半导体器件物理基础

曾树荣　编著

北京大学出版社
北　京

需要全本请访问 www.ertongbook.com

内 容 简 介

本书内容大体可分为两个部分。前两章为第一部分，介绍学习半导体器件必需的知识，包括半导体基本知识和p-n结理论；其余各章为第二部分，阐述半导体器件的基本原理及双极型晶体管、化合物半导体场效应晶体管、MOS器件、有源微波二极管和光电器件等半导体器件。

本书简明扼要，既着重于基本的半导体器件及其基本知识，也涉及了半导体器件领域内的新进展和新概念，可作为电子信息专业特别是微电子学专业的教材或参考书，分章节供本科生和研究生使用；也可供有关研究人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

半导体器件物理基础/曾树荣编著. －北京：北京大学出版社，2002.2
ISBN 7-301-05456-4

Ⅰ.半… Ⅱ.曾… Ⅲ.半导体器件-半导体物理 Ⅳ.TN303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 001726 号

书　　名：半导体器件物理基础
著作责任者：曾树荣
责 任 编 辑：沈承凤
标 准 书 号：ISBN 7-301-05456-4/TP·0648
出　版　者：北京大学出版社
地　　址：北京市海淀区中关村北京大学校内　100871
网　　址：http://cbs.pku.edu.cn
电　　话：出版部 62752015　发行部 62754140　编辑部 62752032
排　版　者：兴盛达打字服务社　62549189
电 子 信 箱：zpup@pup.pku.edu.cn
印　刷　者：北京神剑印刷厂(原国防科工委印刷厂)
发　行　者：北京大学出版社
经　销　者：新华书店
787 毫米×1092 毫米　16 开本　15.875 印张　395 千字
2002 年 2 月第 1 版　2002 年 2 月第 1 次印刷
定　　价：22.00 元

前　言

人类已经进入21世纪，这将是社会高度信息化的世纪。计算机网络和通信技术的进步是信息化发展的标志。今天，无论何时何地，人们都可以高速交换信息，使区域性很强的政治、经济、文化国际化。但是，如果没有以晶体管为基础的微电子学的发展就谈不上个人计算机的高性能和多功能，没有以激光器和光探测器为主体的光电子学的发展就谈不上信息的高速传输，也就是说不可能有现代信息技术。本书介绍微电子学和光电子学领域主要半导体器件的基本原理，供将要从事或者正在从事电子信息专业特别是微电子学专业的人员阅读。

微电子学的主体是在以晶体管、二极管为单元的各种半导体器件的基础上构成的集成电路。1947年半导体三极管(双极晶体管)诞生之后，半个世纪的时间内，半导体器件的理论和制造技术飞速发展。1958年集成电路问世，标志着微电子学时代开始；1968年MOS大规模集成电路产业化，从此集成电路的集成度一直以每3年4倍的惊人速度发展。今天，大部分的半导体器件是用硅做的，硅集成电路占据主导地位。就高速和功率应用而言，双极晶体管一直领先；但MOS场效应晶体管(MOSFET)易于小型化和功耗很小，在集成度方面占有明显的优势，所以MOS器件集成度的提高实际上代表了当今微电子学的进步。但是，随着电子装备向更高级发展，硅器件在许多领域不能适应，化合物半导体电子器件及集成电路成为重要的发展方向。1966年，砷化镓肖特基栅场效应晶体管(GaAs MESFET)问世。其后，随着异质结技术和超薄外延生长技术的日趋成熟，相继出现了机理各异、结构新颖、性能优异的各种器件。除GaAs MESFET有了长足进步之外，又接连开发了异质结双极晶体管(HBT)和高电子迁移率晶体管(HEMT)，这些器件已经成功地用于毫米波及超高速电路。已经或正在开发的还有新一代电子器件——量子电子学器件，包括共振隧穿器件和各种介观器件。微电子学发展的现状和趋势说明，这一领域生机勃勃，预期在本世纪上半叶器件的理论和制造技术仍将不断取得突破性进展。

光电子学是在电子学的基础上吸收了光技术而形成的一门高技术学科，主体是半导体光电子学。半导体激光器在1962年发明并在1970年实现室温下连续工作，以及后来各种半导体光电器件的出现，逐渐形成了以半导体激光器和探测器为主体的光电子学。进入20世纪80年代以后，随着光通信等应用技术的迅猛发展，半导体光电产品的市场迅速扩大，光盘、激光打印机、光通信系统和家用摄像机等都是家喻户晓的产品。普遍预测，到2010年，光电子产品市场将达到可以与集成电路市场相比的程度。由于光电子信息技术和产业具有强大的生命力，半导体光电子器件的研究和开发将更加受到重视。随着原子级薄膜生长和纳米级微细加工技术的发展，通过人工设计的材料如异质、超晶格及量子阱(线、点)材料来研制新器件，将是半导体光电子学器件今后的发展趋势。

