

半导体物理学

刘恩科 等

国防工业出版社

简介

普通物理学、统计物理学、量子力学

固体物理学

半导体物理学、 电介质物理学

电场的作用： 产生电流

产生电荷感应

应用范围

- 半导体器件、IC器件等电荷运动的机理。
- 半导体材料、陶瓷(半导化)材料的导电机理。
- 新型有机材料及其复合材料的机理分析。
- 各种发光材料的电荷运动机理。

课程概括

- 单晶材料中的电子状态及运动规律
- 处于热电平衡时：
 - 晶体材料的结构与能带---→ 第一章
 - 杂质和缺陷---→ 第二章
 - 电子运动状态---→ 第三章*
 - 运动规律---→ 第四章*
 - 非电学平衡---→ 第五章*
 - 器件工作机理---→ 第六章

第一章 半导体中的电子状态

研究方法：假设(近似)、理论、验证

已经了解：单个原子的电子结构

不了解：多个原子排列在一起出现的问题。电子 - 原子、电子 - 电子的相互作用以及原子- 原子排列形成的势场等多体问题。

$$H = H_{e-e} + H_{e-i} + H_{i-i}$$

简单化：忽略电子 - 电子的相互作用，价电子在平均势场中运动，原子固定不动：“单电子近似”。

(H_{i-i} , H_{e-e})分别消除。

研究一个电子在周期性势场中的状态(单电子近似→平均势场→能带论)

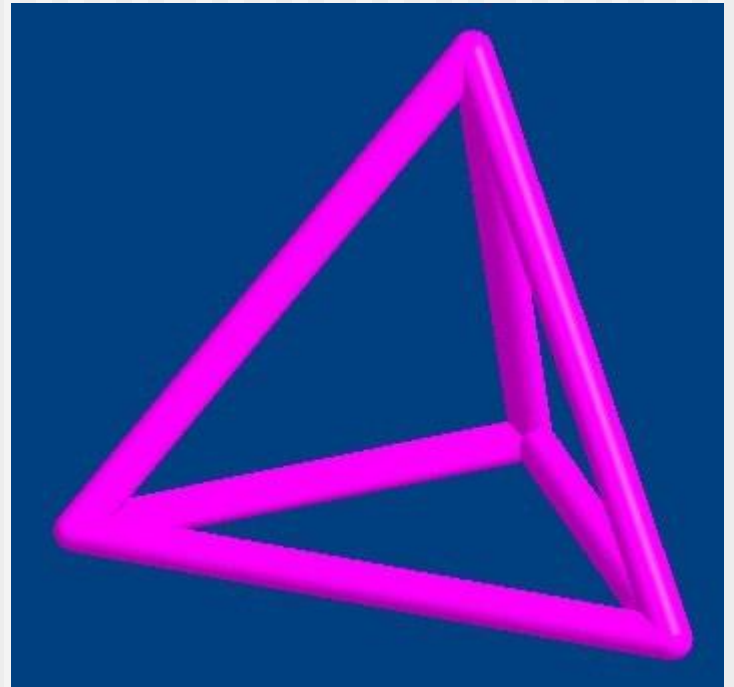
1.1 半导体的晶格结构和结合性质

1、金刚石型结构和共价键

许多材料的结构与金刚石相同，故称之为**金刚石型结构**。

这些材料的第IV族的C(碳)、Si(硅)、Ge(锗)、Sn(锡)，而Si和Ge均是重要的半导体材料。

结合方式：正四面体的顶角上原子和中心原子各贡献一个价电子为该两个原子共有，共有的电子在两个原子之间形成较大的电子云密度，通过它们对原子实的引力把两个原子结合在一起，就是共价键。

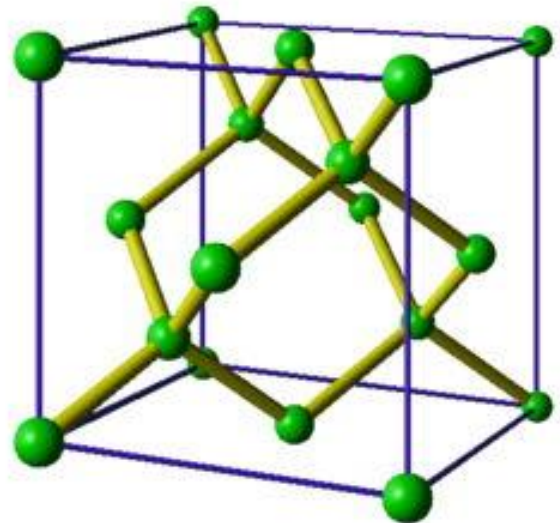
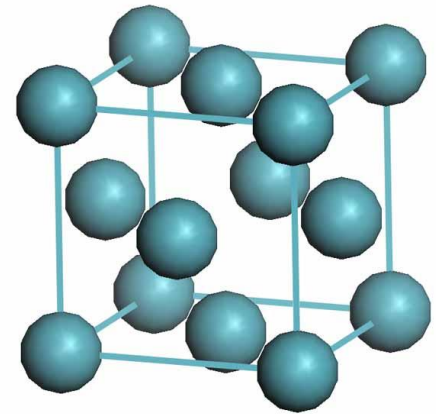


1.1 半导体的晶格结构和结合性质

结构特点：

1、金刚石型结构为两个面心立方的套构。一个基元有两个原子，相距为对角线长度的 $1/4$ ， $n=2$ 。因此，晶格的格波有 $3n$ 支离子振动格波，3个声学波和 $3n-3$ 个光学波。

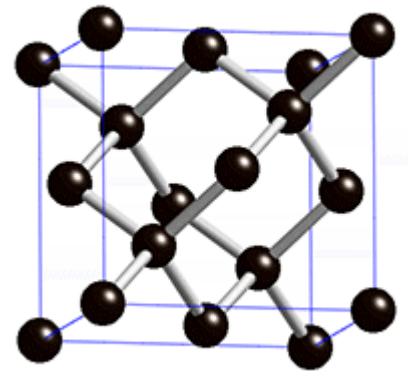
正四面体：顶角、中心有原子
电子云密度大 \rightarrow 共价键 \rightarrow 配位数



1.1 半导体的晶格结构和结合性质

2、任何一个原子的最近邻均有4个原子。例如，离0点对角线1/4处的原子的最近邻原子为0点原子和三个面心原子，它们形成了一个正四面体。

3、“杂化轨道”：每个原子的最外层价电子为一个s态电子和三个p态电子。在与相邻的四个原子结合时，四个共用电子对完全等价，难以区分出s与p态电子，因而人们提出了“杂化轨道”概念：一个s和三个p轨道形成了能量相同的 sp^3 杂化轨道。



