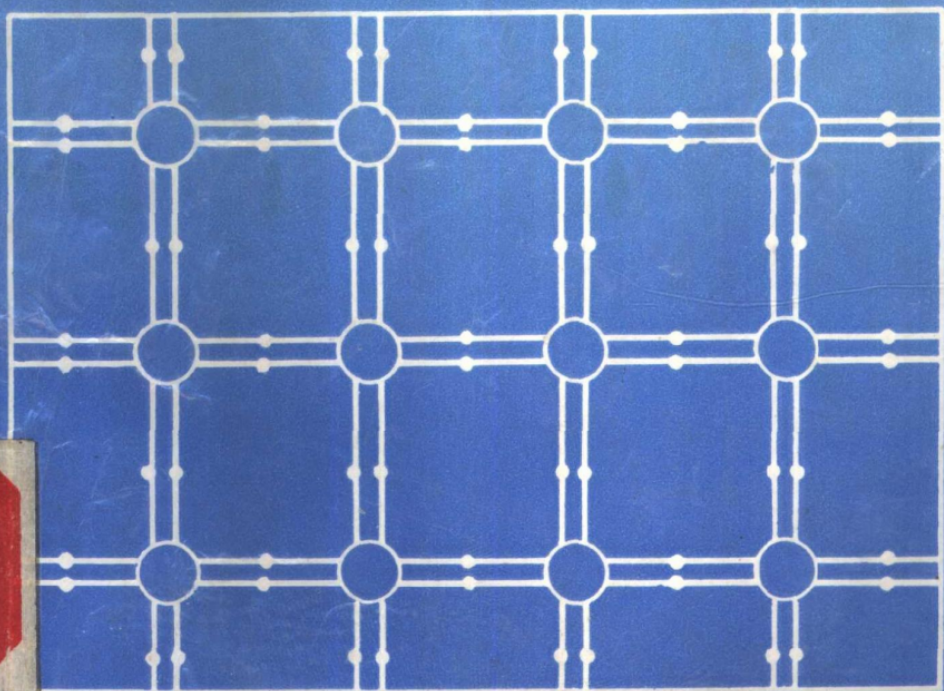


半导体物理学

王印月 编



兰州大学出版社

责任编辑 雷鸿昌
封面设计 张小卉
责任校对 张昭益

ISBN 7-311-00390-3

O·60 定价：4.23 元



半导体物理学

王印月 编

兰州大学出版社

内 容 简 介

本书较全面地介绍了高等院校“半导体物理学”课程中所涉及的基本内容。全书共分九章，包括半导体中的电子状态、杂质和缺陷能级、载流子的统计分布、半导体的输运性质、非平衡载流子、pn结、金半接触及异质结、半导体表面、半导体的光学性质和光电效应等。

本书可作为理、工科半导体物理与器件专业教材，也可供从事半导体工作的有关人员参考。

半导体物理学

王印月 编

兰州大学出版社出版

(兰州大学校内)

兰州大学印刷厂印刷 甘肃省新华书店发行

开本：850×1168毫米1/32 印张：13

1990年12月第1版 1990年12月第1次印刷

字数：323千字 印数：1-1000册

ISBN7-311-00390-3/O·60 定价：4.23元

目 录

第一章 半导体中的电子状态	(1)
§ 1—1 能带的形成.....	(2)
§ 1—2 晶体中电子的运动和有效质量.....	(15)
§ 1—3 导带、满带和空穴.....	(20)
§ 1—4 半导体的能带.....	(26)
习题	(45)
第二章 杂质和缺陷能级	(46)
§ 2—1 半导体的晶体结构.....	(46)
§ 2—2 半导体中的杂质和缺陷.....	(51)
§ 2—3 杂质和缺陷能级.....	(56)
习题	(65)
第三章 半导体中载流子的统计分布	(66)
§ 3—1 费米分布函数和状态密度.....	(67)
§ 3—2 导带电子和价带空穴浓度.....	(74)
§ 3—3 本征半导体的载流子浓度.....	(77)
§ 3—4 杂质半导体的载流子浓度.....	(81)
§ 3—5 一般情况下的统计分布.....	(93)
§ 3—6 简并半导体.....	(97)
习题	(103)
第四章 半导体的输运现象	(105)
§ 4—1 载流子散射.....	(105)
§ 4—2 载流子迁移率.....	(115)
§ 4—3 电导现象和电导率.....	(122)
§ 4—4 强场作用下的迁移性质.....	(130)
§ 4—5 霍耳效应.....	(138)
§ 4—6 磁阻效应.....	(150)
§ 4—7 半导体的热电效应.....	(153)

