

半导体物理

主讲人：蒋玉龙

微电子学楼312室， 65643768

Email: yljiang@fudan.edu.cn

<http://10.14.3.121>

第三章 半导体中的电子状态

3.1 半导体中电子的运动 有效质量

3.2 本征半导体的导电机构 空穴

3.3 回旋共振和等能面

3.4 硅和锗的能带结构

3.1 半导体中电子的运动 有效质量¹

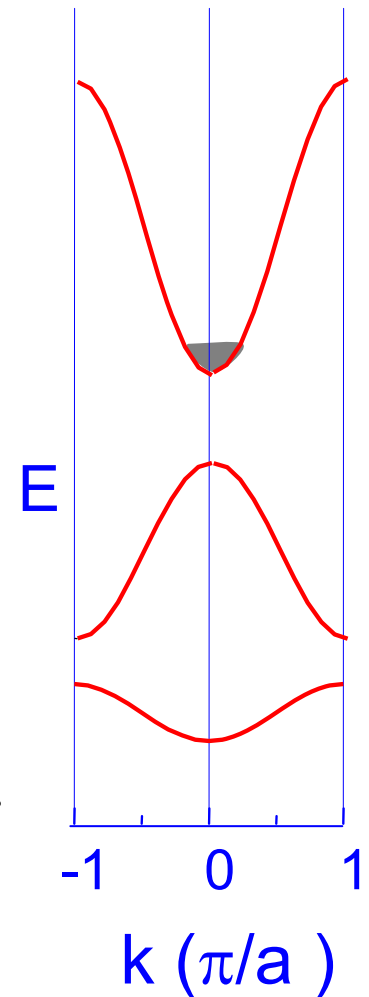
3.1.1 半导体中E-k的关系

- 要掌握能带结构，必须确定E-k的关系（色散关系）
- 半导体中起作用的常常是接近于能带底部或顶部的电子，因此只要掌握这些能带极值附近的色散关系即可
- 以一维情况为例，令 $dE/dk|_{k=0}=0$ ， $E(k=0)$ 泰勒展开

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

$$E(k) - E(0) = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=0} \cdot k^2$$

$E(0)$: 导带底能量



3.1 半导体中电子的运动 有效质量₂

3.1.1 半导体中E-k的关系

对于给定半导体是个定值

$$E(k) - E(0) = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=0} \cdot k^2 \longrightarrow E(k) = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$$

定义能带底电子有效质量

$$m_n^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=0} \right)^{-1}$$

(具有质量的单位)

—导带底: $E(k) > E(0)$, 电子有效质量为正值

—能带越窄, $k=0$ 处的曲率越小, 二次微商就小, 有效质量就越大

3.1 半导体中电子的运动 有效质量³

3.1.1 半导体中E-k的关系

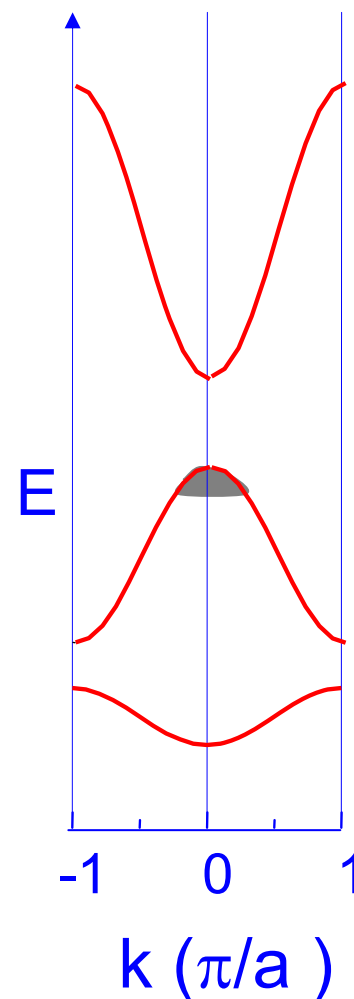
—价带顶的有效质量

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

$$E(k) = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$$

$$m_n^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=0} \right)^{-1}$$

—价带顶：E(k)<E(0)，电子有效质量为负值



3.1 半导体中电子的运动 有效质量⁴

3.1.2 半导体中电子的平均速度

— 电子在周期性势场中的运动，用平均速度，即群速度来描述

— 群速度是介质中能量的传输速度

— 布洛赫定理说明电子的运动可以看作是很多行波的叠加，它们可以叠加为波包；而波包的群速就是电子的平均速度。

— 波包由一个特定波矢 k 附近的诸波函数组成，则波包群速 V_g 为

电子能量 $E = \hbar\omega$

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$
$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$
$$E(k) = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}$$
$$v_g = \frac{\hbar k}{m_n^*}$$

— 能带极值附近的电子速度正负与有效质量正负有关

3.1 半导体中电子的运动 有效质量⁵

3.1.3 半导体中电子的加速度

—当半导体上存在外加电场的时候，需要考虑电子同时在周期性势场中和外电场中的运动规律

—考虑dt时间内外电场| E |对电子的做功过程

$$dE = Fds = Fv_g dt$$

$$F = -q|\vec{E}|$$

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

$$dE = \frac{dE}{dk} dk$$

$$F = \hbar \frac{dk}{dt}$$

加速度

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{F}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

3.1 半导体中电子的运动 有效质量⁶

3.1.3 半导体中电子的加速度

定义电子有效质量

$$a = \frac{dv_g}{dt} = \frac{F}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad m_n^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1} \quad a = \frac{F}{m_n^*}$$

