



高等院校电子科学与技术专业系列教材

# 半导体器件 物理

孟庆巨 刘海波 孟庆辉 编著



科学出版社  
www.sciencep.com

高等院校电子科学与技术专业系列教材

# 半导体器件物理

孟庆巨 刘海波 孟庆辉 编著

科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书结合一些基础的、主要的、常用的半导体器件,介绍了半导体器件的基本结构、主要工艺技术和物理原理。全书内容包括:半导体物理基础、PN结、金属-半导体结、结型场效应晶体管、金属-氧化物-半导体场效应晶体管、半导体太阳能电池和光电二极管、半导体发光管和激光器、集成器件和电荷耦合器件等。

本书可作为高等院校微电子、光电子、电子科学与技术等专业本科生和研究生的教材,也可供有关专业的研究人员和工程技术人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

半导体器件物理/孟庆巨,刘海波,孟庆辉编著. —北京:科学出版社, 2005

高等院校电子科学与技术专业系列教材

ISBN 7-03-013951-8

I. 半… II. ①孟…②刘…③孟… III. 半导体器件-高等学校-教材  
IV. TN389

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 073255 号

责任编辑:马长芳 资丽芳 贾瑞娜 / 责任校对:张怡君

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

新蕾印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2005年1月第一版 开本:B5(720×1000)

2005年1月第一次印刷 印张:21 3/4

印数:1—2 500 字数:418 000

定价:33.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

## 序 言

21 世纪,随着现代科学技术的飞速发展,人类历史即将进入一个崭新的时代——信息时代。其鲜明的时代特征是,支撑这个时代的诸如能源、交通、材料和信息等基础产业均将得到高度发展,并能充分满足社会发展和人民生活的多方面需求。作为信息科学的基础,微电子技术和光电子技术同属于教育部本科专业目录中的一级学科“电子科学与技术”。微电子技术伴随着计算机技术、数字技术、移动通信技术、多媒体技术和网络技术的出现得到了迅猛的发展,从初期的小规模集成电路(SSI)发展到今天的巨大规模集成电路(GSI),成为使人类社会进入信息化时代的先导技术。20 世纪 60 年代初出现的激光和激光技术以其强大的生命力推动着光电子技术及其相关产业的发展,光电子技术集中了固体物理、波导光学、材料科学、半导体科学技术和信息科学技术的研究成就,成为具有强烈应用背景的新兴交叉学科,至今光电子技术已经应用于工业、通信、信息处理、检测、医疗卫生、军事、文化教育、科学研究和社会发展等各个领域。可以预言,光电子技术将继续微电子技术之后再次推动人类科学技术的革命和进步。因此,本世纪将是微电子和光电子共同发挥越来越重要作用的时代,是电子科学与技术飞速发展的时代。

电子科学与技术对于国家经济发展、科技进步和国防建设都具有重要的战略意义。今天,面对电子科学技术的飞速发展,世界上发达国家像美国、德国、日本、英国、法国等都竞相将微电子技术和光电子技术引入国家发展计划。我国对微电子技术和光电子技术的研究也给予了高度重视。在全国电子科学技术的科研、教学、生产和使用单位的共同努力下,我国已经形成了门类齐全、水平先进、应用广泛的微电子和光电子技术的科学研究领域,并在产业化方面形成了一定规模,取得了可喜的进步,为我国科学技术、国民经济和国防建设做出了积极贡献,在国际上也争得了一席之地。但是我们应该清醒地看到,在电子科学与技术领域,我国与世界先进水平仍有不小的差距,尤其在微电子技术方面的差距更大。这既有历史、体制、技术、工艺和资金方面的原因,也有各个层次所需专业人才短缺的原因。

为了我国电子科学与技术事业的可持续发展和抢占该领域中高新技术的制高点,就必须统筹教育、科研、开发、人才、资金和市场等各种资源和要素,其中人才培养是极其重要的一环。根据教育部加强高等学校本科教育的有关精神,电子科学与技术教学指导委员会和科学出版社,经过广泛而深入的调研,组织出版了这套电子科学与技术本科专业系列教材。

