

半导体物理

钱佑华 徐至中

高等教育出版社

半导体物理

钱祐华 徐至中

高等教育出版社

0471

(京) 112号

图书在版编目 (CIP) 数据

半导体物理/钱佑华, 徐至中. —北京: 高等教育出版社, 1999.6

ISBN 7-04-006992-X

I. 半… II. ①钱… ②徐… III. 半导体物理学 - 高等学校 - 教材 IV. 047

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (1999) 第 02742 号

半导体物理
钱佑华 徐至中

出版发行 高等教育出版社

社 址 北京市东城区沙滩后街55号 邮政编码 100009
电 话 010 - 64054588 传 真 010 - 64014048
网 址 <http://www.hep.edu.cn>

经 销 新华书店北京发行所

排 版 高等教育出版社照排中心

印 刷 化学工业出版社印刷厂

开 本	850 × 1168 1/32	版 次	1999年6月第1版
印 张	20.25	印 次	1999年6月第1次印刷
字 数	510 000	定 价	24.50元

凡购买高等教育出版社图书, 如有缺页、倒页、脱页等质量问题, 请在所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

序

钱佑华和徐至中教授编写的《半导体物理》即将出版。这是可供大学高年级理科学生使用的一本教材，反映了他们二人和一些其他同人在十年动乱之后，恢复高考的十余年来在复旦大学物理系讲授这门课的经验，是通过收集和修订了历届所用的讲义编写而成的一本书。在第一次讲授这门课时，面对的是改革开放后的第一批学生。在动乱的十年间，国际半导体物理有了飞速的发展，当时面临的难题是如何从丰富的成果中精选出必要的内容，充实到新的教材中去。和 20 世纪 60 年代中期相比，半导体物理研究的方向已从体内扩展到表面，从三维体系扩展到二维甚至一维体系。研究的对象不仅是天然存在的材料，而且出现了许多人造的超晶格。科学家们已可根据自己的要求，裁剪材料的能隙。即使在天然存在的半导体中，不仅研究单晶，而且也把注意力扩充到多晶。计算机技术、超高真空技术、激光技术、同步辐射光源等的发展，极大地加深了人们对半导体体内和表面的各种性质的了解。另一方面，在半导体材料和器件基础上发展起来的微电子技术和光电子技术，发展速度更为惊人，而且发展势头在近十余年来有增无减。例如 1971 年美国 Intel 公司推出的微处理机芯片上只有 2 300 个晶体管。1982 年 Intel 80286 微处理机有 134 000 个晶体管，1986 年 Intel 486 微处理机有 120 万个晶体管，而 1996 年初推出的 P6 有 550 万个晶体管。据最近报载，该公司又有将近 750 万个晶体管的芯片。集成电路生产厂家的硅片直径已达

203.2 mm (8 in), 对材料的纯净程度有了更高的要求. 随着超大规模集成电路技术、计算机技术和光纤技术的发展, 人们已进入信息时代. 显然这些新成就已远远超出大学半导体物理课程的范畴, 也不可能在教材中无所不包. 然而为了给同学提供必要的基础, 在教材中适当反映出半导体物理中的新成就以及与技术发展密切相关的新内容是必要的. 基于这种认识, 作者们在本书中增加了一些过去大学半导体物理教材没有的内容.

金属-氧化物-半导体 (MOS) 晶体管的发展是现代超大规模集成电路的基础, 而 MOS 晶体管的可靠性和质量的提高又取决于 20 世纪 60 年代人们对二氧化硅层以及硅-二氧化硅界面的了解. 因此本书有较大篇幅介绍具有二氧化硅层的硅真实表面和界面的内容, 这些都是集成电路工艺的物理基础. 此外由于超高真空技术和各种电子能谱仪的发展, 人们对清洁表面也有了深入的了解, 这些知识是生长超晶格的物理基础. 因此本书对有关半导体清洁表面的研究方法和基础知识有所介绍. 近年来随着超大规模集成电路的发展, 科学家们已在研究如何生长厚度在 50 \AA 左右的氧化层, 其中就用到表面能谱的研究技术. 学生们有了本书介绍的有关表面和界面的知识, 要进一步了解这些新的进展将是不难的.

