

考 研 指 导 用 书

半导体 物理问题与习题

(第二版)

田敬民 编著

国防工业出版社

<http://www.ndip.cn>

考 研 指 导 用 书

内容简介

半导体 物理问题与习题

(第二版)

田敬民 编著



国防工业出版社

· 北京 ·

内 容 简 介

本书密切配合高等学校工科电子类规划教材《半导体物理学》的内容,全书的分章和编排次序均与教材一致。共十二章,分别是:半导体中的电子状态、半导体中杂质和缺陷能级、半导体中载流子的统计分布、半导体的导电性、非平衡载流子、 $p-n$ 结、金属—半导体接触、半导体表面与 MIS 结构、半导体异质结构、半导体的光学性质和光电与发光现象、半导体的热电性质、半导体磁和压阻效应。每章在进行重点及难点分析的基础上,再安排了思考题,然后通过对例题和综合性习题的求解与分析,进一步强调了基本原理与基本概念,特别注意了对基本概念的综合应用。

本书可作为硕士研究生的入学考试辅导用书,也可作为相关专业的教学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

半导体物理问题与习题 / 田敬民编著. 第 2 版. —北京:国防工业出版社, 2005. 4

考研指导用书

ISBN 7-118-03675-7

I. 半... II. 田... III. 半导体物理学—研究生—入学考试—自学参考资料 IV. 047

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 110392 号

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号)

(邮政编码 100044)

腾飞印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 787×960 1/16 印张 $17\frac{1}{2}$ 364 千字

2005 年 4 月第 1 版 2005 年 4 月北京第 1 次印刷

印数:8301—13300 册 定价:23.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)68428422

发行邮购:(010)68414474

发行传真:(010)68411535

发行业务:(010)68472764

前 言

半导体物理学是微电子学、电子科学与技术、激光与红外等专业的重要基础课。本书密切配合刘恩科、朱秉升、罗晋生等编写的《半导体物理学》的内容,每章都编写了要点分析,对各章内容进行概括,尽量使其系统化,并对教材中重要概念作了进一步说明。编写的问题和习题力求体现教材中各章的基本内容、基本概念和基本要求,希望通过思考问题帮助读者对半导体物理中的主要内容和主要概念加深理解。为了便于学生理解,每章都选编了有具体解题步骤的例题,以培养学生综合解题和融会贯通的能力。为了开阔学生思路,每章都选编了一部分难度较高的综合性题目,力求反映不同类型的物理问题。解题中所用的数据和曲线均以教材为准。

朱秉升教授为本书提出过许多宝贵意见,在此致以衷心的感谢。

本书第1版于1995年5月出版,曾先后3次印刷。这次对原书的内容进行了一些补充和调整,以期更加贴近读者的需求。修订中,国防工业出版社陈洁编审提出许多宝贵意见,在此表示诚挚的感谢!

尽管我们对第1版内容作了不少订正,恐仍有错误或不妥之处,祈望读者指正。

目 录

第 1 章 半导体中的电子状态	1
要点分析	1
问 题	5
解题示例	7
习 题	20
第 2 章 半导体中杂质和缺陷能级	24
要点分析	24
问 题	25
解题示例	26
习 题	29
第 3 章 半导体中载流子的统计分布	30
要点分析	30
问 题	32
解题示例	35
习 题	48
第 4 章 半导体的导电性	52
要点分析	52
问 题	54
解题示例	57
习 题	72
第 5 章 非平衡载流子	77
要点分析	77
问 题	81
解题示例	85
习 题	103
第 6 章 p-n 结	110
要点分析	110
问 题	112

解题示例	114
习 题	122
第 7 章 金属—半导体接触	126
要点分析	126
问 题	129
解题示例	130
习 题	139
第 8 章 半导体表面与 MIS 结构	142
要点分析	142
问 题	147
解题示例	149
习 题	169
第 9 章 半导体异质结构	174
要点分析	174
问 题	180
解题示例	182
习 题	187
第 10 章 半导体的光学性质和光电与发光现象	189
要点分析	189
问 题	197
解题示例	199
习 题	213
第 11 章 半导体的热电性质	216
要点分析	216
问 题	217
解题示例	218
习 题	222
第 12 章 半导体磁和压阻效应	224
要点分析	224
问 题	227
解题示例	230
习 题	239
附录 A 典型考试模拟试题及参考答案	242
附录 B 研究生入学考试试题	264
参考文献	273

第 1 章 半导体中的电子状态

要点分析

(1) 固体可分为晶体和非晶体两大类。晶体是由原子或离子有规则排列而成,因此,晶体结构的周期性是其基本特征。晶体具有一定规则的几何形状和对称的外形,均是内在结构规律性的反映。半导体材料锗(Ge)、硅(Si)、砷化镓(GaAs)、锑化铟(InSb)、硫化镉(CdS)、氮化镓(GaN)、氮化铝(AlN)、碳化硅(SiC)等材料均为晶体。

