



GH

高 等 学 校 规 划 教 材
工 科 电 子 类

**BANDAOTI
GUANG
DIANZIXUE**

半导体光电子学

黄德修

电子科技大学出版社

TN307

H83

441068

半导体光电子学

黄德修

电子科技大学出版社

• 1994 •

[川]新登字(016)

内 容 提 要

本书详细论述了半导体中光子-电子相互作用的基本理论,在此基础上分析了由这种相互作用所产生的一些重要效应以及利用这些效应得到的一些在光纤通信和其它光信息技术中常用的光电子器件(如半导体激光器、发光二极管和半导体光探测器等);扼要介绍了一些对本学科产生重要影响的前沿课题。

该书可作为光电子技术或相近专业本科生的教材,也可作为有关专业研究生的教学参考书以及供有关工程技术人员参考。

D201/118

半 导 体 光 电 子 学

黄德修 编著

*

电子科技大学出版社
(中国成都建设北路二段4号)
电子科技大学印刷厂印刷
四川省新华书店发行

*

开本 787×1092 1/16 印张 15.25 字数 377千字
版次 1989年9月第一版 印次 1994年3月第二次印刷
印数 1801-3300册

中国标准书号 ISBN7-81016-151-2/TN·41

定价:9.80元

出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作分工的规定,我部承担了全国高等学校、中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力,有关出版社的紧密配合,从1978年至1985年,已编审、出版了两轮教材,正在陆续供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要,贯彻“努力提高教材质量,逐步实现教材多样化,增加不同品种、不同层次、不同学术观点、不同风格、不同改革试验的教材”的精神,我部所属的七个高等学校教材编审委员会和两个中等专业学校教材编审委员会,在总结前两轮教材工作的基础上,结合教育形势的发展和教学改革的需要,制订了1986~1990年的“七五”(第三轮)教材编审出版规划。列入规划的教材、实验教材、教学参考书等近400种选题。这批教材的评选推荐和编写工作由各编委会直接组织进行。

这批教材的书稿,是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐,由编审委员会(小组)评选择优产生出来的。广大编审者、各编审委员会和有关出版社为保证教材的出版和提高教材的质量,作出了不懈的努力。

限于水平和经验,这批教材的编审、出版工作还会有缺点和不足之处,希望使用教材的单位,广大教师和同学积极提出批评建议,共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

机械电子工业部
电子类教材办公室

前 言

本教材系按电子工业部制定的工科电子类专业教材 1986~1990 年编审出版规划,由电子物理与器件教材编审委员会激光编审小组组织征稿、评选、推荐出版的。

本教材由华中理工大学黄德修同志编写,由清华大学江剑平老师主审。

本课程的参考学时数为 60 学时,其主要内容为半导体中光子-电子相互作用的基本理论、几种跃迁速率及其相互关系,并由此导出粒子数反转条件、加强电子-光子相互作用的异质结构及由异质结所构成的一些半导体光电子学器件、半导体光电子学的某些正在发展的学科前沿课题。

北京大学王舒民老师参加了本教材的审阅工作,提出了许多宝贵意见,在此表示诚挚的感谢。余思远、黄慕珍、邓丽刚、裴敏、张素娥、刘雪峰等同志为本书稿的整理给予了很多帮助,在此一并致谢。由于编者水平有限,书中难免存在缺点和错误,愿望广大读者批评指正。

该书可作为光电子技术专业本科生教材,也可作为研究生的参考书以及供有关工程技术人员参考。

编者

于华中理工大学

绪 论

半导体光电子学是研究半导体中光子与电子相互作用、光能与电能相互转换的一门学科。

早在上一世纪就在半导体中观察到了光吸收与光电导,并用这些光电效应来定量分析涉及到光电子学的一些物理过程。然而,半导体光电子学能发展成现在这样一门内容极为丰富且具有强大生命力的学科,首先应归功于半导体激光器的出现和发展。1961年苏联科学院院士巴索夫首先公开提出在半导体材料中产生受激发射的理论。次年,苏联列别捷夫物理研究所、美国麻省理工学院(MIT)、国际商业机器公司(IBM)、通用电话和电子仪器公司(GE&E)都分别研制出了半导体激光器,这是一种高效率的电子-光子转换器件。但当时的这种同质结激光器只能在液氮温度(77K)下才能工作。1970年苏联和美国所研制的双异质结半导体激光器实现了室温下能连续工作,使半导体中的光-电子相互作用更为有效。同年,美国康宁公司的光纤损耗大幅度下降到 20dB/km。因此,1970年是光纤通信发展史上划时代的一年,也是半导体光电子学发展的又一个里程碑。光纤通信促进了半导体光电子学的发展,光纤通信系统中包含了一些最典型的半导体光电子器件,如在光发射机中包含有将电子-光子直接转换的半导体激光器和发光二极管,光接收机中有量子效率高的、将光子-电子直接转换的光电探测器。半导体光电子学的不断发展不但促使光纤通信更新换代,同时也促使光盘技术、光复印、光计算等信息处理技术的蓬勃发展。

量子阱的理论和实践又把半导体光电子学推向一个新的高度,使半导体的光子-电子相互作用进一步加强,出现了许多块状半导体所不具备的重要特点,使半导体光电子学器件具有新的特色。