1.1 半导体的晶格结构和结合性质

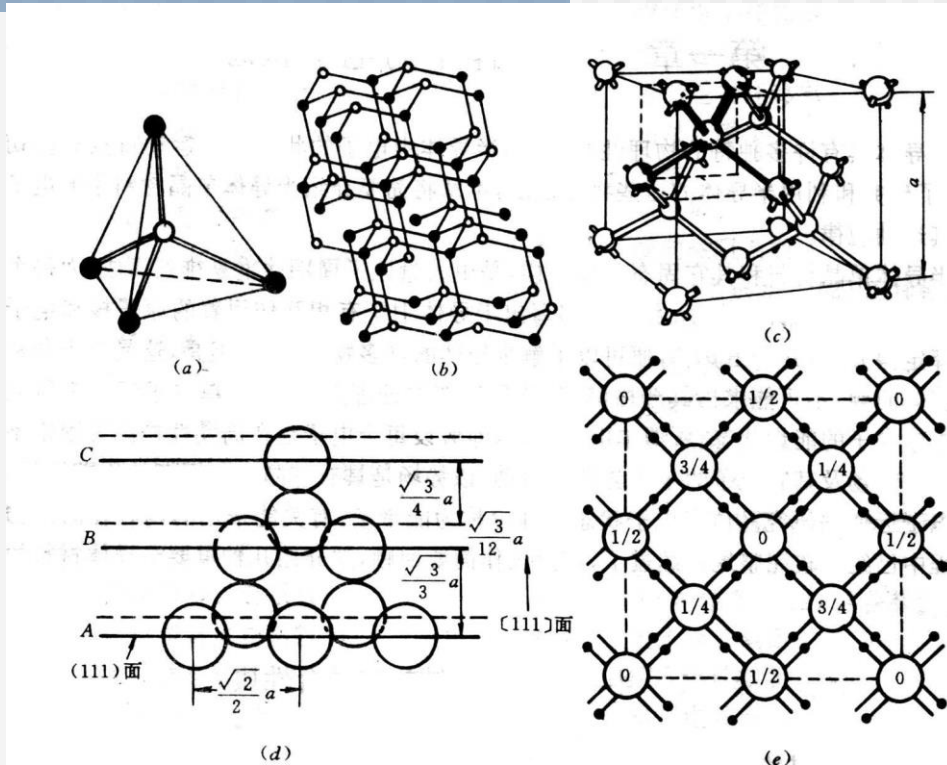
原胞

固体物理学原胞：基于固体物理学中的基矢平衡构成的原胞，体积最小；

结晶学原胞：外观观测、对称性好，易于分析。

图中：(a) 四面体，
(b) 金刚石型结构，(c) 晶胞，
(d) (111) 面得密堆积
(e) {100} 面的投影

注：<100>表示 $[100]$, $[010]$, ... 等六个晶面方向；
{110} 表示 (110) , (101) , ... 等六个密勒指数的晶面方向。



1.1 半导体的晶格结构和结合性质

(a) : 构成了固体物理学原胞，基矢有两个原子。

(b) : 每个实心的原子有四个相邻的空心原子(反之成立)，每个相邻的连线方向可以形成一个四面体。故一个原子成为了四个四面体的顶角。

(c) : 结晶学原胞

(d) (111) 面的堆积，(e) {100} 面的投影

(d) : 取垂直于(c)中对角线的平面，如一个顶角最近邻的三个顶角，

这三个顶角构成了(111)面。该层包含了套构的原子，形成了双原子层的A层。面心立方为ABC层排列。

(e) : 从上到下分为五层。

1.1 半导体的晶格结构和结合性质

需要记忆的参数：

- 晶格常数：硅 0.357nm , 锗 0.357nm
- 密度： $5.00 \times 10^{22}\text{cm}^{-3}$, $4.42 \times 10^{22}\text{cm}^{-3}$
- 共价半径： 0.117nm , 0.122nm .

1.1 半导体的晶格结构和结合性质

2. 闪锌矿型结构和混合键

在金刚石结构中，若由两类原子组成，分别占据两套面心立方——“闪锌矿结构”。

两类原子：III族(镓, 铟)和V族(磷, 砷, 锑)

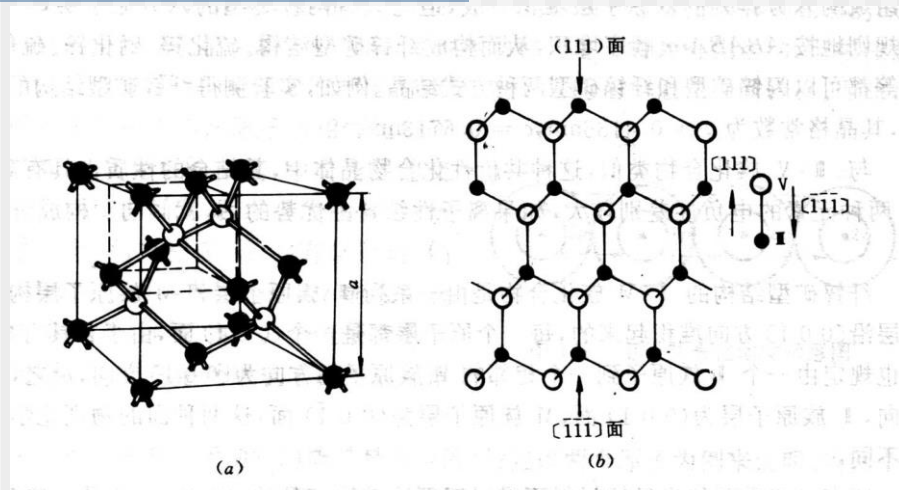
结合方式：共价键，有一定成份的“离子键”，称之为：混合键。即具有“离子性”——“极性半导体”。

(极性物质：正负电荷中心不重合的物质，会形成“电偶子”)如砷化镓中，砷具有较强的电负性(得电子能力)。因此，砷(V)相当于负离子，镓(III)相当于正离子。光学支格波存在。

双原子层：电偶极层。

III→V：[111]方向，III族原子层为[111]面。

结论：共价结合占优势的情况下，此类物质倾向于构成闪锌矿结构。



1.1 半导体的晶格结构和结合性质

3. 纤锌矿型结构

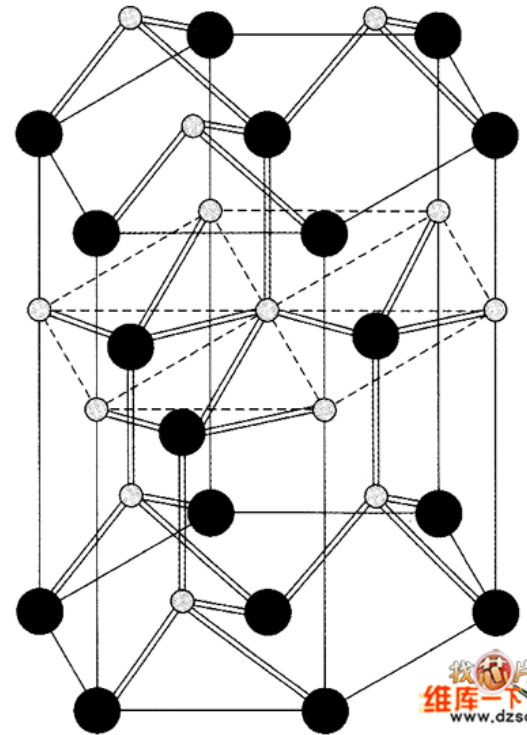
六角密堆积结构和面心立方结构具有相似的地方：ABABAB...；ABCABC...。

