

凝聚态物理学丛书

李名恒 著

半导体物理学



科学出版社

凝聚态物理学丛书

半导体物理学

李名復 著

科学出版社

1991

(京)新登字 092 号

内 容 简 介

本书介绍近代半导体物理学中比较活跃的几个领域的基本成就和新的
发展。全书共五章：第一章论述完整晶体的能带理论，其中包括 LCAO方
法，赝势方法， $k \cdot p$ 方法和自旋轨道耦合；第二章论述半导体中的缺陷态，
重点介绍深能级的理论和实验；第三章介绍半导体的光学性质，包括光吸
收、激子、发光和拉曼散射；第四章论述半导体表面，重点讨论清洁的外表
面；第五章简单介绍异质结、量子阱、超晶格及 Hall效应。每章末尾均附有
参考文献，书末还附有读者必备的基础知识和常用数据等三个附录。

本书是一部大专院校半导体物理专业研究生和高年级学生的教科
书，同时也是凝聚态物理及其他有关领域的科研人员及研究生的参考书。

凝聚态物理学丛书

半 导 体 物 理 学

李名復 著

责任编辑 李义发

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码 100707

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1991年2月第 一 版	开本：850×1168 1/32
1991年2月第一次印刷	印张：12 1/8
印数：平1—1 450	插页：平1稿3
751—600	字数：316 000

ISBN 7-03-002397-8/O·448 (平)

ISBN 7-03-002398-6/O·449 (精)

平 装 13.60 元
定价：布面精装 15.80 元

科技新书目：249-平 80 精 81

《凝聚态物理学丛书》出版说明

以固体物理学为主干的凝聚态物理学，通过半个世纪以来的迅速发展，已经成为当今物理学中内容最丰富、应用最广泛、集中人力最多的分支学科。从历史的发展来看，凝聚态物理学无非是固体物理学的向外延拓。由于近年来固体物理学的基本概念和实验技术在许多非固体材料中的应用也卓有成效，所以人们乐于采用范围更加广泛的“凝聚态物理学”这一名称。

凝聚态物理学是研究凝聚态物质的微观结构、运动状态、物理性质及其相互关系的科学。诸如晶体学、金属物理学、半导体物理学、磁学、电介质物理学、低温物理学、高压物理学、发光学以及近期发展起来的表面物理学、非晶态物理学、液晶物理学、高分子物理学及低维固体物理学等都是属于它的分支学科，而且新的分支尚在不断进发。还有，凝聚态物理学的概念、方法和技术还在向相邻的学科渗透，有力地促进了材料科学、化学物理学、生物物理学和地球物理学等有关学科的发展。

研究凝聚态物质本身的性质和它在各种外界条件(如力、热、光、气、电、磁、各种微观粒子束的辐照乃至处于各种极端条件)下发生的变化，常常可以发现多种多样的物理现象和效应，揭示出新的规律，形成新的概念，彼此层出不穷，内容丰富多彩，这些既体现了多粒子体系的复杂性，又反映了物质结构概念上的统一性。所有这一切不仅对人们的智力提出了强有力的挑战，更重要的是，这些规律往往和生产实践有着密切的联系，在应用、开发上富有潜力，有可能开辟出新的技术领域，为新材料、元件、器件的研制和发展，提供牢固的物理基础。凝聚态物理学的发展，导致了一系列重要的技术突破和变革，对社会和科学技术的发展将发生深远的影响。

为了适应世界正在兴起的新技术革命的需要,促进凝聚态物理学的发展,并为这一领域的科技人员提供必要的参考书,我们特组织了这套《凝聚态物理学丛书》,希望它的出版将有助于推动我国凝聚态物理学的发展,为我国的四化建设做出贡献。

主 编: 葛庭燧

副主编: 冯 端

序 言

随着我国半导体研究工作日益深入的发展，我越来越感到十分需要有一部能切实有助于我国研究人员加强理论基础、提高科学水平的半导体物理书籍。为此，大约在十年前，我曾答应科学出版社的编辑，我将努力在半导体研究所讲课的基础上，尝试写出一部适应这种需要的专著。但是，由于我当时担负一定的行政工作，又必须花较多的精力才能把自己的研究工作抓起来，以致已经开始的讲课也停顿了下来。尝试写书的打算自然也就落空了。后来，我有幸看到李名復教授在中国科技大学研究生院的一部分半导体物理讲义。读后，它给我留下深刻的印象。我深感讲义中所写的题材和讲解的风格，都有不同于已出版的几种半导体物理教学用书的特色，更加切合研究工作的需要，我当时曾表示，希望这本讲义能够成书出版。