本系列教材具有以下特色:

1. 多层次。考虑到多层面的需求(普通院校、重点院校或研究型大学、应用型

大学),根据不同的层次,有针对性地编写不同的教材,同层次的教材也可能出版多种面向的教材。

2. 延续传统、更新内容,基础精深、专业宽新。教材编写在准确诠释基本概念、基本理论的同时,注重反映该领域的最新成果和发展方向,真正使教材能够达到培养“厚基础、宽口径、会设计、可操作、能发展”人才的目的。

3. 扩宽专业基础,加强实践教学。适当拓宽专业基础知识的范围,以增强培养人才的适应性;注重实践环节的设置,以促进學生实际动手能力的培育。

4. 适应教学计划,考虑自学需要。教材的编写完全按照教学指导委员会最新的课程设计和课程要求的指示精神,同时给学生留有更大的选择空间,以利于学生的个性发展和创新能力的培养。

5. 立体化。教材的编写是立体的,包括主教材、学习辅导书、教师参考书和多媒体课件等等。

本系列教材的编写集中了全国高校的优势资源,突出了多层次与适应性、综合性与多样性、前沿性与先进性、理论与实践的结合。在教材的组织和出版过程中得到了相关学校教务处及学院的帮助,在此表示衷心的感谢。

根据电子科学与技术专业发展战略的要求,我们将对这套系列教材不断更新,以保持教材的先进性和适用性。热忱欢迎全国同行以及关注电子科学与技术领域教育及发展前景的广大有识之士对我们的工作提出宝贵意见和建议。

教育部“电子科学与技术”教学指导委员会主任  
中国科学院院士,天津大学教授

## 前 言

本书是作者多年来在吉林大学为微电子、光电子和电子科学与技术等专业本科生讲授半导体物理和半导体器件物理课程的教学实践基础上所编写的一部教材。

半导体器件物理一直是吉林大学微电子、光电子和电子科学与技术等专业的主干专业基础课。半导体器件种类繁多,结构各异,性能千差万别,新技术、新工艺、新产品层出不穷,发展极其迅速。由于篇幅和学时所限,任何一本教材都无法囊括所有器件及其工艺技术,也不可能把每一器件的各种性能一一地详尽介绍,更无法跟踪新工艺技术的飞速发展。因此,根据专业要求,结合一些基本的、主要的、有代表性的常用器件,通过对它们的基本结构、工作原理、主要特性和基本工艺技术的介绍,培养学生具备举一反三、触类旁通的进一步深入学习、研究及设计半导体器件的能力是本书编写过程中始终贯彻的指导思想。这也是作者在教学中始终贯彻的指导思想。

本书共分 10 章。其中第一章为半导体物理基础,这一章所提供的简明而充分的半导体物理知识可作为没有学过半导体物理的读者学习本书以后诸章内容的必要的和足够的准备知识。同时,由于这一章和其后各章的有机结合,也为学习过半导体物理的读者提供了很多的方便。全书由孟庆巨教授主编。中国人民解放军空军航空大学孟庆辉教授和吉林大学刘海波博士参与了本书第四、五、九、十章的编写工作。全书由孟庆巨教授设计、统稿和审核。

在本书编写过程中,作者力图做到物理图像清晰,理论运用准确,数学推导正确,文字叙述简明、流畅。但由于作者学识有限,加之写作时间仓促,错漏之处在所难免。恳请广大读者和同行指正。

在本书编写过程中作者参阅了许多中外有关著作,从中获益匪浅。为了便于读者查阅,同时也为了表达作者对这些著作作者的敬意,一些主要著作被列于本书的参考文献之中。

在编写本书的过程中,作者同北京大学张国义教授、南开大学曹亚安教授进行过多次有益的讨论。这些讨论使作者受益良多。

吉林大学电子科学与工程学院院长杜国同教授,副院长郭树旭教授和微电子与光电子学系主任贾刚教授对本书的编写工作给予了大力的支持。作者对以上诸位同志一并表示衷心的感谢。

