

半导体物理学

(苏) П. С. 基耶夫

导体物理学

(苏) П.С.基耶夫 著

王家俭 丛树福 等 译校
马洪磊 陆大荣

山东电子学会

П. С. КИРЕЕВ

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Издательство «Высшая школа», 1975

P. S. KIREEV

SEMICONDUCTOR PHYSICS

English translation, Mir Publishers, 1978

半导体物理学

(苏) П. С. 基耶夫 著

王家俭 丛树福 等 译校
马洪磊 陆大荣

山东电子学会出版

山东电子工业印刷厂印刷

原 序

这本教材是作者在为莫斯科钢铁冶金学院半导体材料和器件专业的学生授课的基础上写成的。半导体物理课是在学生已经熟悉“结晶学”、“量子力学”等课程之后进行的，因此本书没有专门论述关于晶格结构，晶格的原子结合等内容。熟练掌握量子力学的基本概念能在理解半导体物理各种概念的过程中用量子方法可得到问题的更严格的解，事实上，教材的每一节中都用到量子方法，特别是能带结构的原理和载流子跃迁过程，包括载流子与晶格缺陷、声子和光子的相互作用。

经验表明，在阐述内容时，合理使用较高的标准，不会对学生造成过分的困难。实际上，所有的中间计算，本质上都可以使理解简化。在较多的情况下，计算结果用实验资料对照说明。

利用群论方法可以简化对许多复杂问题的处理。然而，作者考虑到技术性学院中群论一般不做单独课程学习，因此，用附录来介绍群论的基本原理。

把半导体物理作为单独的课程，作者尽量避免涉及与半导体器件紧密相关的内容。

作者借此机会，向为这本半导体物理的出版发行的有关人员表示感谢。

作 者

目 录

译者序

原序

第一章 引言 电导的电子理论

1. 电导的电子理论 欧姆定律……………(1)
2. 平均自由时间和自由程分布函数……………(6)
3. 电子分布函数 物理量的平均值……………(10)
4. 半导体 按电导性对材料分类……………(22)
5. 半导体的导电模型 空穴概念……………(27)
6. 本征电导和非本征电导……………(31)

第二章 半导体能带理论原理

7. 晶体的薛定谔方程……………(35)
8. 绝热近似……………(38)
9. 单电子近似……………(43)
10. 晶格的周期势场 平移算符……………(49)
11. 准动量……………(54)
12. 电子的有效质量……………(59)
13. 速度和准动量的关系……………(65)
14. 加速度算符……………(69)
15. 布里渊区……………(77)
16. 势箱归一化和准动量的分立性……………(82)
17. 准自由电子理论……………(87)
18. 紧束缚电子理论……………(104)

19. 有效质量方法 外场对晶体能谱的影响.....(119)
20. 局域态.....(125)
21. 杂质态的基本理论.....(131)
22. 表面态.....(139)
23. 磁场中电子能量的量子化 朗道能级.....(142)
24. 泡利原理 金属、半导体和电介质的概念.....(148)
25. 空穴的主要特性.....(156)
26. 一些半导体的能带结构 计算方法.....(162)
27. 准粒子概念.....(179)

第三章 半导体中电子和空穴统计

28. 状态密度.....(184)
29. 电子和空穴浓度.....(194)
30. 电中性方程.....(203)
31. 本征半导体.....(206)
32. 非本征半导体 一种类型杂质.....(211)
33. 掺有受主和施主两种杂质的半导体.....(222)
34. 简并半导体.....(229)
35. 磁场中的状态密度.....(233)

第四章 半导体中的动力学现象

36. 玻耳兹曼动力学方程.....(244)
37. 弛豫时间.....(352)
38. 电流密度和能流密度.....(261)
39. 输运系数.....(267)
40. 半导体的电导率.....(276)
41. 电流的磁效应.....(285)
42. 非本征电导范围内的霍耳效应.....(295)
43. 材料中包含几种类型载流情况下的霍耳效应.....(305)

44. 霍尔系数和磁场的关系.....(311)
45. 磁阻效应.....(321)
46. 半导体的热导.....(331)
47. 温差电现象.....(339)
48. 热磁现象.....(356)
49. 动力学现象的一般分析.....(361)
50. 有效质量为张量时半导体中的动力学现象.....(373)
51. 应力电阻效应 应力灵敏度.....(377)
52. 压阻效应 压阻系数.....(385)

