高等学校教学参考书

半导体物理学

刘文明 编著

吉林人民出版社

黑版全本请访问 www.heifangbook.com

高等学校教学参考书

半导体物理学

刘文明　编著

吉林人民出版社

高等学校教学参考书

半导体物理学

刘文明　编著

*

吉林人民出版社出版　吉林省新华书店发行
长春市和顺印刷厂印刷

*

850×1168毫米32开本　19¾印张　2插页　457,000字
1982年9月第1版　1982年9月第1次印刷
印数：1—6,660册
书号：13091·108　定价：2.10元

内 容 简 介

半导体物理学是半导体专业的一门基础课，讲述半导体中一些基本的物理规律。全书共分十二章。第一章和第二章介绍了一般晶格理论；第三章到第八章讲述了半导体物理的主要内容，其中有半导体中的电子状态、平衡载流子密度、电导和霍尔效应、非平衡载流子、半导体表面、$p-n$结；一些数学推导比较复杂和需要用到理论物理知识的内容，都包括在第九章到第十二章里，其中有晶体的对称性、能带理论、能带的计算方法、输运现象的统计理论。供大学生及科技人员阅读。

前　言

最近卅年以来，半导体这门学科发展很快，内容极其丰富。利用半导体制作的各种器件，已在许多科学技术领域中得到了广泛应用。半导体物理是半导体专业的一门基础课，讲述半导体中一些基本的物理规律。作者在教学过程中编写了这本书。

全书共分十二章。第一章和第二章，介绍了一些必要的一般晶格理论知识，如晶体的结构和晶体的结合、晶格振动和晶格缺陷等。这给那些没有学过固体物理的读者，带来了很大方便。从第三章到第八章，讲述了半导体物理的主要内容，其中有半导体中的电子状态、平衡态载流子密度、电导和霍尔效应、非平衡载流子、半导体表面、$p-n$ 结。只要读者学过了原子物理，在学习这一部分时，就不会遇到很大困难。一些数学推导比较复杂和需要用到理论物理知识的内容，都包括在从第九章到第十二章里，其中有晶体的对称性、能带理论、能带的计算方法、输运现象的统计理论。

本书注重基本概念的阐述，内容由浅入深。根据读者的具体情况，既可以按书中各章的先后次序从头到尾地学习，也可以把后面的部分与前面的有关章节结合起来学，灵活性很大，便于教学计划的安排。

我们采用了实用单位制，也被称为 MKSA 有理制，以长度、质量、时间和电流强度为基本量，以米、千克、秒和安培为基本单位。其它的物理量为导出量，其单位按照该量的定义或一定

需要全本请访问 www.ertongbook.com

的物理定律来导出。书中公式表达了在这种单位制下各物理量的数值之间的关系。然而，除了MKSA单位制以外，常常还有度量每个量的习惯单位。因此，在把这些量的具体数值代入书中的公式时，要注意单位变换。个别的表示式，直接给出了某些量用习惯单位度量时的大小，在这样的公式后面，都特别注明了单位。

关于半导体的光学性质，因有其它课程讲授，未包括在本书中。为了完整起见，准备本书再版时增补这方面的内容。由于时间仓促及作者水平有限，书中一定有不少缺点和错误，望读者指正。

作　者

一九八二年二月

目　　录

第一章　晶体的内部结构和晶体的结合

§1——1　晶体内部结构的周期性 …… (3)

§1——2　立方晶系几种常见的晶体结构 …… (10)

§1——3　晶列与晶面的取向 …… (22)

§1——4　晶体的结合 …… (30)

第二章　晶格振动和晶格缺陷

§2——1　一维均匀线的振动 …… (42)

§2——2　一维单原子链的振动 …… (46)

§2——3　一维双原子链的振动 …… (52)

§2——4　玻恩——卡曼边界条件 …… (61)

§2——5　三维晶体中原子的振动和声子 …… (64)

§2——6　晶体中的点缺陷和杂质 …… (70)

§2——7　位错和层错 …… (76)