(2) 金刚石结构、闪锌矿结构和纤锌矿结构。Ge、Si 等半导体属于金刚石结构,构成晶体的原子依靠共价键(即与电子自旋相关的交换力)结合而成。金刚石结构的晶胞是一个正立方体,可以看成是由两个面心立方晶胞沿立方体的空间对角线相互位移四分之一的空间对角线长度套构而成。金刚石结构具有立方对称性,通常按照简单立方晶格的方式规定其晶面和晶向。任何两个近邻原子的连线都沿一个 $[111]$ 方向。处于四面体顶点的 2 个原子的连线都沿一个 $[110]$ 方向。四面体不共顶点的两个棱的中点的连线沿一个 $[100]$ 方向。金刚石结构的原子密排面是(111)晶面,因为它包含 2 个套在一起的面立方,故其密排面是双重的。由于密排面内原子密集,而且双层密排面内每层原子都有 3 个共价键与另一层结合,所以双层密排面内结合很强。然而,在 2 个双层面之间间距较大,而且共价键少,平均 2 个原子之间才有 1 个共价键,致使双层密排面之间结合力弱。

GaAs、InSb、InP(磷化铟)等 III - V 族化合物半导体属于闪锌矿结构,与金刚石结构所不同的只是闪锌矿是由两种原子组成的,即体内对角线四分之一的 4 个原子与格点上原子不相同。在 III - V 族化合物的化学键中,起主要作用的是共价键。但由于 Ga 和 As 原子的电负性相差较大,在共价键中电负性较强的原子相对来说带负电性,电负性较弱的原子带正电,因而库仑作用对结合能有一定的贡献,使其共价键中含有少量的离子键成分,通常称为混合键。

GaN、AlN、InN 等 III - V 族氮化物半导体的禁带宽度(带隙)大于 2.3eV,故称为宽禁带半导体。在通常条件下它们为纤锌矿结构,在一定条件下也可以闪锌矿结构存在,两者均以正四面体结构为基础。其主要差别在于原子堆垛次序与对称性不同,纤锌矿结构具有六方对称性,而闪锌矿结构具有立方对称性。

III - V 族化合物之间也能形成连续固熔体,构成混合晶体,这类晶体能带结构及相关性质可随组分(即混晶比)的连续变化而改变,这一性质在半导体技术中已获得广泛的应用。

SiC 作为惟一的 IV - IV 族宽禁带化合物半导体,由于其禁带宽度大、热导率高、临界雪崩击穿场强和电子饱和速度大等优点受到高度重视。SiC 在温度、压力、介质条件等不同的物理环境下,能够形成 2 种或 2 种以上各自具有一定形态、一定构造和一定物理性质的结晶形态,这种现象称为同质多象。通常把这些成分相同,形态、结构和物理性质有差异的晶体称为同质多象变体(或同质异型体)。SiC 的同质异型体迄今已观察到约 200 余种,其中仅有 3C - SiC 属立方晶系,其他同质异型体皆属六方晶系,其晶体结构或为六方体,或为菱面六方体, SiC 所有同质异型体都可看成由一种基本结构完全相同的正四面体型 Si - C 双原子层的堆垛而成,区分的惟一依据是这些双原子层的堆垛次序。

(3) 在周期性势场中,电子薛定谔方程的解为布洛赫函数,即波函数

$$\psi_k(r) = u_k(r)e^{i2\pi kr}$$

$$u_k(r + na) = u_k(r)$$

式中: k 为平面波的波数,即波长 λ 的倒数; $u_k(r)$ 是一个与晶格同周期的周期性函数; n 为任何整数。

$u_k(r)$ 反映了周期势场对电子运动的影响,说明晶体中电子在原胞中不同位置出现的几率不相同,其周期性说明了晶体中不同原胞的各等价位置上出现的几率是相同的。平面波因子 $e^{i2\pi kr}$ 表明晶体中电子不再是局域化,扩展于整个晶体之中,反映了电子共有化运动,即晶体中电子实际上可以在整个晶体中运动,无法区分究竟属于哪个原子的,只能作为整个晶体所共有。

由于共有化运动,孤立原子的能级按电子共有化运动不同而分裂成彼此靠得很近且有一定宽度的能带。能带通常只对有序的晶态物质而言,是关于晶体中电子运动的一种量子理论,说明了晶体中电子能量限定在某些“带”中,即允带中。允带中的能级数与晶体中原子数相等。允带之间有禁带,禁带宽度的大小是区别绝缘体、半导体与金属的重要标志。