作 者

2004 年于吉林大学

## 主要符号表

$a$	晶格常数、宽度	$f(E)$	费米-狄拉克分布函数
$A$	面积	$F$	力
$C$	电容	$g$	电导、导纳
$C_D$	扩散电容	$g_1$	线性跨导
$C_G$	栅电容	$g_m$	跨导
$C_o$	氧化层电容	$G$	产生率、增益系数、电导
$C_{TE}$	发射结耗尽层电容	$h$	普朗克常量
$C_{TC}$	集电结耗尽层电容	$h_{te}$	交流共发射极电流增益
$D_n$	电子扩散系数	$h_{FE}$	直流共发射极电流增益
$D_p$	空穴扩散系数	$I$	电流强度
$E$	能量	$I_c$	集电极电流
$E_a$	受主能级	$I_D, I_{DS}$	漏极电流
$E_c$	导带底能量	$I_E$	发射极电流
$E_d$	施主能级	$I_B$	基极电流
$E_F$	费米能级	$I_L$	短路光电流
$E_{Fn}$	电子准费米能级	$I_0$	PN 结饱和电流
$E_{Fp}$	空穴准费米能级	$I_{TH}$	阈值电流
$E_g$	禁带宽度	$J$	电流密度
$E_i$	杂质电离能	$J_{TH}$	阈值电流密度
$E_i$	本征费米能级	$J_{mon}$	名义电流密度(标称电流密度)
$E_{i0}$	半导体体内本征费米能级	$K$	玻尔兹曼常数
$E_{is}$	表面本征费米能级	$k$	电子波矢
$E_t$	复合中心能级	$k_0$	氧化物相对介电常数
$E_V$	价带顶能量	$k_S$	半导体相对介电常数
$\mathcal{E}$	电场强度	$L$	长度
$\mathcal{E}_m$	最大电场强度	$L_D$	德拜长度
$\mathcal{E}_0$	绝缘层内电场强度	$L_n$	电子扩散长度
$\mathcal{E}_S$	半导体表面电场强度	$L_p$	空穴扩散长度
$f$	频率	$m$	质量
		$m^*$	有效质量张量

$m^{*-1}$	有效质量倒数张量	$v$	速度
$m_c$	电导有效质量	$v_n$	电子平均漂移速度
$m_n^*, m_n$	电子有效质量	$v_p$	空穴平均漂移速度
$m_p^*, m_p$	空穴有效质量	$v_s$	饱和速度
$m_d$	状态密度有效质量	$\bar{v}_{th}$	热运动平均速度
$m_l$	纵有效质量	$V$	电压
$m_{ph}$	重空穴有效质量	$V_B$	击穿电压
$m_{pl}$	轻空穴有效质量	$V_{BL}$	线性缓变结击穿电压
$m_t$	横有效质量	$V_E$	发射结电压
$n$	电子浓度、折射率	$V_C$	集电结电压
$n_i$	本征载流浓度	$V_{CE}$	集电极-发射极电压
$n_t$	杂质能级上电子浓度	$V_D$	漏电压
$N$	杂质浓度、原胞数	$V_{FB}$	平带电压
$N_a$	受主杂质浓度	$V_G$	栅极电压
$N_d$	施主杂质浓度	$V_{OC}$	开路电压
$N_c$	导带有效状态密度	$V_{TH}$	阈值电压
$N_t$	复合中心浓度	$W$	空间电荷区宽度
$r$	发射效率、复合系数	$x_E$	发射区宽度
$N_V$	价带顶有效状态密度	$x_B$	有效基区宽度
$p$	空穴浓度	$x_C$	集电结空间电荷区边界
$P$	功率	$x_d$	空间电荷区厚度
$P$	动量、准动量	$x_0$	氧化层厚度
$Q$	电荷	$Y$	交流导纳
$Q_B$	耗尽层单位面积电荷	$\alpha$	吸收系数、共基极电流增益、电 离系数
$Q_1$	反型层单位面积电荷	$\beta_T$	基区输运子
$Q_s$	贮存电荷、半导体表面单位 面积电荷	$\sigma$	电导率
$q$	电子电荷、格波波数	$\tau$	寿命、弛豫时间
$Q_{sig}$	信号电荷	$\tau_B$	基区渡越时间
$R$	电阻、反射率、复合率	$\tau_C$	集电结耗尽层电容充电时间
$R_{\square}$	薄层电阻	$\tau_d$	集电结耗尽层渡越时间
$T$	绝对温度、平均透射比	$\tau_E$	发射结耗尽层电容充电时间
$t$	时间	$\tau_n$	电子寿命
$S$	表面复合速度	$\tau_p$	空穴寿命
		$\eta$	转换效率或量子效率