现在我高兴地看到，李名復教授已在他讲课的基础上，经过几年的努力，在繁重的教学和科研工作之余，完成了本书的写作。我认为该书最大的特色是着眼于当代半导体物理研究发展的前沿。书中各章包括了大部分近年来研究最活跃的领域。本书对各个领域中所依据的主要理论以及采用的研究方法，都作了相当全面、具体的介绍。鉴于半导体研究发展特别迅速的特点，李名復教授还尽力使全书内容能反映各领域的最新进展。

由于本书在相当广的面上，涉及许多深入的、专门的问题，所以不可能像一般教科书那样，对所有问题都作详尽的讲解。李名復教授为此特别提供了可以作进一步了解和钻研的文献。

我深切希望科学出版社能克服困难，使本书早日出版。我相信，该书的出版必将受到广大半导体研究人员的欢迎，并对我国培

养青年科技人才和半导体事业的发展作出重要的贡献。

黄 昆
于 北 京

目 录

《凝聚态物理学丛书》出版说明

序 言

第一章 完整晶体的能带理论	1
§ 1.1 预备知识.....	1
§ 1.2 正交化平面波(OPW)和赝势(pseudopotential)方法.....	6
*§ 1.3 赝势方法进一步讨论.....	22
1.3.1 密度泛函理论	22
1.3.2 自洽赝势计算和规范保持(norm-conserving)赝势...	24
1.3.3 交换和关联作用局域密度近似(LDA)和准粒子.....	26
1.3.4 晶体系统总能量和结构参数	30
§ 1.4 紧束缚近似或原子轨道线性组合近似(LCAO)...	36
§ 1.5 $k \cdot p$ 方法及有效质量	50
*§ 1.6 自旋轨道耦合和由此引起的简并态的分裂.....	56
参考文献.....	71
第二章 半导体中的缺陷态	75
§ 2.1 引言.....	75
§ 2.2 对具有点缺陷的非理想晶体中的电子态的一般讨论.....	78
§ 2.3 浅能级的有效质量近似(EMT)	85
§ 2.4 深能级的集团模型(cluster)方法、Koster-Slater格林函数方法和负 U 中心.....	95
§ 2.5 载流子通过深能级间接复合动力学.....	105
§ 2.6 利用瞬态方法研究缺陷能级.....	114
2.6.1 半导体结势垒区(空间电荷区)的瞬变分析	115
2.6.2 等温条件下的瞬态分析	121

2.6.3 深能级瞬态谱 (DLTS) 方法.....	128
*§ 2.7 磁共振方法研究深能级 (EPR, ENDOR 和 ODMR)	131
2.7.1 缺陷电子与磁场的相互作用	132
2.7.2 超精细作用	133
2.7.3 电子顺磁共振实验	136
2.7.4 g 张量.....	141
2.7.5 双共振(ENDOR)	143
2.7.6 光测磁共振 (ODMR)	143
*§ 2.8 深能级对载流子的复合机构——多声子无辐射复合.....	145
参考文献.....	155
第三章 半导体的光学性质.....	161
§ 3.1 固体宏观光学响应函数.....	161
3.1.1 光的传播	161
3.1.2 光的反射	162
3.1.3 光的透射	163
3.1.4 Kramers-Kronig 色散关系	164
§ 3.2 靠近吸收边的本征吸收.....	168
3.2.1 直接跃迁吸收边	163
3.2.2 非直接跃迁吸收边	179
§ 3.3 激子 (excitons) 和激子效应	180
3.3.1 激子	180
3.3.2 激子效应对直接跃迁吸收边谱的影响	186
*3.3.3 激子效应对非直接跃迁吸收边谱的影响	191
§ 3.4 高能量跃迁.....	194
3.4.1 联合态密度和临界点	194
3.4.2 反射谱	197
*3.4.3 调制反射谱	199
§ 3.5 缺陷态对应的光电离谱.....	202
§ 3.6 自由载流子吸收.....	206
3.6.1 带内跃迁	206