电子能带结构由它们所在势场决定,因而与组成晶体的原子结构及晶体结构有关,与晶体中原子数目无关。当晶体中原子数目增加时,只增加每个能带中的电子态数,使能带中子能级的密集程度增加,对能带结构,如允带和禁带的宽度及相对位置并无影响。

允带中电子可以用波矢 k 描写其运动状态,即电子能量 E 和速度 v 都是 k 的函数:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}, v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

晶体中电子的所有运动状态都可以由以波矢 k 为坐标的状态空间(即 k 空间)中一个有限的区域来描写,把 k 空间的这个区域叫做布里渊区。由于晶体电子在一种周期性势场中运动,其 k 值不能像真空中自由电子那样可以任意大;例如在一维情况下, k 值限定在 $-\frac{1}{2a} \leq k \leq \frac{1}{2a}$, 该区域称为第 1 布里渊区(亦称简约布里渊区)。超出上述区域的任何 k 值并不描写新的共有化运动状态。在三维 k 空间中第 1 布里渊区的画法是:由原点到最后或次近格点引倒格矢,然后作倒格矢的中垂面(即垂直平分面),由这些面围成的最小多

面体即为第 1 布里渊区。

(4) 为了使半导体中的电子在外力作用下,也能写出加速度与外力之间类似经典力学的简单关系,从而能够方便地描述在外力作用下电子状态的变化,引入有效质量概念。有效质量张量是能量 E 对准动量 p 二次导数的倒数,即

$$m_n^* = \left(\frac{d^2 E}{d^2 p} \right)^{-1} = \left(\frac{1}{h^2} \frac{d^2 E}{d k^2} \right)^{-1}$$

式中: m_n^* 为电子的有效质量。

由于 $E(\mathbf{k})$ 不是简单的抛物线关系,故 m_n^* 是 $\mathbf{k}$ 的函数;但在能量极小值(即导带底)附近, $\frac{d^2 E}{d k^2} > 0$, 故其电子有效质量为正值;在能量极大值(即价带顶)附近, $\frac{d^2 E}{d k^2} < 0$, 故价带顶电子有效质量为负值。

应用有效质量概念不仅能像讨论自由电子一样讨论半导体中电子运动,而且由于电子有效质量与能带具体结构密切相关,有助于对半导体能带结构的研究。

(5) 磁性共振和回旋共振。物质由于磁场作用而引起对电磁波的选择吸收现象称为磁性共振。在磁场作用下,物质的能谱会发生裂劈形成子能级。当频率为 ω 的电磁波在物质中传播时,若每份能量 $h\omega$ 与子能级间的能量相差时,则会发生对电磁波的磁性共振吸收,与物质的顺磁性、逆磁性、铁磁性相联系的共振吸收,称为顺磁共振、逆磁共振和铁磁共振。

回旋共振是一种逆磁共振,即磁场引起的磁化强度与磁场方向相反。将半导体材料样品置于均匀磁场,由于洛伦兹力作用载流子绕磁场作螺旋运动。此时若再施加一电分量位于垂直磁场平面的交变电场,当电磁场的频率与载流子绕磁场的回转频率相等时,载流子在交变电场不断加速下从而获得能量,引起共振吸收。这一效应与回旋加速器对电子的加速极为相似。因此,把载流子的这种逆磁共振现象称为回旋共振。回旋共振实验是研究半导体能带结构最直接最有效的方法之一。

(6) 有效质量 m_n^* 可以通过回旋共振实验测定,并据此推出半导体的能带结构。依据回旋共振频率 ω 测定的有效质量 m_n^* 称为回旋质量,即

$$m_n^* = \frac{qB}{\omega}$$

是等能面各处有效质量的平均值。等能面为球面时,回转频率与磁场方向无关,所以回旋质量等于各向同性的有效质量。若等能面为椭球等能面时,则

$$m_n^* = \left(\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*} \right)^{-\frac{1}{2}}$$

式中: m_x^* 、 m_y^* 、 m_z^* 分别为椭球等能面 3 个主轴方向上电子的有效质量; α 、 β 、 γ 分别是磁场 $\mathbf{B}$ 相对主轴方向的方向余弦。

若等能面为旋转椭球体时,并选取椭球体中心为原点,其旋转轴方向与 z 轴方向重

合,则能量 E 与波矢量 k 之间有如下关系:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_t^*} \right) + \frac{k_z^2}{m_l^*} \right]$$

式中: m_t^* 是沿垂直于旋转轴平面内运动时的有效质量,称为横向有效质量; m_l^* 是在包含旋转轴的平面内运动时的有效质量,称为纵向有效质量。

根据磁场沿不同方向时共振吸收峰的个数和位置的变化,可以确定导带底和价带顶在布里渊区中的分布,极值附近等能面形状以及能量椭球主轴的方向,极值对称出现的个数。锗、硅在导带底和价带顶附近能带结构模型就是通过回旋共振实验和理论分析相结合而得到的。

