GAO DENG
BAN DAO TI WU LI

高等半导体物理

赵冷柱
张希成 编著

华东师范大学出版社

高等半导体物理

赵冷柱　张希成　编著

华东师范大学出版社

(沪)新登字第201号

高 等 半 导 体 物 理

赵冷柱　张布成　编著

华东师范大学出版社出版发行
(上海中山北路3663号)
新华书店上海发行所经销　　江苏如东印刷厂印刷
开本：850×1168　1/32　印张：17.25　字数：440千字
1992年3月第一版　　　1992年3月第一次印刷
印数：001－2,000 本

ISBN 7-5617-0707-X/O·018　　定价：(平)8.65元(精)11.00元

序

近二十年来，半导体物理取得了很大的进展，出现了不少新领域，例如一维和二维物理(低维物理)、超晶格、半磁半导体、深能级物理、界面物理、半导体中超快现象以及非晶态半导体等。比较系统地阐述这些新领域的基本理论、研究方法和半导体的其它重要性质(载流子的弹性与非弹性散射、复杂能带结构的载流子输运、半导体的光学性质等)，是编写本书的目的之一。

作者从多年的教学中感受到：半导体物理与器件专业的研究生，需要一本能尽可能地缩短课堂内容与近期文献距离的教材，这是编写本书的目的之二。

本书是在原授课内容和科研总结的基础上撰写而成的，并借用了授课的课程名称作为书名。

在编写时，为了有的放矢，将能带理论和能带计算结合各种具体情况放在有关章节中。与三维比较，一维和二维电子系统的一个重要特性是电子较容易定域化，因此，在二维电子气一章中讨论了电子定域化和输运问题，书中没有单独将非晶态半导体列为一章进行介绍。半磁半导体与一般非磁性半导体最重要的不同是半磁半导体中含铁簇离子，铁簇离子的 $3d^5$ 电子与带内电子的自旋交换作用引起了各种物理效应。这部份内容将放在半磁半导体超晶格一章中讨论。在孤立势阱模型中，超晶格是多势阱的二维系统，在超晶格层方向的输运与二维电子气情况类同，由于这部份内容在第三章中已作了详细介绍，在超晶格一章中不再赘述。半导体中载流子的散射和输运一直是重要的研究课题，故在第一、二章中作了详细介绍。

总之，在编写本书时，力图作到重点突出，有一定深度，用文献

中常用的理论、模型和方法来处理书中内容，并着重于介绍方法。

在编写中得到南京大学何宇亮先生、上海科学技术大学吴克勤先生的大力帮助和支持，特此表示感谢。

作者特别感谢严文苓小姐的大力支持和帮助。

赵燕南同志参加了本书的书稿整理工作，在此一并致谢。

因作者水平有限，一定存在很多缺点和错误，诚恳地希望读者给予批评和指正。

赵冷柱于上海

X.-C. Zhang(张希成)

于 Columbia University, New York

1990 年 5 月

目　　录

第一章　半导体中载流子散射

有效质量理论给出：电子在一个理想完美的晶体中运动与有效质量为 m^* 的自由电子的情况近似相同。在外电场作用下，电子将不断地被加速，不存在一个稳定的漂移速度。可是，实际半导体中的电子漂移速度是一定的，这说明电子在漂移过程中不断受到散射，使电子的速度和能量发生改变。换句话说，散射不断地改变电子的波矢的方向和大小，或者只改变波矢方向而不改变其大小。前者称为非弹性散射，后者称为弹性散射。非弹性散射必然伴随着载流子的能量改变。

不管弹性散射还是非弹性散射，都起因于晶体完整性受到了破坏，原来严格的周期性势场受到畸变。使周期性势场产生畸变的原因很多，在实际半导体中，最重要的是杂质原子的引入、晶格缺陷和晶格振动等。

当用玻耳兹曼动力学方程来研究载流子输运性质时，问题将归结为求解一个微分-积分方程。如果引入一个弛豫时间 τ，求解微分-积分方程可分解为两步进行，首先求弛豫时间，这通常是一个简单积分或积分方程，然后解一个微分方程。这样作的好处是可使问题简化。