3.6.2 带间跃迁	208
§ 3.7 晶格吸收	210
§ 3.8 光发射	213
3.8.1 光场态密度及有关定义	214
3.8.2 受激吸收和发射, 自发发射	216
3.8.3 各种发光过程(弱的自发辐射)	219
*3.8.4 光吸收和光发射之间的关系, 推广的 Van Roosbroeck-Shockley 关系, 光放大(强的发射)	226
§ 3.9 光的非弹性散射——拉曼散射	229
3.9.1 有关名词和经典图象	229
3.9.2 拉曼散射的量子力学图象	231
*3.9.3 共振拉曼散射	236
*3.9.4 受激拉曼散射	238
* 3.9.5 极化激元	239
参考文献	245
第四章 半导体表面	250
§ 4.1 引言	250
§ 4.2 表面晶格结构	251
4.2.1 二维周期性	251
4.2.2 表面重构	254
§ 4.3 表面电子态	255
4.3.1 一般讨论	255
4.3.2 自洽势方法	258
4.3.3 LCAO 方法	268
4.3.4 格林函数方法	270
* § 4.4 对表面重构的进一步讨论	276
4.4.1 Si {100} 2×1 表面	277
4.4.2 Si {111} 2×1 表面	277
4.4.3 Si {111} 7×7 表面	279
§ 4.5 表面的实验研究方法	281
4.5.1 综述	281
4.5.2 光电子谱 (PS)	287

4.5.3 低能电子衍射(LEED).....	294
参考文献.....	298
第五章 异质结,量子阱,超晶格和量子 Hall 效应.....	303
§ 5.1 异质结的能带失调.....	303
§ 5.2 量子阱.....	307
5.2.1 量子阱中的束缚量子态	308
5.2.2 量子阱中的能态密度	310
5.2.3 量子阱中光跃迁对应的光吸收和发射	312
§ 5.3 超晶格.....	315
5.3.1 一般概念	315
*5.3.2 利用 LCAO 方法、有效质量方法和赝势方法对超晶 格能带结构作进一步讨论	320
§ 5.4 量子 Hall 效应	329
参考文献.....	336
附录 A 群论知识备忘录.....	339
附录 B 光和电子相互作用的量子理论.....	359
附录 C 半导体物理研究中常用数据和图表.....	364
附录的参考文献.....	372
后记.....	374

* 左上角标有“*”号的这些章节,对于不熟悉群论、固体理论的读者和学生在第一次阅读时可以跳过不看。

第一章 完整晶体的能带理论

§ 1.1 预备知识

本章目的如下:

(一) 介绍几种常用的半导体能带计算方法和概念。

(二) 用这些方法和概念,对某些重要半导体作具体讨论,给出一些重要结果。

通过本章的学习,对一些重要半导体(如 Si, Ge, III-V 族, II-VI 族等化合物半导体)的能带结构有进一步的了解,为学习半导体物理的其它内容提供一个比较好的基础。也为进一步学习和研究有关能带的问题提供一个有益的入门参考材料。

现在,我们首先复习下述一些的重要关系^[1-5]:

(一) 设晶体的正格基矢为 $\mathbf{a}_i, i = 1, 2, 3$, 倒格基矢为 $\mathbf{b}_i, i = 1, 2, 3$ 。它们的关系为

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \end{aligned} \quad (1.1.1)$$

其中 $|\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)| = \mathcal{V}$ 为正格原胞体积。格点

$$\mathbf{r}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i \quad (n_i \text{ 为任意整数}) \quad (1.1.2)$$

的全体组成正格的布喇菲 (Bravais) 格子。格点

$$\mathbf{G} = \sum_{i=1}^3 g_i \mathbf{b}_i \quad (g_i \text{ 为任意整数}) \quad (1.1.3)$$

的全体组成倒格的布喇非格子。倒格原胞体积为 $(2\pi)^3/\Omega$ 。满足晶体对称性的倒格原胞称为布里渊区 (Brillouin zone, 简称为 B.Z.)。正格和倒格基矢满足

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (1.1.4)$$

可证 \mathbf{a}_i 和 \mathbf{b}_j 互为倒格矢。

(二) 设晶体由三个边为 $N_i\mathbf{a}_i (i = 1, 2, 3)$ 的原胞所组成, 共有 $N = N_1N_2N_3$ 个原胞。引入平面波

$$\langle \mathbf{r} | PW, \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (1.1.5)$$

其中

$$\mathbf{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{n_i}{N_i} \mathbf{b}_i \quad (n_i \text{ 为整数}). \quad (1.1.6)$$

式(1.1.5)组成晶体中满足周期边界条件的完备正一系, 即

$$\langle PW, \mathbf{k} | PW, \mathbf{k}' \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}, \quad (1.1.7)$$

$$\sum_{\mathbf{k}} |PW, \mathbf{k}\rangle \langle PW, \mathbf{k}| = 1. \quad (1.1.8)$$