习题	(160)
第五章 非平衡载流子	(161)
§ 5—1 非平衡载流子的产生和寿命	(161)
§ 5—2 连续性方程和扩散运动	(168)
§ 5—3 光扩散电势差和光磁电效应	(178)
§ 5—4 非平衡载流子的漂移和扩散	(184)
§ 5—5 复合过程的性质和直接复合理论	(194)
§ 5—6 复合中心理论	(201)
§ 5—7 陷阱效应	(213)
习题	(219)
第六章 pn结	(221)
§ 6—1 平衡pn结的性质	(221)
§ 6—2 pn结的电流—电压特性	(235)
§ 6—3 pn结电容	(250)
§ 6—4 隧道结和pn结的击穿	(260)
习题	(268)
第七章 金属—半导体接触、异质结	(269)
§ 7—1 金属—半导体接触	(269)
§ 7—2 金属—半导体接触的整流理论	(278)
§ 7—3 少数载流子的注入和欧姆接触	(291)
§ 7—4 空间电荷限制电流	(294)
§ 7—5 半导体异质结	(299)
习题	(308)
第八章 半导体表面理论	(309)
§ 8—1 半导体的表面结构	(309)
§ 8—2 半导体表面空间电荷区的基本性质	(314)
§ 8—3 MIS(MOS)结构的电容—电压特性	(325)
§ 8—4 界面态电容, 低频C—V法确定界面态密度	(339)
§ 8—5 表面电导和场效应	(344)
附录8—1 半导体表面层电荷和电容作为表面势 V_s 的函数的一	

般表示式·····	(350)
习题·····	(356)
第九章 半导体的光学性质和光电效应·····	(358)
§ 9—1 半导体中的光吸收·····	(358)
§ 9—2 半导体的光电导·····	(370)
§ 9—3 半导体的光生伏特效应·····	(379)
§ 9—4 半导体发光·····	(384)
§ 9—5 半导体激光·····	(395)
习题·····	(404)
主要参数符号表·····	(406)
重要物理常数·····	(409)
主要参考书·····	(409)

第一章 半导体中的电子状态

半导体和导体、绝缘体不同，它有其独特的性质，致使它有极其广泛的用途。追溯其原因就是在半导体内部，电子可以做极端多样化的运动。本章就是要介绍半导体中的电子状态及其遵循的运动规律，以作为理解半导体物理性质的基础。

大多数半导体是单晶固体，半导体理论是以单晶为依据建立起来的，虽然后来出现了非晶态半导体材料和器件，它的理论仍然是以单晶理论为基础加以修正而来的，本书只讨论单晶半导体。

半导体和其它晶体一样，是由大量原子周期性重复排列而成的，每个原子包含有原子核和多个电子，所以半导体应该是一个多体问题，如有 N 个原子核、 M 个电子，由于 N 、 M 数量很大，所以严格求解薛定格方程是不可能的，为此必须采取近似方法。首先，由于核的运动慢于电子，可以认为核几乎不动，而只有电子在运动，这样就可以把多体问题简化为多电子的单体问题。其次， M 个电子除受原子核的作用外，电子之间也有相互作用，一个电子所处的势场与其它电子和核的作用有关，如果我们近似认为每一个电子都遵循着确定的量子化了的轨道运动，这就是说把电子之间的作用暗含在轨道之中，即一个电子的轨道与其它电子产生的平均作用有关，这就是单电子近似。固体中每一个电子都是在周期性排列且固定不动的原子核势场及其它电子的平均势场中运动，这一势场是具有与晶格周期相同的周期性势场，这种由单个电子在周期性势场中运动的概念出发所建立起来的理论称为能带论。经验证明，用能带论能够阐明大多数半导体中电子运动的规律。