第三章　半导体中的电子状态

§3——1　电子的运动状态和能级 …… (85)

§3——2　导带和价带，电子和空穴 …… (90)

§3——3　杂质能级 …… (97)

§3——4　缺陷能级 …… (108)

第四章　热平衡情况下载流子的密度

§4——1　电子的统计分布 …… (112)

§4——2　电子和空穴密度的一般表示式 …… (118)

§4——3 本征半导体 …… (126)
§4——4 杂质半导体 …… (131)
§4——5 一般情况下的统计分布 …… (145)
§4——6 载流子的简并化 …… (154)
第五章 半导体中的电导和霍尔效应
§5——1 载流子的散射 …… (161)
§5——2 电导现象 …… (174)
§5——3 迁移率和电导率 …… (179)
§5——4 强电场效应 …… (190)
§5——5 一种载流子的霍尔效应 …… (194)
§5——6 两种载流子的霍尔效应 …… (206)
第六章 非平衡载流子
§6——1 非平衡载流子的产生和寿命 …… (213)
§6——2 连续性方程 …… (220)
§6——3 非平衡少数载流子的扩散 …… (229)
§6——4 少子电流和多子电流 …… (234)
§6——5 非平衡少数载流子的漂移和扩散 …… (239)
§6——6 少子脉冲的扩散和漂移 …… (244)
§6——7 海恩斯——萧克莱实验 …… (250)
§6——8 近本征材料 …… (253)
§6——9 复合机理 …… (257)
§6——10 直接复合 …… (262)
§6——11 通过复合中心的复合 …… (272)
第七章 半导体表面
§7——1 表面势、能带弯曲和空间电荷区 …… (282)
§7——2 空间电荷区的进一步分析 …… (293)
§7——3 接触电势差 …… (305)

§7——4 表面态 ……（313）
§7——5 理想MOS的电容——电压特性……（317）
§7——6 实际MOS的电容——电压特性……（328）
§7——7 表面结构 ……（340）
第八章 p—n 结
§8——1 平衡态的p—r结……（349）
§8——2 p—n结的电流——电压特性 ……（353）
§8——3 简单理论的修正 ……（365）
§8——4 p—n结电容 ……（374）
§8——5 p—n结击穿 ……（387）
第九章 晶体的对称性
§9——1 群论初步 ……（402）
§9——2 对称操作 ……（409）
§9——3 点群 ……（420）
§9——4 晶体的对称性——空间群 ……（432）
§9——5 晶体宏观性质的对称性 ……（444）
§9——6 倒格子 ……（455）
第十章 能带理论
§10——1 能带理论的基础……（462）
§10——2 布洛赫定理……（465）
§10——3 周期性边界条件……（471）
§10——4 能带及其一般特性……（474）
§10——5 布里渊区……（480）
§10——6 电子的平均速度和加速度……（487）
§10——7 金属、半导体和绝缘体……（495）
§10——8 空穴……（502）
§10——9 回旋共振……（506）

§10——10 状态密度 ……（524）
第十一章 能带的计算方法
§11——1 动量表象中的运动方程式……（528）
§11——2 准自由电子近似法……（535）
§11——3 紧束缚近似法……（547）
§11——4 原胞法……（556）
§11——5 正交化平面波方法……（561）
§11——6 赝势法……（565）
§11——7 k·p 方法 ……（567）
第十二章 输运现象的统计理论
§12——1 一般介绍……（572）
§12——2 玻耳兹曼方程和弱场情况下的解……（578）
§12——3 在具有立方对称性的半导体里，输运现象中的一般公式……（585）
§12——4 球形等能面情况下的输运现象……（591）
§12——5 两种载流子的输运现象……（601）
§12——6 多能谷情况下的输运现象……（606）
§12——7 强磁场情况下的电流磁效应……（621）