由式 (1.1.7), (1.1.8) 可知, 对满足周期性边界条件的任意函数 $\phi(\mathbf{r})$ 可展开为

$$\phi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \phi \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{r} | PW, \mathbf{k} \rangle \langle PW, \mathbf{k} | \phi \rangle, \quad (1.1.9)$$

其中

$$\langle PW, \mathbf{k} | \phi \rangle = \int_{N\Omega} \langle PW, \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \phi \rangle d\mathbf{r}. \quad (1.1.10)$$

另外, 由式(1.1.5), (1.1.7)可推得下式:

$$\sum_{\text{全体晶格 } \mathbf{r}_n} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}_n} = N\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}. \quad (1.1.11)$$

(三) 对于与晶格有同样周期性的函数 $u(\mathbf{r})$

$$u(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r} + \mathbf{r}_n) \quad (1.1.12)$$

可展开成

$$u(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | u \rangle = \sum_{\mathbf{G}} u_{\mathbf{G}} \langle \mathbf{r} | PW, \mathbf{G} \rangle, \quad (1.1.13)$$

\mathbf{G} 为式(1.1.3)所定倒格矢,而

$$u_{\mathbf{G}} = \langle PW, \mathbf{G} | u \rangle = \int_{N\Omega} \langle \mathbf{r} | u \rangle \langle PW, \mathbf{G} | \mathbf{r} \rangle d\mathbf{r}. \quad (1.1.14)$$

(四) 由式(1.1.6)可知,可取的 \mathbf{k} 在 \mathbf{k} 空间形成密度 $\frac{N\Omega}{(2\pi)^3}$

的点。在 $N \rightarrow \infty$ 时,对 \mathbf{k} 求和可代以积分

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{N\Omega}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k}. \quad (1.1.15)$$

(五) 由固体物理可知,晶体中电子能量和波函数可归结为下列单电子薛定谔方程的解:

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi &= E\Psi, \\ \hat{H} &= \frac{P^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (1.1.16)$$

$V(\mathbf{r})$ 为晶格周期函数,即满足式(1.1.11)。式(1.1.16)对应的本征函数

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.1.17)$$

称为 Bloch 函数,其中 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 为 \mathbf{r} 的晶格周期函数

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{r}_j) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.1.18)$$

而 \mathbf{k} 取式(1.1.6)。对应本征能量 $E_{n\mathbf{k}}$, 指标 n 为能带指标, \mathbf{k} 为波矢。 $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 构成晶体满足周期边界条件的完备正一系。记 $\Psi_{n\mathbf{k}}$ 为 $|n\mathbf{k}\rangle$, 则

$$\langle n\mathbf{k} | n'\mathbf{k}' \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad (1.1.19)$$

$$\sum_{n,\mathbf{k}} |n\mathbf{k}\rangle \langle n\mathbf{k}| = 1. \quad (1.1.19a)$$

(六) 引入晶体格点 \mathbf{r}_j 处的 Wannier 函数

$$a_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.1.20)$$

可证它局域于 \mathbf{r}_j 附近。记 $a_n(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ 为 $|nj\rangle$, 可证它具有下列性质:

$$\langle n'j' | nj \rangle = \delta_{nn'} \delta_{jj'}, \quad (1.1.21)$$

$|nj\rangle$ 亦为满足周期性边界条件的晶体内完备正一系。而且

$$|nk\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{ik \cdot r_i} |nj\rangle, \quad (1.1.22)$$

$$\langle nk | n'j \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ik \cdot r_i} \delta_{nn'}. \quad (1.1.23)$$

(七) 金刚石和闪锌矿 (zincblende) 结构。半导体中最重要的晶体具有金刚石 (Ge, Si) 或闪锌矿 (III-V 族, II-VI 族化合物半导体) 结构。它们是由两个晶格常数相同的面心立方布喇菲格子平行套构而成 (图 1.1.1), 这两个格子分别记作 A 和 B 格。设取 A 格某格点为原点, x, y, z 轴沿立方体三个边。面心立方边长 a (称晶格常数), 则 B 格点与 A 格点的两个面心立方体平行, 且错开 $(a/4)(1, 1, 1)$ 。如 A 和 B 格点为同类原子, 则称为金刚石结构 [晶体只由一类原子组成的, 称同极 (homopolar) 晶体]。如 A 和 B 格点为异类原子, 则称为闪锌矿结构 [晶体由两类不同原子组成的, 称异极 (heteropolar) 晶体]。通常这两类原子连结成晶体后带有正、负电性, 由该两种原子的电负性 (electronegativity) 的相对强度而定。带正电的称 cation, 带负电的称 anion。比如 III-V 族化合物 GaAs, 三族 Ga 原子为 cation, 五族 As 原子为 anion。