20世纪90年代将近10年的时间内，我曾在北京大学计算机科学技术系为微电子学专业的三年级本科生和一年级硕士生讲授“半导体器件物理”课程，在上述认识的基础上，组织了这门课程的教学，最后编写了这本书。

本书远非包揽所有半导体器件。半导体器件的种类很多，广泛应用于社会、经济和军事的

各个领域。本书只是以电子信息技术为主干线，选择一些用途最广和最具代表性的器件，讲述理解器件行为所需的一些基础知识，因此取名为“半导体器件物理基础”。在编写时，我特别注意物理图像清晰，尽力做到叙述上正确，既简明扼要地阐明学习器件必需的半导体知识及器件的基本特性，也用尽可能简化的模型讨论器件发展中新的物理效应和介绍新器件，力图使学生不仅能获得充足的基础知识，而且建立一些新的观念，能够适应半导体器件的现代发展。

本书应教材建设需要编写，得到了王阳元院士、韩汝琦教授和赵宝瑛教授的鼓励与关心。赵宝瑛、甘学温教授细致地审阅了全书，傅春寅、吴恩教授也阅读了部分章节，他们的热情帮助使作者受益颇多。北京大学出版社沈承凤老师和其他有关工作人员为本书的出版付出了辛勤劳动。在此，作者一并致谢。

对我来说，写这样一本书的确是一项艰巨的工作，为之耗费了难以置信的时间。我也深感学识浅薄，本书肯定有许多不足、不妥和错误，诚恳希望有关方面的专家和读者指正。

作　者

2001 年 9 月

目　录

主要符号表…… (1)
第一章　半导体基本知识…… (1)
1.1　半导体中的载流子 …… (1)
1.1.1　半导体的能带 …… (1)
1.1.2　载流子平衡浓度 …… (7)
1.2　晶格振动…… (12)
1.2.1　晶格振动和格波 …… (12)
1.2.2　声子 …… (14)
1.2.3　晶格散射 …… (16)
1.3　载流子输运现象…… (17)
1.3.1　载流子漂移 …… (17)
1.3.2　载流子扩散 …… (22)
1.3.3　电流密度方程(漂移-扩散方程) …… (23)
1.3.4　过剩载流子及其产生与复合 …… (25)
1.3.5　连续性方程和泊松方程 …… (30)
1.3.6　强电场效应 …… (31)
1.3.7　非稳态输运效应：速度过冲 …… (34)
1.4　半导体的光学性质…… (35)
1.4.1　引言 …… (35)
1.4.2　辐射跃迁和光吸收 …… (36)
1.4.3　直接禁带半导体中带间跃迁的自发发射和载流子寿命 …… (38)
1.4.4　直接禁带半导体中的光吸收和光增益 …… (40)
第二章　p-n 结 …… (42)
2.1　热平衡状态…… (42)
2.2　耗尽区和耗尽层电容…… (45)
2.2.1　热平衡情形 …… (45)
2.2.2　非平衡情形 …… (48)
2.2.3　耗尽层电容(势垒电容) …… (49)
2.3　直流特性…… (50)
2.3.1　理想伏-安特性 …… (50)
2.3.2　产生-复合效应 …… (52)
2.3.3　大注入效应 …… (53)
2.3.4　温度效应 …… (54)
2.4　交流小信号特性;扩散电容 …… (55)

需要全本请访问 www.ertongbook.com

2.5 电荷存储和反向恢复时间 …… (57)
2.5.1 存储电荷 …… (57)
2.5.2 瞬态特性和反向恢复时间 …… (58)
2.6 结的击穿 …… (59)
2.6.1 隧道击穿 …… (59)
2.6.2 雪崩击穿 …… (60)
第三章 双极型晶体管 …… (66)
3.1 基本原理 …… (66)
3.1.1 基本结构 …… (66)
3.1.2 放大工作状态 …… (66)
3.1.3 电流增益 …… (67)
3.2 双极型晶体管的直流特性 …… (69)
3.2.1 理想晶体管的电流 …… (69)
3.2.2 电流基本方程 …… (70)
3.2.3 放大状态 …… (71)
3.2.4 非理想现象分析 …… (73)
3.2.5 输出特性 …… (79)
3.3 双极型晶体管模型 …… (80)
3.3.1 E-M 模型 …… (80)
3.3.2 G-P 模型 …… (82)
3.4 双极型晶体管的频率特性 …… (85)
3.4.1 小信号交流等效电路 …… (85)
3.4.2 电流增益随频率的变化 …… (86)
3.4.3 频率参数 …… (87)
3.4.4 基区渡越时间 …… (88)
3.4.5 功率-频率限制 …… (89)
3.5 双极型晶体管的开关特性 …… (90)
3.5.1 晶体管的开关作用 …… (90)
3.5.2 关断和导通阻抗 …… (90)
3.5.3 导通时间和存储延迟时间 …… (91)
3.6 异质结双极晶体管(HBT) …… (94)
3.6.1 异质结的能带图 …… (94)
3.6.2 HBT 电流放大的基本理论 …… (96)
3.6.3 几类常见的 HBT …… (98)
3.7 多晶硅发射极晶体管(PET) …… (99)
3.7.1 能带图和物理参数 …… (100)
3.7.2 少子分布和电流密度 …… (101)
3.7.3 注入发射区的空穴电流密度 J_{P1} …… (102)
3.7.4 电流增益 …… (102)