半导体光电子学所研究的是速度最快、光子-电子转换效率极高、覆盖波段最广的光电子效应及光电子器件。应该说,半导体光电子学仍是一门方兴未艾的学科,其开发潜力是不言而喻的。

半导体光电子学是一门发展极为迅速的边缘科学,涉及到量子力学、固体物理、半导体物理学等基础学科,也涉及到电子学、结晶学和基础光学等方面的知识。同时,半导体光电子学也是一门实践性很强的应用学科,不断涌现的新型光电子器件,极大地丰富了半导体光电子学的内容。尽管编者力图搜集一些这一学科的最新成果,但限于水平,实在难以跟上其日新月异的形式。如能以此教材作为对这一学科的入门,编者甚为欣慰。

目 录

绪论

第一章 半导体中光子-电子的相互作用

§ 1.1 半导体中量子跃迁的特点	(1)
§ 1.2 直接带隙与间接带隙跃迁	(2)
§ 1.3 光子密度分布与能量分布	(10)
§ 1.4 电子态密度与占据几率	(12)
§ 1.5 跃迁速率与爱因斯坦关系	(16)
§ 1.6 半导体中的载流子复合	(21)
§ 1.7 增益系数与电流密度的关系	(30)
思考与习题	(37)
参考文献	(38)

第二章 异质结

§ 2.1 异质结及其能带图	(39)
§ 2.2 异质结在半导体光电子学器件中的作用	(44)
§ 2.3 异质结中的晶格匹配	(45)
§ 2.4 对注入激光器异质结材料的要求	(50)
§ 2.5 异质结对载流子的限制	(58)
思考与习题	(65)
参考文献	(65)

第三章 平板介质光波导理论

引言	(67)
§ 3.1 光波的电磁场理论	(67)
§ 3.2 光在平板介质波导中的传输特性	(72)
§ 3.3 矩形介质波导	(83)
思考与习题	(86)
参考文献	(87)

第四章 异质结半导体激光器

§ 4.1 概述	(88)
§ 4.2 光子在谐振腔内的振荡	(89)
§ 4.3 在同质结基础上发展的异质结激光器	(91)

§ 4.4 条形半导体激光器	(95)
§ 4.5 条形激光器中的增益波导	(102)
§ 4.6 可见光半导体激光器	(108)
§ 4.7 分布反馈(DFB)半导体激光器	(111)
思考与习题	(118)
参考文献	(118)
第五章 半导体激光器的性能	
§ 5.1 半导体激光器的阈值特性	(120)
§ 5.2 半导体激光器的效率	(125)
§ 5.3 半导体激光器的远场特性	(128)
§ 5.4 半导体激光器的模式特性	(132)
§ 5.5 半导体激光器的光谱线宽	(140)
§ 5.6 半导体激光器的瞬态特性	(144)
§ 5.7 半导体激光器的退化和失效	(153)
思考与习题	(157)
参考文献	(158)
第六章 半导体发光二极管	
§ 6.1 概述	(160)
§ 6.2 半导体发光二极管的结构	(161)
§ 6.3 半导体发光二极管的性能	(163)
§ 6.4 半导体发光二极管的调制特性	(167)
思考与习题	(170)
参考文献	(170)
第七章 半导体中的光吸收和光探测器	
§ 7.1 本征吸收	(171)
§ 7.2 半导体中的其它光吸收	(177)
§ 7.3 半导体光电探测器的材料和性能参数	(184)
§ 7.4 无内部倍增的半导体光探测器	(186)
§ 7.5 半导体雪崩光电二极管(APD)	(190)
思考与习题	(198)
参考文献	(198)
第八章 发展中的半导体光电子学	
§ 8.1 概述	(200)
§ 8.2 量子阱及其在光电子学中的应用	(201)
§ 8.3 半导体激光放大器	(214)
§ 8.4 半导体的非线性效应	(220)

§ 8.5 半导体的光电子集成	(229)
思考与习题	(234)
参考文献	(234)

目 录

第一章 绪论	1
第二章 半导体物理基础	10
第三章 半导体器件物理	25
第四章 集成半导体器件	45
第五章 光电子器件	65
第六章 光电子集成	85
第七章 光电子集成	105
第八章 光电子集成	125
第九章 光电子集成	145
第十章 光电子集成	165
第十一章 光电子集成	185
第十二章 光电子集成	205
第十三章 光电子集成	225
第十四章 光电子集成	245
第十五章 光电子集成	265
第十六章 光电子集成	285
第十七章 光电子集成	305
第十八章 光电子集成	325
第十九章 光电子集成	345
第二十章 光电子集成	365
第二十一章 光电子集成	385
第二十二章 光电子集成	405
第二十三章 光电子集成	425
第二十四章 光电子集成	445
第二十五章 光电子集成	465
第二十六章 光电子集成	485
第二十七章 光电子集成	505
第二十八章 光电子集成	525
第二十九章 光电子集成	545
第三十章 光电子集成	565
第三十一章 光电子集成	585
第三十二章 光电子集成	605
第三十三章 光电子集成	625
第三十四章 光电子集成	645
第三十五章 光电子集成	665
第三十六章 光电子集成	685
第三十七章 光电子集成	705
第三十八章 光电子集成	725
第三十九章 光电子集成	745
第四十章 光电子集成	765
第四十一章 光电子集成	785
第四十二章 光电子集成	805
第四十三章 光电子集成	825
第四十四章 光电子集成	845
第四十五章 光电子集成	865
第四十六章 光电子集成	885
第四十七章 光电子集成	905
第四十八章 光电子集成	925
第四十九章 光电子集成	945
第五十章 光电子集成	965
第五十一章 光电子集成	985
第五十二章 光电子集成	1005