正如氢原子模型的建立和对能级的了解主要基于大量光谱的测量, 显然要了解半导体的能量状态和声子态也要取决于各种光学的测量. 通过光对半导体的作用, 可以获得清洁半导体中电子的能量状态、杂质的能量状态和有关晶格振动声子态的信息, 因此半导体光学性质成为半导体物理的一个重要内容. 由于激光技术的发展, 使许多以前不容易研究的课题, 例如光致发光、拉曼光谱的研究成为可能. 这些研究成果丰富了对半导体能谱的知识. 另一方面, 光电子技术的发展也需要人们加深对光和半导体相互作用的认识, 因此本书也有相当大的篇幅介绍了半导体的光学性质. 其中不仅有国际上的研究成果, 也有一些是近年来在国

内实验室中完成的。

超晶格以及随之而来的异质结和量子阱的生长，给半导体研究和应用开辟了一个崭新的领域，也引入不少新的物理概念，要深入了解这个领域需要阅读有关的专著。但鉴于量子阱、超晶格在物理和器件方面的重要性，作为半导体入门教材，本书相对于现有类似书籍来说，也作了较为详细的讲解。

半导体载流子的统计和输运是半导体物理传统内容的一个重要组成部分。近年来随着工艺技术的不断优化，发现了不少有关的崭新实验现象。例如强磁场下二维电子气的低温量子霍尔效应，就是人们向深层次揭示凝聚态物理本质过程中的一件大事。另外，新的应用前景也常使某些曾遭冷落的物理效应，重新具有了重要性。比如大规模集成电路集成度的迅速提高，使其功耗密度也随之成倍增长；半导体的热电现象在计算机降温技术中的应用被人们看好。因此，这些内容均在本书中有适当的反映。

以上只是就半导体物理学科和本书的一些特点，作了简单概括的叙述，希望能有助于这本教材的阅读和使用。

谢希德

前 言

1979年春，复旦大学物理系原半导体物理教研室的几位同事在谢希德教授主持下，编写了一本半导体物理讲义，共十章，提供给刚刚恢复高考招生的四年级学生使用。由于种种原因，该讲义印了一次又一次而从未进行过修改增补，更谈不上交付出版。这样一拖就是18年。在这漫长的岁月里，半导体科技日新月异，国内也陆续出版了多种半导体物理教材，但十分适合于物理系本科生使用的却为数较少。在此情况下，我们愿意有针对性地作一次尝试，于是就有了现在这样一本书。

半导体物理在物理系中是一门专业基础课，学习的最佳时间应是在学完理论物理课程和固体物理之后。可是据我们所知，目前各校的排课很难做到这一点。因此在参考本书的讲授过程中，教师宜在必要时闪电式地补充一点点有关的基础知识。

目前提倡高等教育培养全面发展的人才。像半导体物理这样的课程，一般给的学时不多。这就要求对本书内容，结合所需进行精心的取舍，有的甚至可整章整节地删除，避免平均支配学时。

考虑到作为本科生的专业基础课，学生事实上没有多少时间去参阅原始文献，所以本书未按惯例列出参考文献。不过如果学生愿意在学习中就某些问题参考程度大体相当的其他教科书，则还是应该鼓励的。除国内近期出版的半导体书籍外，我们知道有两本华人学者编写的新书，是反映了国外名校教学水准的。它们

是 (1) Yu P Y (于鑫) et al.. Fundamentals of Semiconductors, Physics and Materials Properties. Berlin: Springer-Verlag, 1996; (2) Wang S (王适). Fundamentals of Semiconductor Theory and Device Physics. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1989.

感谢希德院士对本书给予的支持。她在百忙中仔细审阅了书稿，还撰写了精辟的序言。特别要说明的是，本书第一章保留了她在 1979 年讲义所写稿子的原样，开宗明义，为编写后面的内容打下了一个好基础。感谢北京大学叶良修教授审阅了全稿。他以丰富的学识和经验，具体提出了许多中肯的意见，使我们得以方便地进行改进和更正。也要感谢复旦大学物理系原讲义的共同编写者王迅教授、包宗明教授和屈逢源教授。18 年前的那册讲义，使我们积累起一定的教学经验，从而比较顺利地将书稿完成。还应感谢陆栋教授和其他许多复旦物理系的同事，他们从一开始就对本书的编写给予了关心和鼓励。

本书不足之处，欢迎指正，以便今后有机会时进行修订。

钱佑华 徐至中

1997 年 3 月于上海

内 容 提 要

本书讲述半导体的物理基础，是半导体科技的入门教材。全书包括七章：第一章在能带的框架内讲解半导体电子的能量状态；第二章简要介绍电子的平衡统计；第三章讲述能带电子的输运规律；第四章说明外界作用引起额外载流子的行为；第五章讨论半导体的表面与界面；第六章介绍金属-半导体接触、pn结、异质结、量子阱及超晶格；第七章讲解半导体光谱。本书内容新颖，便于使用。