3.8 p-n-p-n 结构 …… (103)
第四章 化合物半导体场效应晶体管 …… (106)
4.1 肖特基势垒和欧姆接触 …… (106)
4.1.1 肖特基势垒 …… (106)
4.1.2 肖特基势垒二极管 …… (108)
4.1.3 欧姆接触 …… (111)
4.2 GaAs MESFET …… (111)
4.2.1 基本结构 …… (111)
4.2.2 夹断电压和阈值电压 …… (112)
4.2.3 电流-电压特性 …… (113)
4.2.4 截止频率 …… (116)
4.3 高电子迁移率晶体管(HEMT) …… (117)
4.3.1 器件结构及特点 …… (117)
4.3.2 2DEG 浓度(面密度) …… (118)
4.3.3 HEMT 的基本性质 …… (120)
第五章 MOS 器件 …… (124)
5.1 MOS 结构的基本性质 …… (124)
5.1.1 基本结构和能带图 …… (124)
5.1.2 平带电压 …… (125)
5.1.3 表面势 …… (126)
5.1.4 电势平衡和电荷平衡 …… (126)
5.1.5 半导体表面状态 …… (127)
5.1.6 表面层电荷和表面势的关系 …… (128)
5.1.7 表面势和栅压的关系 …… (129)
5.1.8 表面反型状态 …… (129)
5.1.9 电容和电压的关系(C-V 特性) …… (130)
5.2 MOS 场效应晶体管的基本理论 …… (132)
5.2.1 基本结构和工作原理 …… (132)
5.2.2 非平衡状态 …… (134)
5.2.3 阈值电压 …… (135)
5.2.4 电流基本特性 …… (137)
5.2.5 瞬态特性 …… (143)
5.2.6 短沟道效应 …… (147)
5.2.7 CMOS(互补型 MOSFET)结构 …… (162)
5.3 短沟道 MOSFET …… (164)
5.3.1 器件小型化的规则 …… (164)
5.3.2 结深 X_j …… (166)
5.3.3 栅氧化层厚度 d_{ox} …… (167)
5.3.4 耗尽层宽度 $W_{S,D}$ …… (168)

5.3.5 最短沟道长度 L_{min} …… (170)
5.4 SOI MOSFET …… (171)
5.4.1 概述 …… (171)
5.4.2 阈值电压 …… (172)
5.4.3 电流特性 …… (173)
5.4.4 亚阈区斜率(摆幅) …… (174)
5.4.5 热电子效应 …… (175)
5.5 埋沟 MOSFET …… (176)
5.6 电荷耦合器件(CCD) …… (178)
5.6.1 表面深耗尽状态和电荷存储 …… (178)
5.6.2 基本的 CCD 结构 …… (179)
5.6.3 转移效率和频率响应 …… (181)
第六章 有源微波二极管 …… (183)
6.1 隧道二极管 …… (183)
6.1.1 隧道输运过程 …… (183)
6.1.2 隧道二极管 …… (188)
6.2 共振隧穿二极管(RTD) …… (191)
6.2.1 共振隧穿效应 …… (191)
6.2.2 电流-电压特性 …… (192)
6.2.3 微波性能 …… (194)
6.3 IMPATT 二极管 …… (194)
6.3.1 里德二极管 …… (194)
6.3.2 雪崩延迟和渡越时间效应(小信号分析) …… (196)
6.3.3 功率和效率(大信号分析) …… (198)
6.4 转移电子器件 …… (201)
6.4.1 电子转移和负微分迁移率 …… (201)
6.4.2 偶极畴和基本工作原理 …… (203)
6.4.3 器件工作状态 …… (207)
第七章 半导体激光器和光电二极管 …… (208)
7.1 半导体激光器的基本结构和工作原理 …… (208)
7.1.1 基本结构(光学谐振腔) …… (208)
7.1.2 增益、损耗和光振荡条件 …… (209)
7.2 半导体激光器的工作特性 …… (212)
7.2.1 阈值电流密度 …… (212)
7.2.2 输出功率和效率 …… (213)
7.2.3 调制特性 …… (214)
7.2.4 激光线宽 …… (218)
7.3 双异质结(DH)激光器 …… (220)
7.3.1 能带图和光场分布 …… (220)

7.3.2 半导体材料 …… (221)
7.3.3 改进的器件结构 …… (222)
7.4 量子阱(QW)激光器 …… (224)
7.4.1 量子阱中的载流子 …… (224)
7.4.2 量子阱中的光增益 …… (226)
7.4.3 应变层量子阱 …… (228)
7.5 光电二极管 …… (230)
7.5.1 p-n 结的光电流 …… (230)
7.5.2 p-i-n 光电二极管和雪崩光电二极管 …… (234)
7.5.3 光电二极管的特性参数 …… (236)
主要参考文献 …… (241)