鉴于上述原因，本章首先引入弛豫时间，然后根据半导体中不同的散射机构分别计算它们相应的弛豫时间。

§1.1　弛 豫 时 间

在热平衡情况下，在波矢 $\boldsymbol{k}$ 空间，电子分布函数用 $f_0(\boldsymbol{k})$ 表示，即 $f_0(\boldsymbol{k})$ 代表了 $\boldsymbol{k}$ 态上电子占据的几率。在外场作用下，分

布函数变成 $f(\boldsymbol{k})$，去掉外场后，由于散射作用经过时间 τ 后 $f(\boldsymbol{k})$ 又恢复为 $f_0(\boldsymbol{k})$，称 τ 为弛豫时间。散射的机制不同，τ 的具体形式也不同，下面分三种情况进行讨论。

一、带内弹性散射

令 $W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ 代表单位时间内一个处于 $\boldsymbol{k}'$ 态的电子被散射到 $\boldsymbol{k}$ 态的几率，$W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})$ 代表单位时间内一个处于 $\boldsymbol{k}$ 态的电子被散射到 $\boldsymbol{k}'$ 态的几率。由于散射作用，单位时间内 $f(\boldsymbol{k})$ 的变化为

$$\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{k})}{\partial t}\right]_c=\frac{V}{(2\pi)^3}\int\{W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f(\boldsymbol{k}')[1-f(\boldsymbol{k})]$$
$$-W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})f(\boldsymbol{k})[1-f(\boldsymbol{k}')]\}d\boldsymbol{k}', \qquad (1.1.1)$$

式中 V 代表晶体的体积，$(2\pi)^3$ 为单位体积内 $\boldsymbol{k}$ 空间的态密度。对于弹性散射，由含时间 t 的微扰理论可以得出，跃迁几率 $W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})$ 为[1]

$$W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})=\frac{2\pi}{\hbar}|<\boldsymbol{k}'|\hat{H}'|\boldsymbol{k}>|^2\delta(E_{k'}-E_k) \qquad (1.1.2)$$

式中 $\hat{H}'$ 为微扰势，E_k 为态 $\boldsymbol{k}$ 电子能量。

令：
$$f(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k})+\delta f(\boldsymbol{k}), \qquad (1.1.3)$$
$$f(\boldsymbol{k}')=f_0(\boldsymbol{k}')+\delta f(\boldsymbol{k}'), \qquad (1.1.4)$$

由细致平衡原理，有

$$W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k}')]=W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')f_0(\boldsymbol{k}')[1-f_0(\boldsymbol{k})]。 \qquad (1.1.5)$$

利用(1.1.3)～(1.1.5)式，(1.1.1)式中积分函数可写成

$$积分函数=W(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\{[1-f_0(\boldsymbol{k})]\delta f(\boldsymbol{k}')-f_0(\boldsymbol{k}')\delta f(\boldsymbol{k})\}$$
$$-W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\{[1-f_0(\boldsymbol{k}')]\delta f(\boldsymbol{k})-f_0(\boldsymbol{k})\delta f(\boldsymbol{k}')\}。 \qquad (1.1.6)$$

再利用(1.1.5)式，上式可改写为

$$积分函数=W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k}')]$$
$$\times\left\{\frac{\delta f(\boldsymbol{k}')}{f_0(\boldsymbol{k}')[1-f_0(\boldsymbol{k}')]}-\frac{\delta f(\boldsymbol{k})}{f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k})]}\right\}。 \qquad (1.1.7)$$

将(1.1.7)式代入(1.1.1)式中，得

$$\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{k})}{\partial t}\right]_c=\frac{V}{(2\pi)^3}\int W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k}')]\times\left\{\frac{\delta f(\boldsymbol{k}')}{f_0(\boldsymbol{k}')[1-f_0(\boldsymbol{k}')]}-\frac{\delta f(\boldsymbol{k})}{f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k})]}\right\}d\boldsymbol{k}'。\tag{1.1.8}$$

引入弛豫时间 τ：

$$\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{k})}{\partial t}\right]_c=\frac{f_0(\boldsymbol{k})-f(\boldsymbol{k})}{\tau(\boldsymbol{k})}=-\frac{\delta f(\boldsymbol{k})}{\tau(\boldsymbol{k})},\tag{1.1.9}$$