引进有效质量的概念后，电子在外电场作用下的表现和自由电子相似，都符合牛顿第二定律描述

3.1 半导体中电子的运动 有效质量⁷

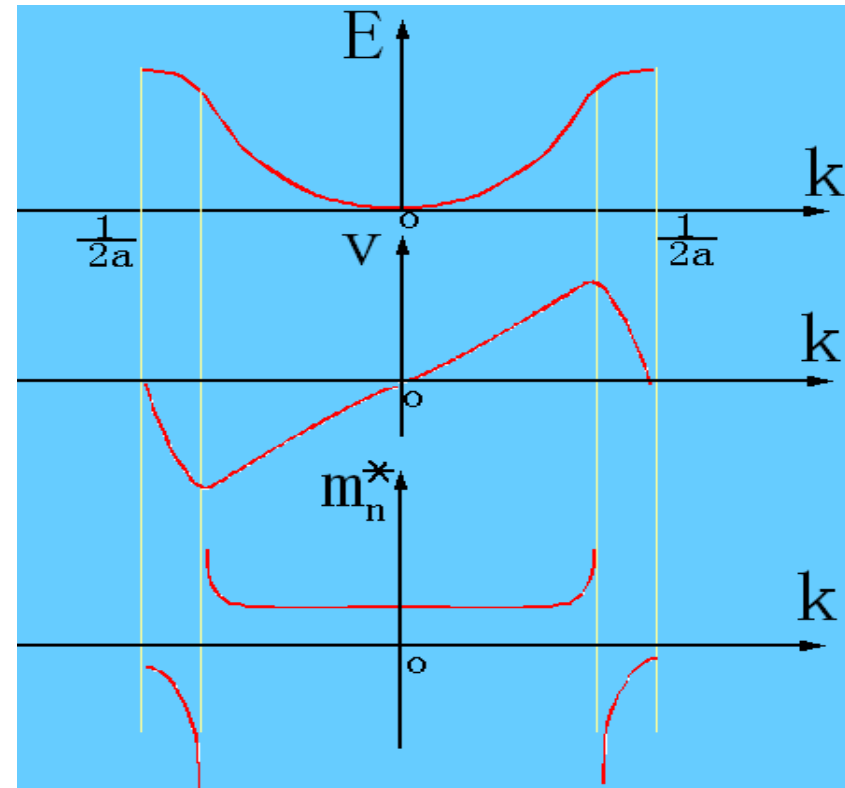
3.1.4 有效质量的意义

— 半导体中的电子需要同时响应内部势场和外加场的作用，有效质量概括了半导体内部势场对电子的作用，使得在解决半导体中电子在外力作用下的运动规律时，可以不涉及到半导体内部势场的作用。

— m_n^* 还可以由实验直接测定

— $\hbar k = m_n^* v_g$ 并不代表电子的动量，称为电子的准动量

E-k关系至关重要



$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad m_n^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

第三章 半导体中的电子状态

3.1 半导体中电子的运动 有效质量

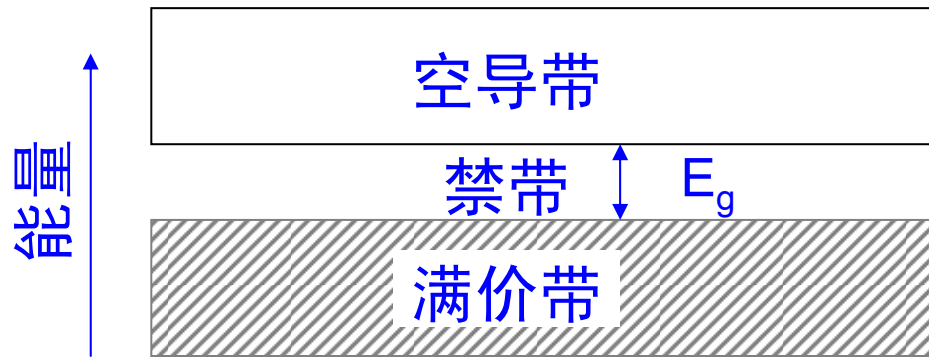
3.2 本征半导体的导电机构 空穴

3.3 回旋共振和等能面

3.4 硅和锗的能带结构

3.2 本征半导体的导电机构 空穴₁

3.2.1 空穴



— 高纯半导体在绝对零度时导带是空的，并且由一个能隙 E_g 与充满的价带隔开。

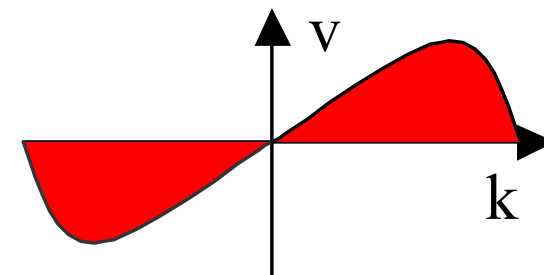
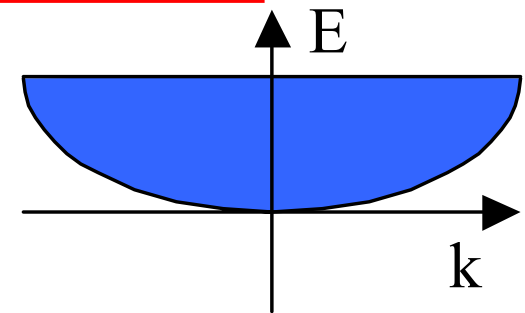
— 当温度升高时，电子由价带被热激发至导带。导带中的电子和留在价带中的空轨道二者都对电导率有贡献。