第一章 半导体中光子-电子的互作用

§ 1.1 半导体中量子跃迁的特点

在光电子学中，一切与光有关的现象从本质上都可以认为是量子现象，或者说是物质中有关量子互作用和能量相互转换的结果，它是与量子跃迁联系在一起的。与通常两能级系统中跃迁发生在分立能级的单个电子态之间的情况不同，在半导体中与光有关的量子（电子或空穴）跃迁是发生在导带与价带之间。与这种跃迁相联系的光现象有三种，即

1. 受激吸收：当适当能量的光子与半导体互作用，并把能量传递给价带中的电子，使之跃迁到导带，从而在半导体中出现电子-空穴对，这就是受激吸收。它是光电导、光探测器的的工作原理，如图 1.1-1(a)所示。

2. 自发发射：在热平衡下，如果在半导体的导带与价带中分别有一定数量的电子与空穴，导带中电子以一定的几率与价带中空穴复合并以光子形式放出复合所产生的能量，则

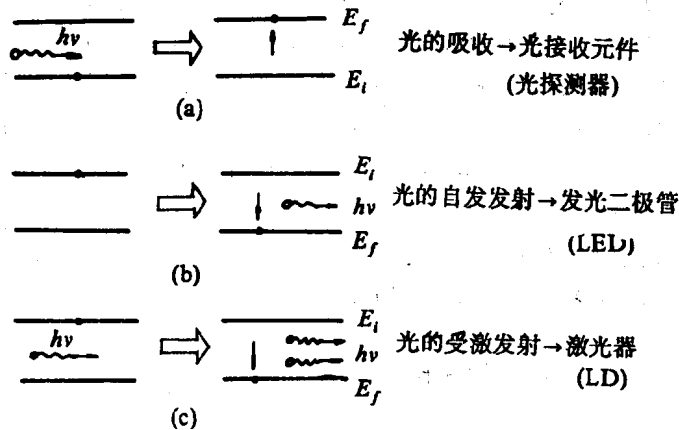


图 1.1-1 在半导体中与跃迁有关的三种光效应
(E_i 为跃迁初态能量, E_f 为跃迁终态能量)

称这一过程为自发发射跃迁，这是半导体发光二极管(LED)的工作原理，如图 1.1-1(b)所示。

3. 受激发射：若上述导带电子与价带空穴复合过程不是自发的，而是在适当能量的光激励下进行的，则由复合产生的光子就与激发该过程的光子有完全相同的特性（包括频率、相位和偏振等），这种跃迁过程称为受激发射。这是半导体激光器(LD)的工作原理，如图 1.1-1(c)所示。

显然，上述三种过程是相互联系但又有区别。受激吸收与受激发射是互逆的跃迁过程，而受激发射与自发发射的区别在于这种辐射跃迁中是否有外来光子的参与。而且，在实际

的光电子器件中，有可能存在上述一种或并存两种、三种跃迁过程，只是在一定条件下某一跃迁过程占主导地位罢了。以后还将看到，一些常用的半导体激光器、发光二极管和半导体光探测器在材料和结构上有一些共同之处。事实上，半导体激光器在一定工作条件下（例如在零偏压下）可用来作光探测器；而在半导体激光器解理面完全增透的情况下，它将呈现出自发发射的特性。

正是由于半导体中的量子跃迁不是发生在分立的、有限的电子态之间，而是发生在非局部能级的导带与价带之间，因而使半导体在光电子学中有异于通常两能级系统的突出特点和重要地位。

1. 半导体能带中存在高的电子态密度，因而在半导体中有可能具有很高的量子跃迁速率。可以得到比其它气体或固体激光工作物质高几个数量级的光增益系数（可达 $50 \sim 100 \text{cm}^{-1}$ ）。

2. 在半导体同一能带内处在不同激励状态的电子态之间存在相当大的相互作用（或大的公有化运动），这种相互作用碰撞过程的时间常数与辐射过程的时间常数相比是很短的，因而能维持每个带内激励态之间的准平衡，一旦由于电子跃迁留下的空态，将迅速由其它原来未包括在跃迁过程中的电子所补充，这种载流子再分布过程几乎是瞬时完成的。因此，半导体激光器或其它光电子器件有很高的量子效率和很好的高频响应特性。

3. 半导体中的电子态可以通过扩散或传导在材料中传播，可以将载流子直接注入发光二极管或激光器的有源区中，因而有很高的能量转换效率。

4. 在两能级的激光系统中，每一处于激发态的电子有它唯一返回的基态（即某一特定的原子态）。在理想的本征半导体（或电离能非常小的杂质半导体）中，这一跃迁选择定则还能成立，即每一被激发到导带的电子，存在唯一容许它返回的价带态。而实际上，由于半导体材料本身不纯或在载流子之间存在相互作用，跃迁选择定则受到松弛或不严格，电子跃迁发生在大量的导带电子与价带空穴之间。这种结果所造成的影响之一是使半导体激光器的光谱线宽较宽。