本书可作为物理专业本科生的教材，也可供其他有关专业的师生及科研人员参考。

目 录

第一章 晶态半导体中的电子能量状态	1
§ 1.1 在一维周期性势场中运动的电子波函数	2
§ 1.2 在一维周期性势场中运动电子的能量状态——Kronig-Penney 模型	6
§ 1.3 紧束缚近似的能带表述和有效质量	15
§ 1.4 在三维周期性势场中运动的电子波函数与能量状态	23
§ 1.5 半导体的能带、满带、导带和能隙	29
§ 1.6 半导体中电子的速度与加速度以及空穴的概念	33
§ 1.7 半导体中的杂质能级，n型与p型半导体	41
§ 1.8 回旋共振与半导体的复杂能带	49
第二章 半导体电子和空穴的平衡态统计分布	60
§ 2.1 状态密度	61
§ 2.2 费米分布函数和载流子密度的一般公式	66
§ 2.3 非简并情况下的费米能级和载流子密度	72
§ 2.4 杂质补偿	83
§ 2.5 重掺杂简并	86
第三章 半导体的输运现象	91
§ 3.1 电导率与玻尔兹曼方程	91
§ 3.2 载流子的散射机构	107
§ 3.3 迁移率与温度的关系	127
§ 3.4 热载流子	138

§ 3.5	电子的谷间转移及 Gunn 效应	150
§ 3.6	霍尔效应	156
§ 3.7	磁阻	168
§ 3.8	热电效应	177
第四章	外界作用引起额外载流子的行为	185
§ 4.1	额外载流子的注入与复合	186
§ 4.2	复合过程	191
§ 4.3	陷阱作用	205
§ 4.4	介电弛豫时间	209
§ 4.5	少子扩散	211
§ 4.6	漂移 - 扩散 - 复合方程及其解	215
§ 4.7	稳态建立过程中的少子运动	219
§ 4.8	双极扩散与丹倍电场	226
§ 4.9	光磁效应	228
§ 4.10	光致 pn 结非平衡	231
第五章	半导体表面与界面	234
§ 5.1	半导体清洁表面的原子结构及表面电子态	236
§ 5.2	研究清洁表面的主要实验方法	246
§ 5.3	真实表面的 Si - SiO ₂ 界面结构	251
§ 5.4	Si - SiO ₂ 界面的表面势	255
§ 5.5	研究半导体和绝缘体界面的 MOS 电容法	270
第六章	金属 - 半导体接触、pn 结、异质结、量子阱及超晶格	294
§ 6.1	金属 - 半导体接触的势垒模型	296
§ 6.2	接触势垒的整流理论	317
§ 6.3	金属 - 半导体二极管的电流特性	331
§ 6.4	势垒高度的测量	336
§ 6.5	pn 结	339

§ 6.6	异质结	367
§ 6.7	量子阱与二维电子气	386
§ 6.8	多量子阱与超晶格	404
第七章	半导体光谱	427
§ 7.1	介电响应的宏观理论	428
§ 7.2	半导体自由载流子和晶格振动的光响应	443
§ 7.3	半导体电子带间本征跃迁的量子理论	457
§ 7.4	激子状态和激子吸收光谱	476
§ 7.5	杂质吸收光谱	494
§ 7.6	半导体的发光光谱	508
§ 7.7	半导体的调制光谱	546
§ 7.8	拉曼散射和半导体的共振拉曼散射光谱	560
§ 7.9	半导体量子阱和超晶格的光谱	577
附录 1.1	绝热近似与单电子近似	607
附录 1.2	晶体中电子的速度	618
附录 1.3	有效质量近似	622
附录 3.1	多能谷旋转椭球面导带结构半导体的电子电导率 计算	627

第一章

晶态半导体中的电子能量状态

自 20 世纪初，量子力学在解决有关原子和分子的疑难问题方面，起了很大的推动作用。特别是对于最简单的氢原子，在量子力学的基础上相继地阐明了氢原子光谱的规律性、双重谱线的来源、谱线在磁场中的分裂以及谱线的精细结构等等。

量子力学在原子问题上取得的成就相当自然地导致用量子力学方法研究固体的电子能态以及其他属性。固体是由数量非常多的原子组成的，每个原子又往往不像氢原子那么简单。在晶态固体中，这些原子按一定的周期性排列；而在非晶态固体中，原子的排列只有短程序，而没有长程序。由于晶态固体（下面简称晶体）比非晶态固体要简单一些，因此从 20 世纪 30 年代起就发展了阐明晶体许多电子属性的固体电子论，而对于非晶态物质电子态的研究则是近 20 年的事，目前还在方兴未艾之中。

