

# 第一章 半导体器件物理基础

- 晶体管、集成电路的发明历史
- 半导体器件发展的最新进展
- 晶体的能带结构
- 半导体中的能带结构
- 半导体的导电类型
- 热平衡统计
- 半导体中的自由载流子输运

# 半导体中的能带结构

半导体的许多物理性质与半导体中的电子状态有关，晶体中的电子与孤立原子中的电子不同，也和自由电子不同。

孤立原子中的电子，只受原子核和其它电子势场的作用，能量是一系列分裂的能级，

完全自由的电子，不受任何外力的作用，在恒定的势场中运动，能量是连续的。

晶体中的电子，在周期性势场中运动，它们的能量谱值是一系列由密集的能级组成的能带。能带与能带之间的能量间隙称为禁带。

能带理论仍然是说明半导体现象的基础。

# 半导体中的能带结构

## 回顾氢原子模型（单电子的原子模型）

氢原子中电子的势能函数为： $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$

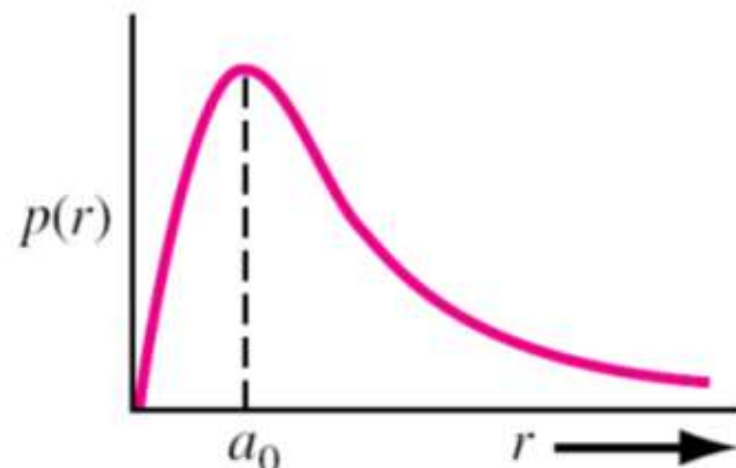
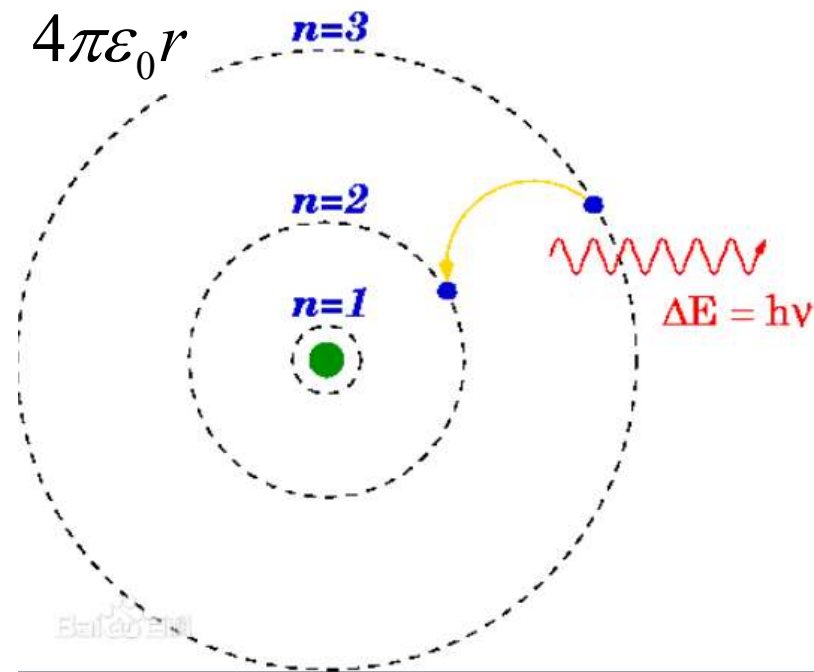
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_n = -\frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