以上所述的只是半导体中与量子跃迁有关的一些特点。至于跃迁所需遵守的定则，跃迁速率及其影响因素将在以下各节详细分析。

§ 1.2 直接带隙与间接带隙跃迁^①

一、概述

上节所述的电子在半导体能带之间的跃迁过程，实质上是非平衡载流子的产生与复合过程，跃迁速率取决于与跃迁有关的初态、终态的细节。按照量子力学原理，半导体中的电子态是用含有与晶格周期有关的波函数来描述的，其电子波函数的波矢量 \mathbf{k} ^① 是一个重要的状态变量。一般说，半导体能带中电子的能量 E 和波矢量 \mathbf{k} 之间是一个非常复杂的、多极值的关系，并表现出复杂的能带结构。半导体的能带结构因材料而异。图 1.2-1 表示出 Ge、Si 和 GaAs 三种半导体的能带结构 ($E \sim \mathbf{k}$ 图)。电子的跃迁发生在导带能量极小值和价带能

① 在该书中用黑正体字母表示矢量。

量极大值之间。如果电子跃迁的初、终态对应着布里渊区的同一波矢 k ，则在能带图上表现为垂直方向的跃迁，故称这种跃迁为垂直跃迁，如同电子在 GaAs 等多数 III-V 族和 I-VI 族化合物半导体中跃迁的情况；相反，若跃迁所涉及的初、终态不对应同一波矢 k ，且其差值大于晶格常数的倒数，则由能带图可以看出，电子在导带极小值与价带极大值之间的跃迁为非垂直方向，因而得名非垂直跃迁，电子在 Ge、Si 中的跃迁就属于这种情况。GaAs 等多数半导体中的垂直跃迁对应着布里渊区的中心点 (Γ)，此处的 $k=0$ 。而另一些垂直跃迁半导体（如 IV-VI 族化合物）则有多个导带能量极小值和价带能量极大值与布里渊区中心呈对称分布，这种简并态使同一 k 值的态密度增加。

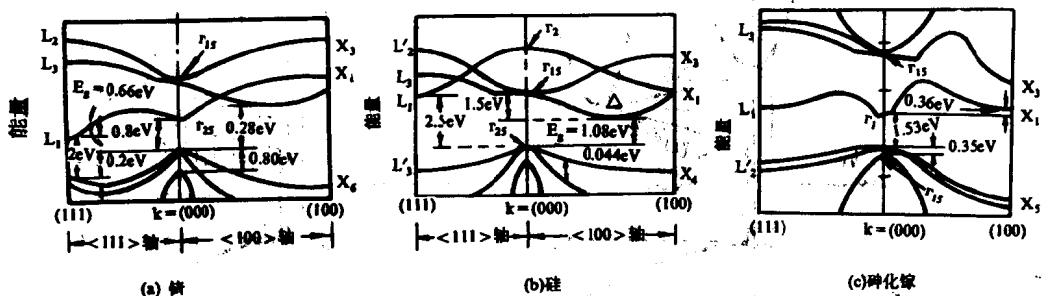


图 1.2-1 Ge、Si 和 GaAs 的能带图

不管是垂直跃迁还是非垂直跃迁，也不论是吸收光子还是发射光子，量子系统总的动量和能量必须守恒，这就叫跃迁的 k 选择定则。设与电子跃迁有关的初态能量和动量分别为 E_i 和 $\hbar k_i$ ，而终态的能量和动量分别为 E_f 和 $\hbar k_f$ ，进一步假设跃迁过程只涉及一个光子，则上述能量和动量守恒定律可表示为

$$E_i - E_f - \hbar\nu = 0 \quad (1.2-1)$$

$$\hbar(k_i - k_f - k_\gamma) = 0 \quad (1.2-2)$$

式中 $\hbar\nu$ 为光子的能量， $\hbar k_\gamma$ 为光子的动量。光子的波数是很小的，例如波长为 $1\mu\text{m}$ 时， $k_\gamma \approx 6 \times 10^4 \text{cm}^{-1} \ll \pi/a$ （布里渊区边界的波数， a 为晶格常数），因而可以将光子的动量忽略不计，由式(1.2-2)有 $k_i = k_f$ ，这正是垂直跃迁的表述。由式(1.2-1)和式(1.2-2)所表示的能量和动量守恒定律只适合于仅有电子、空穴和光子这三种量子参与的垂直跃迁。因为这种守恒是它们之间直接的、自持的平衡，故又称垂直跃迁为直接带隙跃迁或直接跃迁。从量子力学的观点来看，这种跃迁属一级微扰过程，因而有较高的跃迁几率，所有用作半导体光辐射器件（LD 和 LED）的有源区材料必须选用直接带隙跃迁半导体。