(7) 空穴是几乎充满的能带中未被电子占据的空量子态。用空穴的运动可近似描述近满带中电子集体的运动状态。因此,空穴为一准粒子,其物理特性可以用价带电子的特性来描述。可以把空穴视为一个携带正电荷,并以与该空状态相对应的电子速度 $v(k)$ 运动的粒子,空穴具有正有效质量,即 $m_p^* = -m_n^*$ 。空穴能量 E_p 等于原空状态内电子能量 E_n 的负值,即 $E_p = -E_n$,空穴导电实质就是价带中大量电子的导电。

(8) 几种半导体的能带结构

① 元素半导体锗、硅的能带结构。硅的导带极小值在 k 空间 $[100]$ 方向。导带极小值附近的等能面形象地称为能谷。能谷中心与 Γ 点 ($k=0$) 的距离约为 Γ 点与 X 点 ($[100]$) 方向布里渊区边界的 0.85 倍处,共有 6 个等价能谷。锗的导带极小值在 $[111]$ 方向 (L 方向) 简约布里渊区的边界上,共有 8 个等价能谷,其形状为主轴沿 $[111]$ 方向的旋转椭球等能面,但每个椭球面只有半个在简约布里渊区内,因此,共有 4 个等价能谷。锗在 $k=0$ 和 $[100]$ 方向还有较高的能谷出现。

锗、硅价带顶附近等能面为一扭曲面,位于布里渊区中心,不考虑自旋其价带是三度简并,计入自旋后为六度简并,由于自旋——轨道耦合取消部分简并使其成为一组四度简并和一组二度简并的分支。在 $k=0$ 处极大值相重合的两个能带分别对应于两种有效质量的空穴,即轻空穴和重空穴。

② III-V 族化合物半导体能带结构由于其晶体结构与价键性质相似,第 1 布里渊区均为截角八面体,故能带结构也相似。 $k=0$ 时, $[111]$ 和 $[100]$ 方向都有导带极小值,平均原子序数较低的 AlSb(锑化铝)、AlAs(砷化铝)、GaP(磷化镓)、AlP(磷化铝)等其导带极小值位于 $[100]$ 方向,平均原子序数较高的 InSb、InAs(砷化铟)、GaAs、GaSb、InP 等价带极大值和导带最低极小值均位于 $k=0$,且电子有效质量较小。禁带宽度随平均原子序数的增大而减小。

③ 宽禁带半导体材料由于晶体结构的差别导致其能带结构不同。SiC 所有同质异形体的禁带都是间接禁带半导体,其导带极小值位于布里渊区边界,价带极大值位于布里渊区中心 (Γ 点),能带结构的差异主要在于禁带宽度和导带极小值在 k 空间的位置,其禁

带宽度随晶体结构中六方结构所占比例的增加而展宽。

以蓝光辐射为中心形成研究热点的纤锌矿结构的 GaN 与 AlN 均为直接禁带半导体,其导带极小值和价带极大值均位于布里渊区中心(Γ 点)。闪锌矿结构的 AlN 是间接禁带半导体,其导带极小值出现在布里渊区 X 点(即 $[100]$ 方向),极带极大值出现在 Γ 点,然而因为闪锌矿结构的 GaN 是直接带隙半导体,其导带底和价带顶均出现在 Γ 点。

④ 导带底和价带顶不在 k 空间相同点的半导体称为间接禁带(带隙)半导体,如 Ge、Si 等;反之,导带和价带极值位于 k 空间相同点的半导体称直接禁带(带隙)半导体,如 GaAs、InP 等。对于 III - V 化合物半导体,以 GaAs 为界,禁带比 GaAs 宽的均为间接禁带半导体,如 AlSb、GaP、AlAs、AlP 等;禁带比 GaAs 窄的均是直接禁带半导体,如 InP、GaSb、InAs、InSb 等。

问 题

[1-1] 原子中的电子和晶体中电子受势场作用情况以及运动情况有何不同? 原子中内层电子和外层电子参与共有化运动有何不同?

[1-2] 在 N 个原子组成的晶体中,若由原来的一个原子能级分裂的能级数大于 N 或小于 N ,是否与泡利不相容原理矛盾?

[1-3] 如何理解能级“分裂”成能带? 试以 NaCl(氯化钠)和 C^6 为例,说明孤立原子的能级和能带的对应情况。

[1-4] 晶体体积的大小对能级和能带有什么影响?

[1-5] 描述半导体中电子运动为什么要引入“有效质量”的概念? 用电子的惯性质量 m_0 描述能带中电子运动有何局限性?

