maye 女士在本书的修订阶段打印出不同的章节，感谢 G. Holmfelt 先生和贝尔实验室制图科的诸位科员绘制出本书所用的几百幅技术插图。凡要从已经发表的其它来源引用插图时，我都要征得版权持有人的允许，尽管后来对所有插图都作了修改并重新绘制。我感谢他们允许我这样做。我还要感谢 John Wiley & Sons 出版社的 G. Novotny 先生鼓励我写作这一新版本，感谢 V. Ajdzeris 女士，R. Farkas 女士和 R. Fletcher 先生安排本书的出版事宜。最后，我要特别感谢我的妻子 Therese Ling-yi，我的儿子 Raymond 和我的女儿 Julia 在许多方面的帮助，其中包括打印初稿并准备最后的手稿。

施 敏

于新泽西州 Murray Hill 1981年5月

## 引 言

本书分为五篇：

第 I 篇：半导体物理学和半导体性质概要

第 II 篇：双极器件

第 III 篇：单极器件

第 IV 篇：微波器件

第 V 篇：光子器件

我打算在第 I 篇第一章概括叙述半导体材料的性质，以此贯穿全书，作为理解和计算半导体器件特性的基础。在这一章，我简要介绍一下能带、载流子分布和输运性质，把重点放在三种最重要的半导体：锗 (Ge)，硅 (Si) 和砷化镓 (GaAs) 上。在第一章的插图和附录中都汇编了这三种半导体参数的推荐值或最精确值，以便于读者参考。

第 II 篇第二至四章讨论双极器件 (即电子和空穴都参与输运过程的器件)。第二章考虑主要器件工艺和  $p-n$  结特性。由于  $p-n$  结是构成大多数半导体器件的基本部分， $p-n$  结理论就成为半导体器件物理的基础。第三章讨论双极晶体管，即讨论两个紧密耦合  $p-n$  结之间的相互作用。双极晶体管是最重要的半导体器件之一。1947 年发明了双极晶体管，这标志着现代电子学纪元的开始。第四章讨论晶闸管，晶闸管基本上由三个紧密耦合的  $p-n$  结组成，形成一种  $p-n-p-n$  结构。晶闸管的功率控制能力有很宽的范围；晶闸管能控制从几毫安到几千安培的电流，能控制 5000 伏以上的电压。

第 III 篇的第五至八章讨论单极器件 (即只有一种载流子主要参与导电机构)。第五章的金属-半导体接触在电学上类似于单边突变  $p-n$  结，但它能作为一种具有固有快速响应的多数载流子器件而工作。在重掺杂半导体上的金属-半导体接触构成了欧姆接触最重要的形式。第六章描述的结型场效应晶体管 (JFET) 和金属-半导体场效应晶体管 (MESFET) 是极其类似的器件。二者都应用电场来控制平行于结而不是垂直于结的电流流动。第七、第八两章讨论表面物理和金属-氧化物-半导体 (MOS) 器件。了解与这些器件相联系的“界面陷阱”的知识极为重要，其重要性不仅在于这些器件本身，而且在于界面陷阱与所有其它半导体器件的稳定性和可靠性的关系。电荷耦合器件 (CCD) 以紧密耦合的 MOS 电容器组成，它特别适用于信息处理和图象传感。第八章讨论的金属-氧化物-半导体场效应晶体管 (MOSFET) 是超大规模集成电路 (VLSI) 中最重要的器件。MOSFET 被广泛地用于每一芯片上容纳成千上万个分立元件的半导体存储器和微处理器。

第 I V 篇的第九至十一章研究若干特殊微波器件。当  $p-n$  结两边都进行重掺杂，使结电场变得极强可供量子力学隧穿时，我们就可以看到隧道二极管性能的一些有趣特征 (第九章)。当  $p-n$  结或金属-半导体接触在雪崩状态下工作时，只要具备适当的条件，我们

就得到能产生微波辐射的崩越 (IMPATT) 二极管。IMPATT 二极管和若干相关器件的工作特性在第十章予以介绍。微波振荡可以根据导带中电子从高迁移率、较低能量的能谷转移到低迁移率、较高能量的能谷的机构产生。第十一章研究转移电子器件。