两套面心的套构形成了闪锌矿结构；

两套六角套构形成了纤锌矿结构。

每个原子与最近邻的四个原子依然保持“正四面体”结构。

主要由II和VI族原子构成，它们的大小电负性差异较大，呈现较强的离子性，如：硫化锌、硫化镉等。



1.2 半导体中的电子状态和能带

1. 原子的能级和晶体的能带

(1) 原子能级的简并及消失

当 N 个原子相距很远时，每个原子的电子壳层完全相，即电子有相同的能级，此时为简并的。

当 N 个原子相互靠近时，相邻原子的电子壳层开始交叠，电子不再局限在一个原子上，通过交叠的轨道，可以转移到相邻原子的相似壳层上，由此导致电子在整个晶体上的“共有化”运动。

由于2个电子不能有完全相同的能量，交叠的壳层发生分裂，形成相距很近的能级带以容纳原来能量相同的电子。原子相距越近，分裂越厉害，能级差越大。由此导致简并的消失。

1.2 半导体中的电子状态和能带

(2) 晶体中电子做共有化运动时的能量变化

当两个原子相互靠近时，原子中的电子受到自身和另一个原子的库仑作用，导致每一个二度简并的能级都分裂为两个彼此相距很近的能级。

1.2 半导体中的电子状态和能带

(3) 由N个原子组成的晶体能级分裂

当N个原子相互靠近时，每个电子都会受到周围原子的市场作用，每一个N度简并的能级都分裂为N个彼此接近的能级，称之为**能带**。

分裂的每一个能带都称为**允带**，允带之间因没有能级而成为**禁带**。

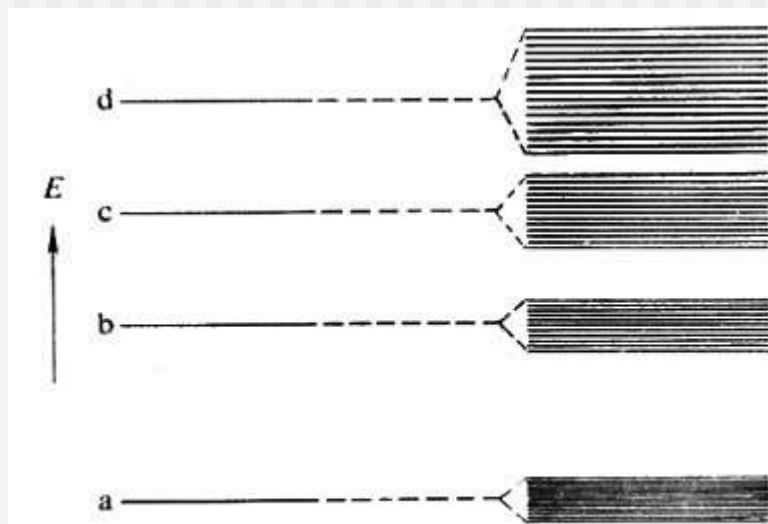


图2 原子能级和能带

1.2 半导体中的电子状态和能带

N 个碱金属原子的 s 能级分裂后形成了 N 个准连续的能级，可容纳 $2N$ 个电子。因此， N 个电子填充为半满，导电。 N 个碱土金属的 s 能级被 $2N$ 个电子填满，因上下能带交叠而导电。

金刚石、硅、锗单个原子的价电子为2个 s 和2个 p 电子；形成晶体后为1个 s 电子和3个 p 电子；经过轨道杂化后 N 个原子形成了复杂的 $2N$ 个低能带和 $2N$ 个高能带， $4N$ 个电子填充在低能带，又称价带；而上面的能带为空带，又称导带。两者之间为禁带。

1.2 半导体中的电子状态和能带

2. 半导体中电子的状态和能带

在晶体中的电子，存在着电子和电子之间的相互作用，也存在电子与离子的相互作用。为了理论计算的方便，必须作简化处理。

单电子近似：忽略电子之间的相互作用，仅考虑离子的周期性势场对电子的影响，同时认为原子核是固定不动的。这种近似也叫做“独立电子近似”。

电子运动满足的规律：

$$p = m_0 v, \quad E = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m_0}, \quad k = |k| = \frac{1}{\lambda}$$

$$E = h\nu, \quad p = \hbar k \quad v = \frac{\hbar k}{m_0}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