如果半导体中电子跃迁的初态和终态的 k 值不相等，即 $k_i \neq k_f$ ，这时在导带底与价带顶之间的跃迁就不遵守由式(1.2-2)所表示的准动量守恒，但实验上却观察到电子由价带顶到导带底跃迁所引起的吸收，所以一定有另外的过程使得跃迁的初态和终态不为同一 k 值时仍能满足准动量守恒，这就是有声子参与的吸收与发射过程。由于多声子过程较单声子过程发生的几率小得多，故在此只考虑单声子参与的跃迁过程。如果令声子的波矢为 k_s ，这时的准动量守恒变为

$$\hbar(k_i - k_f - k_s \pm k_\gamma) = 0 \quad (1.2-3)$$

如果略去光子的动量。则有

$$\hbar(k_i - k_f \pm k_s) = 0 \quad (1.2-4)$$

与此过程相对应的能量守恒为

$$E_i - E_f - h\nu \pm \hbar\omega_s = 0 \quad (1.2-5)$$

式中 $\hbar\omega_s$ 表示声子的能量，符号“±”有双重意义，若由吸收光子所激发的电子由价带顶到导带底的跃迁（受激吸收），则式中的正号代表吸收声子而负号代表发射声子，如图 1.2-2

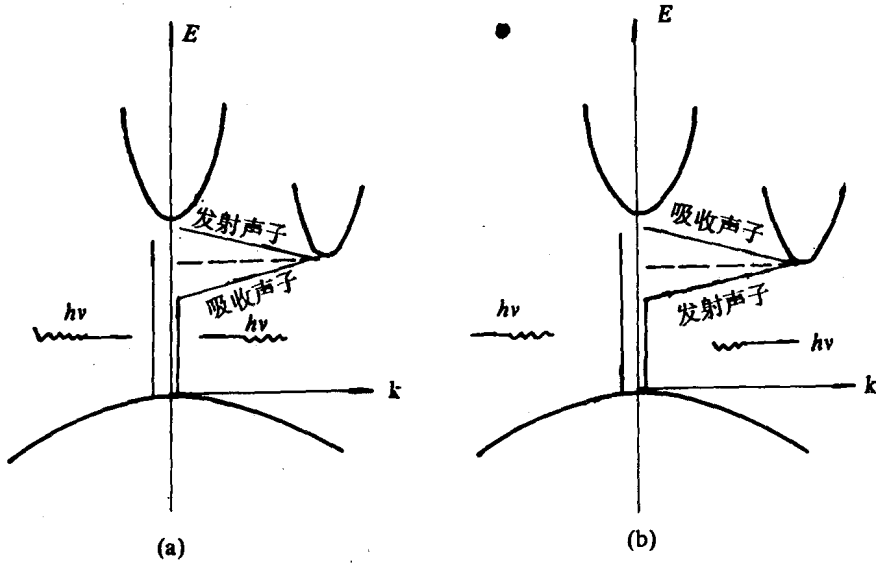


图 1.2-2 间接带隙跃迁

(a) 吸收光子 (b) 发射光子

(a)所示。若跃迁过程是导带底的电子跃迁到价带顶并发射光子，则上式中的正号表示发射声子，负号表示吸收声子，如图 1.2-2(b)所示。与前面的直接带隙跃迁相比，这种有声子参加才满足准动量守恒的跃迁被称为间接带隙跃迁或间接跃迁，这种有四种量子参与的跃迁过程是属二级微扰过程，其跃迁几率比前面所述的一级微扰过程小得多。因此，不能用间接带隙跃迁半导体来作半导体激光器或发光二极管的有源材料。无疑，对理想的半导体光电探测器，其吸收区亦宜用直接带隙跃迁材料。但对于声子 $\hbar\omega_s$ 所参与的跃迁过程，只要入射光子的能量 $\hbar\omega \geq E_g$ (E_g 为半导体材料的禁带宽度或带隙)，那么价带内距价带顶能量范围为 $-\hbar(\omega \pm \omega_s) - E_g$ 的电子以及导带内距导带底能量范围为 $\hbar(\omega \pm \omega_s) - E_g$ 的电子空态都能参与跃迁，这就使参与跃迁的状态范围扩大，这在一定程度上弥补了间接带隙跃迁几率小的因素，而使总的跃迁几率并不太小。基于这点，目前硅是在短波段 ($0.6 \sim 1.0 \mu\text{m}$)、锗是在长波段 ($1.0 \sim 1.7 \mu\text{m}$) 常用的光探测器的光吸收材料。

二、跃迁几率⁽²⁾⁽³⁾

为了更深刻的理解电子在半导体能带之间跃迁的特点，有必要了解电子在上述两种跃迁类型中产生跃迁的几率，它是决定电子在半导体能带之间产生受激跃迁和自发辐射跃迁速率的一个基本量。决定跃迁几率的基本出发点是考虑到与半导体中电子相互作用的辐射场是一个随时间周期变化的函数，因此，处理半导体中电子与光子相互作用的量子力学系统时要使用与时间有关的微扰论。为此，首先要确定包括微扰（把辐射场看成是微扰）在

内的描述量子力学系统能量的哈密顿量和描述该系统信息的波函数，再利用与时间有关的薛定谔方程求解，从而得出反映电子在辐射场作用下跃迁几率的大小。

电子在辐射场中所受到的力是非保守力，因此用矢量场而不用标量场来表示辐射场。设辐射场的矢量势为 \mathbf{A} ，受到其微扰的量子力学系统的哈密顿量可表示为

$$H = \frac{1}{2m_0}(\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2 + V(r) \quad (1.2-6)$$