主要符号表

a	晶格常数
A	面积
A^*	里查孙常数
c	真空中的光速
C	电容;声速
d	厚度
D	扩散系数
D_n	电子扩散系数
D_p	空穴扩散系数
E	能量
E_c	导带底的能量
E_F	费米能级
E_{Fn}	电子准费米能级
E_{Fp}	空穴准费米能级
E_i	本征费未能级
E_g	禁带宽度(禁带隙)
E_v	价带顶的能量
$\mathscr{E}, \boldsymbol{\mathscr{E}}$	电场
E_c	临界电场,最大击穿电场
$\mathscr{E}_m$	最大电场
f	频率
$f(E)$	费米·狄拉克分布函数;占有几率
$f_n(E)$	电子占有几率
$f_p(E)$	空穴占有几率
g	态密度;电导
G	产生率;增益系数
h	普朗克常数
I	电流强度
I_C	集电极电流
I_{ph}	光电流
J	电流密度
J_{th}	阈值电流密度
J_n	电子电流密度
J_p	空穴电波密度
k_B	玻耳兹曼常量
$k, \boldsymbol{k}$	电子波矢
l	长度
L	扩散长度;长度
L_D	德拜长度
L_n	电子扩散长度
L_p	空穴扩散长度
m	有效质量
m_d	态密度有效质量
m_l	纵向有效质量
m_n	电子有效质量
m_p	空穴有效质量
m_{ph}	重空穴有效质量
m_{pl}	轻空穴有效质量
m_t	横向有效质量
m_0	自由电子质量
m_σ	电导有效质量
n	电子浓度
$\bar{n}$	实折射率
$\tilde{n}$	复折射率
n_i	本征载流子浓度
n_q	波矢为 q 的声子数
n_s	表面电子浓度
N	杂质浓度
N_A	受主杂质浓度
N_c	导带有效态密度
N_D	施主杂质浓度
N_v	价带有效态密度
p	空穴浓度
P	动量;散射几率
q	电子电荷;
$\boldsymbol{q}$	声子波矢

Q_b	耗尽层电荷面密度
Q_g	栅电荷面密度
Q_i	反型层电荷面密度
Q_0	有效界面电荷
Q_s	半导体表面层电荷面密度
R	电阻;反射率
t	时间;厚度
T	绝对温度
v, $\boldsymbol{v}$	速度
v_c	热发射速度
v_n	电子漂移速度
v_p	空穴漂移速度
v_s	饱和速度
v_{th}	热运动速度
V	电压
V_{bi}	内建电势
V_{BE}	基极-发射极电压
V_{BC}	基极-集电极电压
V_B	击穿电压
V_{FB}	平带电压
V_T	阈值电压
W	中性基区宽度
α	吸收系数;共基极电流增益
β	其发射极电流增益
γ	发射效率;衬偏系数
δ	间隙宽度
Γ	光限制因子
ε_0	真空介电常数
ε_{ox}	氧化物介电常数
ε_s	半导体介电常数
τ	寿命或弛豫时间
η	转换效率;量子效率
θ	角度;渡越角
λ	波长;平均自由程
ν	光的频率
μ_n	电子迁移率
μ_p	空穴迁移率
ρ	电阻率;电荷密度
σ	电导率;俘获截面
σ_G	微分增益系数
ϕ_F	费米势
ϕ_{Bn}	n 型半导体的肖特基势垒高度
ϕ_m	金属功函数
ϕ_s	半导体功函数
χ	电子亲和势
ψ	电势;电子波函数
ω	角频率

需要全本请访问 www.ertongbook.com

第一章　半导体基本知识

作为理解各类半导体器件性质的基础，本章概述半导体的能带、载流子浓度、输运现象和光学性质。在标准的半导体物理学或固体物理学的教科书中，这些课题都得到了详细的论述，我们这里只是以比较直观的论证方式介绍一些基本概念和重要结论。

1.1　半导体中的载流子

1.1.1　半导体的能带

1. 能带　电子和空穴

按照固体的量子理论，当原子凝聚成为固体（并不只限于晶体）时，由于原子间的相互作用，相应于孤立原子的每个能级加宽成由间隔极小（准连续）的分立能级所组成的能带，能带之间隔着宽的禁带。图 1.1 为金刚石结构晶体如何从孤立的硅原子能级形成能带的示意图，图右端画出了孤立原子的两个分立能级（如果将这些孤立原子看成一个体系，那么每个分立能级都是简并的），随着原子间距的减小，各个简并的能级分裂，形成能带。当原子间距进一步缩小时，由各个不同的分立能级所形成的各能带失去其特性，合并成一个能带。当原子间距接近金刚石晶体中原子间的平衡距离（硅的晶格常数为 5.43Å）时，这一能带再次分裂成为两个能带。两个能带之间的区域表示固体中的电子不能具有的能量，所以称之为禁带或带隙，通常以 E_g 表示。在禁带上面的能带叫导带，在禁带下面的能带叫价带，如图 1.1 左端所示。