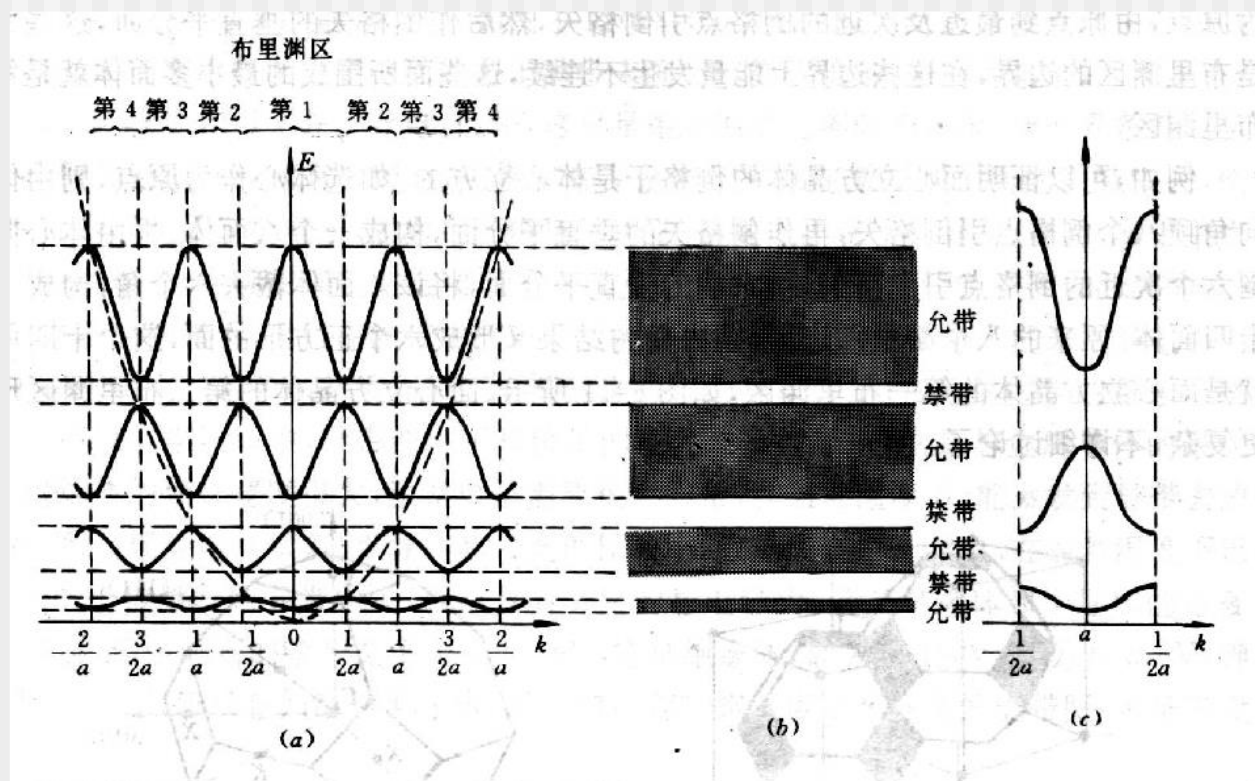
1.2 半导体中的电子状态和能带

(1) 电子的运动方程

单电子近似认为，电子与原子的作用相当于电子在原子的势场中运动。周期性的原子排列产生了周期性的势场。在一维晶格中， x 处的势能为：

$$V(x) = V(x + na)$$

电子所满足的波函数为布洛赫波函数： $\varphi(x) = u_k(x)e^{i2\pi kx}$
 $e^{i2\pi kx}$ 平面波函数，空间各点出现的几率相同，共有化。
 $u_k(x) = u_k(x + na)$ 为周期函数，反映电子在每个原子附近的运动情况。



1.2 半导体中的电子状态和能带

图中虚线为自由电子的关系，实线为周期势场的关系曲线，在布里渊区边界出现了不连续，形成允带和禁带。允带出现的条件是：第一布里渊区出现在中间，第二、第三分别在两边。将能量值 $E(k)$ 作布里渊区整数倍的平移，总可以将其他布里渊区的值平移到第一布里渊区。因倒空间的周期性，这种平移不改变能量的大小。因此，第一布里渊区有晶体能量的全部信息。常称此区域为简约布里渊区。根据周期性边界条件，三个波矢分量为

$$k_x = \frac{n_x}{L} \quad (n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$k_y = \frac{n_y}{L} \quad (n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$k_z = \frac{n_z}{L} \quad (n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

1.3 半导体中电子的运动有效质量

1. 半导体中 $E(k)$ 与 k 的关系

起主要作用的是处于能带顶部和底部的电子。在能带顶部和底部的电子能量为

$$E(k) = E(0) + \left(\frac{dE}{dk} \right)_{k=0} k + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0} k^2 + \dots$$

能带顶部的底部的波矢均为 $k=0$ ，同时 $dE/dk=0$ ，其结果为

$$E(k) - E(0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$$

能带顶部和底部电子的有效质量分别为负和正。

1.3 半导体中电子的运动有效质量

2. 半导体中电子的平均速度和加速度

电子含时间的波函数为：

$$\psi_k(x, t) = \psi_k(x) e^{-iEt/h}$$

电子的平均速度（波包的速度）为：

$$v = \frac{1}{h} \nabla_k E$$

在能带极值附近的电子速度为：

$$v = \frac{\hbar k}{m_n^*}$$

电子的加速度为： $a = f / m_n^*$

其中

$$f = \hbar \frac{dk}{dt} = \frac{dp}{dt}, \quad \frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

1.3 半导体中电子的运动有效质量

3. 有效质量的意义

加速度公式中，外力作用于有效质量而不是惯性质量。其原因是，电子受的总力为外电场力和内部原子的势场力。因此，加速度是内外场作用的综合效果。使用有效质量可以使问题变简单：可以不涉及半导体的内部势场，而又可以从实验测定有效质量。

在 $k=0$ 附近，内部势场很弱，接近自由电子，有效质量为正。在布里渊区边界，内部势场对电子的作用很强，大于外场，使有效质量呈现负值。

作业： P32 习题1和2。

1.4 本征半导体的导电机制 空穴

机构：指产生机理的物质。

本征半导体中本征的含义：即本来的特征，100%纯的，无外来杂质的，“理想的”，材料本身所特有的材料**如何导电？**如何分析？

用能带：导带、价带，占满电子。

只有不满能带的电子才能导电。

碱金属：占半满价带，电子有移动的空间。

碱土金属：占满价带，电子没有移动空间，但三维布里渊区不对称，导带与价带有交叠，使其导电。

三价金属：半满价带，导电。

四价非金属：电子填满了第二级允带——价满，其导带为第三级允带。

解释：电子从价带跃迁到导带底，在外场作用下，导带电子参与导电；同时，价带不满的状态——**空穴也参与了导电**

1.4 本征半导体的导电机制 空穴

电子从价带到导带：成为可在整个晶体内运动的共有化电子。

在结构上理解为图1-15：产生了一个空穴和一个填隙电子。

对于空穴：产生了一个正电荷的空状态；

对于电子：在外电场 E 作用下，受外力作用，电子的 k 状态不断

变化：
$$dk / dt = -q|E| / h$$

空状态的电流：
$$J = (\pm q)v(k)$$

所有电子的 k 状态均变化相同，在价带顶， $a = -q|E| / m_n^*$

空穴带正电，力为 qE ， $m_n^* < 0$ ，令 $m_p^* = -m_n^*$ 表示空穴的有效质量在价顶为正。

引入概念，把价带中大量电子对电流的贡献用少量的空穴表达。半导体中的导电机构有两种：电子和空穴。而金属只有电子一种。

1.4 本征半导体的导电机制 空穴

讨论:

1、有效质量 $f_{ext} + f_{in} = m_0 a$

为了便于研究，将公式变为 $f_{ext} = m_n^* a$

2、外电场对电子的作用

当外电场加在电子上，波矢 k 随时间变化 $dk / dt = -q|E| / \hbar$
电子受力加速运动平均速度为 $v = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$

电子电流为 $J = (-q)v(k)$

其中，电子运动方向和波矢变化方向均与外电场方向相反。
(见图)

1.5 回旋共振

1. k空间等能面:

设一维情况下能带极值在 $k=0$ 处, 且

导带底附近
$$E(k) - E(0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \quad (1.6-1)$$

价带顶附近
$$E(k) - E(0) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*} \quad (1.6-2)$$

$E(0)$ 分别为导带底能量和价带顶能量。

1.5 回旋共振

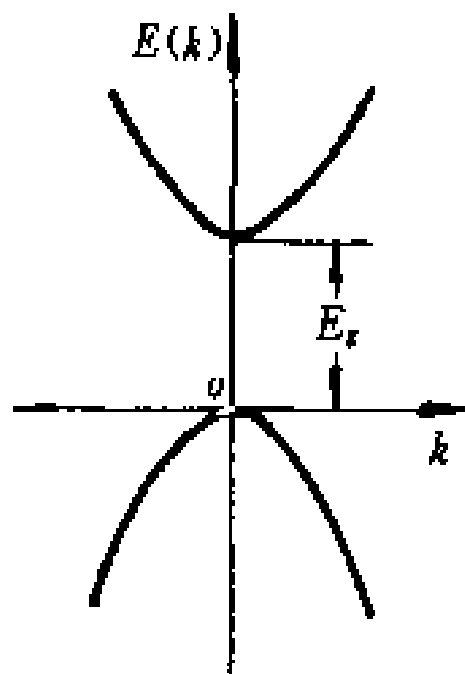


图 1-17 极值附近 $E(k)$ 与 k 的关系示意图

1.5 回旋共振

对各向同性的三维晶体，以 k_x 、 k_y 、 k_z 为坐标轴构成 k 空间，如图。其中

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \quad (1.6-3)$$

设导带底位于 $k=0$ ，其能值为 $E(0)$ ，
导带底附近

$$E(k) - E(0) = \frac{\hbar^2}{2m_n} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (1.6-4)$$