式中 m_0 为电子质量， \mathbf{P} 为电子的动量，相应的动量算符 $\mathbf{P} \rightarrow -j\hbar\nabla$ ，其中 ∇ 是熟知的劈形或梯度标符， $V(r)$ 为随空间坐标 r 变化的晶格周期势。对于 $\text{div}\mathbf{A}=0$ 的电磁场，交换律 $\mathbf{PA} = \mathbf{AP}$ 成立。将式(1.2-6)展开，可以将辐射电磁场与电子相互作用的哈密顿量写为

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(r) + \frac{je\hbar}{m_0}\mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2\mathbf{A}^2}{2m_0} \quad (1.2-7)$$

如果忽略含 \mathbf{A}^2 的非线性项，并与本征量子力学（未受微扰）的哈密顿量 $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(r)$ 比较就可得到微扰势 H' 为

$$H' = \frac{je\hbar}{m_0}\mathbf{A} \cdot \nabla \quad (1.2-8a)$$

或者

$$H' = -\frac{e}{m_0}\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} \quad (1.2-8b)$$

现在就可以将式(1.2-8)定义为系统相互作用哈密顿量。令矢量势为空间和时间的函数并表示为

$$\mathbf{A} = A_0\mathbf{a} \exp[j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-9)$$

式中 A_0 为矢量势场的振幅， \mathbf{k} 为辐射光场的波矢， ω 为辐射场的角频率， \mathbf{a} 为单位矢量。为了求出 A_0 ，利用场论知识可以合理地将矢量势与电场强度 \mathbf{E} 的关系表示为

$$-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{E} \quad (1.2-10)$$

其中单位矢量为 \mathbf{a} 的电场强度 \mathbf{E} 为

$$\mathbf{E} = eE_0 \exp[j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-11)$$

所以式(1.2-9)可写为

$$\mathbf{A} = \frac{E_0}{j\omega} \mathbf{a} \exp[j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-12)$$

因而有

$$|\mathbf{A}|^2 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^* = \left(\frac{E_0}{\omega}\right)^2 \quad (1.2-13)$$

为了进一步表示 A_0 ，需计算电场强度 E_0 。为此，把由坡印廷矢量的实部给出的电磁通量（光子通量）与光子能量 $\hbar\omega$ 联系起来。坡印廷矢量的实部为

$$|\mathbf{S}| = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) \quad (1.2-14)$$

式中 \mathbf{H} 为磁场强度矢量，它可由电场强度矢量利用麦克斯韦方程求得

$$\mathbf{H} = \left(\frac{\mathbf{a}_\perp E_0 k}{\mu_0 \omega}\right) \exp[j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-15)$$

式中 \mathbf{a}_\perp 是与 \mathbf{a} 垂直的单位矢量， $k = \bar{n}\omega/c$ ， c 为真空中的光速， \bar{n} 为半导体材料的折射率， μ_0 为真空中的导磁率。将式(1.2-11)和式(1.2-15)代入式(1.2-14)后得到

$$|S| = \frac{1}{2} \left(\frac{E_0^2 k}{\mu_0 \omega} \right) \quad (1.2-16)$$

另一方面, 光子通量是光子能量 $\hbar\omega$ 与其群速 (c/\bar{n}) 之积, 而 $c^2 = 1/\mu_0 \epsilon_0$, ϵ_0 为真空中的介电常数, 因而有

$$\frac{\hbar\omega c}{\bar{n}} = \frac{1}{2} \bar{n} \epsilon_0 E_0^2 c \quad (1.2-17)$$

由式(1.2-13)和式(1.2-17)可以得到

$$|A|^2 = \frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \quad (1.2-18)$$

因此, 可以将 A 最后表示为

$$A = a \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-19)$$

将式(1.2-19)代入式(1.2-8b), 便得到辐射场与半导体中电子相互作用的哈密顿量为

$$H' = -a \frac{e}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \cdot \mathbf{P} \quad (1.2-20)$$

在得到相互作用哈密顿量以后, 下一步便是要找到描述该量子系统的波函数。所有在晶格周期势场中运动的电子波函数, 都可以表示为具有晶格周期的布洛赫函数 $u(\mathbf{r})$ 和具有某一波矢 \mathbf{k} 的平面波函数之积。先考虑在某一体积 V 内只有单个电子和空穴、电子在能带之间跃迁的简单情况。设跃迁的初态用导带电子波函数 $\psi_2(\mathbf{r})$ 表示, 跃迁的终态用价带空穴波函数 $\psi_1(\mathbf{r})$ 表示, 二者都归一化到体积 V 。这种对初、终态的假设是无关紧要的。事实上, 后面将看到如令电子从价带跃迁到导带, 其跃迁几率和相反过程跃迁几率是相同的。

$$\psi_2(\mathbf{r}, t) = V^{-1/2} u_2(\mathbf{r}) \exp[j(\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t)] \quad (1.2-21)$$

$$\psi_1(\mathbf{r}, t) = V^{-1/2} u_1(\mathbf{r}) \exp[j(\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t)] \quad (1.2-22)$$

到此, 已求得了相互作用哈密顿量 H' 和有关的波函数。将它们代入薛定谔方程求解, 即可得到跃迁几率 B_{21} , 这也就是著名的费米“黄金准则”, 表示为

$$B_{21} = \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle \psi_2^*(\mathbf{r}, t) | H' | \psi_1(\mathbf{r}, t) \rangle \right|^2 \quad (1.2-23)$$