[1-6] 一般来说,对应于高能级的能带较宽,而禁带较窄,是否如此? 为什么?

[1-7] 通常,晶格势场对电子作用力 F_L 是不容易直接测定的,但可以通过它与外力 F_e 的关系

$$F_L = \left(\frac{m_0}{m_n^*} - 1 \right) F_e$$

去求得。式中, m_0 表示电子质量; m_n^* 表示电子有效质量。试推导上述关系。

[1-8] 有两种晶体其能量与波矢的关系如图 1-1 所示。试问,哪一种晶体电子的有效质量大一些? 为什么?

[1-9] 一维晶格能量 E 与波矢 k 的关系如图 1-2 所示。分别讨论下面几个问题:

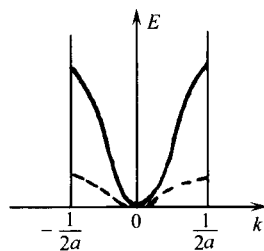


图 1-1

(1) 如电子能谱和自由电子一样,写出与简约波矢 $k = \frac{1}{4a}$ 对

应的 A(第Ⅰ能带)、B(第Ⅱ能带)、C(第Ⅲ能带)3 点处的能量 E 。

(2) 图中,哪个能带上的电子有效质量最小?

(3) 图中能带上是否有某些位置,外力对这些位置上的电子没有影响?

(4) 若能带Ⅰ、Ⅱ完全填满,而能带Ⅲ是完全空着的,此时稍稍加热晶体,把少数电子从第Ⅱ能带激发到第Ⅲ能带,问空穴数是否等于电子数?

(5) 第Ⅱ能带上空穴的有效质量 $|m_p^*|$ 比第Ⅲ能带上的电子有效质量 $|m_n^*|$ 大还是小?

(6) 比较能带Ⅱ空穴占据的能量间隔 ΔE_2 和能带Ⅲ上电子占据的能量间隔 ΔE ,哪一个大?

(7) 当 k 为何值时,能带Ⅰ和能带Ⅱ之间,能带Ⅱ和能带Ⅲ之间发生跃迁需要的能量最小?

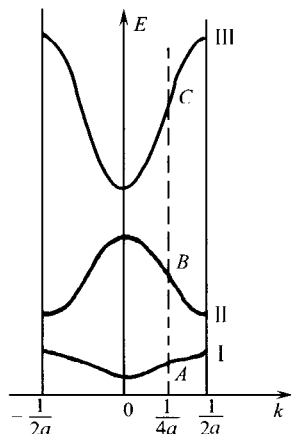


图 1-2

[1-10] 有效质量对能带的宽度有什么影响?有人说:“有效质量愈大,能态密度也愈大,因而能带愈窄。”是否如此?为什么?

[1-11] 简述有效质量与能带结构的关系?

[1-12] 对于自由电子,加速度方向与外力作用方向一致,这个结论是否适用于布洛赫电子?

[1-13] 从能带底到能带顶,晶体中电子的有效质量将如何变化?外场对电子的作用效果有什么不同?

[1-14] 试述在周期性势场中运动的电子具有哪些一般属性?

[1-15] 为什么说,通常有效质量是一个张量?何时出现负值?其物理意义如何?有什么比较直接的方法可以研究半导体中电子的有效质量?简要说明实验原理。

[1-16] 以硅的本征激发为例,说明半导体能带图的物理意义及其与硅晶格结构的联系?为什么电子从其价键上挣脱出来所需的最小能量就是半导体的禁带宽度?

[1-17] 为什么半导体满带中的少量空状态可以用具有正电荷和一定质量的空穴来描述?

[1-18] 试论证空穴具有下述的主要特征:

(1) 空穴浓度等于价带中空状态浓度;

(2) 空穴所带的正电荷等于电子电荷;

(3) 空穴的有效质量 m_p^* 等于原空状态内电子有效质量的负值,即 $m_p^* = -m_n^*$;

(4) 空穴的波矢 k_p 等于原状态内电子波矢 k_n 的负值,即 $k_p = -k_n$;

(5) 空穴的能量 E_p 等于原空状态内电子能量 E_n 的负值,即 $E_p = -E_n$ 。

[1-19] 讨论晶体中电子在能带极值点速度 v 与波矢 k 的关系?