完整地阐明能带论是固体物理的任务，我们只提出能带论中对了解半导体物理现象所必须的概念和结果。

§ 1-1 能带的形成

一、孤立原子中电子所处的状态

自然界的物质都是由原子构成的。在研究半导体中的电子状态时，必须追溯到组成半导体的原子中的电子状态，所以首先回顾一下孤立原子的能量状态。

1. 原子结构

早在六十多年前，人们就知道原子是由原子核和电子组成的，电子具有质量 $m_0 = 9.1 \times 10^{-28} \text{g}$ 、具有负电荷 $-q = -1.6 \times 10^{-19} \text{C}$ 。原子核由质子和中子组成，质子带正电 $(+q)$ ，质量为电子的 1836 倍，中子不带电，质量与质子的差不多，如原子核中有 Z 个质子， N 个中子，则原子核的电荷为 $+Zq$ ，质量为 $(Z+N) \times 1836m_0$ 。可见原子的质量绝大部分集中在原子核上，而轻盈的电子则围绕原子核旋转，将它们联系起来的是正负电荷间的静电库伦吸引力。

原子核的大小约为 $10^{-13} - 10^{-11} \text{cm}$ ，电子的大小约为 10^{-13}cm 而原子的大小约为 10^{-8}cm ，与原子相比，电子和原子核都可以当作微小的带电“质点”，在研究原子的内部状态时，由于原子核很重可以认为它是不动的，而电子则围绕原子核运动，因此原子的状态就是指电子的运动状态，电子在不同运动状态时所相应的能量就是原子的能级。原子内电子的每一种状态具有各方面的物理性质，而最主要的性质是能量。

2. 量子数和量子态

根据量子力学观点，一切微观粒子均具有波、粒二象性，表征波动性和表征粒子性的量之间有一定的联系。一个质量为 m_0 、以速度 $\vec{V}$ 作自由运动的电子，其动量和能量分别为

$$\vec{p} = m_0 \vec{V} \quad (1-1-1)$$

$$E = \frac{p^2}{2m_0} \quad (1-1-2)$$

德布洛依指出：一个自由电子可以用频率为 ν 、波长为 λ 的波表示

$$|\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} = h|\vec{K}| \quad (1-1-3)$$

其中 $|\vec{K}| = \frac{1}{\lambda} = k$ 为波矢的大小。

$$E = h\nu \quad (1-1-4)$$

普朗克常数 $h = 6.625 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{S} = 4.14 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$

以氢原子中的电子为例。

按照粒子的观点，可以认为电子这个“粒子”围绕原子核作圆周运动轨道半径为 r ，电子作圆周运动的向心力是由库伦引力提供的，即

$$\frac{m_0 v^2}{r} = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$\frac{1}{2} m_0 v^2 = \frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 r}$$

动能与动量的关系为

$$\frac{1}{2} m_0 v^2 = \frac{p^2}{2m_0}$$

$$p = \left(\frac{m_0 q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right)^{1/2}$$

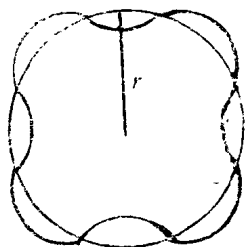


图 1—1 电子绕核运动

根据德布洛依关系 $p = h k = \frac{h}{\lambda} \quad (1-1-5)$

电子的总能量为 $E = E_{\text{动}} + E_{\text{势}} = -\frac{q^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (1-1-6)$

按照波的观点，认为在圆周附近有一个电子波在运行，能够稳定存在的波必须满足布拉格条件

$$2\pi r = n\lambda \quad (n = 1, 2, 3 \dots)$$

即

$$\lambda = \frac{2\pi r}{n} \quad (1-1-7)$$

$$r_n = \frac{\epsilon_0 \hbar^2 n^2}{\pi m_0 q^2} \quad (1-1-8)$$

$$E_n = -\frac{m_0 q^2}{8\epsilon^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (1-1-9)$$

n 是主量子数，将普适常数 $\hbar$ 、 m_0 、 q 的值代入，得到

$$r_n = n^2 \times 0.53 \text{ \AA}$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \times 13.6 \text{ eV}$$