第五章 载流子散射理论

53. 有效散射截面.....(394)
54. 弛豫时间和有效截面之间的关系.....(404)
55. 量子跃迁理论的基本原理.....(409)
56. 杂质离子散射.....(418)
57. 中质杂质原子的散射.....(425)
58. 晶格振动 简正坐标 声子.....(429)
59. 晶格的光学和声学振动.....(438)
60. 晶格比热 声子统计.....(451)
61. 晶格热振动引起的散射 形变势法.....(462)
62. 载流子迁移率和温度的关系.....(472)
63. 弛豫时间对外场的依赖关系 对欧姆定律的偏离.....(483)

第六章 载流子的复合

64. 连续方程 寿命.....(492)
65. 复合机理 线性复合.....(505)
66. 非平衡载流子的扩散和漂移.....(517)
67. 表面复合.....(525)

第七章 半导体中的接触现象

- 68. 德拜长度..... (531)
- 69. 功函数..... (545)
- 70. 接触电势差 金属-金属接触..... (550)
- 71. 金属-半导体接触..... (555)
- 72. 非均匀半导体 $p-n$ 结..... (560)

第八章 半导体中的光学和光电现象

- 73. 光吸收谱..... (568)
- 74. 自由载流子光吸收..... (572)
- 75. 回旋共振..... (583)
- 76. 本征光吸收..... (593)
- 77. 晶格光吸收..... (612)
- 78. 局域态中电子的光吸收..... (618)
- 79. 环境对吸收谱的影响..... (626)
- 80. 光敏电阻效应..... (629)
- 81. 丹倍效应 光生伏特效应..... (639)
- 82. 光电磁效应..... (648)
- 83. 法拉第效应..... (654)
- 84. 能带的自旋-轨道分裂..... (665)

附录 群论介绍

- 1. 空间变换..... (675)
- 2. 对称变换群 群元的性质..... (682)
- 3. 群间的关系..... (685)
- 4. 群的表示..... (689)
- 5. 不可约表示的特性..... (691)
- 6. 表示的基..... (695)

7. 表示的直乘.....(699)
8. 点群.....(702)
9. 平移群 布里渊区.....(709)
10. 波矢群.....(715)
11. 薛定谔方程.....(724)
12. 孪生群 时间反演.....(727)

第一章

引言 电导的电子理论

1 电导的电子理论 欧姆定律

现代物理学的许多概念，特别是电导率和载流子迁移率这类概念，均以金属电子论为基础。

十九世纪发展起来的金属电子论认为：电子不占有体积，电子之间无相互作用。它们组成类似于分子物理学中理想气体的电子气；电子气与晶格处于热平衡。每个粒子的运动状态用六个量来描写：三个座标 x, y, z 和三个速度分量 v_x, v_y, v_z (或动量分量 p_x, p_y, p_z)，或用两个矢量 \mathbf{r} 和 \mathbf{v} (或 \mathbf{p}) 来描写。体积可忽略的假设看来是正确的，因为根据经典理论，电子半径 $r_0 \approx 10^{-15}\text{m}$ ，体积 $V_0 \approx 10^{-45}\text{m}^3$ 。取单位体积的电子数 $n \approx 10^{28}\text{m}^{-3}$ ，我们可估算出这些电子本身的体积与物体体积之比 $b = nV_0 \approx 10^{-17}$ 。然而，电子之间没有相互作用的假设无疑是不合理的。事实上，电子的电荷 $e = 1.6 \cdot 10^{-19}\text{C}$ ，相距 10^{-10}m 的两个电子之间的相互作用力为 $2 \cdot 10^{-8}\text{N}$ ，此力将使一个电子获得 $2 \cdot 10^{22}\text{m/s}^2$ 的加速度。相距 $r = 10^{-10}\text{m}$ 的两个电子之间的库仑相互作用能约为 14eV 。

所有电子总的库仑相互作用(排斥)能应为相当大的正值。而实验证明，金属中电子的能量是负的(取距金属无穷远的一个静止电子的能量为零)。这是由于，除电子之间的斥力外，还存在电子与原子核之间的库仑引力。后一相互作用的力和能量的大小与电子-电子相互作用同数量级。在所有电子和原子核的合成电场中运动时，每个电子既受到吸引作用也受到排斥作用。这两种