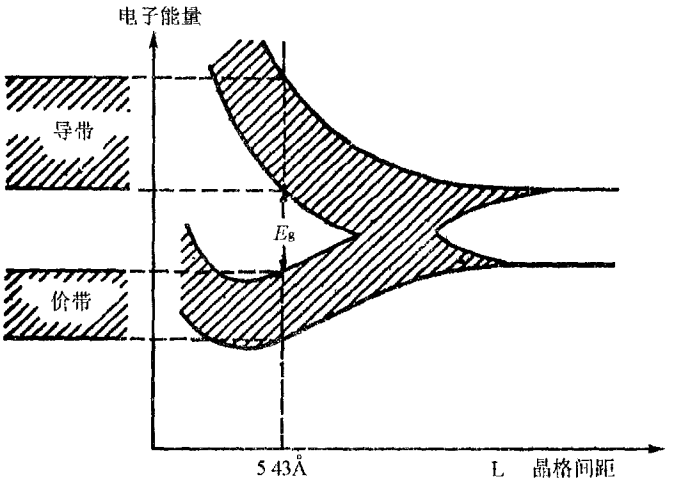

图 1.1　使孤立的硅原子彼此接近组成金刚石结构晶体时形成能带

固体的电学性质由原子最外围电子（价电子）填满或只是部分填充固体能带来决定。对于我们所讨论器件涉及的半导体，价电子实际上完全填满价带。因为能带填满了，就电子的整体

而言是不能获得能量的，所以不能产生净电流流动。因此，除非能够使一些电子离开价带，让位给少量电子以获得能量，否则是不可能导电的。另一方面，少量电子进入邻近的较高能带(导带)，导带中的电子将自由地获得能量，所以能够导电。

虽然在较高的温度下，热振动会使结合强度一般的半导体价键(不像绝缘体的价电子与最近邻原子形成强键)中的一些破裂，有少量价带电子越过禁带进入导带，但是这种本征过程是不重要的。用于器件的半导体材料主要是非本征的，即载流子是由掺入半导体的特定类型的杂质原子所产生的。如果载流子是导带中的电子，则杂质被称作施主，相应的半导体材料是 n 型；反之，如果半导体中含有收留来自价带电子(从而留给价带一个电子空位或者说一个空穴)的杂质，则杂质被称作受主，相应的半导体材料是 P 型。值得注意的是，应把空穴看作与电子类似，是具有动量和能量的量子波包(准经典粒子)。空穴带正电，并在外电场作用下运动，运动的方向与电子相反。形象地讲，空穴的概念和流体中的气泡类似，虽然实际上是液体在流动，但我们可以把它看成是气泡沿相反方向移动。

图 1.2 表示电子能量和空穴能量的关系。E_c 代表导带底的能量，相应于电子的势能，即导带电子静止时的能量；E_c 以上的能量表示电子的动能。E_v 代表价带顶的能量，相应于空穴的势能，E_v 以下的能量表示空穴的动能。E_c 和 E_v 之差即为禁带宽度：E_g 是半导体物理中最重要的参数。通常，能带图表示的是电子的能量。当电子能量增加时，电子跃迁到能带图上较高的位置；相反，空穴的能量增加时，空穴在价带内向下跃迁(这是因为空穴带正电，与电子相反)。

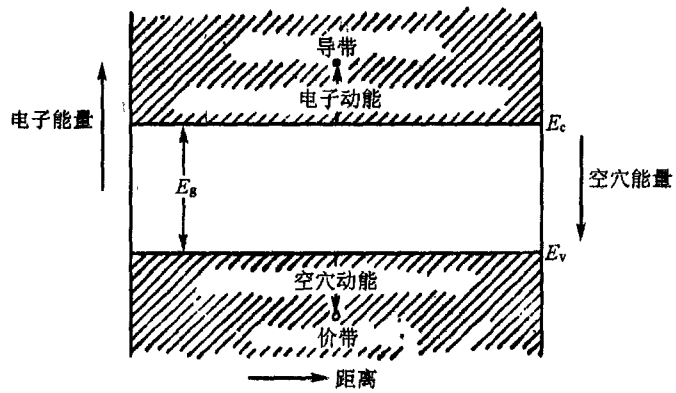

图 1.2　能带图中的势能与动能表示

实验结果表明，大多数半导体的禁带宽度随温度的升高而减小，禁带宽度随温度的变化可近似表示为

$$E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2/(T + \beta) \tag{1.1}$$

对 Si, Ge 和 GaAs，参数 $E_g(0)$，α 和 β 之值如表 1.1 所示。

表 1.1　$E_g(T)$表示式(1.1)中的参数值

半导体材料	$E_g(0)$(eV)	α($\times 10^{-4}$eV/K^2)	β(K)
Si	1.17	4.73	636
Ge	0.74	4.77	235
GaAs	1.52	5.41	204