[1-20] 有两块硅单晶,其中一块的质量是另一块质量的 2 倍。这两块晶体价带中

的能级数是否相等？彼此有何联系？

[1-21] 解释布里渊区边界方程： $n \cdot \left(\mathbf{k} - \frac{\mathbf{n}}{2a} \right) = 0$ 的几何意义和物理意义。

[1-22] 对三维晶体来说，布里渊区边界面上发生能量的不连续，这种界面上能量的不连续是否意味着一定有禁带存在？

[1-23] 如果能量极值并不在 $\mathbf{k}$ 空间的原点，而是位于 k_x 轴上某点处，则对应于同一能量极值有多少个状态？如果能量极值是位于体对角线上的一点，情况又如何？

[1-24] 说明布里渊区和 $\mathbf{k}$ 空间等能面这两个物理概念的不同。

[1-25] 二维平面晶体如图 1-3 所示。晶格常数已注于图上。画出第 1、第 2 布里渊区的边界并简要说明画法的根据。

[1-26] 简述，Ge、Si 和 GaAs 能带结构的主要特征。分别画出 $\mathbf{k}$ 空间 [100] 和 [111] 方向的一维能带图，标出导带极小值和价带极大值在 $\mathbf{k}$ 空间中的位置。分别给出能带极值附近电子和空穴等能面形状。

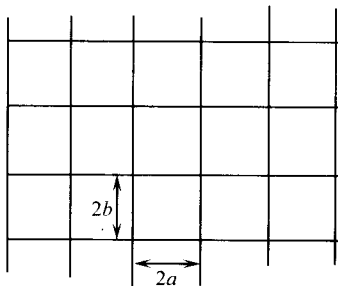


图 1-3

[1-27] 置于均匀磁场中的半导体中的电子受到的洛伦兹力 $\mathbf{F}_L = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ ，式中速度 $\mathbf{v}$ 是由什么决定的？为什么说回旋共振实质上也是一种光吸收现象？

[1-28] 为什么极值附近的等能面是球面的半导体，当改变磁场方向时只能观察到一个共振吸收峰？

[1-29] 如何理解回旋共振有效质量 m_n^* 不仅通过 m_x^* 、 m_y^* 和 m_z^* 而与能带结构有关，而且还与磁场和等能面主轴之间的相对方位有关。

[1-30] 布洛赫函数中的波矢 $\mathbf{k}$ 有什么物理意义？什么是电子的准动量？它是不是布洛赫电子的动量？为什么在运动方程中外力等于电子准动量的变化率 $\mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}$ ，而不等于电子真实动量的变化率？

解 题 示 例

例 1 某半导体晶体价带顶附近能量 E 可表示为 $E(\mathbf{k}) = E_{\max} - 10^{26} \mathbf{k}^2 (\text{erg})$ ^①，现将其中一波矢 $\mathbf{k} = 10^7 \mathbf{i} / \text{cm}$ 的电子移走，试求此电子留下的空穴的有效质量、波矢及速度。

【解】 由题中条件可知： $E(\mathbf{k}) = E_{\max} - 10^{26} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ ，显然价带顶附近等能面为球面，则有效质量为各向同性，即是一标量：

注：① $1\text{J} = 10^7 \text{erg}$

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}^2}$$

所以 $m_p^* = -m_n^* = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}^2} \right)^{-1} = (6.62 \times 10^{-27})^2 \times \left(-\frac{1}{2 \times 10^{-26}} \right) = 2.2 \times 10^{-27} (\text{g})$

由速度 $v(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}$ 可得

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_x} = \frac{1}{\hbar} \times (-2 \times 10^{-26}) k_x$$

$$v_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_y} = \frac{1}{\hbar} \times (-2 \times 10^{-26}) k_y$$

$$v_z = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k_z} = \frac{1}{\hbar} \times (-2 \times 10^{-26}) k_z$$

当 $\mathbf{k} = 10^7 \mathbf{i} / \text{cm}$ 时

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{\hbar} \times (-2 \times 10^{-26}) \times 10^7 \mathbf{i} = 3.02 \times 10^7 \mathbf{i} (\text{cm/s})$$

因为空穴的波矢 $k_p = -k_n$, 所以 $k_p = -10^7 \mathbf{i} / \text{cm}$ 。

例 2 在各向异性晶体中, 其能量 E 可用波矢 $\mathbf{k}$ 的分量表示成

$$E(\mathbf{k}) = Ak_x^2 + Bk_y^2 + Ck_z^2$$

试求出能代替牛顿方程 $\mathbf{F} = m_0 \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2}$ 的电子运动方程。

【解】 因为电子的运动速度可表示成

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{d\mathbf{k}}$$

所以电子加速度为

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{d\mathbf{k}} \right) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{d}{d\mathbf{k}} \left(\frac{dE}{dt} \right)$$

由于单位时间内能量增加等于力在单位时间内所做的功, 即

$$\frac{dE}{dt} = \mathbf{F} \cdot \frac{d\mathbf{s}}{dt} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{F} \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{dE}{d\mathbf{k}}$$

所以

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \mathbf{F} \cdot \frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} \cdot \mathbf{F}$$