第一章　晶体的内部结构和晶体的结合

处于凝固状态下的物体，我们称之为固体。固体按其内部结构可分为两类：一类是晶体，另一类是非晶体。而晶体又有单晶体和多晶体之分。一般所说的晶体，主要是指单晶体而言。

人们对晶体的认识，是一个由表及里、由浅入深的过程。在生产和生活实践中很早就发现自然界中许多固体具有高度对称的、规则的外形。例如常见的矿物水晶和岩盐等，外形都很规则。当时，把这类外形规则的固体称为晶体。后来，进一步发现晶体的许多物理性质都与它们外形的规则性有关。如方解石总是沿着一定方位的解理面而劈裂。然而，决定晶体性质的因素主要是它们的内部结构。既然这些性质同外形的规则性有联系，这使人们联想到，晶体外形的规则性可能是它们内部结构规则性的反映。这就是说，晶体的内部结构，应该是很规则的。另一方面，人们对组成物质的单元——原子和分子——也逐渐有了比较深入的认识。在这些发展的基础上，十九世纪中叶，布拉伐提出了描述晶体内部结构规则性的空间点阵学说。十九世纪末，基于大量的观察和分析，费多洛夫等建立了关于晶体微观结构对称性质的空间群理论。1912年劳厄提出了晶体可以作为X射线衍射光栅的原理。同时，其他人在实验上对晶体的X光衍射进行了观察。此后，X光衍射便成了揭示晶体内部结构的最有效工具。它证实了空间群理论的正确性。

需要全本请访问 www.ertongbook.com

晶体的主要特征是它们内部原子（离子或分子）的排列是有规则的，具有一定的周期性。

单晶体是在整块材料中，原子都是有规则地、周期性地重复排列起来的。由于单晶体这种原子排列的规则性，也就决定了它们在宏观上具有以下共同性质：首先，在适当条件下生长出来的单晶体，它们的外形呈现出规则的几何形状。其次，沿着单晶体的不同方向上，由于原子排列情况一般是不一样的，因此，其物理性质常常也不相同，表现出各向异性的性质。天然的氯化钠（岩盐）晶体，它们的外形可以是规则的立方体或八面体，也可能是立方体和八面体的混合——截角八面体。这些形状都具有立方体的对称性。另外，用来制作半导体器件的锗、硅、Ⅲ—Ⅴ族化合物和其它半导体材料，都是人工拉制的单晶体。

多晶体是由大量微小的晶粒（线度在0.01毫米以下）所组成的。在每个小晶粒中，原子的排列是规则的。但在各晶粒之间，原子排列的取向则不同。金属一般都属于多晶体。

固体除晶体外，还有非晶体。在非晶体中，原子的排列是无规则的。非晶体有时也被称为过冷液体。玻璃、塑料等都是非晶体。

半导体物理是固体物理的一个分支学科。在讲述半导体物理的具体内容之前，我们有必要先介绍一些有关固体物理的知识。固体物理学主要就是研究晶体中的原子和电子运动规律及其性质的。在人们对晶体中的问题了解得较深入的基础上，近十几年来，开始了对非晶体的研究。特别是对非晶态半导体的研究，已引起了广泛的重视。

晶体的性质主要决定于它们的化学组成和内部结构。由不同化学成分组成的晶体，其性质不同。而化学成分相同，但内

部结构不同的晶体，其性质也不同。例如，金刚石和石墨，都是由碳原子组成的晶体，但由于它们的内部结构不同，即原子排列的方式不同，两者的性质差别很大。这说明，晶体的内部结构对其性质有着决定性的影响。因此，我们在这一章里，着重介绍一些有关晶体结构的基本知识以及晶体的结合方式。

§1—1 晶体内部结构的周期性

在一般温度下，晶体中的原子都在其平衡位置附近振动着。另外，晶体中总是有少量杂质和缺陷存在。当讨论晶体中的内部结构时，可以暂时忽略掉这些因素的影响，而认为晶体中的原子都固定在其平衡位置上，并且它们的排列是完整无缺的。这样一来，我们就抓住了晶体内部结构的主要方面——原子排列的规则性。在搞清楚了理想的完整晶体中的原子排列的基础上，再进一步讨论原子振动的影响和杂质与缺陷的影响。

