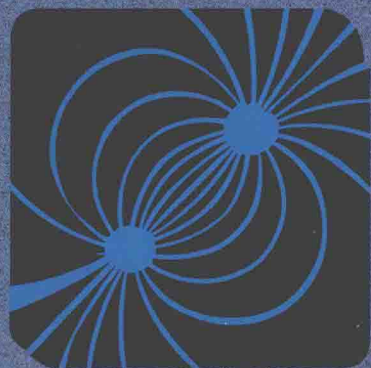


部編大學用書



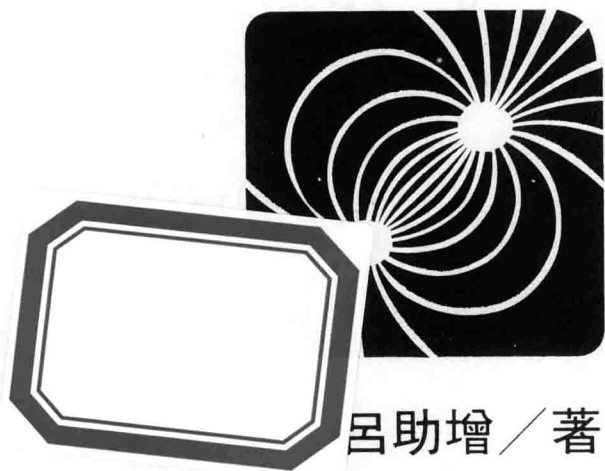
呂助增／著

固態電子學

國立編譯館 主編

明文書局 印行

部編大學用書



呂助增 / 著

固態電子學

國立編譯館 主編
明文書局 印行

版權所有·翻印必究

332 固態電子學

平裝一冊 定價450元

著作者/呂助增

主編者/國立編譯館

著作財產權人/國立編譯館

出版·發行/明文書局股份有限公司

發行人/李潤海

地址/台北市重慶南路一段49號7樓之3

電話/3754679·3318447

傳真/3619101 郵撥/01436784

行政院新聞局局版台業字第6591號

印製所/國華印製有限公司

板橋市中山路二段416巷59弄3號

西元一九九六年七月初版

ISBN 957-703-074-2

Ming Wen Book Co., Ltd.

7F No.49, 1 Sec., Chungking South Road,
Taipei, Taiwan, R.O.C.

呂助增／著

固態電子學

國立編譯館 主編
明文書局 印行

著者小傳

呂助增先生於民國三十二年九月二十二日生於台灣省台中縣，國立成功大學物理學士，國立清華大學物理碩士，六十三年美國大學哲學博士，專攻微波電子順磁共振光譜學，現為國立清華大學物理系及電機系合聘教授，主要教授課程為半導體物理、雷射原理與應用、科學儀器學及表面物理等，曾獲中山學術著作獎、教育部工科學術獎、國科會連續五屆傑出研究獎，以及德國宏博研究學者等。

序 論

固態電子學(Solid State Electronics)所涵蓋之範圍頗廣，從固態物理之基礎理論，乃至電子元件應用；細分則包括半導體元件，超導磁性電子元件、雷射與其光電調制器(modulator)以及金屬場輻射(field emission)元件等。此課程常為應用物理系或電機系同學所經常選修者，本書為著者在清華大學歷年來所開課程講義彙整而成，適合物理系、電機系、材料系四年級或研究所學生研讀，其背景及先修課程為固態物理導論及量子物理。

本書之編排，首先由固之晶格對稱性，群之不可分割表示法說明原來看似複雜之固態多體理論，可藉群論加以簡化；固體之傳輸理論為其導電性提供各種可能之機制，而固體之光學性質使元件之光學應用變成確實可行。半導體元件物理為固態電子學之主流，因之本書亦有較多之篇幅加以說明。半導體人造分子束磊晶成長，為半導體開拓了一嶄新之領域；而微顆粒具量子侷限效應之粒子，則與其原來塊材時之特性完全不同，其可使間接能隙之半導體轉化成直接能隙，不具順磁性之金屬轉變成具磁性；並由顆粒粒徑之變化改變其對光學吸收之峰值，並能增強其線性及非線性光學係數，其應用潛能有待開發。另外最近有重要突破之太陽電池及超導量子穿隧元件則作原理性之介紹，讀者特可由本書熟悉固態電子之基本知識。本書倉促編纂而成，如有遺漏請讀者不吝賜教。