第 V 篇的第十二至十四章讨论光子器件 (即能探测、产生光能或能把光能转变为电能或具有相反作用的器件)。第十二章讨论发光二极管 (LED) 和半导体激光器。这两种器件都是光纤通信系统的重要光源。具有高量子效率和高响应速度的各种光电探测器在第十三章讨论。随着世界范围内能源需求的增加, 要求我们发展另外的能源。因为太阳电池能以高效率把阳光直接转变为电力, 故被看作是主要的选择之一。太阳电池的各种结构及其工作特性在第十四章予以研究。

关于符号问题, 我有下述意见: 为保持符号的简单性, 需要不止一次地使用简单的符号, 视不同的器件而赋予符号以不同的含义。例如, 对于双极晶体管, 符号  $\alpha$  被用作共基极电流增益; 对于光电探测器,  $\alpha$  被用作光吸收系数; 对于 IMPATT 二极管, 则被用作碰撞电离系数。我认为, 这种用法优于另外的用法, 在另外的用法中,  $\alpha$  只用一次, 然后要迫使人们寻找较复杂的符号作别的用途。然而在本书的每一章内, 所用的每个符号只有一种含义并在该符号初次出现时进行定义。通观全书, 有许多符号始终具有相同或相似的含义; 为便于参考起见, 各种符号均被收录在附录 A 中。

目前, 电子学领域特别是半导体器件领域, 充满着活力, 瞬息万变, 今天的概念一到明天可能就变得陈旧了。因此, 对于我们来说, 重要的是理解基本的物理过程, 并用足够的物理和数学基础知识武装我们自己, 以便透彻理解这些活跃领域的本质, 对之作出评价并接受来自这些领域的挑战。许多器件, 尤其是单极器件和光子器件仍处于深入研究的过程之中<sup>[1]</sup>。指出这一点是十分重要的。目前我们决没有完全了解这些器件的最终极限性能。我打算把本书介绍的材料作为一个基础。每章末尾列举的参考文献能够提供更多的资料。

### 参 考 文 献

- [1] S. M. Sze, "Semiconductor Device Development in the 1970s and 1980s — A perspective", Proc. IEEE, 69, 1121 (1981).



# 目 录

## 引 言

### 第 I 篇 半导体物理学

第一章 半导体物理学和半导体性质概要 .....	1
1.1 引言 .....	1
1.2 晶体结构 .....	1
1.3 能带 .....	4
1.4 热平衡时的载流子浓度 .....	7
1.5 载流子输运现象 .....	16
1.6 半导体的声子谱以及光学、热学和高场性质 .....	24
1.7 半导体器件工作的基本方程 .....	32

### 第 II 篇 双 极 器 件

第二章 $p-n$ 结二极管 .....	41
2.1 引言 .....	41
2.2 基本器件工艺 .....	41
2.3 耗尽区和耗尽电容 .....	48
2.4 电流-电压特性 .....	56
2.5 结的击穿 .....	65
2.6 瞬变特性和噪声 .....	74
2.7 端功能 .....	77
2.8 异质结 .....	84
第三章 双极晶体管 .....	91
3.1 引言 .....	91
3.2 静态特性 .....	91
3.3 微波晶体管 .....	108
3.4 功率晶体管 .....	118
3.5 开关晶体管 .....	122
3.6 相关的器件结构 .....	126
第四章 晶体闸流管 .....	133
4.1 引言 .....	133

4.2	基本特性	133
4.3	肖克莱二极管和三端晶闸管	146
4.4	相关的功率晶闸管	155
4.5	二极管交流开关和三极管交流开关	159
4.6	单结晶体管 and 触发晶闸管	162
4.7	场控晶闸管	164

### 第Ⅲ篇 单极器件

第五章	金属-半导体接触	169
5.1	引言	169
5.2	能带关系	169
5.3	肖特基效应	172
5.4	电流输运过程	176
5.5	势垒高度的特征	187
5.6	器件结构	207
5.7	欧姆接触	213
第六章	结型场效应晶体管和金属-半导体场效应晶体管	220
6.1	引言	220
6.2	基本的器件特性	221
6.3	一般特性	229
6.4	微波特性	241
6.5	相关的场效应器件	248
第七章	MIS二极管和电荷耦合器件	256
7.1	引言	256
7.2	理想的MIS二极管	256
7.3	Si-SiO <sub>2</sub> MOS二极管	269
7.4	电荷耦合器件	289
第八章	MOS场效应晶体管	307
8.1	引言	307
8.2	基本的器件特性	308
8.3	非均匀掺杂和埋沟器件	325
8.4	短沟道效应	335
8.5	MOSFET结构	347
8.6	非易失性存储器	353