令 $\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} = \frac{1}{m_{ni}^*}$, 按题中所给条件 $E(\mathbf{k}) = Ak_x^2 + Bk_y^2 + Ck_z^2$ 得

$$\frac{1}{m_{nx}^*} = \frac{2A}{h^2}, \quad \frac{1}{m_{ny}^*} = \frac{2B}{h^2}, \quad \frac{1}{m_{nz}^*} = \frac{2C}{h^2}$$

于是

$$\frac{dv_x}{dt} = \frac{2A}{h^2} F_x, \quad \frac{dv_y}{dt} = \frac{2B}{h^2} F_y, \quad \frac{dv_z}{dt} = \frac{2C}{h^2} F_z$$

或者写成

$$F_x = \frac{h^2}{2A} \cdot \frac{dv_x}{dt}, \quad F_y = \frac{h^2}{2B} \cdot \frac{dv_y}{dt}, \quad F_z = \frac{h^2}{2C} \cdot \frac{dv_z}{dt}$$

上式即为各向异性晶体中电子的运动方程。

例3 证明:对于能带中的电子, $\mathbf{k}$ 状态和 $-\mathbf{k}$ 状态的电子速度大小相等,方向相反,即 $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = -\mathbf{v}(-\mathbf{k})$ 。

并解释为什么无外场时,晶体总电流等于零。

【解】 $\mathbf{k}$ 状态电子的速度为

$$\mathbf{v}(\mathbf{k}) = \frac{1}{h} \left[\frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_x} \mathbf{i} + \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_y} \mathbf{j} + \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_z} \mathbf{k} \right] \quad (1)$$

同理, $-\mathbf{k}$ 状态电子的速度则为

$$\mathbf{v}(-\mathbf{k}) = \frac{1}{h} \left[\frac{\partial E(-\mathbf{k})}{\partial k_x} \mathbf{i} + \frac{\partial E(-\mathbf{k})}{\partial k_y} \mathbf{j} + \frac{\partial E(-\mathbf{k})}{\partial k_z} \mathbf{k} \right] \quad (2)$$

从一维情况容易看出

$$\frac{\partial E(-\mathbf{k})}{\partial k_x} = - \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_x} \quad (3)$$

同理有

$$\frac{\partial E(-\mathbf{k})}{\partial k_y} = - \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_y} \quad (4)$$

$$\frac{\partial E(-\mathbf{k})}{\partial k_z} = - \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_z} \quad (5)$$

将式(3)、式(4)、式(5)代入式(2)后得

$$\mathbf{v}(-\mathbf{k}) = - \frac{1}{h} \left[\frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_x} \mathbf{i} + \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_y} \mathbf{j} + \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_z} \mathbf{k} \right] \quad (6)$$

利用式(1)即得

$$\mathbf{v}(-\mathbf{k}) = -\mathbf{v}(\mathbf{k})$$

因为电子占据某个状态的几率只同该状态的能量有关,即: $E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k})$, 故电子占有 $\mathbf{k}$ 状态和 $-\mathbf{k}$ 状态的几率相同,且 $\mathbf{v}(\mathbf{k}) = -\mathbf{v}(-\mathbf{k})$, 故这两个状态上的电子电流相

互抵消,晶体中总电流为零。

例 4 已知一维晶体的电子能带可写成

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{m_0 a^2} \left(\frac{7}{8} - \cos 2\pi \mathbf{k} a + \frac{1}{8} \cos 6\pi \mathbf{k} a \right)$$

式中: a 为晶格常数。试求:

- (1) 能带的宽度;
- (2) 电子的波矢 $\mathbf{k}$ 状态时的速度;
- (3) 能带底部和顶部电子的有效质量。

【解】 (1) 由 $E(\mathbf{k})$ 关系得

$$\begin{aligned} \frac{dE}{d\mathbf{k}} &= \frac{\pi \hbar^2}{m_0 a} \left(2\sin 2\pi \mathbf{k} a - \frac{3}{4} \sin 6\pi \mathbf{k} a \right) = \\ &= \frac{\pi \hbar^2}{m_0 a} \left[2\sin 2\pi \mathbf{k} a - \frac{3}{4} (3\sin 2\pi \mathbf{k} a - 4\sin^3 2\pi \mathbf{k} a) \right] = \\ &= \frac{\pi \hbar^2}{m_0 a} \left(3\sin^3 2\pi \mathbf{k} a - \frac{1}{4} \sin 2\pi \mathbf{k} a \right) \end{aligned} \quad (1)$$

$$\frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0} \left(18\sin^2 2\pi \mathbf{k} a \cos 2\pi \mathbf{k} a - \frac{1}{2} \cos 2\pi \mathbf{k} a \right) \quad (2)$$