呂助增 謹識於一九九四年中秋

國家圖書館出版品預行編目資料

固態電子學 / 呂助增著. -- 初版. -- 臺北市

: 明文, 1996 [民85]

面; 公分

含索引

ISBN 957-703-074-2 (平裝)

1. 電子學

337.9

85007251

目 錄

序 論	
第一章 晶體結構之對稱性	1
第二章 固體之能帶及布里淵區 (Brillouin Zone)	29
第三章 晶格振動及聲子	55
第四章 固體之傳輸現象	73
第五章 固體內之散射理論	87
第六章 非正常態金屬之傳輸性質	107
第七章 固體之光學性質	129
第八章 半導體之光學性質	159
第九章 pn 型接面二極體之特性	177
第十章 金屬與半導體接面二極體	209
第十一章 半導體超晶格之量子穿效應	233
第十二章 半導體雷射	261
第十三章 半導體量子點 (quantum dots)、線之特性	279
第十四章 光能接收器	303
第十五章 超導穿隧電子元件	329
第十六章 半導體電光與電磁之效應	355
第十七章 熱輻射與場輻射元件	377
名詞索引	387



第 1 章

晶體結構之對稱性

第一節 引言

固態電子學主要為探討固體內電子在各種電磁波頻率下之傳輸現象，在直流(DC)時，固體可依其導電性而區分成絕緣體(insulator)、半導體(Semiconductor)及金屬(metal)三種，其電導率(conductivity)分別介於 $< 10^{-10}(\Omega\text{-cm})^{-1}$ ， $10^{-10} \sim 10^4(\Omega\text{-cm})^{-1}$ 及 $10^4 \sim 10^{12}(\Omega\text{-cm})^{-1}$ ；有些金屬在溫度降至臨界溫度 T_c 以下時，會出現零電阻，此時若同時具有麥斯納(Meissner)排磁效應則稱為超導體(superconductor)。傳統超導體如 Nb_3Ge 之臨界溫度為 23K，最近發展之汞系($\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$)高溫超導體則可達 133K^[1,2]。

固體內之原子與原子凝聚在一起，原子內之價電子(Valence electron)相互作用形成連續之能帶，此能帶如被電子填滿則稱為價帶，而未填滿或半填滿的則稱為傳導帶(conduction band)，此二能帶夾有一費米能階(Fermi level)。如圖 1.1 所示，金屬或半金屬之傳導帶及價帶全部或部份互相重疊，電子數目決定於相疊面積。在半導體內則此二能階間有一間隙(energy gap)，當此間隙大於 10eV 以上時，此半導體可視為絕緣體，此時電子無法由價帶激發至傳導

帶，亦很難藉摻雜 (doping) 而增加傳導帶上之電子數目。同一元素或數元素組成之固體，由於其晶格排列之不同，而會形成截然不同之導體或絕緣體。例如六面體 (hexagonal) 之石墨為良導體，而四面體 (tetragonal) 之金剛鑽則為極佳絕緣體。