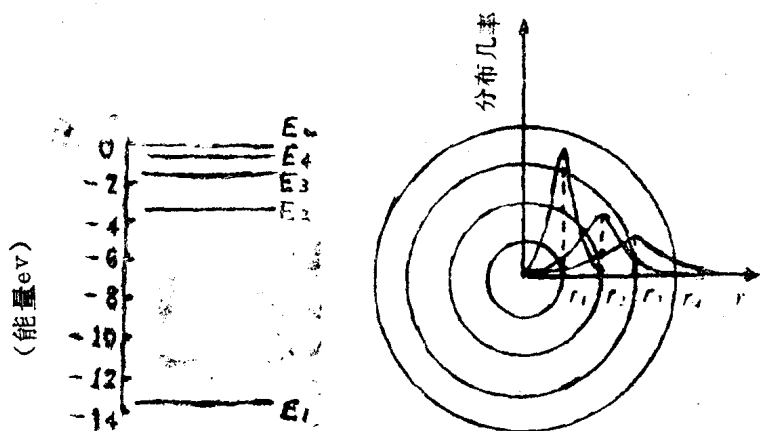


图 1—2 氢原子能级图

能级和轨道半径示意图如图 1—2 所示，可以看出原子中电子的能量是量子化的。

对于含有多个电子的原子，理论和实验均指出电子的能量也是不连续的，它们分列在不同的能级上，按层分布，称为电子壳层，用主量子数 n 标志。处于 $n=1$ 状态的电子属于第一壳层称为 K 壳层；处于 $n=2, 3, 4 \dots$ 状态的电子分别属于第二、

三、四……电子壳层，分别称为L、M、N……壳层，所以主量子数 n 是决定电子能量的主要因素。

同一壳层的电子，由于它们的轨道角动量有不同，所以能量仍稍有不同，角量子数 L 决定轨道角动量的大小。对同一主量子数 n ， L 的可能值为 $0, 1, 2 \cdots (n-1)$ 共 n 个值。 L 不同的壳层称为支壳层，每一个电子壳层内有 n 个支壳层，以 $s, p, d, f \cdots$ 分别表示 $L = 0, 1, 2, 3 \cdots$ 的支壳层。

同一支壳层内的电子轨道角动量在空间的方位仍有不同，磁量子数 m_L 决定轨道角动量在空间的方位，对同一个角量子数 L ， m_L 的可能值为 $0, \pm 1, \pm 2 \cdots \pm L$ 共有 $(2L+1)$ 个值。

电子还有自旋运动，用自旋量子数 m_s 决定自旋角动量在空间的方位，因为自旋只可能有两个状态，所以 m_s 只能取 $(+\frac{1}{2})$ 和 $(-\frac{1}{2})$ 两个值。计入自旋，上述的每一种可能状态数均乘以2。

总之，电子的状态要用一套量子数 n, L, m_L, m_s 来表示，从量子的观点出发，一组量子数 n, L, m_L, m_s 所确定的状态叫量子态。

3. 原子中电子所处的状态

原子中电子填充能级要满足能量最低原理（原子中的电子都有处于能量最低的倾向）和泡里不相容原理（原子中某一状态不能有一个以上的电子占据），由低能向高能围绕着原子核运动。 n 主要决定电子的能量，有时能量还与 L 有关，对多电子原子如过渡族原子，有时小 n 的能量可能高于大 n 时的能量。在无外界作用时，对应于同一个 n 和 L 的支壳层电子的能量相同。

质量、电荷是描述粒子固有性质的参数，凡是这些参数相同的粒子称为全同粒子，所以处于某一状态的任何电子都是等价的。

原子中电子所处的状态可列表表示。

表 1—1 原子中电子所处的状态

壳 层	n	支 壳 层			最多容纳 的电子数
		L	能 级	状态数	
K	1	0	1s	2	2
L	2	0	2s	2	8
		1	2p	6	
M	3	0	3s	2	18
		1	3p	6	
		2	3d	10	
N	4	0	4s	2	32
		1	4p	6	
		2	4d	10	
		3	4f	14	

例如，硅的原子序数是14，共有14个电子，分列在1s、2s、2p、3s、3p的能级上，即 $1s^2$ 、 $2s^2$ 、 $2p^6$ 、 $3s^2$ 、 $3p^2$ ，3s和3p各容纳2个电子，但是对于 $n=3$ 来说，最多可容纳18个电子，因而没有占满，这四个电子就是硅的价电子，所以硅是四价元素。锗是32号元素，原子中电子的状态是 $1s^2$ 、 $2s^2$ 、 $2p^6$ 、 $3s^2$ 、 $3p^6$ 、 $3d^{10}$ 、 $4s^2$ 、 $4p^2$ ，也有四个价电子，也是四价元素。