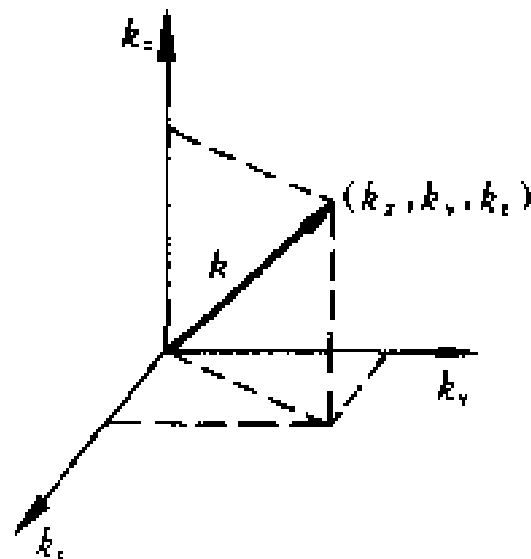


图 1-18 k 空间

1.5 回旋共振

当 $E(k)$ 为某一定值的面称为等能面 (1.6-4) 式表示的是一系列半径为

$$|k| = \sqrt{\frac{2m_n^*}{\hbar^2} [E(k) - E(0)]}$$

的球面。

如图，表示的是等能面在 $k_y k_z$ 平面上的截面图，它是一系列环绕坐标原点的圆。

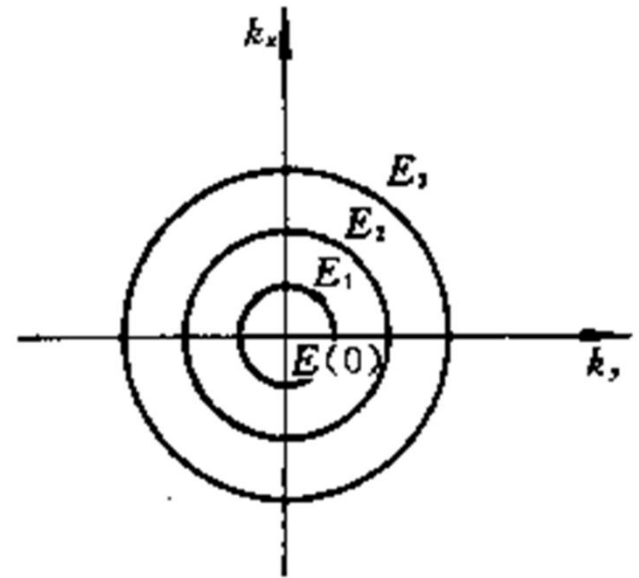


图 1-19 k 空间球形等能面平面示意图

1.5 回旋共振

对各向异性的晶体， $E(k)$ 与 k 的关系沿不同的 k 方向不一定相同反映在沿不同的 k 方向，电子的有效质量不一定相同，而且能带极值不一定位于 $k=0$ 处。

设导带底位于 k_0 处，能量为 $E(k_0)$ ，在晶体中选取适当的坐标轴 k_x 、 k_y 、 k_z ，并令 m_x^* 、 m_y^* 、 m_z^* 分别表示沿 k_x 、 k_y 、 k_z 三个方向的导带底电子的有效质量， $E(k)$ 用泰勒级数在极值 k_0 附近展开，略去高次项，得

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right] \quad (1.6-5)$$

1.5 回旋共振

式中

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{m_x^*} &= \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \right)_{k_0} \\ \frac{1}{m_y^*} &= \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \right)_{k_0} \\ \frac{1}{m_z^*} &= \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \right)_{k_0} \end{aligned} \right\} \quad (1.6-6)$$

也可将 (1.6-5) 写为如下形式

1.5 回旋共振

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2}{\frac{2m_x^* (E - E_c)}{\hbar^2}} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{\frac{2m_y^* (E - E_c)}{\hbar^2}} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{\frac{2m_z^* (E - E_c)}{\hbar^2}} = 1 \quad (1.6-7)$$

式中 E_c 表示 $E(k_0)$

这是一个椭球方程，各项的分母等于椭球各半轴长的平方，这种情况下的等能面是环绕 k_0 的一系列椭球面。如图，为等能面在 $k_y k_z$ 平面上的截面图，它是一系列椭圆。

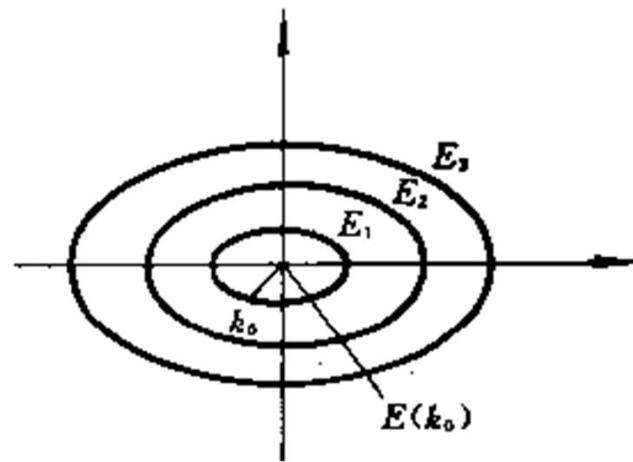


图 1-20 k 空间椭球等能面平面示意图

1.5 回旋共振

2. 回旋共振

磁场强度为 B 作用在速度为 v 的电子上，磁场力为

$$f = -qv \times B$$

电子作回旋运动，回旋速度和加速度分别为

$$v = r\omega_c, \quad a = v^2 / r$$

由此导出的回旋频率为

$$\omega_c = \frac{qB}{m_n^*}$$

外加交变电场，则电子会吸收电场能量，加快回旋。测量被吸收的电场能量，可以得到吸收谱：

- (1) 在回旋频率有较大的吸收峰
- (2) 有几个吸收峰就有几个有效质量。

1.5 回旋共振

3. 计算方法

取磁场B为任意方向

$$\frac{1}{m_n^*} = \sqrt{\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*}}$$

经过计算，各向异性的回旋频率也满足上式，只是 α, β, γ 分别为B分别在三个方向的方向余弦。

若 $m_x = m_y = m_t$, $m_x = m_l$ 。 $\alpha + \beta = 1 - \gamma$

$$\frac{1}{m_n^*} = \sqrt{\frac{m_t^* (1 - \gamma^2) + m_l^* \gamma^2}{(m_t^*)^2 m_l^*}}$$