$\eta_D$	微分外量子效率	$q\phi'_m$	修正金属功函数
$\eta_i$	内量子效率	$q\phi_s$	半导体功函数
$\eta_e$	外量子效率	$q\phi'_s$	修正半导体功函数
$\eta_0$	逸出率	$\psi_0$	自建电势
$\theta$	角度	$\psi_s$	半导体表面势
$\theta_C$	临界角	$\psi_{si}$	强反型表面势
$\lambda$	波长	$\omega$	角频率
$\nu$	光波频率	$\chi$	电子亲和势
$\mu_n$	电子迁移率	$\kappa$	比例因子
$\mu_p$	空穴迁移率	$\omega_c$	截止频率
$\rho$	电阻率、电荷密度	$\omega_T$	增益-带宽乘积
$\Phi$	光通量	$\omega_a$	共基极截止频率
$\phi_f$	费米势	$\omega_\beta$	共发射极截止频率
$q\phi_b$	肖特基势垒高度	$\epsilon_0$	真空介电常数
$q\phi_m$	金属功函数	$\Gamma$	光限制因子

# 目 录

序言

前言

主要符号表

<b>第一章 半导体物理基础</b> .....	1
1.1 半导体中的电子状态 .....	1
1.1.1 半导体中电子的波函数和能量谱值 布洛赫定理 .....	1
1.1.2 能带 .....	4
1.1.3 有效质量 .....	6
1.1.4 导带电子和价带空穴 .....	9
1.1.5 硅、锗、砷化镓的能带结构 .....	12
1.1.6 杂质和缺陷能级 .....	15
1.2 载流子的统计分布 .....	20
1.2.1 能带中的状态密度和分布函数 .....	20
1.2.2 能带中的电子和空穴浓度 .....	22
1.2.3 本征半导体 .....	24
1.2.4 只有一种杂质的半导体 .....	25
1.2.5 杂质补偿半导体 .....	28
1.3 简并半导体 .....	29
1.4 载流子的散射 .....	32
1.4.1 格波与声子 .....	32
1.4.2 载流子的散射 .....	34
1.5 载流子的输运 .....	37
1.5.1 漂移运动 迁移率和电导率 .....	37
1.5.2 扩散运动和扩散电流 .....	39
1.5.3 流密度和电流密度 .....	40
1.5.4 非均匀半导体中的自建场 .....	40
1.6 非平衡载流子 .....	43
1.6.1 非平衡载流子的产生与复合 .....	43
1.6.2 准费米能级 .....	46
1.6.3 复合机制 .....	47