相互作用共同造成单个电子运动的“形式上的独立性”。我们将在第二章中阐明，量子力学定律实际上允许我们把电子看成是无相互作用的粒子。

电子在晶体中作无规则运动。在运动过程中，电子与晶格粒子“碰撞”，改变了电子速度的大小和方向。电子速度大小的变化与其动能的变化有关。在热平衡条件下，电子气的温度应等于晶格离子的温度。这意味着平均地讲，没有从电子到晶格或从晶格到电子的能量转移。

但是，若改变电子气的温度，则由于电子与离子间的交换能量，晶格的温度也将发生变化。这一事实对于阐明金属和半导体的导电性是很重要的，下面将要用到它。

由于电子与晶格碰撞后散射的无规则性，某一给定电子的速度和位移(作为矢量)在较长一段时间的平均值应等于零。对于一切电子，条件相同，故上述结论适用于每个电子。电流描述通过某一截面的电荷迁移，形成电流要求电子有定向运动。因为电子作无规则(热)运动的平均位移等于零，故这种无规则运动不可能引起电流。有多种因素可以引起电流，如电场、温度梯度、非均匀光照等。

若金属中建立起电场强度 \mathbf{E} ，则电子将被此电场加速、加速度为

$$\mathbf{a} = \frac{e}{m} \mathbf{E} \quad (1.1)$$

在时间 t 内电子获得的速度为

$$\mathbf{v} = \mathbf{a}t = \frac{et}{m} \mathbf{E} \quad (1.2)$$

其方向与电场的相反。若电子的初速度为 \mathbf{v}_T ，则在 t 时刻的速度将等于

$$\mathbf{a}t + \mathbf{v}_T = \frac{et}{m} \mathbf{E} + \mathbf{v}_T \quad (1.3)$$

由此可以看出，沿电场方向的电子速度分量将减小，而逆电场方向的分量将增大。结果，电子集合获得一个适当的定向速度。电子在作无规则运动的同时，参与逆电场方向的定向运动。电子集合在电场中的定向运动称为漂移，定向运动的速度称为漂移速度，记作 v_d 。在电场 E 作用下，电子在 t 时间内移动的距离为

$$l(t) = \frac{et^2}{2m} E \quad (1.4)$$

经典电子论将电子速度的变化归因于电子与晶格（格点上的原子或离子）的瞬时相互作用。换言之，把电子-晶格相互作用看成类似于力学中的碰撞现象。在两次碰撞之间，电子象一个不受晶格的场和其他电子的场作用的自由粒子那样运动。

为描写电子的运动，引入平均自由渡越时间（两次碰撞之间的平均时间） τ 和平均自由程 l 的概念。

平均自由程 l 与平均自由渡越时间 τ 之间的关系为

$$l = v_T \tau \quad (1.5)$$

式中， v_T 是电子热运动的平均速率，即速度量值的平均值。

现在我们来确定电子在电场中的平均漂移速度。若电子在 $t = 0$ 时的定向运动速度为零，则在 $t = \tau$ 时的速度等于

$$a\tau = \frac{e\tau}{m} E \quad (1.6)$$

漂移速度应等于定向运动的平均速度，即初速和末速之和的一半

$$v_d = \frac{0 + a\tau}{2} = \frac{e\tau}{2m} E \quad (1.7)$$

由 (1.7) 式得出，定向运动的平均速度正比于电场强度 E 。漂移速度与电场强度关系式中的系数称为电子迁移率，用字母 μ 表示：

$$\mu = \frac{e\tau}{2m} \quad v_d = \mu E \quad (1.8)$$

电子迁移率在数值上等于单位场强对应的电子漂移速度。

设电子浓度为 n ，单位时间通过单位截面的电荷等于以该单

位截面为底以 $1 \cdot v_d$ 为高的柱体中所含的电荷。众所周知，单位时间通过单位截面的电荷称为电流密度 j ，显然有

$$j = en v_d = en \mu E = \sigma E \quad (1.9)$$

方程 (1.9) 是微分形式的欧姆定律。由 (1.9) 和 (1.8) 式得出电导率的两个表达式

$$\sigma = en \mu \quad (1.10)$$

和

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau}{2m} \quad (1.11)$$

特鲁德首先得到 (1.11) 式。用 (1.5) 式消去 τ ，可将 (1.11) 式改写成

$$\sigma = \frac{e^2 n l}{2m v_T} \quad (1.12)$$

只要电场不改变电子浓度 n 或迁移率 μ ，欧姆定律就成立。不过，随着电场 E 的增强，电子的浓度和迁移率有可能在电场的影响下变化。作为例子，下面说明迁移率在电场下发生变化的情况。