### 第Ⅳ篇 特殊微波器件

第九章	隧道器件	365
-----	------	-----

9.1	引言 .....	365
9.2	隧道二极管 .....	366
9.3	反向二极管 .....	382
9.4	MIS隧道二极管 .....	388
9.5	MIS开关二极管 .....	392
9.6	MIM隧道二极管 .....	395
9.7	隧道晶体管 .....	400
<b>第十章</b>	<b>IMPATT和相关的渡越时间二极管 .....</b>	<b>406</b>
10.1	引言 .....	406
10.2	静态特性 .....	407
10.3	动态特性 .....	414
10.4	功率和效率 .....	421
10.5	噪声特性 .....	430
10.6	器件设计和性能 .....	434
10.7	BARITT和DOVETT二极管 .....	441
10.8	TRAPATT二极管 .....	451
<b>第十一章</b>	<b>转移电子器件 .....</b>	<b>459</b>
11.1	引言 .....	459
11.2	转移电子效应 .....	459
11.3	工作模式 .....	469
11.4	器件特性 .....	481

## 第V篇 光子器件

<b>第十二章</b>	<b>发光二极管和半导体激光器 .....</b>	<b>491</b>
12.1	引言 .....	491
12.2	辐射跃迁 .....	492
12.3	发光二极管 .....	496
12.4	半导体激光器物理 .....	508
12.5	激光器工作特性 .....	524
<b>第十三章</b>	<b>光电探测器 .....</b>	<b>540</b>
13.1	引言 .....	540
13.2	光电导体 .....	540
13.3	光电二极管 .....	544
13.4	雪崩光电二极管 .....	557
13.5	光电晶体管 .....	569
<b>第十四章</b>	<b>太阳电池 .....</b>	<b>575</b>
14.1	引言 .....	575
14.2	太阳辐射和理想的转换效率 .....	575

14.3	$p-n$ 结太阳电池	582
14.4	异质结, 界面和薄膜太阳电池	595
14.5	集光	605
<b>附录</b>		<b>612</b>
A.	符号表	612
B.	国际单位制	613
C.	单位词头	614
D.	希腊字母表	614
E.	物理常数	615
F.	晶格常数	615
G.	重要半导体的性质	616
H.	300K下Ge, Si和GaAs的性质	616
I.	300K下SiO <sub>2</sub> 和Si <sub>3</sub> N <sub>4</sub> 的性质	617

# 第 I 篇 半导体物理学

## 第一章 半导体物理学和半导体 性质概要

### 1.1 引言

半导体器件物理学与半导体物理学本身有天然的渊源关系。本章概述半导体物理学和半导体的性质。它仅代表大量半导体文献的一个很小的片断；只有与器件工作有关的论题才收进本章内。

如欲详细研究半导体物理学，读者可查阅 Dunlap<sup>[1]</sup>，Madelung<sup>[2]</sup>，Moll<sup>[3]</sup>，Moss<sup>[4]</sup> 和 Smith<sup>[5]</sup> 编写的标准教科书或参考书。

为了把大量资料浓缩在一章内，本章搜集并介绍了根据实验数据绘制的三张表和三十余幅插图。本章重点讲述三种最重要的半导体：锗（Ge），硅（Si）和砷化镓（GaAs）。锗和硅已得到广泛研究。近年来，对砷化镓也进行了深入的研究。砷化镓有与锗、硅不同的性质，已研究清楚的砷化镓的特殊性质是它有直接带隙可供光子器件之用，它还能进行谷间载流子输运并有高迁移率可产生微波。

### 1.2 晶体结构

结晶固体可用三个初基矢  $a$ 、 $b$  和  $c$  描述，当平移等于这三个基矢整数倍的矢量和的任一矢量时，晶体结构保持不变。换句话说，正格子位置可由下面的方程组决定<sup>[6]</sup>

$$R = ma + nb + pc \quad (1)$$

式中， $m$ 、 $n$  和  $p$  为整数。

图 1.1 示出若干重要的元胞（正格子）。许多重要的半导体具有属于四面体相的金刚石或闪锌矿晶格结构，亦即每个原子被位于四面体顶角的四个等距紧邻原子所包围。两个紧邻原子之间的键由自旋相反的两个电子形成。金刚石和闪锌矿晶格可认为是两个相互套构的面心立方晶格。对于金刚石晶格，譬如硅，所有原子均为硅原子；对于闪锌矿晶格，譬如砷化镓，一个子晶格为镓，另一子晶格为砷。砷化镓是一种 III-V 族化合物，因为它由周期表的 III 族和 V 族元素形成。多数 III-V 族化合物有闪锌矿晶体结构<sup>[7]</sup>，但是，有许多半导体（包括若干 III-V 族化合物）有纤锌矿或岩盐晶体结构。