1.6.4	半导体中的基本控制方程	53
<b>第二章</b>	<b>PN 结</b>	<b>56</b>
2.1	热平衡 PN 结	58
2.2	加偏压的 PN 结	62
2.2.1	加偏压的 PN 结的能带图	62
2.2.2	少数载流子的注入与输运	64
2.3	理想 PN 结的直流电流-电压特性	67
2.4	空间电荷区的复合电流和产生电流	72
2.5	隧道电流	74
2.6	$I$ - $V$ 特性的温度依赖关系	77
2.7	耗尽层电容 求杂质分布和变容二极管	78
2.8	小信号交流分析	81
2.9	电荷贮存和反向瞬变	84
2.10	PN 结击穿	88
<b>第三章</b>	<b>双极结型晶体管</b>	<b>94</b>
3.1	双极结型晶体管的结构	95
3.2	基本工作原理	98
3.2.1	晶体管的放大作用	98
3.2.2	电流分量	100
3.2.3	电流增益	100
3.3	理想双极结型晶体管中的电流传输	103
3.3.1	电流传输	103
3.3.2	正向有源模式	105
3.4	埃伯斯-莫尔方程	109
3.4.1	工作模式和少子分布	109
3.4.2	埃伯斯-莫尔方程	110
3.5	缓变基区晶体管	112
3.6	基区扩展电阻和电流集聚	113
3.7	基区宽度调变效应	116
3.8	晶体管的频率响应	117
3.9	混接 $\pi$ 型等效电路	120
3.10	晶体管的开关特性	122
3.11	击穿电压	125
3.12	P-N-P-N 结构	127
3.13	异质结双极晶体管	130
3.13.1	平衡异质结	130

3.13.2	加偏压的异质结 .....	135
3.13.3	异质结双极晶体管(HBT)放大的基本理论 .....	135
3.14	几类常见的 HBT .....	137
<b>第四章</b>	<b>金属-半导体结 .....</b>	<b>139</b>
4.1	肖特基势垒 .....	139
4.1.1	肖特基势垒的形成 .....	139
4.1.2	加偏压的肖特基势垒 .....	140
4.2	界面态对势垒高度的影响 .....	142
4.3	镜像力对势垒高度的影响 .....	143
4.4	肖特基势垒二极管的电流-电压特性 .....	146
4.5	肖特基势垒二极管的结构 .....	149
4.6	金属-绝缘体-半导体肖特基势垒二极管 .....	151
4.7	肖特基势垒二极管和 PN 结二极管之间的比较 .....	151
4.8	肖特基势垒二极管的应用 .....	153
4.9	欧姆接触 .....	154
<b>第五章</b>	<b>结型场效应晶体管和金属-半导体场效应晶体管 .....</b>	<b>156</b>
5.1	JFET 的基本结构和工作过程 .....	156
5.2	理想 JFET 的 $I-V$ 特性 .....	158
5.3	静态特性 .....	160
5.4	小信号参数和等效电路 .....	162
5.5	JFET 的截止频率 .....	165
5.6	夹断后的 JFET 性能 .....	165
5.7	金属-半导体场效应晶体管 .....	167
5.8	JFET 和 MESFET 的类型 .....	168
5.9	异质结 MESFET 和 HEMT .....	169
<b>第六章</b>	<b>金属-氧化物-半导体场效应晶体管 .....</b>	<b>172</b>
6.1	理想 MOS 结构的表面空间电荷区 .....	173
6.1.1	半导体表面空间电荷区 .....	173
6.1.2	载流子的积累、耗尽和反型 .....	174
6.1.3	反型和强反型条件 .....	177
6.2	理想 MOS 电容器 .....	179
6.3	沟道电导与阈值电压 .....	186
6.4	实际 MOS 的电容-电压特性 .....	187
6.4.1	功函数差的影响 .....	187
6.4.2	界面陷阱和氧化物电荷的影响 .....	188
6.4.3	实际 MOS 阈值电压和 $C-V$ 曲线 .....	191