$$\Psi_{nlm_l}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$$

当 $n=1$ 、 $l=0$ 、 $m=0$ 时，波函数为：

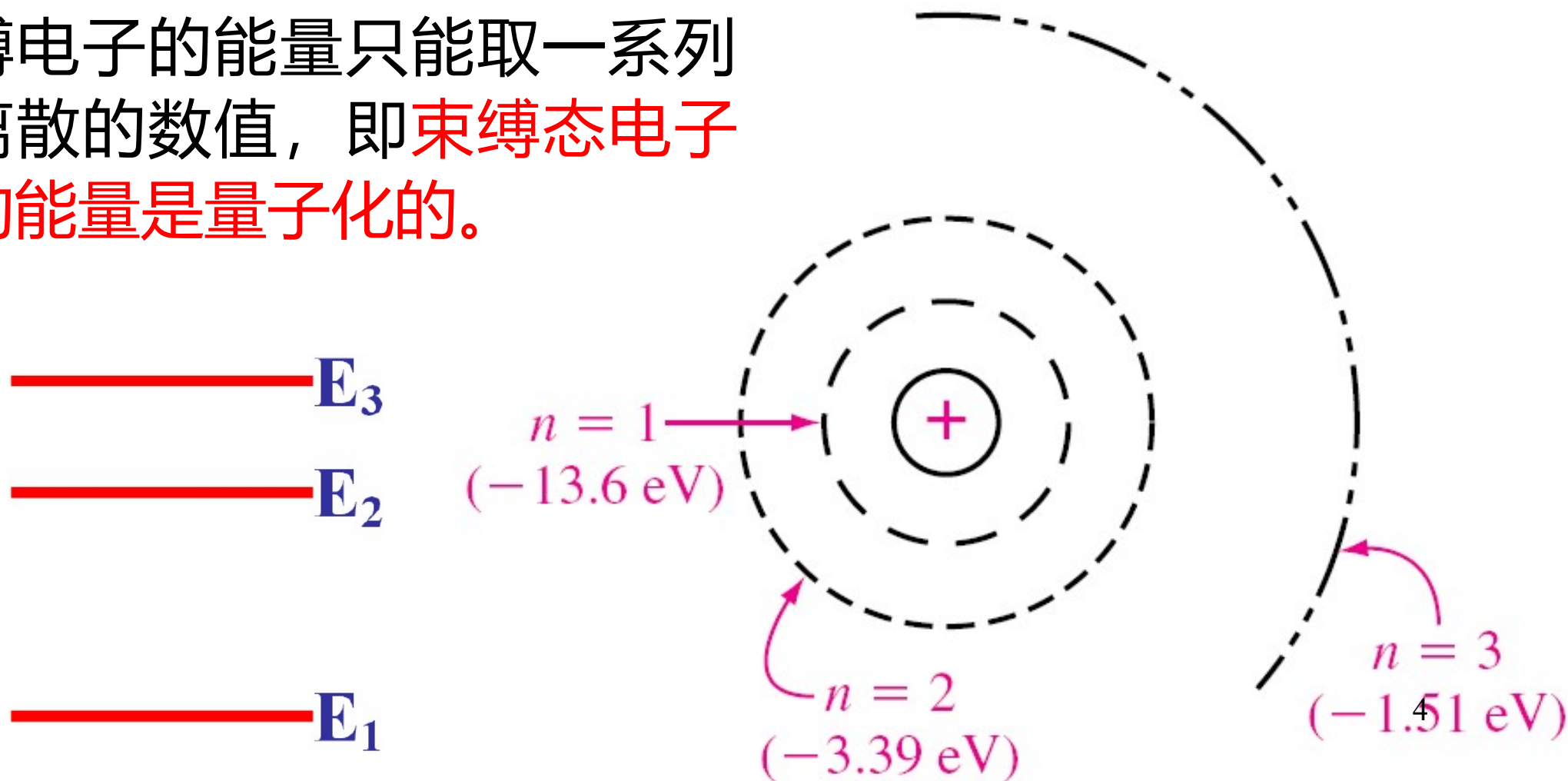
$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{1}{a_0} \right) e^{-r/a_0}$$