由于固体的复杂性，即使对于原子排列具有周期性的晶体，要严格地求解薛定谔方程也是很困难的，必须诉诸于近似的方法。目前最常用的近似法是所谓单电子近似，即把求解晶体中电子能态的问题简化为求解一个电子在有周期性的势场中运动的问题。这个运动既具有晶体中电子运动的共性，又能反映电子在原子核附近运动的特殊性；晶体中电子的能量状态既与晶体结构有密切关系，又因组成晶体的原子不同而有所差异。本章将着重介绍晶体中电子能量状态的特征，除指出其共性外，将重点地介绍

具有金刚石结构的半导体能量状态的特征，同时也介绍一些描述晶体中电子运动的基本方程。

§ 1.1 在一维周期性势场中运动的电子波函数

晶体是由原子按一定的周期性排列组成的，每个原子并不是固定不动的，而是在平衡位置附近做热振动，但在绝热近似及单电子近似下（见附录 1.1）可以把问题简化为求解一个电子在固定的原子核以及其他电子所决定的平均的周期性势场中运动的薛定谔方程。图（1.1-1）给出这种周期性势场的示意图。图（1.1-1a）是单原子势场，与熟知的氢原子势场相似。图（1.1-1b）则为由多个原子所组成的晶体势场。限于篇幅，图中只给出了三个原子的势场。 V_1 、 V_2 、 V_3 分别代表原子 1、2、3 的势场， V 则代表三个势场叠加以后的晶体势场。如果假设具有能量 E_1 或 E_2 的电子在原子 1 的势阱中运动，根据量子力学的隧道效应，电子不仅在势阱 1 内运动，而且可以通过隧道效应越过势垒 V 到势阱 2 以及势阱 3……内运动，换言之：即在周期性势场中，属于某个原子的电子既可在该原子附近运动，也可以在其他原子附近运动。常把前者称为定域化运动，而将后者称为共有化运动。晶体中电子的运动既有定域化的特征，也有共有化的特征。如果电子的能量比较低，例如图（1.1-1b）中的 E_2 ，由于在该能态的电子受所属原子核的束缚比较强，而且势垒 $V - E_2$ 也比较大，电子要从势阱 1 通过隧道效应穿透到势阱 2 的概率就比较小，因此，对于在这种能量状态下的电子，它的共有化运动的程度就比较小。但是对于束缚能比较弱的状态 E_1 ，由于势垒 $V - E_1$ 的值较小，穿透隧道的概率比较大，因此处在 E_1 状态的电子的共有化程度就比较大。由于价电子是原子最外层的电子，受原子的束缚比较弱，共有化的特征比较显著。在研究半导体中电子的能量状态时，我们最感兴趣的正是价电子的能量状态。

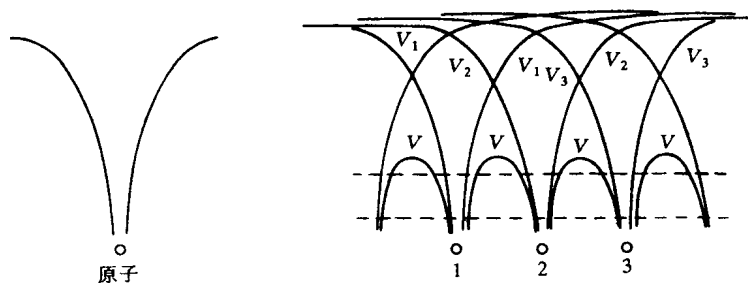


图 (1.1-1) 周期势场示意图

本节将以一维周期性势场为例，说明在周期势场中运动的电子波函数所具有的特征。

图 (1.1-2) 给出了周期为 a 的一维势场的示意图，虚线表示孤立原子的势场。电子在这个周期性势场中运动的薛定谔方程可写为

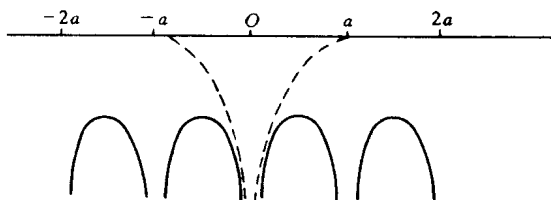


图 (1.1-2) 周期为 a 的一维周期性势场

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \varphi(x) = E\varphi(x) \quad (1.1-1)$$