可以得出结论：等能面椭球的径向与B的夹角余弦决定了有效质量。

1.6 硅和锗的导带结构

1. 硅和锗的导带结构

回旋共振硅的吸收峰：

B 沿 $[111]$ 晶轴方向，有一个；

沿 $[110]$ 晶轴方向，有二个；

沿 $[100]$ 晶轴方向，有二个；

沿任意晶轴方向，有三个

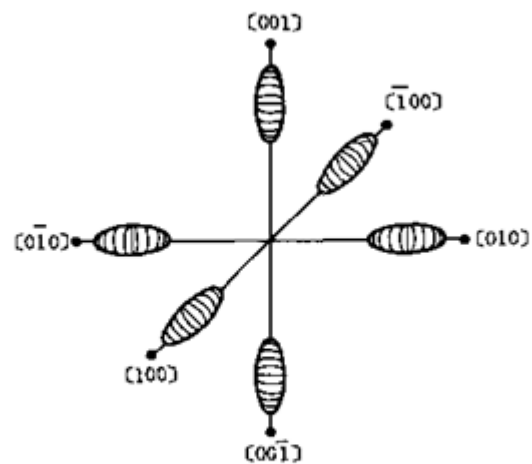


图 1-22 硅导带等能面示意图

1.6 硅和锗的导带结构

设 k_0^s 表示第 s 个极值所对应的波矢 $s=1, 2, 3, 4, 5, 6$ ，极值处能值为 E_c ， k_0^s 沿 $\langle 100 \rangle$ 方向共有六个，极值附近的能量 $E^s(k)$ 为

$$E^s(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x}^s)^2}{m_x} + \frac{(k_y - k_{0y}^s)^2}{m_y} + \frac{(k_z - k_{0z}^s)^2}{m_z} \right] \quad (1.6-8)$$

该式表示六个椭球等能面的方程

1.6 硅和锗的导带结构

如选取 E_0 为能量零点，以 k_0^s 为坐标原点，取 k_1 、 k_2 、 k_3 为三个直角坐标轴，，分别与椭球主轴重合。即使等能面分别为绕 k_1 、 k_2 、 k_3 轴旋转的旋转椭球面。

以沿 $[001]$ 方向的旋转椭球面为例。设 k_3 轴沿 $[001]$ 方向，即沿 k_z 方向，则 k_1 、 k_2 轴在 (001) 面内并互相垂直，这时，沿 k_1 、 k_2 轴的有效质量相同。

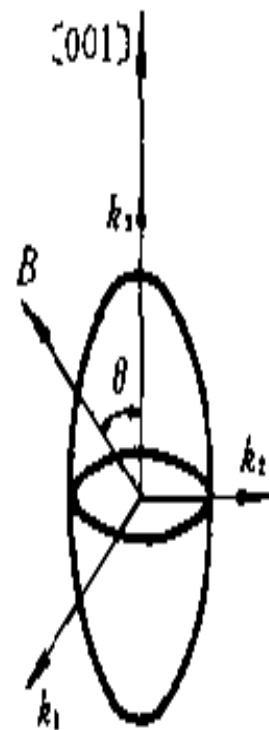


图 1-23 B 相对于 k 空间坐标轴的取向

1.6 硅和锗的导带结构

现令 $m_x^* = m_y^* = m_t$, $m_z^* = m_l$, m_t 和 m_l 分别称为横有效质量和纵有效质量, 则等能面方程为

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{k_1^2 + k_2^2}{m_t} + \frac{k_3^2}{m_l} \right] \quad (1.6-9)$$

对其它五个椭球面可以写出类似的方程。

如果选取 k_1 , 使磁感应强度 B 位于 k_1 轴和 k_3 轴所组成的平面内, 且同 k_3 轴交 θ 角, 则在这个坐标系里, B 的方向余弦 α 、 β 、 γ 分别为 $\alpha = \sin \theta$, $\beta = 0$, $\gamma = \cos \theta$

代入式 (9-11), 得

$$m_n^* = m_t \sqrt{\frac{m_l}{m_t \sin^2 \theta + m_l \cos^2 \theta}} \quad (1.6-10)$$

1.6 硅和锗的导带结构

讨论:

(1) 磁感应沿 $[001]$ 方向, 这时磁感应与 k_3 的夹角给 $\cos^2 \theta = 1$, 由(1.6-10)式得:

$$m_n^* = m_t \quad (1.6-11)$$

B沿 k_1, k_2 方向, $\cos^2 \theta = 0$ 。对应的 m_n^* 值分别是

$$m_n^* = \sqrt{m_l m_t} \quad (1.6-12)$$

因而也可以观察到两个吸收峰。

1.6 硅和锗的导带结构

(2) 磁感应沿 $\langle 110 \rangle$ 方向, 若B在 k_1k_2 平面, 这时 $\cos^2 \theta = 0$, $\sin^2 \theta = 1$, 得

$$m_n^* = \sqrt{m_t m_l} \quad (1.6-13)$$

若B在 k_1k_3 平面, 这时 $\cos^2 \theta = \sin^2 \theta = 1/2$

$$m_n^* = m_t \sqrt{\frac{2m_l}{m_t + m_l}} \quad (1.6-14)$$

即能测得两个不同的 m_n^* 的值, 因而可以观察到两个吸收峰。

1.6 硅和锗的导带结构

(3) 磁感应沿 $\langle 111 \rangle$ 方向，则与上述六个 $\langle 100 \rangle$ 方向的方向余弦 $\alpha^2 = \beta^2 = \gamma^2 = 1/3$ ，于是由 (1.6-7) 式

$$\frac{1}{m_n^*} = \sqrt{\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*}} \quad (1.6-7)$$

得

$$m_n^* = m_t \sqrt{\frac{3m_l}{2m_t + m_l}} \quad (1.6-15)$$

由 $\omega = \omega_c = qB/m_n^*$ 可知，因为 m_n^* 只有一个值，当改变 B 时，只能观察到一个吸收峰。

1.6 硅和锗的导带结构

根据实验数据得出硅的 (m_0 为电子惯性质量)