我们在推导欧姆定律时曾假定，电子定向运动的能量将在每次碰撞全部转移给晶格。在弱电场情况下，漂移速度远小于运动速度，因此， τ 与场强 E 无关。但随着电场的增强，漂移速度将增大到可以与热运动速度相比拟，这会使自由渡越时间减小，因为现在的 τ 应写成

$$\tau = \frac{l}{v_T + v_d} \quad (1.13)$$

相应地，电子迁移率和金属的电导率将减少。 v_T 愈小（即物体的温度愈低），弱电场迁移率愈高。则效应开始的临界电场 E_c 就愈小。

可以用另一种方法来解释自由渡越时间概念。如果在某时刻去掉电场，电子集合将继续其定向运动，直到通过碰撞将它在电

场所中积累的全部动能都转移给晶格为止。

经历平均时间 τ , 定向运动停止(对全部电子来说), 此后, 电子恢复到无规则热运动状态。

由此可见, 电场倾向于使电子集合偏离与晶格的热平衡, 而碰撞则使整个系统恢复热平衡。系统以从非平衡态到平衡态的过渡称为弛豫过程或弛豫。恢复到平衡态所需时间称为弛豫时间。因此我们可以说, 自由渡越时间实际上就是弛豫时间。

在国际 (SI) 单位制中, 电导的单位是 S (西门子), 比电导或电导率的单位是 S/m。可以根据 (1.8) 式得到迁移率的量纲

$$[\mu] = (\text{A} \cdot \text{s}^2) \text{kg}^{-1}$$

迁移率也可以表示为在单位电场中的速度, 即一个量纲为 $\text{m/s} : \text{V}/\text{m} = \text{m}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 的量。实际上最广泛用的单位不是 SI 制。而是 $\text{cm}, \text{V}, \text{s}$ 制。迁移率用 $\text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$ 度量, 而电导率用 $\text{ohm}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1} (\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1})$ 度量。很明显,

$$1 \text{m}^2/(\text{V} \cdot \text{s}) = 10^4 \text{cm}^2/(\text{V} \cdot \text{s})$$

$$1 \text{S}/\text{m} = 10^{-2} \frac{1}{\text{ohm} \cdot \text{cm}} \left(\frac{1}{\Omega \cdot \text{cm}} \right)$$

1 节 小 结

1. 电导的经典电子论的要点如下:

(a) 电子组成理想(电子)气体, 并作无规则热运动, 用平均自由程 l 和平均自由渡越时间 τ 来描写这种运动。

(b) 电子与晶格离子交换能量和动量, 从而保持电子气和晶格之间的热平衡。

(c) 电场使电子产生定向速度, 从而引起电流。

2. 电流密度正比于电场强度

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} \quad (1.1s)$$

3. 电导率与电子浓度 n 和迁移率 μ 的关系为

$$\sigma = en\mu \quad (1.2s)$$

4. 迁移率决定于电子在弱电场中的行为及其作无规则热运动的特性, 有

$$\mu = \frac{e\tau}{2m} = \frac{el}{2mv_T} \quad (1.3s)$$

5. 迁移率在数值上等于单位电场中电子的漂移速度, 即

$$\mu = \frac{v_d}{E} \quad (1.4s)$$

6. 欧姆定律不适用强电场情况。

7. 自由渡越时间可以看成是弛豫时间。

2 平均自由时间和自由程分布函数

上节中, 我们曾假设一切电子平均渡越时间相等, 得到了迁移率和电导率的表达式。考虑到平均自由时间的值并非对一切电子都相同, 而是在 0 至 ∞ 之间变化, 故有必要对那些表达式加以改写。为此, 应知道作为随机量的平均自由时间取某一值时的几率。下面, 我们来求平均自由时间的分布函数。