将式(1.2-20)、(1.2-21)和(1.2-22)代入式(1.2-23)便得到

$$\begin{aligned} B_{21} = & \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle V^{-1/2} u_2^*(\mathbf{r}) \exp[j(-\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r} + \omega_2 t)] \right| - a \\ & \times \frac{e}{m_0} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \cdot \mathbf{P} \left| V^{-1/2} u_1(\mathbf{r}) \right. \\ & \left. \times \exp[j(\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t)] \right\rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (1.2-24)$$

考虑到动量算符 $\mathbf{P} \rightarrow -j\hbar \nabla$, 而其中梯度算符 ∇ 是沿电磁场电矢量方向, 同时取光的偏振方向平行于 \mathbf{k}_v , 则可列出在外光场作用下导带电子向价带跃迁的几率为

$$\begin{aligned} B_{21} = & \frac{\pi e^2 \hbar}{m_0^2 \epsilon_0 \bar{n}^2 \hbar \omega} \left| \langle \frac{\hbar}{2\pi j} V^{-1} \exp[j(\omega_2 - \omega_1 - \omega)t] \right. \\ & \left. \times \exp[j(\mathbf{k}_v - \mathbf{k}_c + \mathbf{k}_v) \cdot \mathbf{r}] u_2^*(\mathbf{r}) (j\mathbf{k}_v + \nabla) u_1(\mathbf{r}) \right\rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (1.2-25)$$

当光辐射场与半导体中电子发生共振相互作用时, 即满足 $\omega = \omega_2 - \omega_1$, 则上式括号中第一个指数变为 1。由式(1.2-25)还可以看到, 当满足

$$\mathbf{k}_v - \mathbf{k}_c + \mathbf{k}_v = 0 \quad (1.2-26)$$

时, 则括号中第二个指数变为 1, 这时括号中就有非零值。然而式(1.2-26)正是竖直跃迁动量守恒表示式(1.2-2)的另一种具体表述。这就从理论上证明, 只有当半导体中的电子在辐射场作用下满足动量守恒 (k 选择定则) 所产生的跃迁才有最大的跃迁几率。

式(1.2-25)中括号 $\langle \dots \rangle$ 中的乘积常被称为跃迁矩阵元或动量矩阵元, 并用 M 表示。基于电子与辐射场所产生的竖直共振跃迁, 则 M 可变成如下的简单形式:

$$\begin{aligned} M &= \frac{\hbar}{2\pi j} \frac{1}{V} \langle u_2^*(r)(j\mathbf{k}_j + \nabla)u_1(r) \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2\pi j} \frac{1}{V} \int u_2^*(r)(j\mathbf{k}_j + \nabla)u_1(r)d^3r \end{aligned} \quad (1.2-27)$$

至此, 可将跃迁几率写为

$$B_{21} = \frac{\pi e^2 \hbar}{m_0^2 \epsilon_0 n^2 \hbar \omega} |M|^2 \quad (1.2-28)$$

要想从式(1.2-27)中得到矩阵元 M 的值, 就需知道布洛赫函数的具体形式, 我们就不详细去研究这些函数, 而直接列出凯恩 (Kane) 对直接带隙跃迁 III-V 族化合物半导体动量矩阵元的近似式⁽⁴⁾

$$|M|^2 \approx \frac{m_0^2 E_g}{3m_e} \cdot \frac{1 + \Delta/E_g}{1 + (2/3)\Delta/E_g} \left\{1 - \frac{m_e}{m_0}\right\} \quad (1.2-29)$$

式中 m_0 为自由电子质量, m_e 为导带电子的有效质量, E_g 为禁带宽度, Δ 是在 § 1.6 中还将讨论的自旋-轨道裂矩带。以 GaAs 半导体为例, 设 $m_e = 0.067m_0$, $E_g = 1.42\text{eV}$, $\Delta = 0.33\text{eV}$, 将这些值代入式(1.2-29), 则有

$$|M|_{\text{GaAs}}^2 = 4.96m_0 E_g \quad (1.2-30)$$

将式(1.2-29)代入式(1.2-28), 并令 $\hbar\omega = E_g$, 则可近似得到 III-V 族化合物半导体中电子的辐射跃迁几率为

$$B_{21} = \frac{e^2 \hbar}{3m_e \epsilon_0 n^2} \cdot \frac{1 + \Delta/E_g}{1 + (2/3)\Delta/E_g} \left\{1 - \frac{m_e}{m_0}\right\} \quad (1.2-31)$$

由上式可以看出, 跃迁几率与 E_g 基本无关, 不同半导体中电子跃迁几率的差别在很大程度上取决于电子的有效质量。

对竖直跃迁矩阵元式(1.2-27)稍作深入的分析, 我们还将发现在竖直跃迁类型中还存在允许的和非允许的 (禁戒) 跃迁。将式(1.2-27)分解为

$$\mathbf{M} = \frac{\hbar}{2\pi j} V^{-1} \left[\int u_2^*(r) \nabla u_1(r) d^3r + j\mathbf{k}_j \int u_2^*(r) u_1(r) d^3r \right] \quad (1.2-32)$$