在室温及常压下，硅的禁带宽度为 1.12eV，锗为 0.68eV，砷化镓为 1.42eV。

2. 有效质量近似

量子力学分析表明，晶体中电子的波函数为布洛赫函数，形式为

$$\psi_k(r) = u_k(r)e^{ik\cdot r} \tag{1.2}$$

k 是波矢，r 是空间矢量，$u_k(r)$是具有和晶格相同周期的周期函数。$u_k(r)$反映周期场对电子运动的影响。对于自由电子(动量 $P=\hbar k$，$\hbar=h/2\pi$ 是约化普朗克常数)，波函数退化为平面波$\psi_k(r)=Ae^{ik\cdot r}$，A 是与位置无关的常数。显然，与平面波不同，布洛赫函数并不对应于确定的动量，即晶体中波矢 k 的状态并不对应确定的动量，$P=\hbar k$ 不再具有严格意义下的动量的含义，而称之为晶体动量。

无疑，电子在晶体中的能级(本征值)和相应的布洛赫函数(本征态)是讨论各种有关电子问题的基础。但是，可以证明，对于一般的输运过程问题(例如电、磁场中各种电导效应)，可以把电子(或空穴)看成具有动量 P(对于 k 的状态，$P=\hbar k$)和能量 $E=P^2/2m$ 的粒子(量子波包)，m 称为有效质量。这种方法称为有效质量近似。

E-k 关系

已经采用各种数值方法对固体的能带(E-k 关系)进行了理论研究。图 1.3 示出了 Ge, Si 和 GaAs 的能带图。下面只是从有效质量近似出发，对 E-k 关系进行一些讨论。

在有效质量近似下，电子的动量 P 和能量 E 分别为

$$P = \hbar k \tag{1.3}$$

$$E = (\hbar^2/2m)k\cdot k \tag{1.4}$$

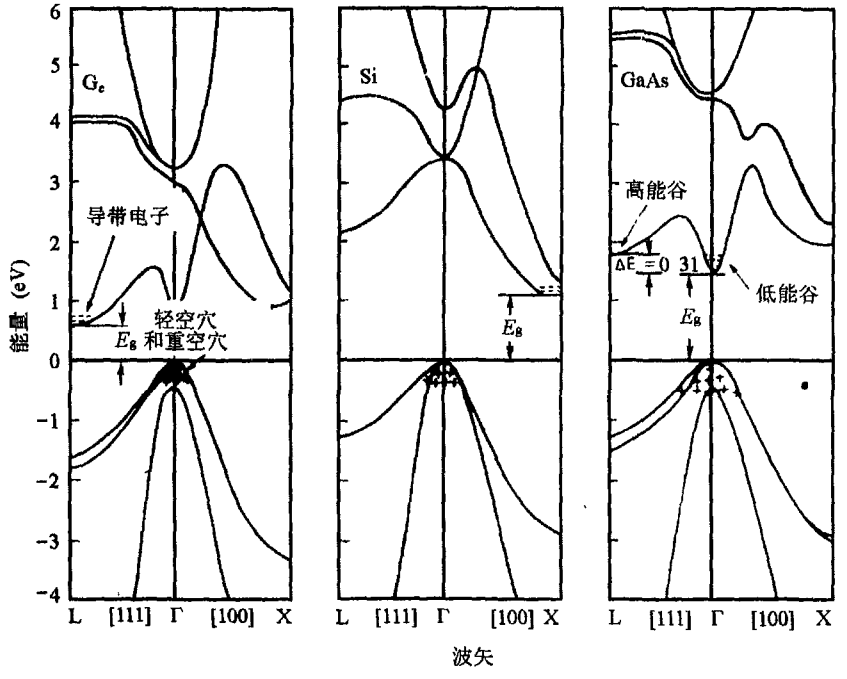

图 1.3 Ge, Si 和 GaAs 的能带结构

一般，$E(k)$在 $k=k_0$ 处有极值(极大值或极小值)E_0。在导带中，电子倾向在最低能量

处，因此其行为可以用在最小能量附近的级数展开式来描述：

$$E - E_0 = (\hbar^2/2m)(k - k)^2 \tag{1.5}$$

如果画出能量 $E(k)$ = 常数的三维表面，它将是一个圆球，即所谓球形等能面。画等能面的空间叫做 k 空间。

在更普遍的情形下，k 空间的等能面是椭球面，即方程(1.5)应修改成

$$E - E_0 = (\hbar^2/2m_1)(k_1 - k_{10})^2 + (\hbar^2/2m_2)(k_2 - k_{20})^2 + (\hbar^2/2m_3)(k_3 - k_{30})^2 \tag{1.6}$$