由(1.1.8)和(1.1.9)式，得

$$\tau(\boldsymbol{k})^{-1}=\frac{V}{(2\pi)^3}\int W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\frac{1-f_0(\boldsymbol{k}')}{1-f_0(\boldsymbol{k})}\times\left\{1-\frac{f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k})]}{f_0(\boldsymbol{k}')[1-f_0(\boldsymbol{k}')]}\frac{\delta f(\boldsymbol{k}')}{\delta f(\boldsymbol{k})}\right\}d\boldsymbol{k}'。\tag{1.1.10}$$

设 $\boldsymbol{F}$ 为外加电场，θ 为 $\boldsymbol{k}$ 与 $\boldsymbol{F}$ 的夹角，Θ 为 $\boldsymbol{k}'$ 与 $\boldsymbol{F}$ 的夹角。以 $\boldsymbol{k}$ 为极轴，$\boldsymbol{F}$ 的极角为 θ 和 φ，$\boldsymbol{k}'$ 的极角为 θ' 和 φ'，于是

$$\cos\Theta=\cos\theta\cos\theta'+\sin\theta\sin\theta'\cos(\varphi-\varphi')。\tag{1.1.11}$$

令：

$$\delta f(\boldsymbol{k})=\phi(k)\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{k}=\phi(k)Fk\cos\theta,\tag{1.1.12}$$

$$\delta f(\boldsymbol{k}')=\phi(k')\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{k}'=\phi(k')Fk'\cos\Theta,\tag{1.1.13}$$

将 (1.1.11)～(1.1.13) 式代入 (1.1.10) 式，对 φ' 积分时含 $\cos(\varphi-\varphi')$项为零，于是有

$$\tau(\boldsymbol{k})^{-1}=\frac{V}{(2\pi)^3}\int W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\frac{1-f_0(\boldsymbol{k}')}{1-f_0(\boldsymbol{k})}\times\left\{1-\frac{f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k})]}{f_0(\boldsymbol{k}')[1-f_0(\boldsymbol{k}')]}\frac{\phi(k')k'}{\phi(k)k}\cos\theta'\right\}d\boldsymbol{k}'。\tag{1.1.14}$$

对于弹性散射，$|\boldsymbol{k}|=|\boldsymbol{k}'|$。于是，$\phi(k)=\phi(k')$。又因 $f_0(\boldsymbol{k})=f_0(\boldsymbol{k}')=f_0(k)$，(1.1.14)式变成

$$\tau(\boldsymbol{k})^{-1}=\frac{V}{(2\pi)^3}\int W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})(1-\cos\theta')d\boldsymbol{k}'。\tag{1.1.15}$$

设晶体内只有一个电子，对于电离中心散射，由于势能的球对

称性，$\hat{H}'=V(r)$。设 N_I 为电离中心密度，整个晶体内共有 N_IV 个散射中心，这些电离散射中心同时与电子发生作用，于是弛豫时间为

$$\tau(\boldsymbol{k})^{-1}=\frac{N_I V^2}{(2\pi)^2\hbar}\int|<\boldsymbol{k}'|V(r)|\boldsymbol{k}>|^2 \times(1-\cos\theta')\delta(E_{k'}-E_k)d\boldsymbol{k}', \tag{1.1.16}$$

$$<\boldsymbol{k}'|\hat{H}'|\boldsymbol{k}>=\frac{1}{V}\int\exp(-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r})V(r)\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}。 \tag{1.1.17}$$

上式为常用的弹性散射由迁跃矩阵元直接求弛豫时间的公式。(1.1.17)式表示的矩阵元为一级玻恩近似。

二、带内非弹性散射

对于非弹性散射过程，一般情况下写不出弛豫时间 τ 的简单表示式，除非跃迁矩阵元中不含有声子的波矢$\boldsymbol{q}$[2]。常用的方法是：将定义的 τ 写成一个积分方程，然后用迭代法近似求解[3][4][5]。

上面给出的(1.1.10)式是一个普遍公式，它适用于弹性和非弹性散射过程。对于电子与声子相互作用的非弹性散射，应考虑散射后电子可以有两个终态，一是电子吸收一个声子，即消灭声子过程；另一是电子放出一个声子，即产生声子过程(设只考虑单声子过程)。将两种可能过程用求和表示时，电子与声子相互作用非弹性散射的弛豫时间公式为

$$\tau(\boldsymbol{k})^{-1}=\frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\text{过程}}\int W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\frac{1-f_0(\boldsymbol{k}')}{1-f_0(\boldsymbol{k})} \times\left\{1-\frac{f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k})]}{f_0(\boldsymbol{k}')[1-f_0(\boldsymbol{k}')]}\frac{\delta f(\boldsymbol{k}')}{\delta f(\boldsymbol{k})}\right\}d\boldsymbol{k}'。 \tag{1.1.18}$$