晶体中原子排列的主要特点就是它们的周期性。此外，还有一定的对称性。下面，我们以氯化钠晶体结构为例，简单地说明如何来描述晶体结构的周期性。

一、空间晶格

NaCl 晶体是由氯和钠两种元素的原子所组成的。形成NaCl晶体时，由于Cl和Na两种原子夺取电子的能力不同，结果，Cl原子夺取 Na原子的一个价电子，成为 Cl^-离子，Na失去一个价电子，成为Na^+离子。带正电的钠离子和带负电的氯离子靠静电作用相互吸引，它们在空间交错地、周期性地排列起来，构成NaCl晶体。图 1 — 1 a 画出了它的重复排列区域。

每个Na^+离子的近邻是Cl^-离子，每个Cl^-离子的近邻是Na^+离子。把这种依靠正负离子间的静电吸引作用而形成的结合，称为离子键。由离子键而构成的晶体称为离子晶体。NaCl就是典型的离子晶体。

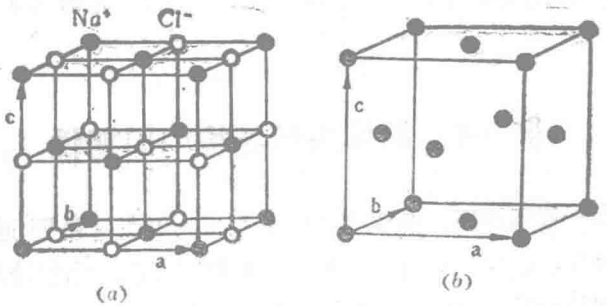


图1—1　NaCl晶体结构及其相应的布拉伐格子——面心立方格子
(a) NaCl晶体结构　　(b) 相应的布拉伐格子

既然晶体中原子是规则地、周期性地重复排列起来的，因此，整个晶体可以看成是由一个基本的结构单元(简称为基元)沿三个不同的方向，各按一定的距离，周期性地重复堆积的结果。对于不同的晶体，它们的基元是不同的。一个基元可能是一个原子，也可能是由若干个原子所组成的集团。NaCl晶体的基元，是由一个Na^+离子和一个Cl^-离子所组成。

为了简单明确地描述晶体内部结构的周期性，可以把每个最小的重复单元，即基元，用一个点子来表示。当然，每个基元的代表点，必须选择在各基元中的同类原子上(NaCl的Na^+或Cl^-上)，也可以选择在基元的重心上。这样一来，这些代表点在空间分布的周期性，就与晶体中原子排列的周期性完全一致。这些代表点的整体，被称为空间晶格，或布拉伐格子。NaCl晶体的每一个布拉伐格点代表组成基元的一个Na^+离子

和一个 Cl^- 离子。其相应的布拉伐格子，如图1—1b所示。它是一套面心立方格子，即除了在立方体的顶角有格点外，在立方体的六个面心也有格点存在。

对于每种晶体，只要知道了与它相应的布拉伐格子，那么，该晶体原子排列的周期性也就完全清楚地反映出来了。因为两者的周期性是完全一致的。在NaCl晶体中，Na^+ 离子和 Cl^- 离子交错地重复排列起来所具有的周期性，显然同面心立方格子的完全一致。当然每个基元内部的原子排列情况，布拉伐格点是反映不出来的。不过，在每个布拉伐格点周围，原子的排列情况一定都相同。布拉伐格子具有一个特点，就是每个最小的周期性重复单元中，只有一个格点。

布拉伐格点是基元的代表点，一般来说，每个格点是代表一个原子集团的。由各个格点所代表的这些原子集团，它们彼此之间有相同的结构，即在原子的成分、排列和取向上，它们彼此相同。只有当每个基元中只包含一个原子时，每个布拉伐格点才代表一个原子本身。因此，应当特别注意的是，要把布拉伐格子同晶体结构区分开来。晶体结构是指晶体中的原子排列；而布拉伐格子则是指基元的代表点在空间的分布。在图1—1中，画出了NaCl晶体的内部结构同相应的布拉伐格子之间的关系。