满带中的电子不能导电

$$E(k) = E(-k) \quad v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

$$v_g(k) = -v_g(-k)$$

$$\sum v_g(k) = 0$$



3.2 本征半导体的导电机构 空穴₂

3.2.1 空穴

满带中的电子不能导电

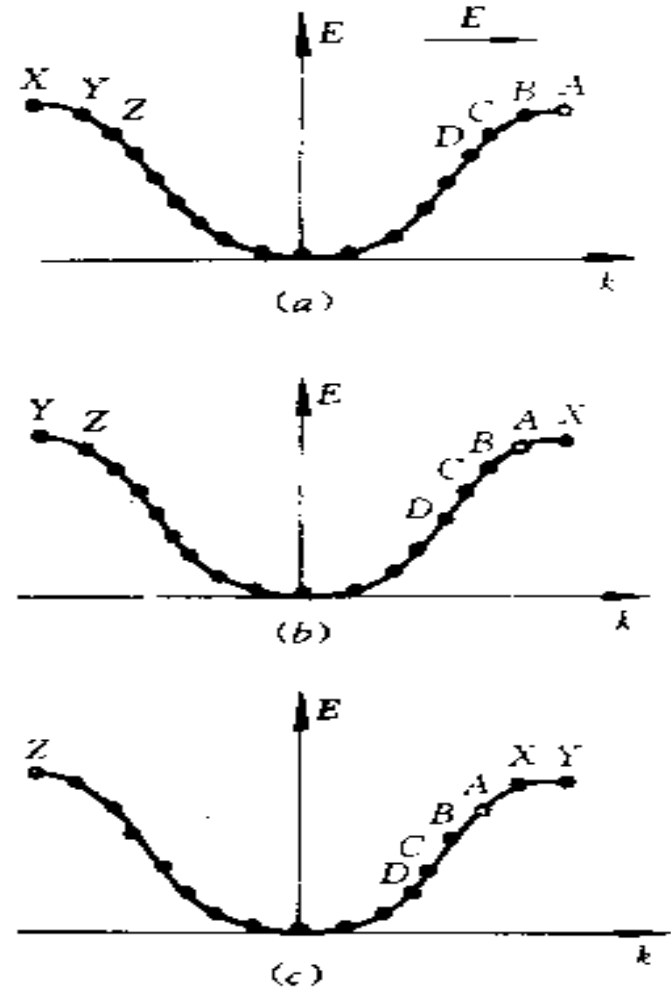
外加电场 \vec{E}

$$F = -q|\vec{E}| = \hbar \frac{dk}{dt}$$

$$\frac{dk}{dt} = \frac{-q|\vec{E}|}{\hbar}$$

所有电子的波矢都以相同的速率向左运动，但满带的结果是合速度为零。

$$\sum v_g(k) = 0$$



3.2 本征半导体的导电机构 空穴₃

3.2.1 空穴

若满带中有一个电子逸出，出现一个空状态，情况如何？

外加电场 \mathbf{E}

$$F = -q|\vec{E}| = \hbar \frac{dk}{dt}$$

$$\frac{dk}{dt} = \frac{-q|\vec{E}|}{\hbar}$$

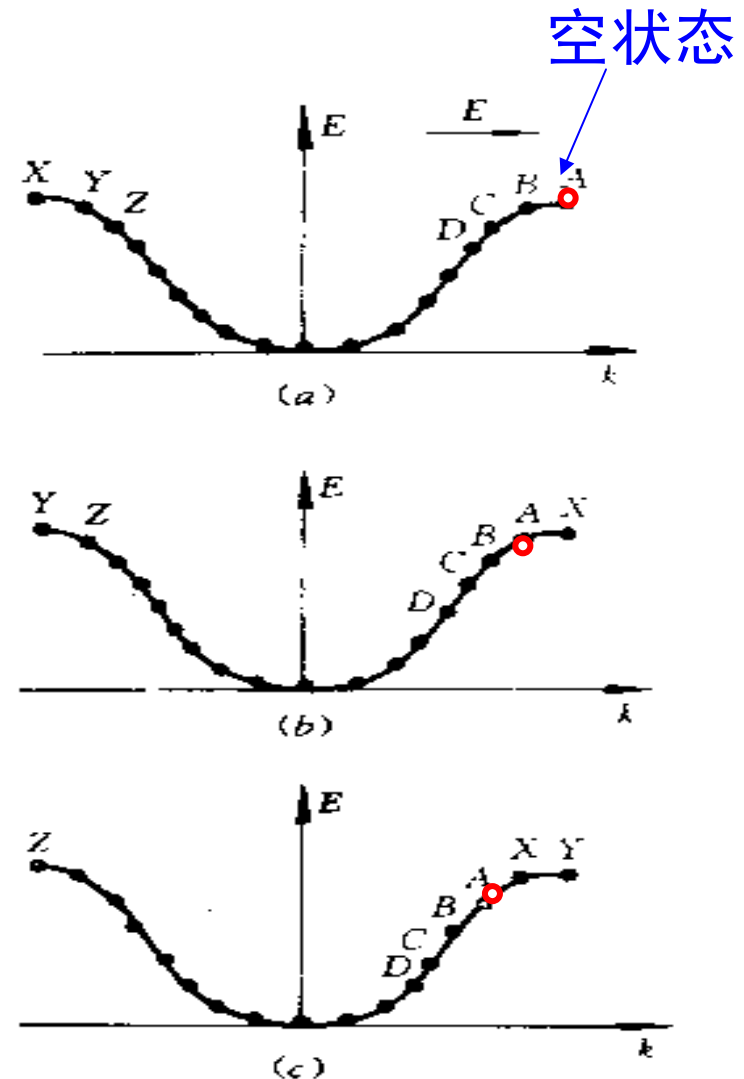
所有电子的波矢以相同的速率向左运动

$Z \rightarrow Y, Y \rightarrow X \dots X \rightarrow A$

$Z \rightarrow X, Y \rightarrow A \dots X \rightarrow B$

$A \rightarrow B \rightarrow C$

空状态和电子k状态的变化相同



3.2 本征半导体的导电机构 空穴₄

3.2.1 空穴

- 因为价带有个空状态，所以外加电场下存在电流
- 求解电流密度 J
- 假设用一个电子填充空状态 k ，它对应的电流为

$$k \text{ 状态电子电流} = (-q)v_g(k)$$

- 但满带情况下电流应为零 $J + (-q)v_g(k) = 0$

$$J = (+q)v_g(k)$$

- 等效成一个带正电荷的粒子以 k 状态电子速度运动时产生的电流
- 通常把价带中空着的状态看成是带正电的粒子，称为空穴

3.2 本征半导体的导电机构 空穴₅

3.2.1 空穴

—空穴不仅带有正电荷+q，而且还具有正的有效质量 m_p^*

—空状态和电子k状态的变化相同

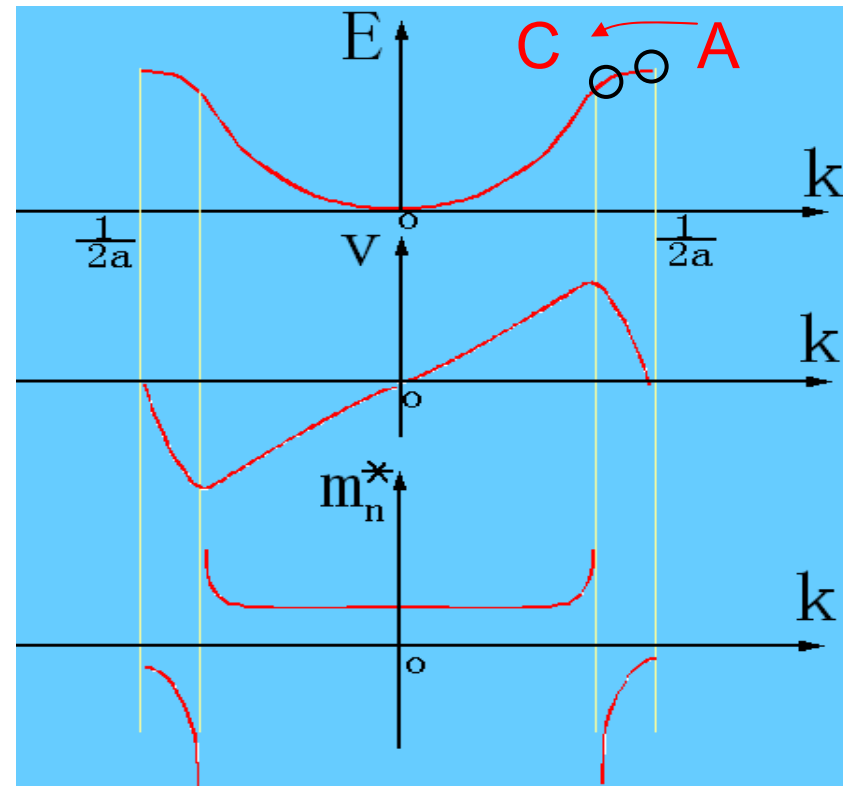
$$\frac{dk}{dt} = \frac{-q|\vec{E}|}{\hbar}$$