$$m_1 = (0.98 \pm 0.04)m_0 \quad m_t = (0.19 \pm 0.01)m_0$$

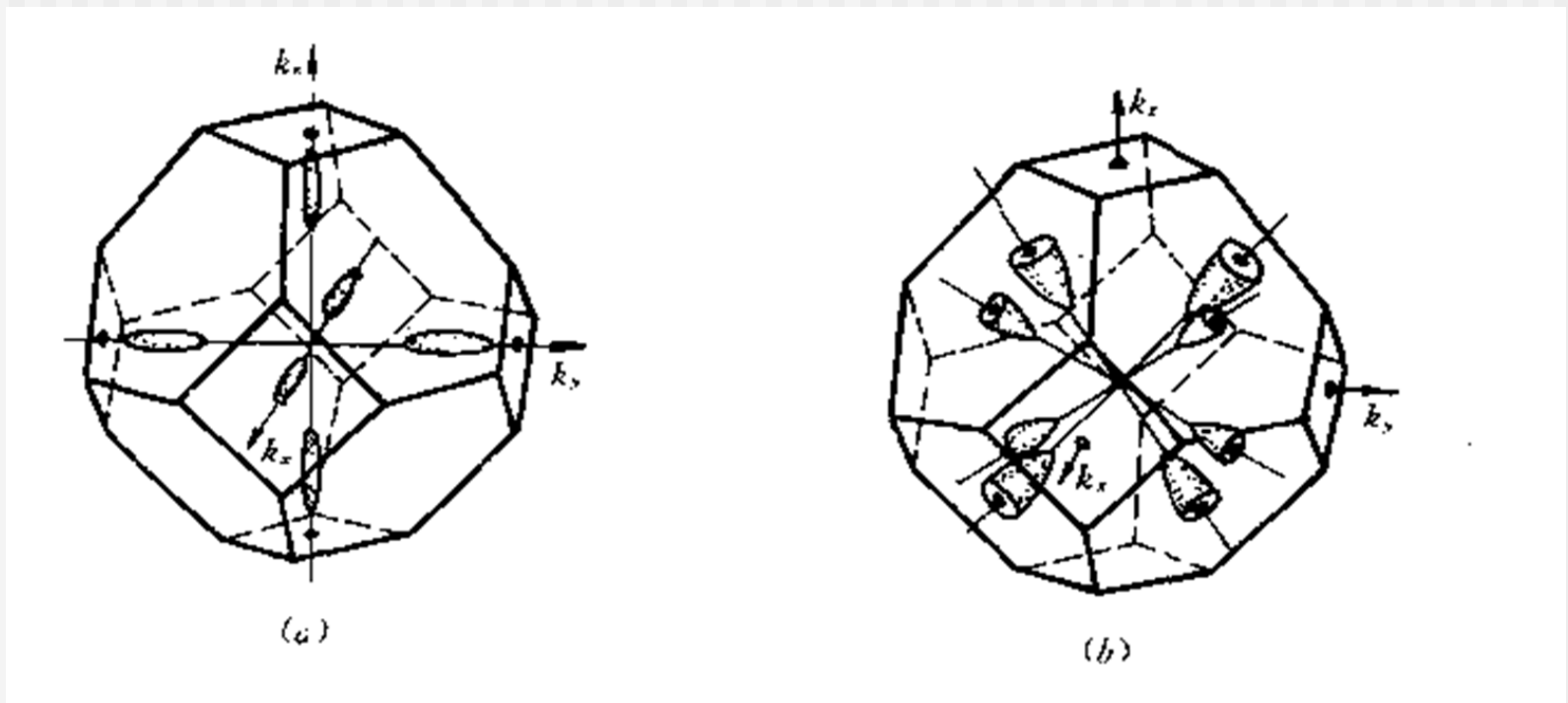
仅从回旋共振试验还不能决定导带极值（椭球中心）的确定位置。通过施主电子自旋共振试验得出，硅的导带极值位于 $\langle 100 \rangle$ 方向的布里渊区中心到布里渊区边界的 0.85 倍处。

n 型锗的实验结果指出，锗的导带极值极小值位于 $\langle 111 \rangle$ 方向的边界上，共有八个。极值附近等能面为沿 $\langle 111 \rangle$ 方向旋转的八个旋转椭球，每个椭球面有半个在第一布里渊区内，在简约布里渊区内共有四个椭球。

实验测得锗的 $m_1 = (0.98 \pm 0.04)m_0$ $m_t = (0.19 \pm 0.01)m_0$

1.6 硅和锗的导带结构

2、硅和锗的价带结构



硅和锗在布里渊区中导带等能面示意图

1.6 硅和锗的导带结构

硅和锗的价带结构也是一方面通过理论计算，求出 $E(k)$ 与 k 的关系，另一方面由回旋共振试验定出其系数，从而算出空穴有效质量。

通过理论计算及p型样品的实验结果指出，价带顶位于 $k=0$ ，即在布里渊区的中心，能带是简并的。如不考虑自旋，硅和锗的价带是三度简并的。计入自旋，成为六度简并。

计算指出，如果考虑自旋-轨道耦合，可以取消部分并，得到一组四度简并的状态和另一组二度简并的状态，分为两支。

1.6 硅和锗的导带结构

四度简并的能量表示式

$$E(k) = \frac{-\hbar^2}{2m_0} \left\{ A k^2 \pm \left[B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) \right]^{\frac{1}{2}} \right\} \quad (1.6-16)$$

二度简并的能量表示式为

$$E(k) = -\Delta - \frac{\hbar^2}{2m_0} A k^2 \quad (1.6-17)$$

式中 Δ 是自旋-轨道耦合的分裂能量，常数A、B、C由计算不能准确求出，需借助于回旋共振试验定出。

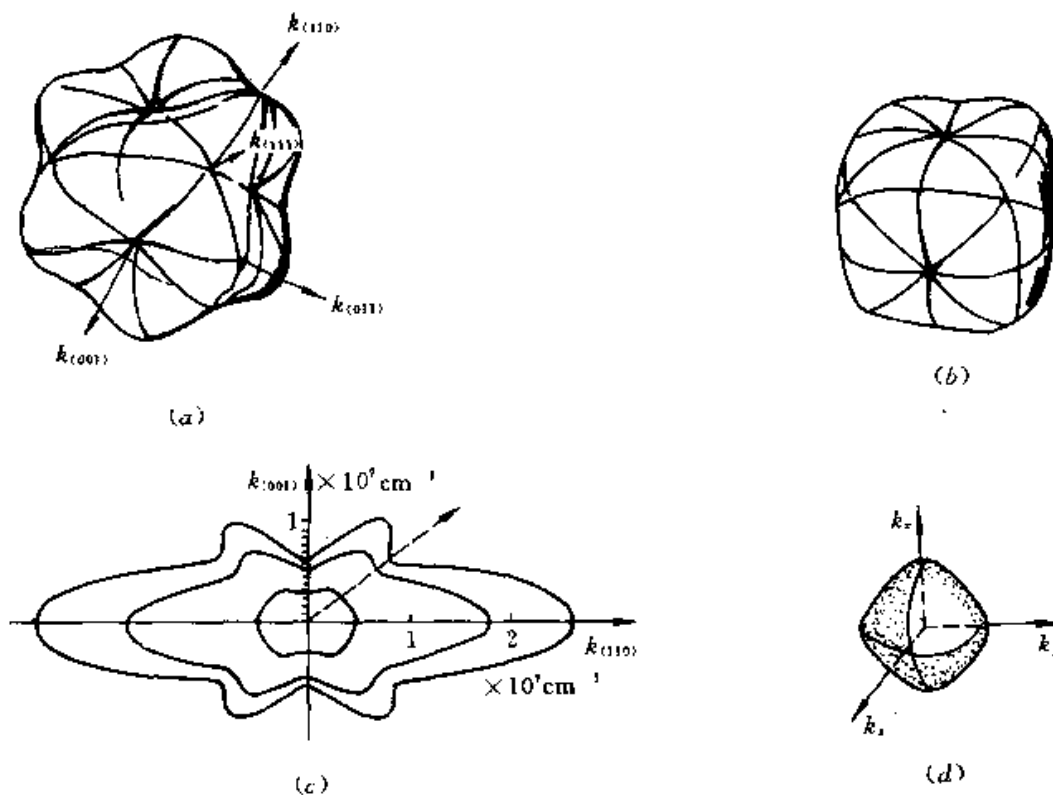
1.6 硅和锗的导带结构

由式 (1.6-16) 看到, 对于同一个 k , $E(k)$ 可以有两个值, 在 $k=0$ 处, 能量相重合, 这对应于极大值相重合的两个能带, 表明硅、锗有两种有效质量不同的空穴。