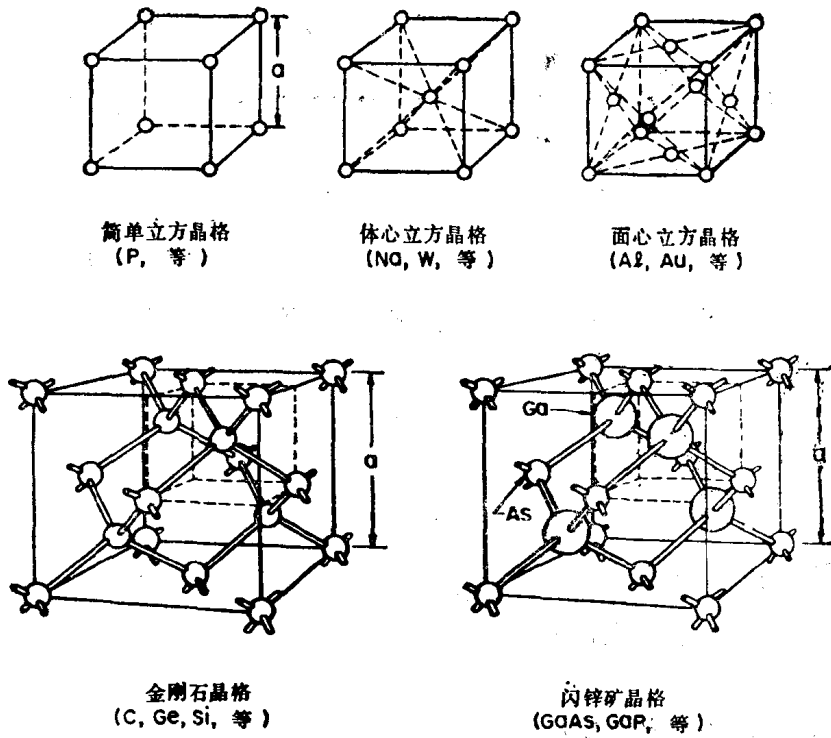


图 1.1 某些重要的元胞 (正格子) 及其代表性元素或化合物,  $a$  为晶格常数

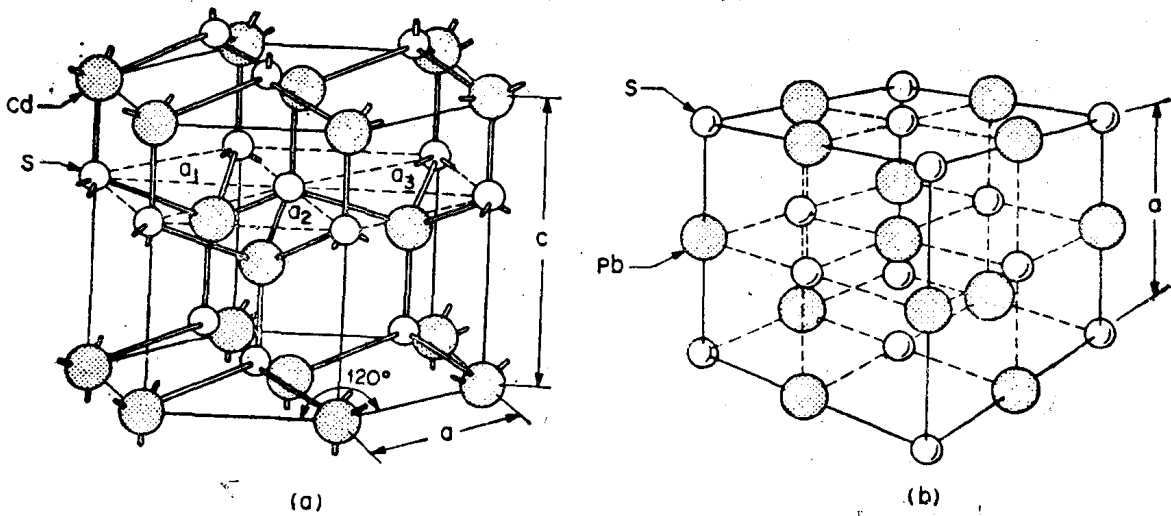


图 1.2 化合物半导体的两种元胞。(a) 纤锌矿晶格 (CdS, ZnS 等), (b) 岩盐晶格 (PbS, PbTe 等)