对于一定的晶体，每个基元究竟应该包括多少个原子？由于整个晶体是基元重复堆积的结果，所以，如果把化学成分不同或者所处的环境不同的原子，都区分为不同类型的原子，那么，显然有下面的关系存在：

每个基元中的原子数 = 晶体中的原子种类数。　　(1.1)

因为基元是晶体中的一个周期性重复单元，基元的重复排列便形成整个晶体。所以每个基元中的原子数不能少于晶体中原子

的种类数，可以是原子种类数的整数倍。另外，由于基元是最小的周期性重复单元，所以两者只能相等。NaCl 晶体是由两种化学成分不同的原子组成的，而且所有的Na^+离子所处的环境是彼此相同的，所有的Cl^-离子所处的环境也彼此相同。因此，NaCl是由两种类型的原子构成的。每个基元中应包含两个原子，一个Na^+离子，一个Cl^-离子。

如果晶体是由两种或两种以上的原子所组成，那么，各种原子它们各自在空间的分布一定彼此相同，并且分别与该晶体的布拉伐格子的分布情况一致。因为只有这样，晶体中总的原子排列，才具有统一的周期性。对于这类晶体中的原子排列，可以把每种原子它们各自的分布，分别看成是一套布拉伐格子，而晶体中总的原子排列，则可以被看成是由两套或两套以上分布情况完全相同的布拉伐格子套在一起构成的。正因为有这种关系，有时候称这类晶体中的原子排列为复式格子。NaCl就属于这类晶体。从图1—1可以看出，Na^+离子和Cl^-离子各自在空间的分布情况完全相同，并且与 NaCl 的布拉伐格子（面心立方格子）相一致。因此，NaCl 晶体被看成是由两套面心立方格子彼此沿着立方体的边长方向平移半个周期套在一起构成的。

二、单胞与原胞

描述晶体内部结构周期性的另一种方法是，把晶体划分成一些周期性重复区域——单胞或原胞。

单胞（晶胞）是以格点为顶点，以三个独立方向上的周期为边长所构成的平行六面体。单胞是晶体中的一个小体积，它是晶体中的一个周期性重复区域，是晶体内部结构的一个缩影。单胞的重复堆积，便可以得到整个晶体。

原胞也是单胞，只不过是体积最小的单胞。每个原胞中只能包含一个基元，或者说，只包含一个布拉伐格点。所有的布拉伐格点都只能在原胞的顶角上，而在体心和面心不能有布拉伐格点存在。

由于原胞是体积最小的周期性重复区域，所以，如果用它们来描述晶体内部结构的周期性，则一定描写得最充分、最细致。但在很多情况下，原胞的形状不便于反映晶体中原子排列的对称性。因此，为了既能描述原子排列的周期性，又便于反映它们的对称性，在习惯上有时不得不采用体积较大的单胞。对于一定的晶体，常常选择这样的单胞，它的对称性同该晶体布拉伐格子的点群对称性相一致（六角晶系，习惯上选取一个正六角柱体为单胞）。

通常选择NaCl晶体的单胞如图1—1中所画出的立方体，因为该立方体既是晶体的一个周期性重复区域，又反映了它的布拉伐格子（面心立方格子）的点群对称性。很容易看出，凡是能使该立方体与它自身相重合的对称操作，同时也能使面心立方格子与其自身相重合。

我们来计算一下，该单胞中含有多少个布拉伐格点。这个立方体共有六个面心格点。从整体来看，每个面心格点被两个立方体所平分，因而平均说来，它对一个立方体的贡献是1/2。这个立方体在八个顶角有八个格点，而每个顶角格点又被八个立方体所平分，因而每个顶角格点对立方体的贡献是1/8。因此，平均一个单胞中的布拉伐格点数为：

$$6\times\frac{1}{2}+8\times\frac{1}{8}=4.$$

这就是说，面心立方格子的立方体单胞，包含有四个布拉伐格点。与此相应的，该单胞中包含有四个基元，即四个Na^+离

需要全本请访问 www.ertongbook.com