6.5	MOS 场效应晶体管	193
6.5.1	基本结构和工作过程	193
6.5.2	静态特性	193
6.6	等效电路和频率响应	197
6.7	亚阈值区	199
6.8	MOS 场效应晶体管的类型	200
6.9	影响阈值电压的其余因素	201
6.10	器件尺寸比例	204
6.10.1	短沟道效应	204
6.10.2	器件的小型化	206
6.10.3	MOSFET 制造工艺	209
<b>第七章</b>	<b>太阳能电池和光电二极管</b>	<b>213</b>
7.1	半导体中的光吸收	213
7.2	PN 结的光生伏打效应	216
7.3	太阳能电池的 $I$ - $V$ 特性	218
7.4	太阳能电池的效率	220
7.5	光产生电流和收集效率	221
7.6	提高太阳能电池效率的考虑	223
7.7	肖特基势垒和 MIS 太阳能电池	228
7.8	非晶硅(a-Si)太阳能电池	229
7.8.1	P-I-N 结太阳能电池	230
7.8.2	非晶硅肖特基势垒太阳能电池	231
7.9	光电二极管	231
7.9.1	P-I-N 光电二极管	231
7.9.2	雪崩光电二极管(APD)	232
7.9.3	金属-半导体光电二极管	234
7.10	光电二极管的特性参数	235
7.10.1	量子效率和响应度	235
7.10.2	响应速度 带宽	237
7.10.3	噪声特性	238
7.10.4	其他几个概念	239
<b>第八章</b>	<b>发光二极管与半导体激光器</b>	<b>241</b>
8.1	辐射复合与非辐射复合	241
8.1.1	辐射复合	241
8.1.2	非辐射复合	248
8.2	LED 的基本结构和工作过程	251

8.3	LED 的特性参数 .....	252
8.3.1	$I$ - $V$ 特性 .....	253
8.3.2	量子效率 .....	253
8.3.3	光谱分布 .....	259
8.4	可见光 LED .....	262
8.4.1	GaP LED .....	262
8.4.2	$\text{GaAs}_{1-x}\text{P}_x$ LED .....	263
8.4.3	GaN LED .....	264
8.5	红外 LED .....	265
8.6	异质结 LED .....	266
8.7	半导体激光器及其基本结构 .....	268
8.8	半导体受激发射的条件 .....	270
8.8.1	粒子数反转分布 .....	270
8.8.2	光学谐振腔 .....	274
8.8.3	振荡的阈值条件 .....	275
8.8.4	阈值电流 .....	277
8.9	结型半导体激光器的特性 .....	278
8.9.1	阈值特性 .....	278
8.9.2	转换效率 .....	279
8.9.3	光谱分布 .....	282
8.10	异质结激光器 .....	284
8.10.1	单异质结(SH)激光器 .....	284
8.10.2	双异质结(DH)激光器 .....	285
<b>第九章</b>	<b>集成器件</b> .....	<b>288</b>
9.1	双极集成器件的隔离工艺 .....	289
9.1.1	PN 结隔离 .....	289
9.1.2	介质隔离 .....	291
9.1.3	等平面工艺 .....	292
9.2	集成电路中的无源元件 .....	293
9.2.1	集成电路电阻器 .....	293
9.2.2	集成电路电容器 .....	295
9.3	双极型反相器 .....	295
9.4	集成注入逻辑 .....	297
9.5	NMOS 逻辑门电路 .....	298
9.6	NMOS 存储器件 .....	299
9.7	CMOS 反相器 .....	302

9.8 砷化镓集成电路 .....	306
<b>第十章 电荷转移器件</b> .....	<b>309</b>
10.1 电荷转移 .....	309
10.2 深耗尽状态和表面势阱 .....	311
10.3 MOS 电容的瞬态特性 .....	312
10.4 信息电荷的输运 转换效率 .....	315
10.5 电极排列和 CCD 制造工艺 .....	317
10.6 体内(埋入)沟道 CCD .....	321
10.7 电荷的注入、检测和再生 .....	323
10.8 集成斗链器件 .....	326
10.9 电荷耦合图像器件 .....	327
<b>参考文献</b> .....	<b>329</b>
<b>附录 A 物理常数</b> .....	<b>330</b>
<b>附录 B 重要半导体的性质</b> .....	<b>331</b>
<b>附录 C 硅、锗和砷化镓的性质</b> .....	<b>332</b>