图 1.2 (a) 示出纤锌矿晶格, 它可看作是两个套构而成的六角密排晶格 (即镉的子晶格和硫的子晶格)。纤锌矿结构是四个等距紧邻原子的四面体形排列, 类似于闪锌矿结构。图 1.2 (b) 示出了岩盐晶格, 它可看作是两个套构而成的面心立方晶格。在岩盐结构中, 每个原子有六个紧邻原子。

附录F总结了重要半导体的晶格常数及这些半导体的晶体结构<sup>(63), (69)</sup>。请注意,有一些化合物,如硫化锌和硫化镉,可以兼有闪锌矿和纤锌矿两种晶体结构。

当一组正基矢给定时,一组倒格基矢 $a^*$ ,  $b^*$ ,  $c^*$ 可定义为

$$a^* \equiv 2\pi \frac{b \times c}{a \cdot b \times c}, \quad b^* \equiv 2\pi \frac{c \times a}{a \cdot b \times c}, \quad c^* \equiv 2\pi \frac{a \times b}{a \cdot b \times c} \quad (2)$$

故 $a \cdot a^* = 2\pi$ ;  $a \cdot b^* = 0$ , 等等; 总的倒格矢可表示为

$$G = ha^* + kb^* + lc^* \quad (3)$$

式中,  $h$ ,  $k$ 和 $l$ 为整数。

由此得出, 乘积 $G \cdot R = 2\pi \times$ 整数, 因而每个倒格矢垂直于正格子的一组晶面, 并且倒格子元胞的体积 $V_c^*$ 与正格子元胞的体积 $V_c$ 成反比, 即 $V_c^* = (2\pi)^3 / V_c$ , 其中,  $V_c \equiv a \cdot b \times c$ 。

确定晶体中不同晶面的一种方便的方法是采用密勒指数。密勒指数按如下方法确定: 首先求该晶面与三根主轴的截距, 并以晶格常数表示截距值; 然后取这三个数值的倒数, 并简约为有相同比值的三个最小整数。把结果括在圆括弧内得到 $(hkl)$ , 这就是一个晶面或一组平行晶面的密勒指数。图 1.3 示出立方晶格中重要晶面的密勒指数。

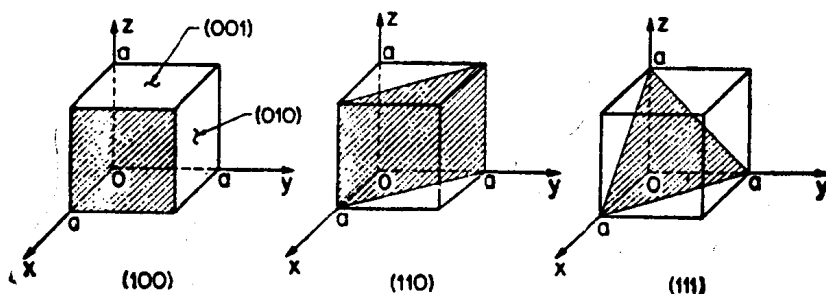


图 1.3 立方晶格中某些重要晶面的密勒指数

其它若干种习惯符号如下:

$(hkl)$ : 在原点负方向与 $a$ 轴相截所得的晶面。

$\{hkl\}$ : 等效对称面, 如对于立方对称的 $(100)$ ,  $(010)$ ,  $(001)$ ,  $(\bar{1}00)$ ,  $(0\bar{1}0)$ 和 $(00\bar{1})$ 诸面, 用 $\{100\}$ 表示。

$[hkl]$ : 晶向, 如对于 $a$ 轴, 用 $[100]$ 表示。

$\langle hkl \rangle$ : 整个一组等效方向。

$[a_1, a_2, a_3, c]$ : 六角晶格所用的符号。此处习惯采用四根轴(图 1.2a), 以 $c$ 轴作为 $[0001]$ 方向。

对于两种元素半导体——锗和硅, 最易断裂或解理的面是 $\{111\}$ 面, 砷化镓则与之不同, 虽有类似的晶格结构, 但含有少许离子键成分, 故能沿 $\{110\}$ 面解理。