这里必须适当地选择各轴在 k 空间的方向。普遍说来，有效质量是一个张量，m_1, m_2, m_3 是主质量。

热电子是能量远远超过晶体中电子的正常平均热能的电子，其能量并不局限在最小能量的区域中，有效质量近似显然有很大的误差。但是，由于这种近似用起来很方便，并且已经证实甚至在理解高能电子现象时也有实用价值，所以通常使用这一近似方法。

空穴实际上是价带中最高能量上面的电子波波包，等效于式(1.5)的展开式为

$$E - E_0 = -(\hbar^2/2m)(k - k_0)^2 \tag{1.7}$$

上式中的负号表示最大值。这些电子具有负有效质量。然而，如果全部带负电荷和负有效质量的电子被电场扫动的话，则波包的运动与一个带正荷和正有效质量的粒子的运动是不可区分的。这个粒子就是空穴。

布里渊区

前面的论述说明了半导体中的电子只能取一定允许的能量或动量值。如果我们考虑在一定方向上传播的平面电子波，在此方向上晶体中等效原子平面的间距为 a，则波函数在每一个周期的平面上都有反射，而当 a 等于半波长 $\lambda/2$ 时，被邻近原子反射的子波位相相差 π。但是当被 B 反射的子波到达被 A 反射的子波时，它们的位相相同。这点也适用于其他的子波。这样，所有反射的子波相长地干涉，如图 1.4 所示。结果形成电子波的全部反射，即当波矢量满足条件

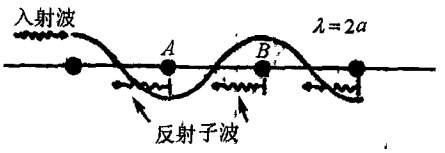

图 1.4 晶体中反射波的相长干涉

$$|k_m| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\pi}{a} \tag{1.8}$$

时，能量的传播成为不可能。因为晶体的周期性随方向而变，传播停止的 $|k_m|$ 值也随方向而变。在 k 空间中，由所有这些 k_m 矢量形成的空间叫做布里渊区(第一布里渊区，或简约布里渊区)。

图 1.5 画出了面心立方晶格(例如金刚石和闪锌矿晶格)的第一布里渊区。元素半导体 Si 和 Ge 具有金刚石结构，而大多数Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体(例如 GaAs)具有闪锌矿结构晶格。图 1.5 也标出了布里渊区的对称点和对称线。例如，Γ 表示 $k = 0$(布里渊区中心)的点，L 表示沿〈111〉轴(Λ)的边缘点，X 表示沿〈100〉轴(Δ)的边缘点，K 表示沿〈110〉轴(Σ)的边缘点。

值得注意的是电子的动量 $\hbar k$ 可以超过式(1.8)定义的 $\hbar k_m$，但电子的能量是由 $k - nk_m$ 来计算的，其中整数 n 的选择条件是使得总的波矢量位于布里渊区内。换句话说，$E(k)$ 是随 k 周期性地重复的函数，周期性的单元由布里渊区确定。正因为如此，图 1.3 限定的 k 值足以描述电子的 E-k 关系。

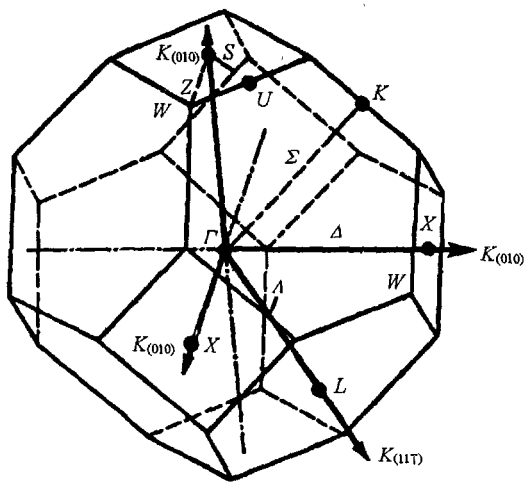

图 1.5　金刚石和闪锌矿晶格的布里渊区

多能谷半导体

许多重要的半导体(例如 Ge, Si, GaAs)不是只有一个导带极小值,而是有若干个位于 $\boldsymbol{k}$ 空间不同点的极小值。例如, Si 具有位于〈100〉轴上 $k=k_0$ 的 6 个极小值(k_0 约等于最大波矢量的 0.85 倍),相应地有 6 个能谷(极小值为能谷的谷底),如图 1.6 所示。通常, E-$\boldsymbol{k}$ 围绕极小值不是球对称,而是旋转椭球对称。