二、半导体能带的形成

1. 电子的共有化运动

如单晶硅，晶格常数为 $5.4307\text{\AA}$ ，可以算出原子密度为 5.00×10^{22} 个/ cm^3 。可见单晶是由靠得很紧密的原子，周期性重复排列而成的，所以半导体中的电子状态肯定和孤立原子中的

电子状态不同，特别是外层电子状态会有显著的变化。我们以原子结合成晶体的过程定性地说明确半导体中的电子状态。

原子中的电子分列在内、外许多层电子壳层上，每一支壳层对应于确定的能量。当原子间互相接近形成晶体时，不同原子的内外各电子壳层之间有一定的交叠，相邻原子最外壳层交叠最多，内壳层交叠较少。当原子组成晶体后，由于电子壳层间的交叠，电子不再完全局限在某一个原子上，它可以由一个原子转移到相邻的原子上去，因而电子将可以在整个晶体中运动，这种运动称为电子的共有化运动。应该注意，因为各原子中只有相似壳层上的电子才有相同的能量，因此电子只能在相似壳层间转移，所以共有化运动的产生，是由于不同原子的相似壳层间的交叠引起的，例如 $2s$ 支壳层的交叠， $2p$ 支壳层的交叠（如图 1—3 所示）。也可以说，原子结合成晶体以后，每一个原子能级引起了与之相应的共有化运动。由于内外壳层交叠程度很不相同，所以只有外层电子的共有化运动才显着。

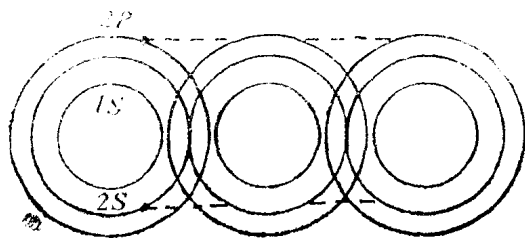


图 1—3 电子共有化运动示意图

2. 能带的形成

晶格电子发生了共有化作用后，它们的能量也要发生变化。由于晶体中的电子是大量的，它们在一起运动时也应该服从泡里不相容原理，因而速度和动量不能完全相同，总是有差别的，这种差别是由于大量晶格原子之间复杂的相互作用引起的，这就是原子的一个能级形成晶体能带的原因。固体物理可以证明，一

一个能带中的能级数目就是晶格的原胞数（不计及原子能级本身的简并）。

以四个原子为例来说明。当原子相距很远时，如同四个孤立原子一样，原子能级如图 1—4 (a)，所以每个能级都是四度简并的；当原子互相靠近时，每个原子中的电子除受本身原子势场的作用外，还要受到其它原子势场的作用，使每个四度简并的能级都分裂为四个彼此靠近的能级，原子靠得愈近，能级分裂得愈厉害（如图 1—4 (b) 所示），这时电子不再属于某一个原子，而被组成晶体的所有原子所共有。

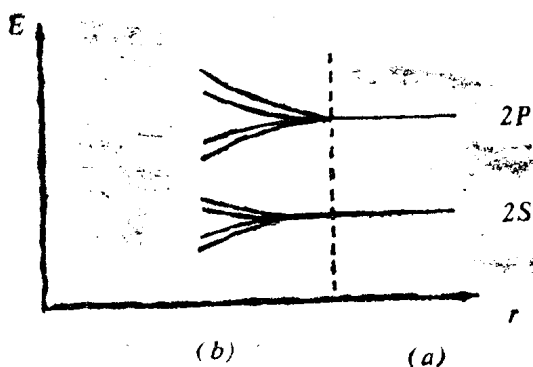


图 1—4 能级的分裂

当 N 个原子组成晶体时， N 是一个很大的数，晶体内每立方厘米内约有 10^{22} — 10^{23} 个原子，每个电子都要受到周围原子势场的作用，使每一个 N 度简并的原子能级都分裂为 N 个彼此相距很近的能级，这 N 个能级组成一个能带，这时电子不再属于某一个原子，而是为全晶体所共有，作共有化运动。分裂的每一个能带都称为允许带，允带之间因没有能级，称为禁带（如图 1—5 所示）。