我们假设

(1) 一个电子在时间间隔 dt 内进行一次碰撞 (散射) 的几率正比于它的“飞行”时间

(2) 单位时间的碰撞几率与时间无关。

上述两点假设便足以得到平均自由时间分布函数。我们将一个粒子在 t 至 $t+dt$ 时间间隔内不发生碰撞的几率表示为

$$dw = -dw(dt) \quad (2.1)$$

$w(t)$ 为在时间间隔 $(t, t+1)$ 内自由运动的几率, $w(t+dt)$ 为 $t+dt$ 至 $t+dt+1$ 时间间隔内自由运动的几率。 $w(t+dt)$ 可用两种不同的方法来表示。一方面,

$$w(t+dt) = w(t) + \frac{dw}{dt}dt \quad (2.2)$$

另一方面，在时间 $t+dt$ 期间电子的自由运动即事件 C 可以认为是 A、B 两个事件的乘积—事件 A 为在时间 t 期间的自由运动，另一事件 B 为在 dt 期间的自由运动，所以

$$C = AB \quad (2.3)$$

两个事件积的几率等于第一个事件的几率与第二个事件的条件几率之积：

$$w(C) = w(A)w\left(\frac{B}{A}\right) = w(B)w\left(\frac{A}{B}\right) \quad (2.4)$$

然而，因为事件 A 与事件 B 无关，结果 $w\left(\frac{A}{B}\right) = w(A)$ 。此外，还有事件 B 与事件 A 无关*。因此

$$w(t+dt) = w(t) \cdot dw(dt) \quad (2.5)$$

在时间 dt 内自由运动的几率可以用相同时间间隔内的散射几率来表示。我们用 a 表示单位时间散射(碰撞)的几率。则在时间 dt 内散射几率就等于 adt ，自由运动的几率就等于 $1-adt$ ，亦即

$$dw(dt) = 1 - adt \quad (2.6)$$

考虑到 (2.2)，(2.5) 及 (2.6) 式，我们可以写出

$$w(t+dt) = w(t) + \frac{dw}{dt} dt = w(t)[1 - adt] = w(t) - w(t)adt \quad (2.7)$$

这样便得到函数 $w(t)$ 的微分方程

$$\frac{dw}{dt} = -wa \quad (2.8)$$

解方程 (2.8)，我们得到

* 采用事件 B 与事件 A 无关的说法，通常会引起学生的异议，一般学生容易接受事件 A 与事件 B 无关的明显说法。通常的论证是，如果在 t 时刻以前粒子被散射，则在 t 至 $t+dt$ 时间里将不存在运动。但是，在这种情况下不仅仅事件 B 将不存在，事件 C 甚至 A 也不存在。同时对事件 $AB=C$ 形成了定理，即两个事件的乘积相当于作为该乘积中被乘数的两个事件的实现。

$$w(t) = ce^{-at} \quad (2.9)$$

积分常数 c 由归一化条件决定

$$\int_0^{\infty} w(t) dt = 1 = c \int_0^{\infty} e^{-at} dt = \frac{c}{a} \quad (2.10)$$

由此得出

$$c = a \quad (2.11)$$

从而，归一化的自由渡越时间分布函数采用形式为

$$w(t) = ae^{-at} \quad (2.12)$$

现在我们来求平均自由渡越时间 $\langle t \rangle$ ：

$$\langle t \rangle = \int_0^{\infty} tw(t) dt = \int_0^{\infty} tae^{-at} dt = \frac{1}{a} \quad (2.13)$$

若用 τ 表示平均自由渡越时间，即 $\langle t \rangle = \tau$ ，我们将从 (2.13) 式得知单位时间的碰撞几率是正比于平均自由渡越时间的：

$$a = \frac{1}{\tau} = \tau^{-1} \quad (2.14)$$

归一化到 1 的分布函数可以写成下述形式

$$w(t) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (2.15)$$

用同样的方法可以得到自由程 x 的函数，

$$w(x) = \frac{1}{l} e^{-\frac{x}{l}} \quad (2.16)$$

这里 l 是平均自由程。

上面得到的分布函数适用于相当普遍的情况。现在把这些函数应用到在电场中电子运动的情况，我们仅涉及电子在反电场方向上的运动。设定 x -轴与电场方向一致。在电场中自由运动的电子经过时间 t 之后，则获得速度

$$v(t) = \frac{et}{m} E \quad (2.17)$$