—价带顶附近A→C，空穴速度在增加，说明加速度为正值

$$a = \frac{F}{m_n^*} = -\frac{q|\vec{E}|}{m_n^*} = \frac{q|\vec{E}|}{m_p^*} > 0$$

—似乎描述了一个带正电荷+q，具有正有效质量 m_p^* 的粒子的运动

—价带顶附近电子有效质量为负值，因此空穴确实应是正值



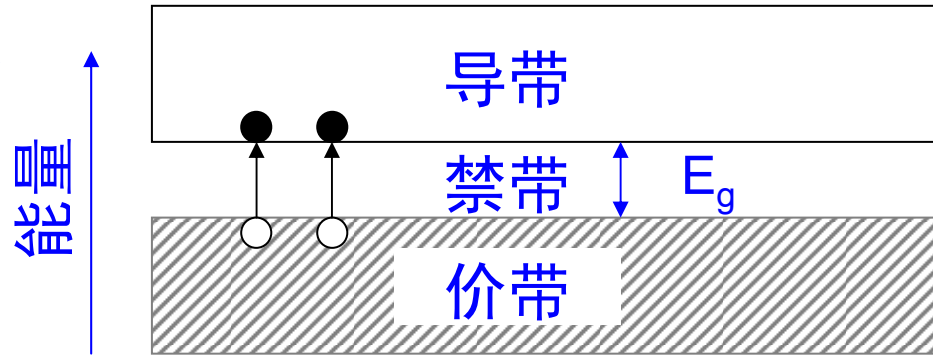
3.2 本征半导体的导电机构 空穴₆

3.2.2 本征半导体的导电机构

一本征半导体在绝对零度时导带是空的，并且由一个能隙 E_g 与充满的价带隔开。

— 当温度升高时，电子由价带被热激发至导带。导带中的电子和留在价带中的等量空穴二者都对电导率有贡献。

— 两种载流子导电机制是半导体与金属的最大差异。金属中只有一种载流子。



第三章 半导体中的电子状态

3.1 半导体中电子的运动 有效质量

3.2 本征半导体的导电机构 空穴

3.3 回旋共振和等能面

3.4 硅和锗的能带结构

3.3 回旋共振和等能面₁

- 不同的半导体材料，其能带结构不同，而且往往是各项异性的，即沿不同波矢 \mathbf{k} 的方向， $E \sim \mathbf{k}$ 关系也不同，往往很复杂
- $E \sim \mathbf{k}$ 关系对研究和理解半导体中的载流子行为至关重要
- 理论上尚存在困难，需要借助实验帮助，得到准确的 $E \sim \mathbf{k}$ 关系
- 这个实验就是回旋共振实验
- $E(\mathbf{k})$ 为某一定值时，对应着许多组不同的 \mathbf{k} (即 k_x, k_y, k_z)，将这些不同的 \mathbf{k} 连接起来构成一个封闭面，在这个面上的能值均相等，这个面就称为等能面

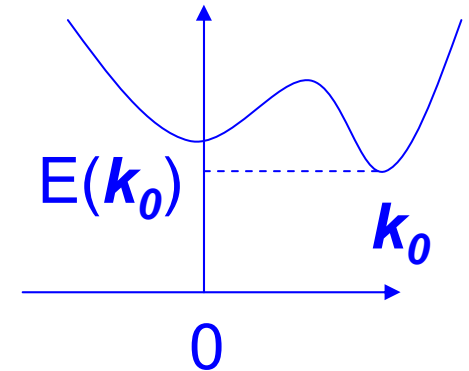
3.3 回旋共振和等能面₂

3.3.1 一般情况下的等能面方程

— 晶体往往是各项异性的，使得沿不同波矢 \mathbf{k} 的方向， $E \sim \mathbf{k}$ 关系也不同

— 不同方向上的电子有效质量也往往不同

— 能带极值也不一定在 $\mathbf{k}=0$ 处



导带底： \mathbf{k}_0 ， $E(\mathbf{k}_0)$ 选择适当坐标轴： k_x, k_y, k_z

定义： m_x^*, m_y^*, m_z^* 为相应方向的导带底电子有效质量

在 \mathbf{k}_0 这个极值附近进行三维泰勒展开

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \left. \frac{\partial E}{\partial \vec{k}} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 E}{\partial \vec{k}^2} \right|_{\vec{k}=\vec{k}_0} \cdot (\vec{k} - \vec{k}_0)^2$$

3.3 回旋共振和等能面₃

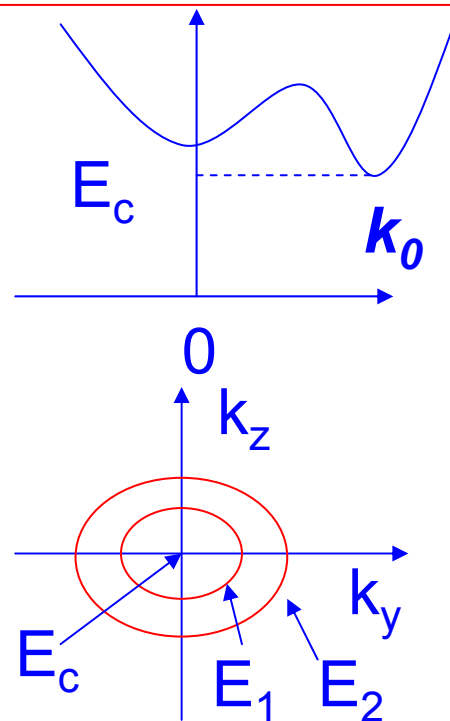
3.3.1 一般情况下的等能面方程

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right]$$

$$m_x^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \right)^{-1} \bigg|_{\vec{k}_0}, m_y^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \right)^{-1} \bigg|_{\vec{k}_0}, m_z^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \right)^{-1} \bigg|_{\vec{k}_0}$$

$$\frac{k_x^2}{2m_x^*(E - E_c)} + \frac{k_y^2}{2m_y^*(E - E_c)} + \frac{k_z^2}{2m_z^*(E - E_c)} = 1$$

一般情况下的等能面是个椭球面



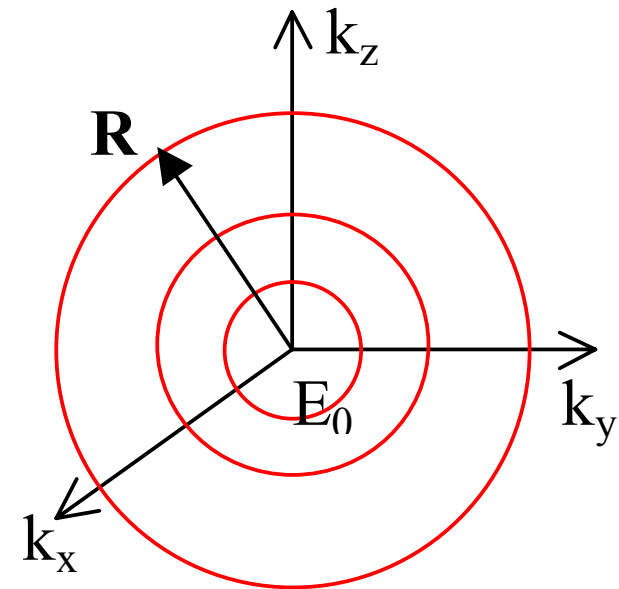
3.3 回旋共振和等能面₄

3.3.1 一般情况下的等能面方程

当E-k关系是各项同性时，等能面是球形的

$$m_x^* = m_y^* = m_z^* = m^*$$

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left\{ 2m^* [E(\vec{k}) - E_c] \right\} = R^2$$