内壳层的电子原来处于低能级，轨道交叠小，共有化运动弱，能级分裂得小，能带很窄，外层电子原来处于高能级，特别

是价电子，共有化运动很显著，如同自由电子一样，其能级分裂厉害，能带很宽。

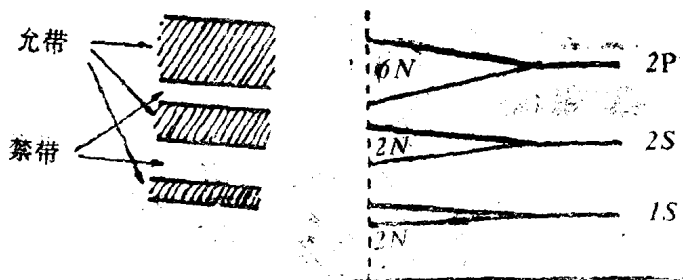


图 1—5 原子能级分裂为能带的示意图

每一能带包含的能级数除与组成晶体的原子数 N 有关外，还与孤立原子能级本身的简并度有关，与自旋也有关。实际晶体，由于 N 是一个很大的数，能级又靠得很近，所以每一个能带中的能级基本上可视为是连续的，有时称它为“准连续”

能带和原子能级之间的对应关系，实际上并不都象上述的那么单纯，并不永远都是一个原子能级对应着一个能带，即不一定能区分出 s 能级和 p 能级所过渡的能带，实际上我们会遇到这样的情况：外层原子能级所引起的能带可以很宽，以至于不同能带相互交叠起来，所以简单的对应关系就不存在了。如碳原子组成的一种金刚石晶体，碳是四价元素有6个电子，原子内电子的组态是 $1s^2, 2s^2, 2p^2$ ，由于 s 轨道和 p 轨道相互杂化，形成 sp^3 杂化轨道， sp^3 杂化轨道呈四面体结构，构成金刚石结构，由 sp^3 杂化轨道构成的能级如图1—6所示，由图看出 γ 很大时能带很窄，随着 γ 的变小，轨道重叠加重，能带变宽，六度简并的 $2p$ 能带可包含 $6N$ 个共有化状态， $2s$ 能带包含 $2N$ 个状态，当 r 减小时，两能带交叠， r 进一步减小时，又重新分成两个能带，它们不再和原子能级相对应，各包含 $4N$ 个能态， N 个碳原子组成稳定晶体时 $r=r_0$ ， $4N$ 个价电子刚好填满下面的能带称为价带，而上面的

能带则全空，由于金刚石的禁带较大（约为7eV），所以是绝缘体。重要半导体Ge、Si的能带与金刚石类似，只是由于禁带较小（0.7eV, 1.1eV），所以是半导体。

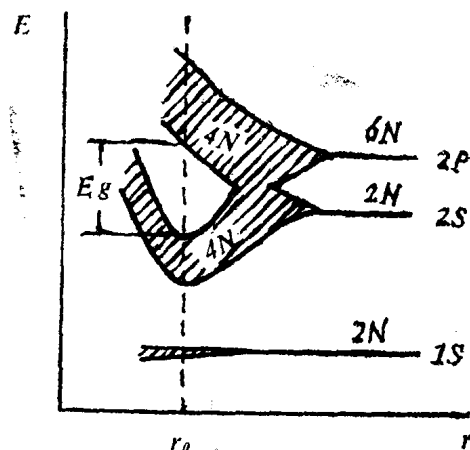


图 1—6 金刚石结构能带的形成

三、晶体中电子作共有化运动的特征

孤立原子中的电子只受到本身原子的势场作用如图 1—7 (a) 所示。而晶体中的电子还要受到相邻其它原子和电子的平均势场作用，这个势场是一个与晶格周期相同的周期性势场，如图 1—7 (b) 所示。所以一般来说，晶体中的电子兼有原子运动和共有化运动，而外层电子，特别是价电子的共有化运动特征更显著。

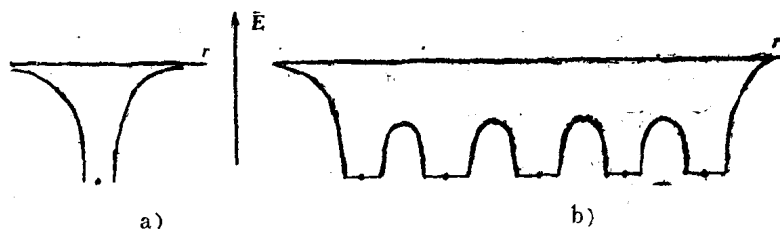


图 1—7 一维势能示意图