如果晶体中不存在空间场时，由玻耳兹曼方程，有

$$\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\cdot\nabla_k f(\boldsymbol{k})=-\frac{f_0(\boldsymbol{k})-f(\boldsymbol{k})}{\tau(\boldsymbol{k})}=\frac{\delta f(\boldsymbol{k})}{\tau(\boldsymbol{k})},$$

$$\delta f(\boldsymbol{k})=\tau(\boldsymbol{k})\frac{d\boldsymbol{k}}{dt}\cdot\nabla_k f(\boldsymbol{k})。$$

在弱场情况下，上式改写为

$$\delta f(\boldsymbol{k}) = -\frac{e\tau(\boldsymbol{k})}{\hbar}\boldsymbol{F}\cdot\nabla_k f_0(\boldsymbol{k}), \tag{1.1.19}$$

式中 e 为电子电荷，$\hbar$ 为普朗克常数。

设 k_B 为玻耳兹曼常数，对于费米分布函数，有

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{1}{k_B T} f_0(1-f_0), \tag{1.1.20}$$

式中 T 为绝对温度。利用上式，(1.1.19)式变为

$$\delta f(\boldsymbol{k}) = \frac{e\tau(\boldsymbol{k})}{k_B T\hbar} f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k})]\boldsymbol{F}\cdot\nabla_k E_\circ \tag{1.1.21}$$

设 $E=\hbar^2k^2/2m^*$，上式改写成

$$\delta f(\boldsymbol{k}) = \frac{e\hbar}{m^* k_B T}\tau(\boldsymbol{k})f_0(\boldsymbol{k})[1-f_0(\boldsymbol{k})]Fk\cos\theta, \tag{1.1.22}$$

$$\delta f(\boldsymbol{k}') = \frac{e\hbar}{m^* k_B T}\tau(\boldsymbol{k}')f_0(\boldsymbol{k}')[1-f_0(\boldsymbol{k}')]Fk'\cos\Theta_\circ \tag{1.1.23}$$

将(1.1.22)和(1.1.23)式代入(1.1.18)式，得

$$\tau(\boldsymbol{k})^{-1} = \frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\text{过程}}\int W(\boldsymbol{k}',\ \boldsymbol{k})\frac{1-f_0(\boldsymbol{k}')}{1-f_0(\boldsymbol{k})}$$

$$\times\left\{1-\frac{k'\tau(\boldsymbol{k}')\cos\Theta}{k\tau(\boldsymbol{k})\cos\theta}\right\}d\boldsymbol{k}'_\circ \tag{1.1.24}$$

用(1.1.11)式，上式变为

$$\tau(\boldsymbol{k})^{-1} = \frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\text{过程}}\int W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\frac{1-f_0(\boldsymbol{k}')}{1-f_0(\boldsymbol{k})}$$

$$\times\left\{1-\cos\theta'\frac{k'\tau(\boldsymbol{k}')}{k\tau(\boldsymbol{k})}\right\}d\boldsymbol{k}'_\circ \tag{1.1.25}$$

这个式子为非弹性散射弛豫时间公式。由于 $\tau(\boldsymbol{k})$ 和 $\tau(\boldsymbol{k}')$ 具有完全相同的函数形式，因此上式是一个积分方程。

为了便于迭代计算，将上式改写成

$$\tau(\boldsymbol{k}) = \tau_0(\boldsymbol{k}) + \tau_0(\boldsymbol{k})\frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\text{过程}}\int W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\frac{k'[1-f_0(\boldsymbol{k}')]}{k[1-f_0(\boldsymbol{k})]}$$

$$\times\tau(\boldsymbol{k}')\cos\theta'\,d\boldsymbol{k}', \tag{1.1.26}$$

$$\tau_0(\boldsymbol{k}) = \left\{\frac{V}{(2\pi)^3}\sum_{\text{过程}}\int W(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})\frac{1-f_0(\boldsymbol{k}')}{1-f_0(\boldsymbol{k})}\,d\boldsymbol{k}'\right\}^{-1}{}_\circ \tag{1.1.27}$$