3.3 回旋共振和等能面⁵

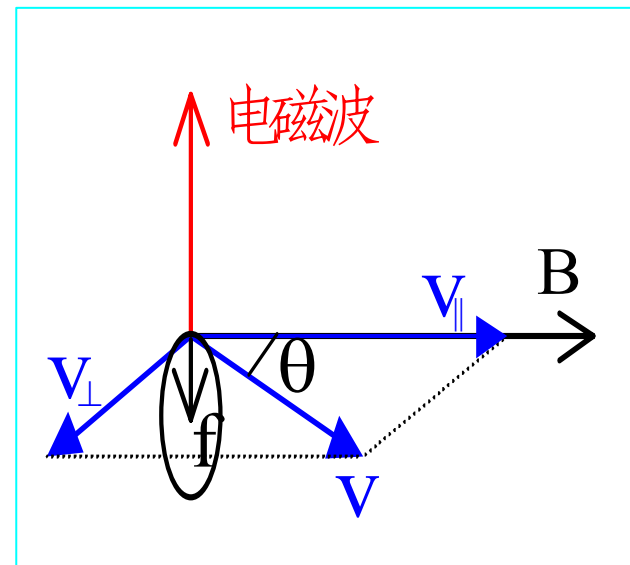
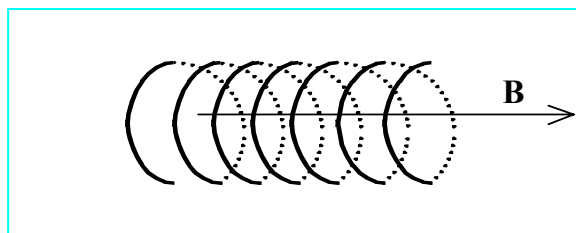
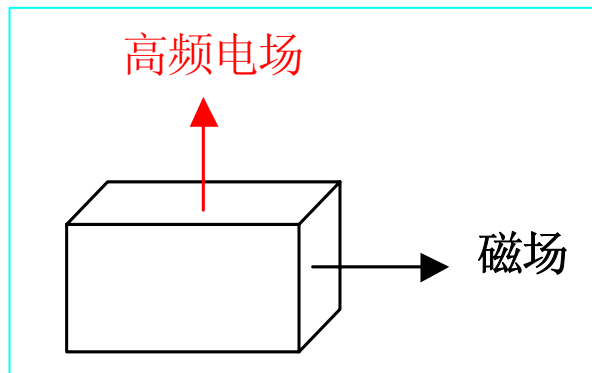
3.3.2 回旋共振

各向同性晶体

$$\vec{F} = -q\vec{v}_g \times \vec{B}$$

$$f = -qv_g B \sin \theta$$

$$|f| = qv_{g\perp} B$$



设圆周运动的半径 r

圆周运动的向心加速度

$$a = \frac{v_{g\perp}^2}{r}$$

圆周运动的角频率

$$\omega = \frac{v_{g\perp}}{r}$$

圆周运动的向心力

$$|f| = m^* a = \frac{m^* v_{g\perp}^2}{r} = m^* v_{g\perp} \omega$$

3.3 回旋共振和等能面₆

3.3.2 回旋共振

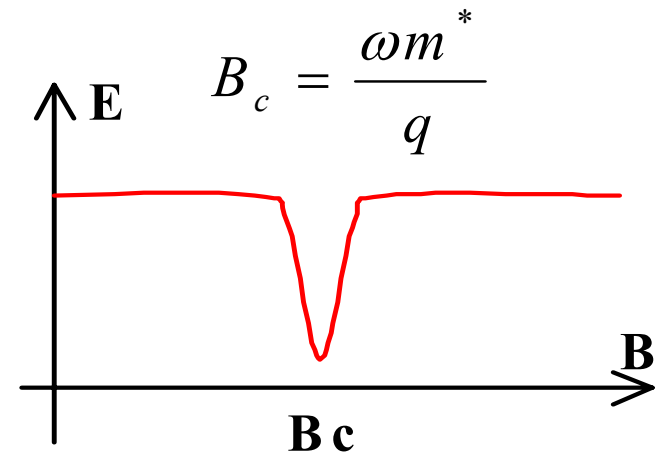
各向同性晶体

$$|f| = m^* a = \frac{m^* v_{g\perp}^2}{r} = m^* v_{g\perp} \omega \quad \omega = \frac{v_{g\perp}}{r}$$

$$|f| = qv_{g\perp} B$$

回旋共振频率

$$\omega = \frac{qB}{m^*}$$



3.3 回旋共振和等能面₇

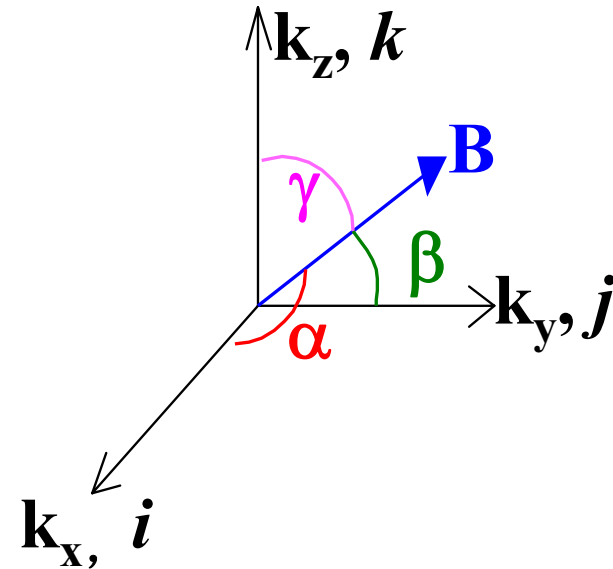
3.3.2 回旋共振

各向异性晶体

$$\vec{B} = B\alpha\vec{i} + B\beta\vec{j} + B\gamma\vec{k}$$

群速

$$\vec{v} = v_x\vec{i} + v_y\vec{j} + v_z\vec{k}$$



$$\vec{F} = -q\vec{v} \times \vec{B} = f_x\vec{i} + f_y\vec{j} + f_z\vec{k}$$

$$= -q[(v_y B\gamma - v_z B\beta)\vec{i} + (v_z B\alpha - v_x B\gamma)\vec{j} + (v_x B\beta - v_y B\alpha)\vec{k}]$$