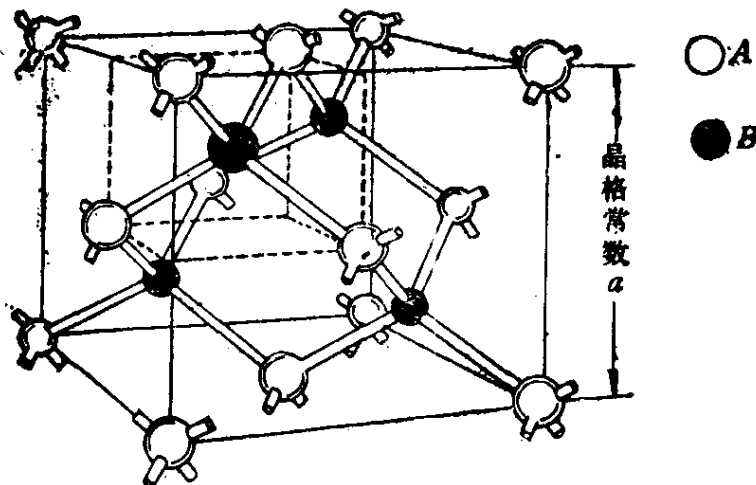


图 1.1.1 金刚石或闪锌矿的结构。A 类或 B 类格点分别为晶格常数相同的面心立方格点。两类面心立方相互平行而错开 $(a/4)(1, 1, 1)$ 。对金刚石结构, A 和 B 为同类原子。对闪锌矿结构, A 和 B 为异类原子。

面心立方的倒格矢构成体心立方布喇菲格子。布里渊区为此体心立方格子的 Wigner-Seitz 原胞。以某倒格点为中心,作所有与周围格点的连线,在每一连线正中作一垂直于连线之平面,此类平面就构成以倒格点为中心的原胞,即 Wigner-Seitz 原胞,其形状和对称性见图 A.3。

如将面心立方布喇菲格子(附录 A)的三个基矢取为

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(1, 1, 0), \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(0, 1, 1), \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}(1, \bar{1}, 0),\end{aligned}\tag{1.1.24}$$

则利用式(1.1.1)可证三个倒格基矢为

$$\begin{aligned}\mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a}(1, 1, \bar{1}), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a}(0, 0, 2), \\ \mathbf{b}_3 &= \frac{2\pi}{a}(1, \bar{1}, 1),\end{aligned}\tag{1.1.25}$$

而正格原胞的体积 Ω 为 $a^3/4$ 。为方便起见,下面列出面心立方的三个基矢的另一种取法:

$$\begin{aligned}\mathbf{a}_1 &= \frac{a}{2}(1, 1, 0), \\ \mathbf{a}_2 &= \frac{a}{2}(0, 1, 1), \\ \mathbf{a}_3 &= \frac{a}{2}(1, 0, 1),\end{aligned}\tag{1.1.24a}$$

以及其倒格基矢

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 1, \bar{1}),$$

$$b_2 = \frac{2\pi}{a}(\bar{1}, 1, 1), \quad (1.1.25a)$$

$$b_3 = \frac{2\pi}{a}(1, \bar{1}, 1).$$

表 1.1.1 所列的是常见半导体的晶格常数 a 的值。

表 1.1.1 几种半导体的面心立方晶格常数^[6]

晶 体	结 构	晶格常数(Å)
C	金 刚 石	3.56
Si		5.43
Ge		5.66
Sn		6.49
GaP	闪 锌 矿	5.44
GaAs		5.64
AlSb		6.13
InP		5.86
GaSb		6.12
InAs		6.04
InSb		6.48
ZnS		5.41
ZnSe		5.65
ZnTe		6.07
CdTe		6.41

§ 1.2 正交化平面波 (OPW) 和赝势 (pseudopotential) 方法

首先, 我们来说明一下为什么初等固体物理教科书中所介绍的平面波方法^[4]不适用于真正固体的能带计算。

从原则上来说, 我们总可以把晶体中的波函数用平面波展开。根据 Bloch 定理, 晶体波函数可写成下列波矢为 k 的 Bloch 波形式:

• • •