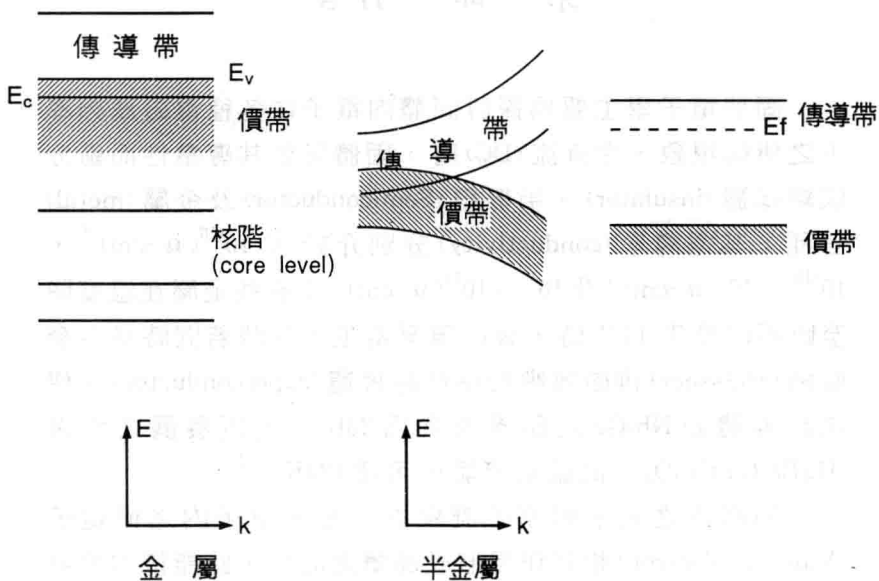


圖 1.1 金屬、半金屬、半導體之能帶結構，水平軸表動量 (k)，垂直軸表能量。

第二節 晶格學(Crystallography)

由於固體內電子數目非常多（約 10^{21}cm^{-3} ），這些多體 (many body) 電子間之交互作用非常複雜，故如要個別而正確尋求電子之波函數以描述物理現象將為不可能；但由於固體內原子之呈週期性規則排列，此固體內之所有物理行為如波函數、能帶、聲子、電磁波之傳播等，皆受限於此對稱性結構，利用群論 (group theory) 之運算，可解決晶體之對稱性問題。

所謂晶體結構常以單胞 (unit cell) 作週期性之排列，一單胞由數原子所組成其大小約為 $2 \sim 10$ 埃，常見之單胞如圖 1.2 所示。假若單胞之晶格常數 (lattice constant) 為 a ， b 及 c ，則連接原點 (origin) 至其他單胞上晶格點之距離為：

$$\vec{l} = h\vec{a} + k\vec{b} + l\vec{c}, \dots\dots\dots (1.1)$$

其中 h ， k ， l 為互質之整數，此時 \vec{l} 之方向可用 $\langle hkl \rangle$ 表示；因之單胞內之 \hat{a} ， \hat{b} 及 \hat{c} 軸，可分別用 $\langle 100 \rangle$ ， $\langle 010 \rangle$ 及 $\langle 001 \rangle$ 來表示，其與 $\langle 200 \rangle$ ， $\langle 020 \rangle$ 及 $\langle 004 \rangle$ 相仿，仍指同一方向；其反方向則用 $\langle \bar{h}\bar{k}\bar{l} \rangle$ 表示。在立方體結晶內， $\langle 100 \rangle$ 、 $\langle 200 \rangle$ 及 $\langle \bar{1}00 \rangle$ 皆指同一方向，一個方向可由對稱運算子轉移到數個新方向，而形成同一架構之方向 (directions of a form)，例如 $\langle 111 \rangle$ ， $\langle \bar{1}\bar{1}\bar{1} \rangle$ ， $\langle \bar{1}\bar{1}1 \rangle$ 及 $\langle \bar{1}1\bar{1} \rangle$ 等，上述方向形成交集 (set) 可以 $[111]$ 表示。而平面則以小括號 (hkl) 表示，其垂直於法線 $\langle hkl \rangle$ ；由對稱運算某些面可以互為對易，例