令 $\frac{dE}{d\mathbf{k}} = 0$ 得

$$\sin^2 2\pi \mathbf{k} a = \frac{1}{12}$$

所以

$$\cos 2\pi \mathbf{k} a = \pm \left(\frac{11}{12} \right)^{\frac{1}{2}}$$

当 $\cos 2\pi \mathbf{k} a = \sqrt{\frac{11}{12}}$ 时, 代入式(2)得

$$\frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0} \left(18 \times \frac{1}{12} \times \sqrt{\frac{11}{12}} - \frac{1}{2} \times \sqrt{\frac{11}{12}} \right) = \sqrt{\frac{11}{12}} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0} > 0$$

对应 $E(\mathbf{k})$ 的极小值。

当 $\cos 2\pi \mathbf{k} a = -\sqrt{\frac{11}{12}}$ 时, 代入式(2)得

$$\begin{aligned} \frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0} \left(-18 \times \frac{1}{12} \times \sqrt{\frac{11}{12}} + \frac{1}{2} \times \sqrt{\frac{11}{12}} \right) = \\ &= -\sqrt{\frac{11}{12}} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0} < 0 \end{aligned}$$

对应 $E(\mathbf{k})$ 极大值。

根据上述结果,求得 $E_{\min}$ 和 $E_{\max}$ 即可求得能带宽度。

$$\begin{aligned} \text{因为} \quad E(\mathbf{k}) &= \frac{h^2}{m_0 a^2} \left(\frac{7}{8} - \cos 2\pi \mathbf{k} a + \frac{1}{8} \cos 6\pi \mathbf{k} a \right) = \\ &= \frac{h^2}{m_0 a^2} \left[\frac{7}{8} - \cos 2\pi \mathbf{k} a + \frac{1}{8} (4\cos^3 \pi \mathbf{k} a - 3\cos 2\pi \mathbf{k} a) \right] = \\ &= \frac{h^2}{m_0 a^2} \left(\frac{7}{8} - \frac{11}{8} \cos 2\pi \mathbf{k} a + \frac{1}{2} \cos^3 2\pi \mathbf{k} a \right) \end{aligned}$$

将 $\cos 2\pi \mathbf{k} a = \sqrt{\frac{11}{12}}$ 代入得

$$E_{\min} = \frac{h^2}{m_0 a^2} \left[\frac{7}{8} - \frac{11}{8} \left(\sqrt{\frac{11}{12}} \right)^3 \right] = \frac{h^2}{m_0 a^2} \left[\frac{7}{8} - \left(\frac{11}{12} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

将 $\cos 2\pi \mathbf{k} a = -\sqrt{\frac{11}{12}}$ 代入得

$$E_{\max} = \frac{h^2}{m_0 a^2} \left[\frac{7}{8} + \frac{11}{8} \sqrt{\frac{11}{12}} - \frac{1}{2} \left(\sqrt{\frac{11}{12}} \right)^3 \right] = \frac{h^2}{m_0 a^2} \left[\frac{7}{8} + \left(\frac{11}{12} \right)^{\frac{3}{2}} \right]$$

故能带宽度为

$$\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = 2 \left(\frac{11}{12} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{h^2}{m_0 a^2}$$

(2) 由题中所给 $E(\mathbf{k})$ 关系可得电子在波矢 $\mathbf{k}$ 状态时的速度为

$$\begin{aligned} v(\mathbf{k}) &= \frac{1}{h} \frac{dE}{d\mathbf{k}} = \frac{1}{h} \frac{\pi h^2}{m_0 a} \left(3\sin^3 2\pi \mathbf{k} a - \frac{1}{4} \sin 2\pi \mathbf{k} a \right) = \\ &= \frac{\pi h}{m_0 a} \left(3\sin^3 2\pi \mathbf{k} a - \frac{1}{4} \sin 2\pi \mathbf{k} a \right) \end{aligned}$$

(3) 能带底部和顶部电子有效质量分别为

$$(m_n^*)_{\text{带底}} = \left[\frac{1}{h^2} \left(\frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} \right)_{\text{带底}} \right]^{-1} = \left[\frac{1}{h^2} \sqrt{\frac{11}{12}} \frac{\pi^2 h^2}{m} \right]^{-1} = 4 \left(\frac{12}{11} \right)^{\frac{1}{2}} m_0 = 4.18 m_0$$

$$(m_n^*)_{\text{带顶}} = \left[\frac{1}{h^2} \left(\frac{d^2 E}{d\mathbf{k}^2} \right)_{\text{带顶}} \right]^{-1} = \left[\frac{1}{h^2} \left(-\sqrt{\frac{11}{12}} \frac{\pi^2 h^2}{m_0} \right) \right]^{-1} = -4 \left(\frac{12}{11} \right)^{\frac{1}{2}} m_0 = -4.18 m_0$$