因为 ∇ 是奇宇称算符, 所以只有当满足动量守恒式(1.2-26)、且满足 $u_2^*(r)$ 与 $u_1(r)$ 具有相反宇称时才使式(1.2-32)中第一项积分不为零。这时所产生的跃迁为允许的竖直跃迁。相反, 若 $u_2^*(r)$ 与 $u_1(r)$ 具有相同宇称, 则式(1.2-32)中第一项积分为零, 而第二项积分对矩阵元只产生很小的贡献, 因而跃迁几率很小, 这种竖直跃迁为非允许的跃迁。前者对应 GaAs、InP 等半导体中导带最小值与价带最大值均处于 $k=0$ 的情况, 此时价带是原子的 s 态, 导带是原子的 p 态; 后者对应 Ge 等半导体, 其价带最大值与导带最小值不对应同一 k 值, 导带与价带分别由原子的 d 态和 s 态构成, 这种非允许的直接带隙跃迁几率虽小, 但不为零。有关这方面的问题在 § 7.1 中还将详细分析。

三、电子在浅杂质能级和与其相对的能带之间的跃迁

在掺杂的半导体中，存在着束缚在局部能级（施主或受主能级）上的电子或空穴与相对能带中的自由载流子之间发生相互作用而产生跃迁。这时，前面所提到的由动量守恒所得出的严格 k 选择定则被松弛或不再成立，跃迁矩阵元变成只与能量有关。

束缚电子的波函数可以写成与晶格周期有关的布洛赫函数 $u(r)$ 与类氢原子中的电子态波函数 $\Psi_{n\ell}(r)$ 之积，即

$$\Psi_1(r) = \Psi_{n\ell}(r)u_1(r) \quad (1.2-33)$$

式中 $\Psi_{n\ell}(r)$ 是一个依指数衰减但相对晶格周期来说变化很缓慢的函数，其形式为

$$\Psi_{n\ell}(r) = \pi^{-1/2} \left(\frac{1}{a^*}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{-r}{a^*}\right) \quad (1.2-34)$$

式中 $a^* = 4\pi\epsilon\hbar/m^*e^2$ 是束缚态的有效玻尔半径， m^* 为束缚态的有效质量， ϵ 为介电常数，对 GaAs 中的束缚电子或空穴的有效玻尔半径分别为 10^{-6}cm 和 10^{-7}cm 。

与束缚态相对的能带中自由载流子波函数可以取抛物带近似中波矢为 k_0 的平面波函数。例如在不考虑时间因素时，导带电子的波函数有和式(1.2-21)相同形式，即为

$$\Psi_2(r) = V^{-1/2}u_2(r)\exp(jk_0 \cdot r) \quad (1.2-35)$$

式中 $u_2(r)$ 为抛物带的布洛赫函数。至此，就可将杂质能级与相对能带之间的跃迁矩阵元写为

$$M_{12} = V^{-1/2} \int_V \Psi_{n\ell}^*(r)u_1^*(r)P u_2(r)\exp(jk_0 \cdot r)d^3r \quad (1.2-36)$$

式中 P 为动量算符，或者将式(1.2-36)写成

$$M_{12} = V^{-1/2} \langle u_1^*(r) | P | u_2(r) \rangle \int_V \Psi_{n\ell}^*(r)\exp(jk_0 \cdot r)d^3r \quad (1.2-37)$$

式(1.2-37)中的积分为矩阵元的包络部分，写作

$$M_{n\ell} = \int_V \Psi_{n\ell}^*(r)\exp(jk_0 \cdot r)d^3r \quad (1.2-38)$$

矩阵元 $\langle u_1^*(r) | P | u_2(r) \rangle$ 是本征带的布洛赫平均矩阵元或带间跃迁矩阵元 M_{12} ，对 III-V 族化合物半导体的 $|M_{12}|^2$ 已由式(1.2-29)给出。因此

$$M_{12} = M_{12}M_{n\ell} \quad (1.2-39)$$

将式(1.2-34)代入式(1.2-38)并完成适当的积分后就得到

$$|M_{n\ell}|^2 = \frac{64\pi a^{*3}}{(1 + a^{*2}k_0^2)^4 V} \quad (1.2-40)$$

当跃迁发生在浅受主能级与导带之间时，式中 $k_0 = (2m_e E_c/\hbar^2)^{1/2}$ ，其中 E_c 是从导带底算起的导带电子能量。图 1.2-3 给出了 $|M_{n\ell}|^2 (V/a^{*3})$ 与 a^*k_0 之间的关系。由图看出与跃迁相联系的电子可能产生的跃迁主要是与那些 $k_0 < 1/a^*$ 的空穴态相关。因为， k_0 出现在式(1.2-40)的分母中，所以随着较低能量的导带被填满而使这种浅受主能级与导带之间的跃迁几率减小。也就是说，这种不遵守 k 选择定则的跃迁矩阵元是与能量有关的。随着空穴浓度的增加，束缚电子的跃迁几率起初成比例地增加，但随着低能态空穴的占满和高能态空穴的 $|M_{n\ell}|^2$ 趋向零，跃迁几率将趋向一个有限值，即达到带与带之间的跃迁几率。这就说明，尽管上面所说的是浅受主能级与导带间的跃迁，但不管是受主还是施主能级，只要与晶格间