$$E-E_c=\frac{\hbar^2}{2m_l}(k_l-k_0)^2+\frac{\hbar^2k_t^2}{2m_t} \qquad (1.9)$$

E_c 为谷底(导带底)能量, k_l 是沿椭球长轴方向(纵向)的波矢, k_t 是横向波矢, m_l 和 m_t 分别是纵向和横向有效质量。

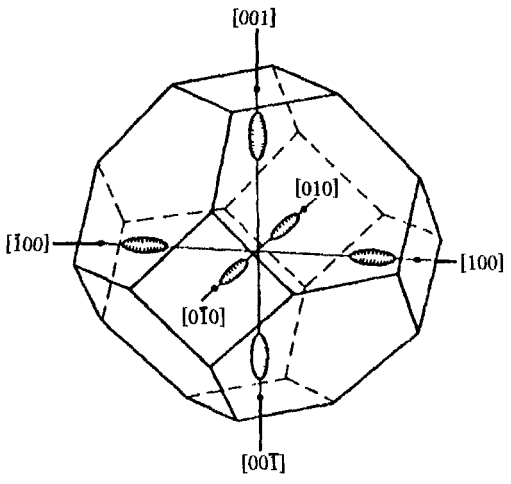

图 1.6　Si 中导带的椭球等能面

上述 Si 的导带能谷都具有同样的极小值和性质,平均来说能容纳同样数目的电子,所以称这些能谷是等价的。

在 GaAs 中,导带极小值在 Γ 点($\boldsymbol{k}=0$),等能面是球面,

$$E-E_c=\frac{\hbar^2}{2m_n}k^2 \qquad (1.10)$$

k 为波矢数值, m_n(约 $0.067m_0$, m_0 是自由电子质量)为电子有效质量。除 Γ 处外,沿〈111〉轴接近 L 点还有能量稍高(约高 0.31eV)但有效质量大得多的 8 个等价能谷。在强电场下获得足够高的能量时,电子可以由 Γ 能谷(低能谷)向 L 能谷(次能谷)转移,产生所谓电子转移效应。

对于价带,普遍的情形是极大值发生在 Γ 点,并有两个简并化的能谷,从而产生两类空穴,即轻空穴(有效质量 m_{pl})和重空穴(有效质量 m_{ph})。这种简并性质来源于自旋和轨道角

动量之间耦合的量子力学效应。这一效应在量子阱激光器中是重要的。

表 1.2　Ge, Si, GaAs 中电和子空穴的有效质量

半导体材料	电　子	空　穴
Ge	$1.64(m_l/m_0)$	$0.04(m_{pl}/m_0)$
	$0.082(m_t/m_0)$	$0.28(m_{ph}/m_0)$
Si	$0.98(m_l/m_0)$	$0.16(m_{pl}/m_0)$
	$0.19(m_t/m_0)$	$0.49(m_{ph}/m_0)$
GaAs	$0.067(m_n/m_0)$	$0.082(m_{pl}/m_0)$
		$0.45(m_{ph}/m_0)$

注：(m_0：自由电子质量)

3. 态密度

每当我们想知道能谷中的电子数量时，就要知道能谷的量子态密度。这里简单考虑一下导带能谷的情况，类似的结果也适用于价带空穴。

在有效质量近似中，具有动量 $\hbar\boldsymbol{k}$ 的电子代表中心位置为 $\boldsymbol{k}$ 的小范围 $\Delta\boldsymbol{k}$ 的布洛赫波组成的量子波包，波包占据的空间范围 Δx 和波包所要求的量子波矢量范围 $\Delta\boldsymbol{k}$ 之间满足下述关系：

$$\Delta x \cdot \Delta k = 2\pi \tag{1.11}$$

在三维情形下有：

$$V \cdot V_{\mathbf{k}} = (2\pi)^3 \tag{1.12}$$

由此得出占据空间体积 V 的一个量子态在 $\boldsymbol{k}$ 空间所要求的体积 $V_{\mathbf{k}}$。由于具有相同波矢量的电子具有不同的自旋，每个 $\boldsymbol{k}$ 矢量存在两种状态，所以式(1.12)应修改为

$$2V \cdot V_{\mathbf{k}} = (2\pi)^3 \tag{1.13}$$

现在，对于单位实际空间体积($V=1$)，我们来计算能量在 E 和 $E+\mathrm{d}E$ 之间的量子态数目 $g(E)\mathrm{d}E$。对位于 $\boldsymbol{k}_0$ 的球对称能谷，由式(1.5)决定的在 $\boldsymbol{k}$ 空间中球的半径为

$$\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{1/2}(E-E_c)^{1/2} \tag{1.14}$$

相应的球的体积为

$$\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E-E_c)^{3/2} \tag{1.15}$$

球内的量子态数($V=1$)为

$$\frac{2}{(2\pi)^3}\cdot\frac{4\pi}{3}\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E-E_c)^{3/2} \tag{1.16}$$

当 E 增加时得到能量在 E 和 $E+\mathrm{d}E$ 间隔内的量子态总数，即

$$g(E)\mathrm{d}E = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E-E_c)^{1/2}\mathrm{d}E \tag{1.17}$$

其中能态密度分布函数为

$$g_c(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_n}{\hbar^2}\right)^{3/2}(E-E_c)^{1/2} \tag{1.18}$$

E_c 为谷底(导带底)的能量。

需要全本请访问 www.ertongbook.com