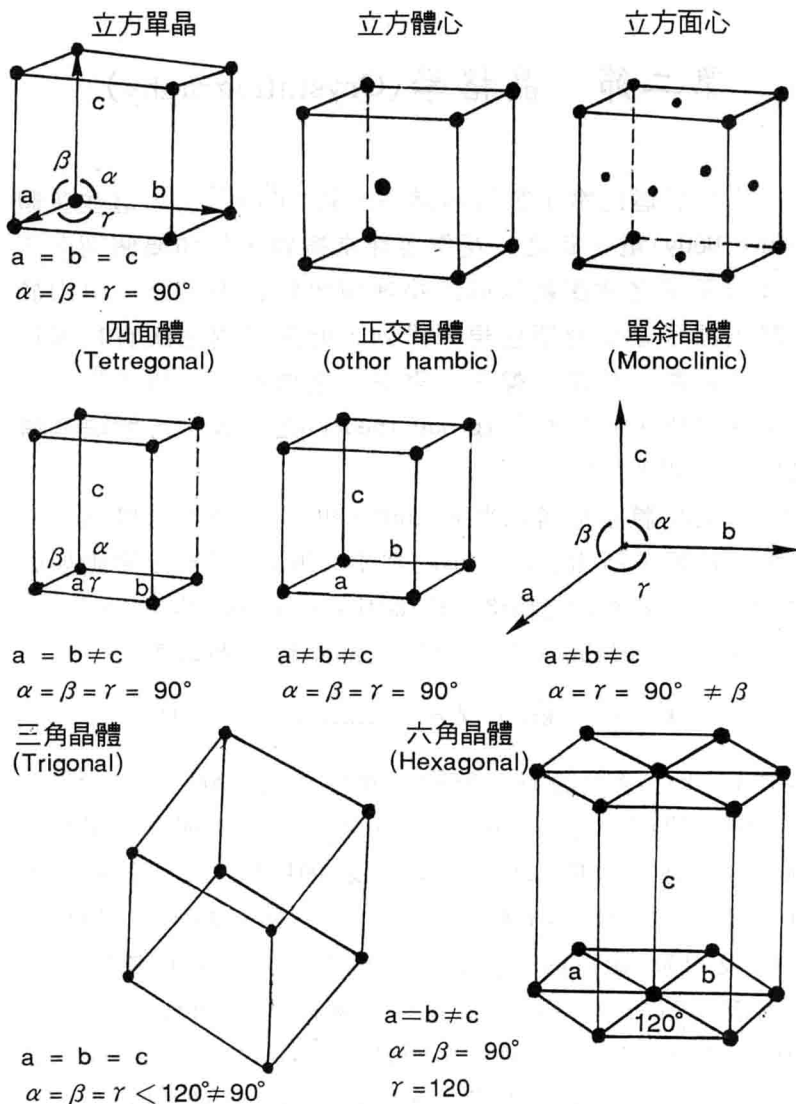


圖 1.2 常見晶體結構之單胞種類

如 (100) ， (010) ， $(\bar{1}00)$ ， $(1\bar{0}0)$ ， $(0\bar{1}0)$ ， $(00\bar{1})$ 與 (001) 可成一交集 (set) 而以同一架構之面 (planes of a form) $\{100\}$ 表示。圖 1.3 顯示立方晶體之對稱軸及對稱面。

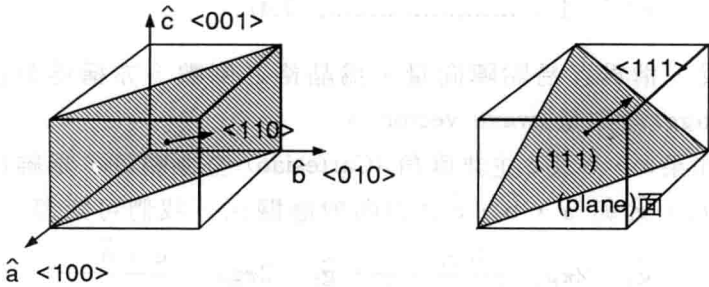


圖 1.3 立方體之對稱軸及面

§ 1.2.1 互易點陣 (Reciprocal Lattice) 及米勒 (Miller) 指標

由於晶格之具重覆性 (repeativity)，因之在此晶體內之物理函數亦具重覆性，其可表示如下

$$f(\vec{r} + \vec{l}) = f(\vec{r}) \circ \dots\dots\dots (1.2)$$

具有此週期性特質之方程式，可以用傅利葉 (Fourier) 級數展開而得正弦，餘弦或指數函數，如

$$f(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} A_{\vec{g}} e^{i\vec{g} \cdot \vec{r}} \circ \dots\dots\dots (1.3)$$

其中 \vec{g} 之分量滿足下列關係， $g_a = \frac{g_1}{a} 2\pi$ ， $g_b = \frac{g_2}{b} 2\pi$ 及 $g_c =$