$$f_x = m_x^* \frac{dv_x}{dt}$$

$$m_x^* \frac{dv_x}{dt} + qB(v_y\gamma - v_z\beta) = 0$$

$$v_x = v_x' \exp(i\omega t)$$

$$i\omega m_x^* v_x' + qB\gamma v_y' - qB\beta v_z' = 0$$

$$f_y = m_y^* \frac{dv_y}{dt}$$

$$m_y^* \frac{dv_y}{dt} + qB(v_z\alpha - v_x\gamma) = 0$$

$$v_y = v_y' \exp(i\omega t)$$

$$i\omega m_y^* v_y' + qB\alpha v_z' - qB\gamma v_x' = 0$$

$$f_z = m_z^* \frac{dv_z}{dt}$$

$$m_z^* \frac{dv_z}{dt} + qB(v_x\beta - v_y\alpha) = 0$$

$$v_z = v_z' \exp(i\omega t)$$

$$i\omega m_z^* v_z' + qB\beta v_x' - qB\alpha v_y' = 0$$

3.3 回旋共振和等能面₈

3.3.2 回旋共振

各向异性晶体

要使 v_x' , v_y' , v_z' 的方程组有异于零的解, 系数行列式须为零

$$\begin{vmatrix} i\omega m_x^* & qB\gamma & -qB\beta \\ -qB\gamma & i\omega m_y^* & qB\alpha \\ qB\beta & -qB\alpha & i\omega m_z^* \end{vmatrix} = 0$$

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

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

第三章 半导体中的电子状态

3.1 半导体中电子的运动 有效质量

3.2 本征半导体的导电机构 空穴

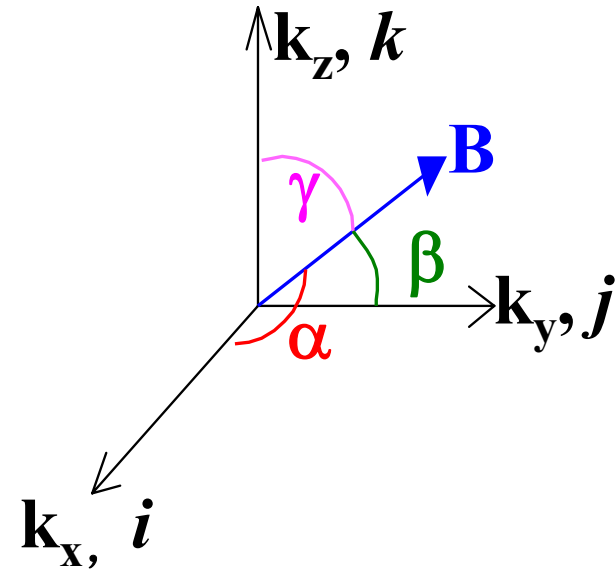
3.3 回旋共振和等能面

3.4 硅和锗的能带结构

3.4 硅和锗的能带结构₁

3.4.1 硅的导带结构

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



—通过改变磁场的方向，回旋共振可以得出一系列有效质量 m^* ，进而可以求出 m_x^*, m_y^*, m_z^*

—一个磁场方向应该只对应一个吸收峰

3.4 硅和锗的能带结构₂

3.4.1 硅的导带结构

N型硅中有效质量的测量

$$s=1,2 \quad m_x^* = m_l^* \quad m_y^* = m_z^* = m_t^*$$

$$s=3,4 \quad m_y^* = m_l^* \quad m_x^* = m_z^* = m_t^*$$

$$s=5,6 \quad m_z^* = m_l^* \quad m_x^* = m_y^* = m_t^*$$

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

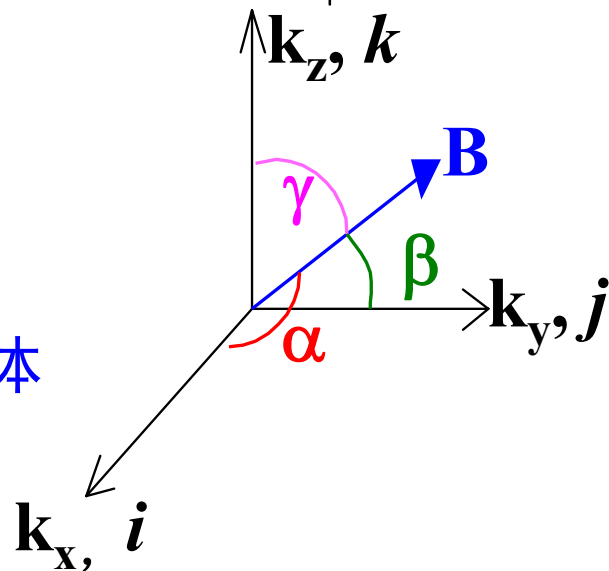
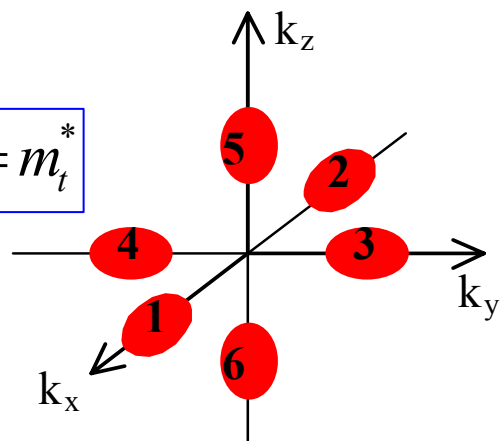
$$\omega_c = \frac{qB}{m^*}$$