式中 $V(x)$ 是周期性势场，具有下述特性

$$V(x) = V(x + na)$$

$$n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (1.1-2)$$

a 为原子间距。处在一维周期性势场中的电子波函数可写成

$$\varphi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x) \quad (1.1-3)$$

$u_k(x)$ 具有与势场相同的周期性,即

$$u_k(x) = u_k(x + na) \quad (1.1-4)$$

为了证明上述结果,我们引入平移算符 \hat{T}_n , 当把这个算符作用在任何函数上时,它的作用是使 x 变成 $x + na$. 将 \hat{T}_n 作用在(1.1-1)式的两方,可得

$$\hat{T}_n \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) \right] = \hat{T}_n E \varphi(x) \quad (1.1-5)$$

根据 \hat{T}_n 的性质,上式成为

$$\begin{aligned} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d(x+na)^2} + V(x+na) \right] \varphi(x+na) \\ = E \varphi(x+na) \end{aligned} \quad (1.1-6a)$$

由于

$$\frac{d^2}{d(x+na)^2} = \frac{d^2}{dx^2} \quad (1.1-6b)$$

$$V(x+na) = V(x) \quad (1.1-6c)$$

可将(1.1-6a)式写成

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \hat{T}_n \varphi(x) = E \hat{T}_n \varphi(x) \quad (1.1-7)$$

将此式与(1.1-1)式比较

$$\text{只有当 } \hat{T}_n \varphi(x) = \lambda(n) \varphi(x) \quad (1.1-8)$$

时,才有可能. $\lambda(n)$ 是一个与 n 有关的常数,也可把(1.1-8)式看成是本征方程, $\lambda(n)$ 是算符 \hat{T}_n 的本征值. (1.1-8)式也可写成

$$\varphi(x+na) = \lambda(n) \varphi(x) \quad (1.1-9)$$

由于势场的周期性,在 x 处与在 $x+na$ 处找到粒子的概率密度相等

$$|\varphi(x+na)|^2 = |\varphi(x)|^2 \quad (1.1-10)$$

将(1.1-9)式两方取绝对值平方

$$|\varphi(x + na)|^2 = |\lambda(n)|^2 |\varphi(x)|^2 \quad (1.1-11)$$

由以上二式可得

$$|\lambda(n)|^2 = 1 \quad (1.1-12)$$

如将 \hat{T}_{n+m} 作用在 $\varphi(x)$ 上, 可得

$$\hat{T}_{n+m}\varphi(x) = \varphi(x + na + ma) = \lambda(n + m)\varphi(x) \quad (1.1-13a)$$

如果把 \hat{T}_m 作用在 $\varphi(x + na)$ 上, 则得

$$\begin{aligned} \hat{T}_m\varphi(x + na) &= \varphi(x + ma + na) \\ &= \lambda(m)\varphi(x + na) \end{aligned} \quad (1.1-13b)$$

而根据 (1.1-9) 式, 上式也可写成

$$\hat{T}_m\varphi(x + na) = \hat{T}_m\hat{T}_n\varphi(x) = \lambda(m)\lambda(n)\varphi(x) \quad (1.1-13c)$$

由于 $\hat{T}_{n+m} = \hat{T}_m\hat{T}_n$, 所以

$$\begin{aligned} \hat{T}_{n+m}\varphi(x) &= \hat{T}_m\hat{T}_n\varphi(x) = \lambda(n + m)\varphi(x) \\ &= \lambda(m)\lambda(n)\varphi(x) \end{aligned} \quad (1.1-13d)$$

即本征值 $\lambda(n), \lambda(m)$ 具有另一性质

$$\lambda(n)\lambda(m) = \lambda(n + m) \quad (1.1-14)$$

不难看出, 如果令

$$\lambda(n) = \exp(ikna) \quad (1.1-15)$$

则可满足由 (1.1-12) 和 (1.1-14) 式给出的两个条件, 即在一维周期性势场中运动的电子波函数可表示为

$$\varphi(x + na) = \exp(ikna)\varphi(x) \quad (1.1-16)$$

显然, 如将 $\varphi(x)$ 写成由 (1.1-3) 式所给出的形式

$$\varphi_k(x) = \exp(ikx)u_k(x)$$

即

$$u_k(x) = \exp(-ikx)\varphi_k(x)$$

则 (1.1-4) 式也必然被满足

$$\begin{aligned} &u_k(x + na) \\ &= \exp(-ikx - ikna)\varphi_k(x + na) \\ &= \exp(-ikx)\varphi_k(x) \\ &= u_k(x) \end{aligned}$$