$\frac{g_3}{c} 2\pi$ ，而 g_1, g_2, g_3 為整數，則 $\vec{g} \cdot \vec{l} = \hat{g}_a \cdot h\hat{a} + \hat{g}_b \cdot k\hat{b} + \hat{g}_c \cdot \ell\hat{c} = h a g_a + k b g_b + \ell c g_c = (g_1 h + g_2 k + g_3 \ell) 2\pi = 2\pi \times \text{整數}$ ，故

$$e^{i\vec{g} \cdot \vec{l}} = 1 \quad (1.4)$$

此時 \vec{g} ，稱為互易點陣向量，為晶格之倒數，亦稱為布拉格 (Bragg) 波向量 (wave vector)。

如果 a, b 及 c 並非直角 (Cartesian) 座標關係，為維持 $\hat{g}_a, \hat{g}_b, \hat{g}_c$ 與 $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$ 之方向對應關係，我們可定義

$$\begin{aligned} \hat{g}_a &= 2\pi g_1 \frac{\hat{b} \times \hat{c}}{\hat{a} \cdot \hat{b} \times \hat{c}}, \quad \hat{g}_b = 2\pi g_2 \frac{\hat{c} \times \hat{a}}{\hat{a} \cdot \hat{b} \times \hat{c}}, \\ \hat{g}_c &= 2\pi g_3 \frac{\hat{a} \times \hat{b}}{\hat{a} \cdot \hat{b} \times \hat{c}} \quad \dots\dots\dots (1.5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{則 } \hat{g} \cdot \vec{l} &= 2\pi g_1 h \frac{\hat{a} \cdot \hat{b} \times \hat{c}}{\hat{a} \cdot \hat{b} \times \hat{c}} + 2\pi g_2 k \frac{\hat{b} \cdot \hat{c} \times \hat{a}}{\hat{a} \cdot \hat{b} \times \hat{c}} + \\ 2\pi g_3 \ell \frac{\hat{c} \cdot \hat{a} \times \hat{b}}{\hat{a} \cdot \hat{b} \times \hat{c}} &= 2\pi (g_1 h + g_2 k + g_3 \ell) = 2\pi \times \text{整數} \quad \dots\dots (1.6) \end{aligned}$$

此時 \hat{g} 稱為互易點陣，利用它可以表示互易點陣面及點，此在描述有關繞射及動量與能帶結構上頗為有用。原晶格 $(ha, kb, \ell c)$ 面之互易點陣面之求法如下：在原晶格方向 \hat{a}, \hat{b} 及 \hat{c} 軸上截取例如 $h = 1, k = 2, \ell = 3$ 諸點並連結成一平面，其互易點陣面為取 $(\frac{1}{h} \hat{b} \times \hat{c}, \frac{1}{k} \hat{c} \times \hat{a}, \frac{1}{\ell} \hat{a} \times \hat{b}) = \frac{1}{6}(6, 3, 2)$ 乘以最小公倍數 6 而得 $(g_1, g_2, g_3) = (6, 3, 2)$ ，與互易點陣面 (g_1, g_2, g_3) 垂直之法線則以 $\langle g_1 \ g_2 \ g_3 \rangle$ 表示，線與面之族群仍然以 $\{g_1, g_2, g_3\}$ 及 $\{g_1 \ g_2 \ g_3\}$ 表示，與原晶

格之表示法相同。

第三節 點群論 (point group)^[3]

滿足式 (1.1) 之平移對稱性晶格稱為 Bravais 晶格，其可允許之對稱性運算子 (symmetry operator) 主要有旋轉 (rotation C)，反向 (inversion I)，鏡面反射 (mirror reflection σ) 及旋轉後再作鏡面反射 (S) 等運算子。在此晶體內之任一晶格點、向量或波函數 ψ ，經運算子 P 之座標轉換後需保持不變，例如

$$P \psi (x,y,z) = a \psi (x,y,z), \dots\dots\dots (1.7)$$

其中 a 為一無向量自然數 (scalar)。茲以立方晶體 (cubic crystal) 說明其可能包含之運算子 \hat{P} ：

E ：表示不運算 (identity) 之基元 (unit element)。

$8C_3$ ：沿體對角線 $[111]$ 旋轉 $2\pi/3 = 120^\circ$ ，由於 $[111]$ 向徑共包含 $\langle 111 \rangle$ ， $\langle \bar{1}11 \rangle$ ， $\langle 1\bar{1}1 \rangle \dots\dots$ 等八個，故 C_3 前之 8 表示同類運算子數。