磁场B的方向是参照真实晶体空间

面心立方的常用晶胞是个立方体

倒易点阵空间的常用晶胞也是个立方体

磁场B的方向也可参照晶体 k 空间



3.4 硅和锗的能带结构₃

3.4.1 硅的导带结构

N型硅中有效质量的测量

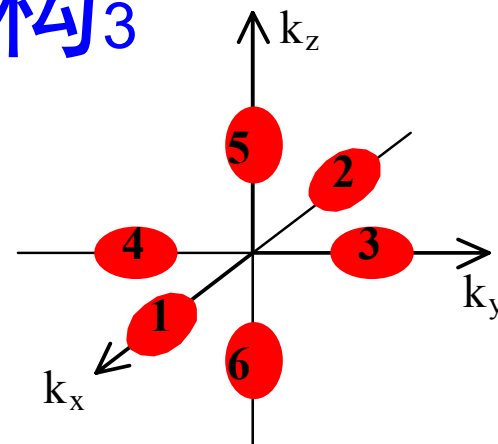
B沿[111]方向, 只能测到一个吸收峰

$$\alpha = \beta = \gamma = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\frac{1}{m^*} = \sqrt{\frac{m_x^* + m_y^* + m_z^*}{3m_x^*m_y^*m_z^*}}$$

$$s = 1 \cdots 6$$

$$\frac{1}{m^*} = \sqrt{\frac{m_l^* + 2m_t^*}{3m_l^*m_t^{*2}}}$$



B沿[110]方向, 能测到二个吸收峰

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}, \gamma = 0$$

$$\frac{1}{m^*} = \sqrt{\frac{m_x^* + m_y^*}{2m_x^*m_y^*m_z^*}}$$

$$s = 1 \cdots 4$$

$$\frac{1}{m^*} = \sqrt{\frac{m_l^* + m_t^*}{2m_l^*m_t^{*2}}}$$

$$s = 5, 6$$

$$\frac{1}{m^*} = \sqrt{\frac{1}{m_l^*m_t^*}}$$

B沿[100]方向, 能测到二个吸收峰

$$\alpha = 1, \beta = \gamma = 0$$

$$\frac{1}{m^*} = \sqrt{\frac{m_x^*}{m_x^*m_y^*m_z^*}}$$

$$s = 1, 2$$

$$m^* = m_t^*$$

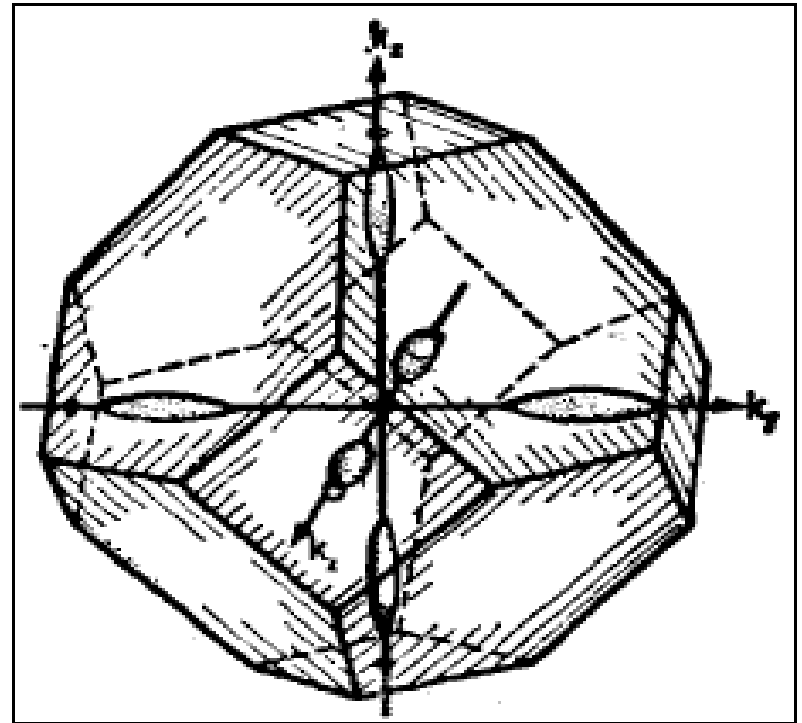
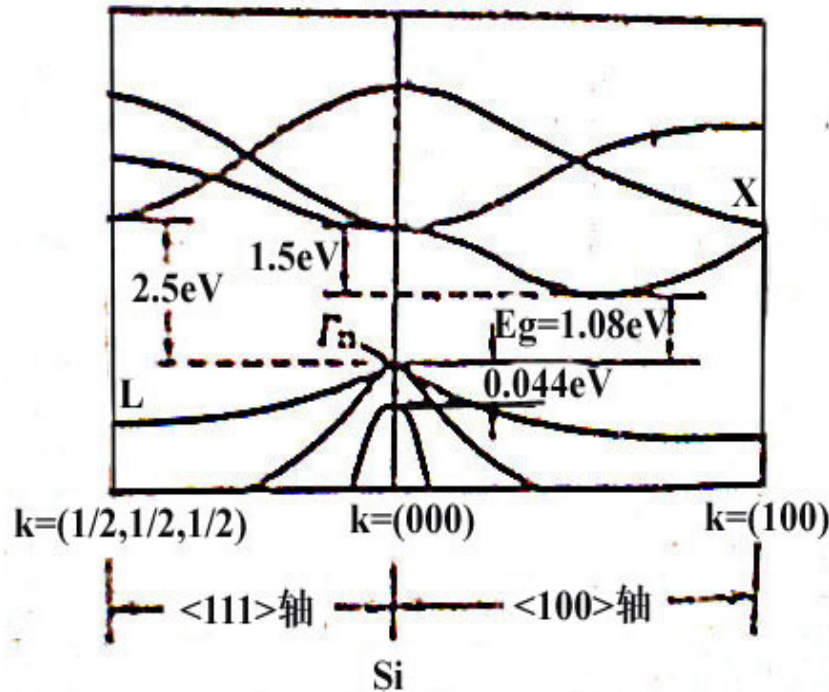
$$s = 3 \cdots 6$$