倒格子的元胞可用维格纳-赛茨元胞表示。从倒格子中选定的中心点到紧邻的等效倒格点作垂直平分面, 如此得到的一组垂直平分面即可围成一个维格纳-赛茨元胞。面心立

方结构的一个典型例子示于图 1.4(a)<sup>[10]</sup>,如首先从中心点( $\Gamma$ )到立方体的八个顶角画直线,然后作垂直平分面,其结果就是立方体内的截角八面体,即维格纳-赛茨元胞。可以看出<sup>[11]</sup>,晶格常数为 $a$ 的面心立方正格子有间距为 $4\pi/a$ 的体心立方倒格子。因此,图 1.4(a)所示的维格纳-赛茨元胞是面心立方正格子的倒格子的元胞。同理,我们可以作六角结构的维格纳-赛茨元胞<sup>[12]</sup>;其结果示于图1.4(b)。图1.4所用的符号取自群论。其中的若干符号将用于1.3节。

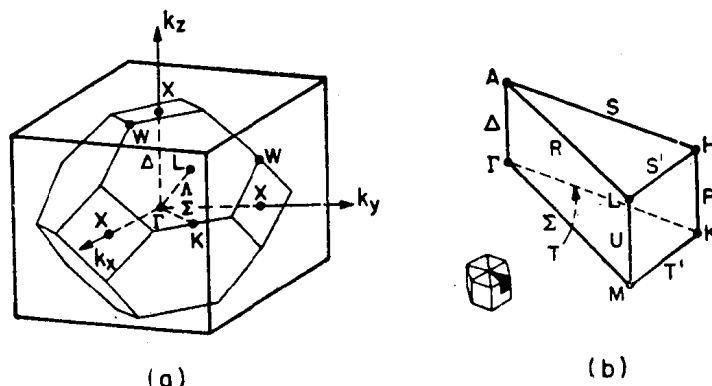


图 1.4 (a) 金刚石和闪锌矿晶格的布里渊区; (b) 纤锌矿晶格的布里渊区。图中标出最重要的对称点和对称线:  $\Gamma$ :  $2\pi/a(0, 0, 0)$ , 布里渊区中心;  $L$ :  $2\pi/a(1/2, 1/2, 1/2)$ , 沿 $\langle 111 \rangle$ 轴( $\Delta$ )的布里渊区边缘点;  $X$ :  $2\pi/a(0, 0, 1)$ , 沿 $\langle 100 \rangle$ 轴( $\Delta$ )的布里渊区边缘点;  $K$ :  $2\pi/a(3/4, 3/4, 0)$ , 沿 $(110)$ 轴( $\Sigma$ )的布里渊区边缘点。(引自 Brillouin 的参考文献 10; Cohen 的参考文献 12)

### 1.3 能 带

结晶固体的能带结构,即能量-动量( $E-k$ )关系通常用求解单电子近似问题的薛定谔方程得到。作为能带结构基础的最重要定理之一是布洛赫定理。布洛赫定理说,若势能 $V(r)$ 为周期函数,其周期为晶格周期,则薛定谔方程<sup>[11], [13]</sup>

$$\left[ \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) \right] \phi_k(r) = E_k \phi_k(r) \quad (4)$$

的解 $\phi_k(r)$ 有下列形式

$$\phi_k(r) = e^{ik \cdot r} U_n(k, r) = \text{布洛赫函数} \quad (5)$$

式中,  $U_n(k, r)$  为  $r$  的周期函数, 其周期为正格子的周期,  $n$  为能带指数。

从布洛赫定理可见, 在倒格子内, 能量  $E_k$  为周期函数, 即  $E_k = E_{k+G}$ , 其中,  $G$  由方程 3 给出。对于给定的能带指数, 只用倒格子元胞内的  $K$  就足以唯一地标示能量。标准习惯是采取倒格子内的维格纳-赛茨元胞(图 1.4)。这种元胞称为布里渊区或第一布里渊区<sup>[10]</sup>。显然, 我们能将倒空间内的任何动量  $k$  约化为布里渊区内的一个点, 布里渊区内的任何能态可在约化区内标出。