$3C_2$ ：沿邊緣 $[100]$ 旋轉 180° ，其包括 $\langle 100 \rangle$ ， $\langle 010 \rangle$ 及 $\langle 001 \rangle$ 三對稱軸。

$6C_2$ ：沿面對角線 $[110]$ 旋轉 180° 。其包括 $\langle 110 \rangle$ ， $\langle 101 \rangle$ ，等六個對稱軸。

$6C_4$ ：沿 $[100]$ 旋轉 $\pi/2$ 或 $3\pi/2$ ， $[100]$ 晶軸共包括 $\langle 100 \rangle$ ， $\langle 010 \rangle$ 及 $\langle 001 \rangle$ 三個，共有 $2 \times 3 = 6$ 個運算子。

- I : 反向對稱子 (inversion symmetry) 其將向量 \vec{R} 轉換成 $-\vec{R}$ 。
- σ : 鏡面反射子，其又包含 σ_h (對水平面 h 作反射) 及 σ_v (對垂直面 v 作反射)。
- S_n^k : 對某軸旋轉 C_n^k 後再對垂直此軸之面作鏡面反射對稱 σ 。

不同之晶體結構其所含之對稱運算子亦不同，運算子愈多的，其對稱性愈高。表 1.1 為各種晶體之運算子種類。

表 1.1 為各種晶體結構所包含之對稱之運算子

	國際標示	Schönflies標示	對稱運算子
三角晶系 (Triclinic)	$\frac{1}{1}$	C_1	E
	1	C_1	E, I
單斜晶系 (Monoclinic)	m	C_2	E, σ_h
	2	C_2	E, C_2
	2/m	C_2h	E, C_2, I, σ_h
正方晶系 (Cubic)	$\frac{23}{432}$	T	E, $8C_3, 3C_2$
	43m	T_d	E, $8C_3, 3C_2, 6\sigma, 6S_4$
	432	O	E, $8C_3, 3C_2, 6C_2, 6C_4$
	m3m	O_h	E, $8C_3, 3C_2, 6C_2, 6C_4, I, 8S_3, 3\sigma, 6\sigma, S_4$

§ 1.3.1 對稱運算子之乘法規則

在同一點群 (point group) 內，運算子滿足下列相乘規則，

此即

- (1) $E \cdot A = A \cdot E = A$ ，其中 E 為基元。
- (2) $A^{-1} \cdot A = A \cdot A^{-1}$ 。
- (3) 若 $A, B \in G$ ，則 $A \cdot B = C \in G$ ，即在同一群 G 內之數元素相乘之積，仍屬於同一群內，形成封閉(close)系統。
- (4) 聯結定律(associate law)，即 $ABC = (AB)C = A(BC)$ 。
- (5) 互調定律不一定滿足，即 $AB \neq BA$ 。..... (1.8)

茲舉 NH_3 分子為例，其滿足點群 C_{3v} 之對稱性，共包含對稱運算子 $E, C_3, C_3^{-1}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ ；其中 C_3 及 $C_3^{-1} = C_3^2$ 係對穿過 N 原子之主軸（見圖 1.4）旋轉 $\frac{2\pi}{3}$ 或 $\frac{4\pi}{3}$ ，

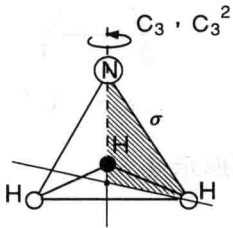


圖 1.4 氨分子之原子排列

σ 係對包含主軸及一 $N-H$ 鍵之面作鏡面反射。當點群內之某數元素任取二個相乘，所獲乘積再與此組內任一元素相乘，如結果仍在此組內形成一小封閉系統，則此數元素同屬一次群(subgroup)；例如上述 C_{3v} 點群內， E, C_3, C_3^2 組成一封閉之次群。我們可以用圖 1.5 說明 C_{3v} 群內，二元素相乘之幾何結果。如將運算子之乘積製成表。

	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
E	E	C_3	C_3^2	σ_1	σ_2	σ_3
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_3	σ_1	σ_2
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_2	σ_3	σ_1
σ_1	σ_1	σ_2	σ_3	E	C_3	C_3^2
σ_2	σ_2	E	σ_3	C_3^2	E	C_3
σ_3	σ_3	C_3	E	C_3	C_3^2	E