$$\frac{1}{m^*} = \sqrt{\frac{1}{m_l^*m_t^*}}$$

B沿任意方向, 能测到三个吸收峰

3.4 硅和锗的能带结构₄

3.4.2 硅的能带结构



$$\text{Si: } m_l^* = 0.98m_0, \quad m_t^* = 0.19m_0$$

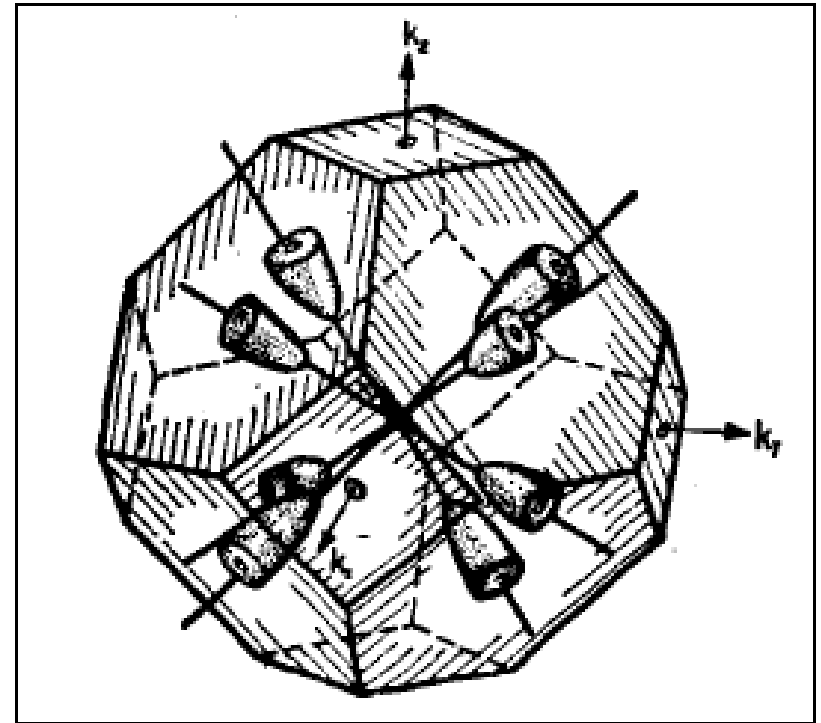
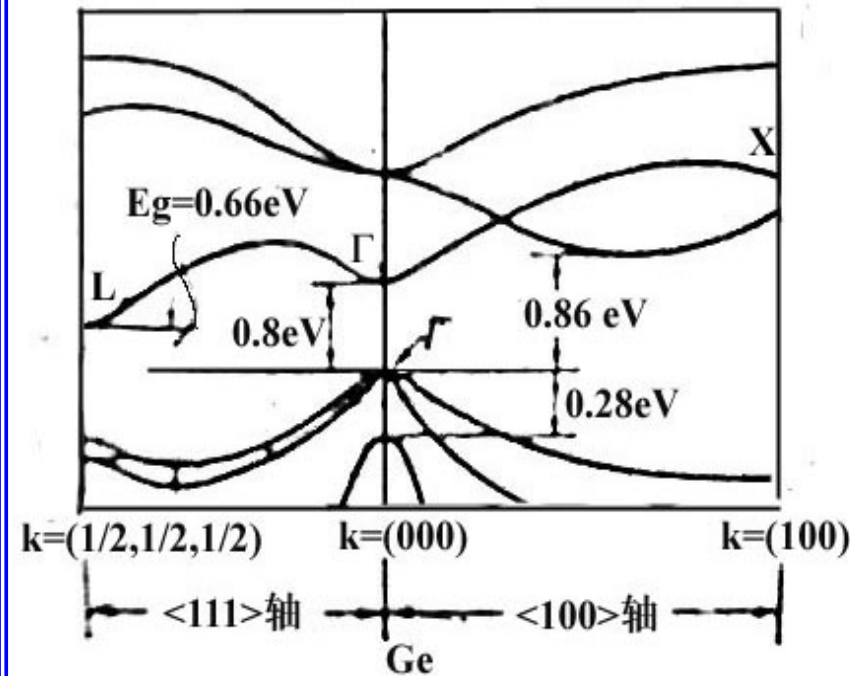
$$E_{1,2}(\vec{k}) = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[Ak^2 \pm \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)} \right]$$

$$E_3(\vec{k}) = E_v - \Delta - \frac{\hbar^2}{2m_0} Ak^2$$

$$\text{Si: } m_{hh}^* = 0.53m_0, \quad m_{lh}^* = 0.16m_0, \quad m_{3h}^* = 0.25m_0; \Delta = 0.04\text{eV}$$

3.4 硅和锗的能带结构₅

3.4.3 锗的能带结构



$$\text{Ge: } m_l^* = 1.64m_0, \quad m_t^* = 0.082m_0$$

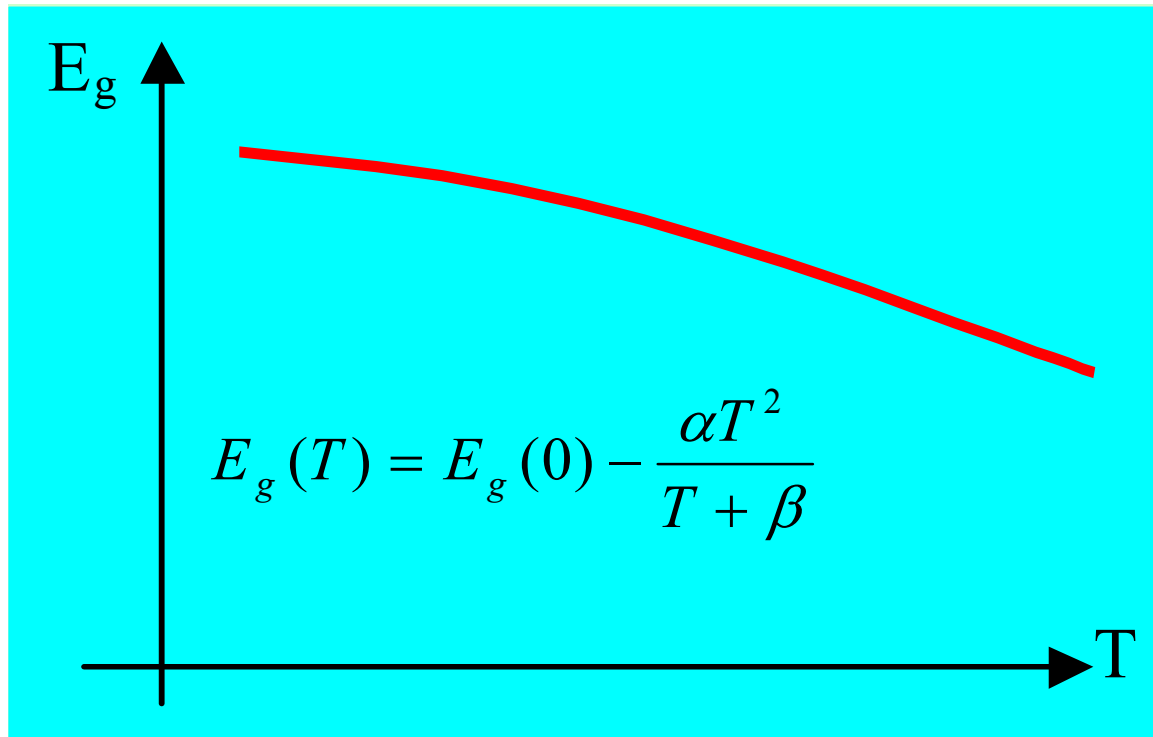
$$E_{1,2}(\vec{k}) = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[Ak^2 \pm \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)} \right]$$

$$E_3(\vec{k}) = E_v - \Delta - \frac{\hbar^2}{2m_0} Ak^2$$

$$\text{Ge: } m_{hh}^* = 0.36m_0, \quad m_{lh}^* = 0.044m_0, \quad m_{3h}^* = 0.077m_0; \quad \Delta = 0.29\text{eV}$$

3.4 硅和锗的能带结构₆

3.4.4 能带结构与温度的关系



$E_g(T = 0K)$

Si 1.170eV

Ge 0.744eV

$E_g(T = 300K)$

Si 1.12eV

Ge 0.67eV

α

β

Si 4.73E - 4 eV/K

636K

Ge 4.77E - 4 eV/K

235K