金刚石和闪锌矿晶格的布里渊区与面心立方晶格的布里渊区相同, 如图 1.4a 所示。纤



锌矿晶格的布里渊区如图1.4b所示，图中还表示出最重要的对称点和对称线，如布里渊区的中心 $[\Gamma = 2\pi/a(0, 0, 0)]$ ， $\langle 111 \rangle$ 轴( $\Lambda$ )及其与布里渊区边缘的交点 $[L = 2\pi/a(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})]$ ， $\langle 100 \rangle$ 轴( $\Delta$ )及其交点 $[X = 2\pi/a(0, 0, 1)]$ ， $\langle 110 \rangle$ 轴( $\Sigma$ )及其交点 $[K = 2\pi/a(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0)]$ 。

已采用各种数值方法对固体的能带进行了理论研究。对于半导体来说，最常用的三种方法是正交平面波法<sup>[14]、[15]</sup>，赝势法<sup>[16]</sup>和 $k \cdot p$ 法<sup>[5]</sup>。Ge, Si和GaAs能带结构的最新研究成果示于图1.5<sup>[17]</sup>。请注意，对于任何半导体，都有一个禁止能量区，在禁止区内不能存在允许的能态。在这一能隙的上方和下方允许有能量区或能带。上能带称为导带；下能带称为价带。导带最低能量与价带最高能量的间隙称为带隙 $E_g$ ，在半导体物理学中，带隙是最重要的参数。在讨论能带结构的细节以前，我们首先考虑简化了的能带图，如图1.6所示。在该图中，导带底记作 $E_c$ ，价带顶记作 $E_v$ 。当向上量度时，习惯上把电子能量定义为正；当向下量度时，空穴能量为正。某些重要半导体的带隙列于<sup>[8]、[18]</sup>附录G。

当薛定谔方程中的自旋可以忽略时，闪锌矿结构的价带由四个子能带组成；当计入自旋时，每个能带加倍。四个子能带中的三个在 $k=0$ （即 $\Gamma$ 点）处简并，形成价带的上沿，第四个子能带则形成带底。而且，自旋-轨道相互作用使能带在 $k=0$ 处分裂。如图1.5所示，沿给定的方向，两个价带顶可近似地用两个有不同曲率的抛物面带拟合：重空穴带（有较小 $\partial^2 E/\partial k^2$ 的较宽能带），轻空穴带（有较大 $\partial^2 E/\partial k^2$ 的较窄能带）。有效质量通常为张量，张量元 $m_{ij}^*$ ，定义为

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \quad (6)$$

若干重要半导体的有效质量列于附录G。

导带由许多子能带组成（图1.5）。导带底可以沿 $\langle 111 \rangle$ 轴（ $\Lambda$ 或 $L$ ），沿 $\langle 100 \rangle$ 轴（ $\Delta$ 或 $X$ ）出现，或在 $k=0$ （ $\Gamma$ ）处出现。单凭对称考虑决定不了导带底的位置。然而实验结果表明：对Ge而言，导带底沿 $\langle 111 \rangle$ 轴；对Si而言，导带底沿 $\langle 100 \rangle$ 轴；对GaAs而言，导带底在 $k=0$ 处。等能面形状如图1.7所示<sup>[19]</sup>。对于Ge，沿 $\langle 111 \rangle$ 轴有八个旋转半椭球等能面。布里渊区边界在各椭球中央，等能面以各 $L$ 点为中心，作成四个完整的椭球。对于Si，沿 $\langle 100 \rangle$ 轴有六个椭球，各椭球球心位于距布里渊区中心约四分之三处。对于GaAs，等能面为球面，球心就在布里渊区中心。把实验结果与抛物面导带底相拟合，得到电子有效质量；对于GaAs，有一个有效质量，对于Ge和Si，各有两个有效质量：沿对称轴的 $m_i^*$ 和与对称轴相垂直的 $m_j^*$ 。这些值也列于附录G。

在室温和常压下，Ge能隙值为0.66eV，Si能隙值为1.12eV，GaAs能隙值为1.42eV。上述数值是对高纯材料而言的。对于重掺杂材料，能隙变窄。实验结果表明，大多数半导体的能隙随温度的升高而减少。Ge, Si和GaAs的带隙随温度的变化示于图1.8<sup>[20]</sup>。对于这三种半导体，在0K下，其带隙分别接近于0.743, 1.17和1.519eV。带隙随温度的变化可用一个普适函数 $E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / (T + \beta)$ 近似表示，式中，