如根式前取负号, 得到有效质量较大的空穴, 称为重空穴, 有效质量用 $(m_p^*)_h$ 表示;

如取正号, 则的有效质量较小的空穴, 称为轻空穴, 有效质量用 $(m_p^*)_l$ 表示。

1.6 硅和锗的导带结构



重空穴和轻
空穴 k 空间等
能面示意图

图 1-25 重空穴和轻空穴 k 空间等能面示意图
(a) 重空穴能值较高的情况; (b) 重空穴能值较低的情况;
(c) (110) 平面等能面截面图; (d) 轻空穴等能面。

1.6 硅和锗的导带结构

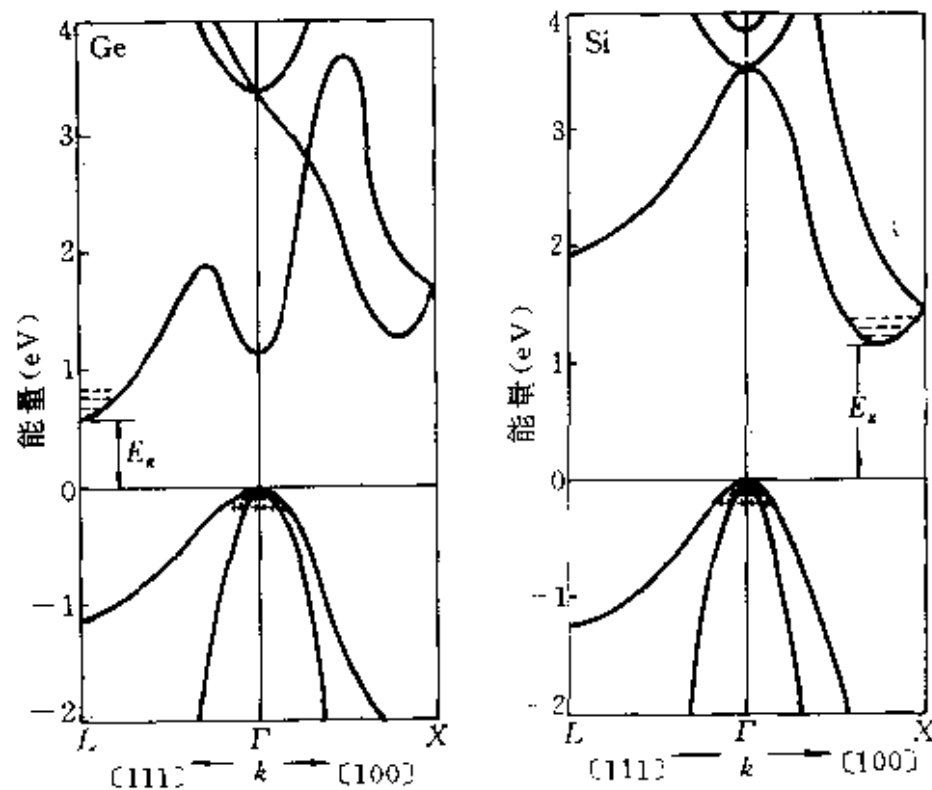


图 1-26 硅和锗的能带结构

理论和实验相结合得出的硅、锗沿 $\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ 方向上的能带结构图。

1.6 硅和锗的导带结构

硅和锗的价带顶 E_v 都位于布里渊区中心，而导带底 E_c 则分别位于 $\langle 100 \rangle$ 方向的布里渊区中心到布里渊区边界的0.85倍处和简约布里渊区边界上，即导带底与价带顶的能量对应的波矢不同。这种半导体称为**间接禁带半导体**。

最后指出，硅、锗的禁带宽度是随温度变化的。在 $T=0\text{K}$ 时，硅、锗的禁带宽度 E_g 分别趋近于

$$E_{g\text{Si}}=1.170\text{eV}, \quad E_{g\text{Ge}}=0.7437\text{eV}$$

随着温度升高， E_g 按（1.6-18）的规律减小。

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1.6-18)$$

1.6 硅和锗的导带结构

式中 $E_g(T)$ 和 $E_g(0)$ 分别表示温度为 T 和 $0K$ 时的禁带宽度。温度系数 α 和 β 分别为：

硅： $\alpha = 4.73 \times 10^{-4} \text{eV/K}$

$\beta = 636K$

锗： $\alpha = 4.774 \times 10^{-4} \text{eV/K}$

$\beta = 235K$

$T=300K$ 时， $E_{gSi}=1.12\text{eV}$ ， $E_{gGe}=0.67\text{eV}$ ，所以 E_g 具有负温度系数。对半导体来说，导带底和价带顶的能量差，即禁带宽度 E_g 是十分重要的量，因此采用一种简化的能带图。图的水平向常表示实际空间的坐标。

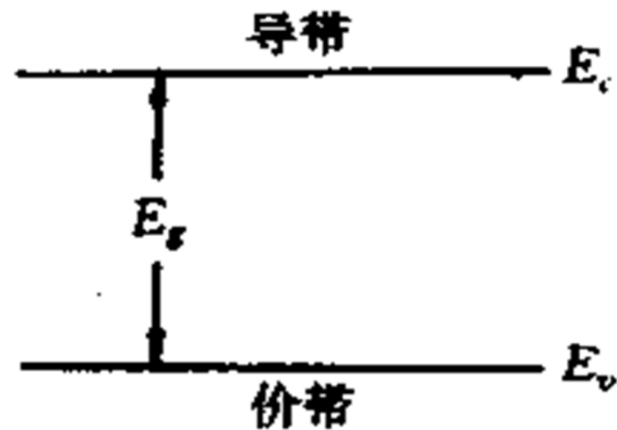


图 6-30 半导体的简化能带图

1.6 硅和锗的导带结构

运用上述理论分析实验结果：

- 1) B 沿 $[111]$ 方向，六个方向的夹角余弦只有一个相同值，有效质量 只有一个取值；
- 2) B 沿 $[110]$ 方向，六个方向的夹角余弦有二个值0和 $1/2$ 。有效质量有2个值；
- 3) B 沿 $[100]$ 方向，六个方向的夹角余弦有二个值0和1。有效质量有2个值；
- 4) 任意方向，六个方向的夹角余弦有三个值，有效质量有3个值。

硅的三维等能面见图24a，锗和硅的晶格常数不同，三维等能面也不同。在 $\langle 111 \rangle$ 方向的简约布里渊区的八个面上，见图24a。

作业 P33： 习题3 和 4。