# 第一章 半导体物理基础

必要的半导体物理知识是学习半导体器件物理的基础。为了方便学过半导体物理的学生使用本书时对半导体物理的有关知识进行回顾和查阅,也为了给没有学过半导体物理的读者提供必要的参考,我们在本章简明地介绍半导体的基本性质。主要内容包括半导体能带论的主要结果,半导体中载流子的统计分布,费米能级的计算,载流子的输运以及半导体中的基本控制方程等。半导体表面和半导体光学性质是半导体物理中的重要内容,为不使本章的内容过于冗长,更为了学习相关器件物理的方便,分别把它们放在有关章节(第六、七、八章)予以介绍。相信上述内容可为读者学习半导体器件物理提供足够的预备知识。如果有些读者觉得本书所介绍的内容尚不够全面、深入和详尽,可参阅标准的半导体物理和固体物理教材。

## 1.1 半导体中的电子状态

### 1.1.1 半导体中电子的波函数和能量谱值 布洛赫定理

电子状态亦称为量子态,指的是电子的运动状态。

晶体是由规则的周期性排列起来的原子所组成的。每个原子又包含有原子核和核外电子,原子核和电子之间、电子和电子之间存在着库仑作用,因此,它们的运动不是彼此无关的,应该把它们作为一个体系统地加以考虑。也就是说,这是一个多体问题。为使问题简化,可近似地把每个电子的运动单独地加以考虑,即在研究一个电子的运动时,把在晶体中各处的其他电子和原子核对这个电子的库仑作用,按照它们的概率分布,平均地加以考虑,这种近似称为单电子近似。这样,一个电子所受的库仑作用仅随它自己位置的变化而变化,于是它的运动便由下面仅包含这个电子坐标的波动方程式决定

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1-1)$$

式中,  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$  为电子的动能算符;  $V(\mathbf{r})$  为电子的势能算符,它具有晶格的周期性;

$E$  为电子的能量;  $\psi(\mathbf{r})$  为电子的波函数;  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ,  $h$  为普朗克常量,  $\hbar$  称为约化普朗克常量。

如果势函数  $V(\mathbf{r})$  具有晶格的周期性,即



$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) = V(\mathbf{r}) \quad (1-2)$$

则方程(1-1)的解  $\psi(\mathbf{r})$  具有如下形式

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1-3)$$

式中,  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  为与晶格具有同样周期性的周期函数, 即

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1-4)$$

式(1-2)和式(1-4)中的  $\mathbf{R}_m$  称为晶格平移矢量

$$\mathbf{R}_m = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3 \quad (1-5)$$

式中,  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  为晶格的一组基矢量;  $m_1, m_2, m_3$  为三个任意整数。公式中出现的  $\mathbf{k}$  为波矢量, 是任意实数矢量。  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  称为波数,  $\lambda$  为波长。以上的陈述称为布洛赫 (Bloch) 定理。式(1-3)所确定的波函数称为布洛赫函数或布洛赫波。

由于

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) &= e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R}_m)} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \end{aligned}$$

所以布洛赫函数也可以写成下面的形式

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1-6)$$

由于  $|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_m}|^2 = 1$ , 说明周期性势场中电子的波函数  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  和平移任意一个晶格矢量  $\mathbf{R}_m$  后得到的波函数  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m)$  之间只差一个模量为 1 的因子。也就是说, 在晶体中各原胞的对应点上, 电子出现的概率相同, 即电子可以在整个晶体中运动。通常称这种电子态为扩展态。

波矢量  $\mathbf{k}$  是标志电子运动状态的量, 不同的  $\mathbf{k}$  代表不同的状态, 因此  $\mathbf{k}$  也同时起着量子数的作用。我们考察由  $\mathbf{k}$  和  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{k}_n$  标志的两个状态。式中

$$\mathbf{k}_n = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3 \quad (1-7)$$

叫做倒格矢;  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  为一组与  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  相应的倒基矢;  $n_1, n_2, n_3$  为任意整数; 由  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  所构成的空间称为倒空间。  $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$  与  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  之间具有如下关系

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij} = \begin{cases} 2\pi, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

且

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$$

$$\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)$$

$$\mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)$$

$$\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$$

显然晶格平移矢量  $\mathbf{R}_m$  和倒格矢  $\mathbf{k}_n$  之间满足如下关系

$$e^{i\mathbf{k}_n \cdot \mathbf{R}_m} = 1$$