# 半导体中的能带结构

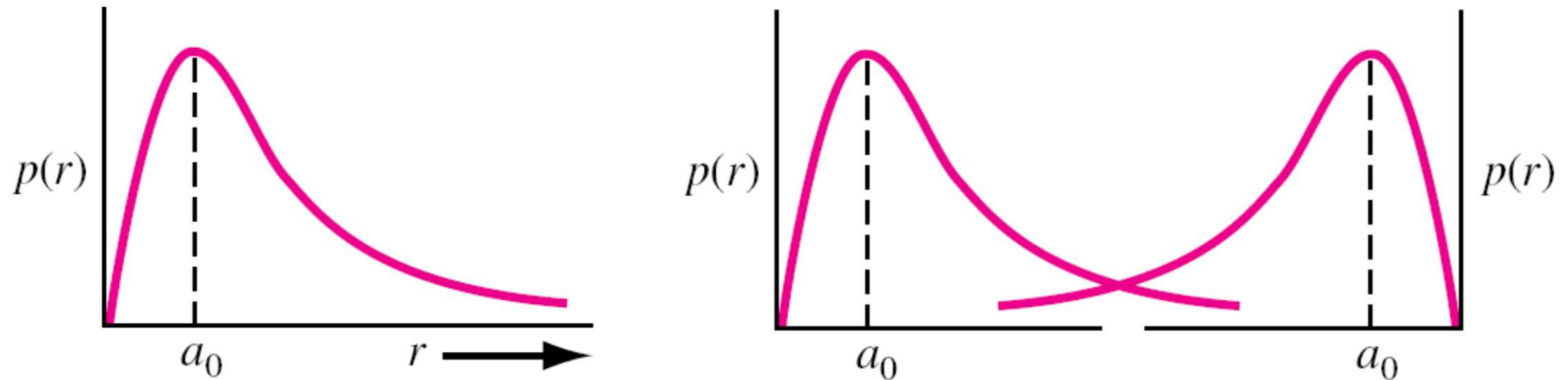
能量为负表示电子被束缚在核的周围

其中 $n$ 为整数，称为主量子数。可见，在氢原子中，束缚电子的能量只能取一系列离散的数值，即束缚态电子的能量是量子化的。



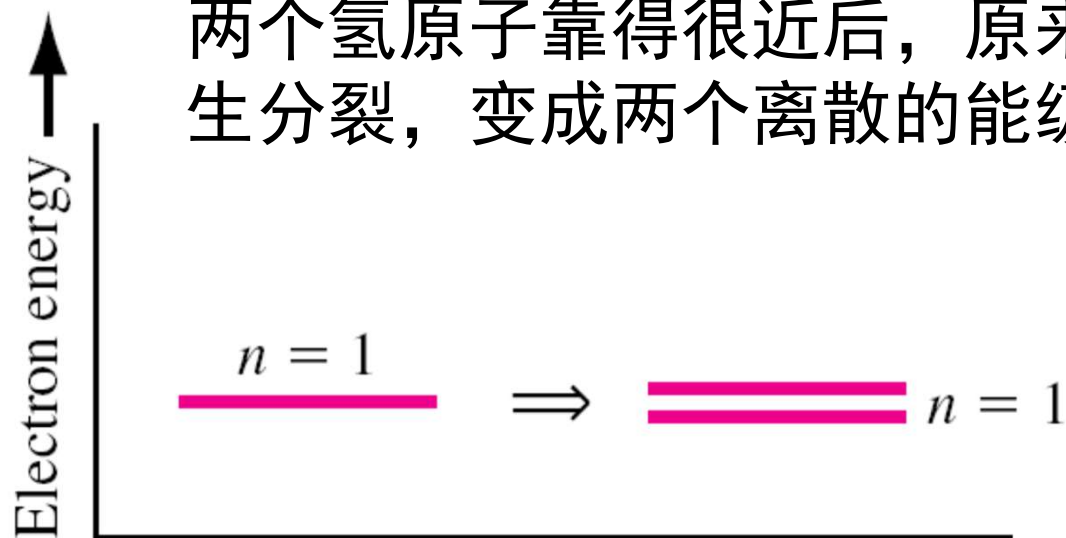
# 半导体中的能带结构

能带的形成：



原子靠近→电子云发生重叠→电子之间存在相互作用→分立的能级发生分裂

两个氢原子靠得很近后，原来相同的两个 $1s$ 能级就会发生分裂，变成两个离散的能级。



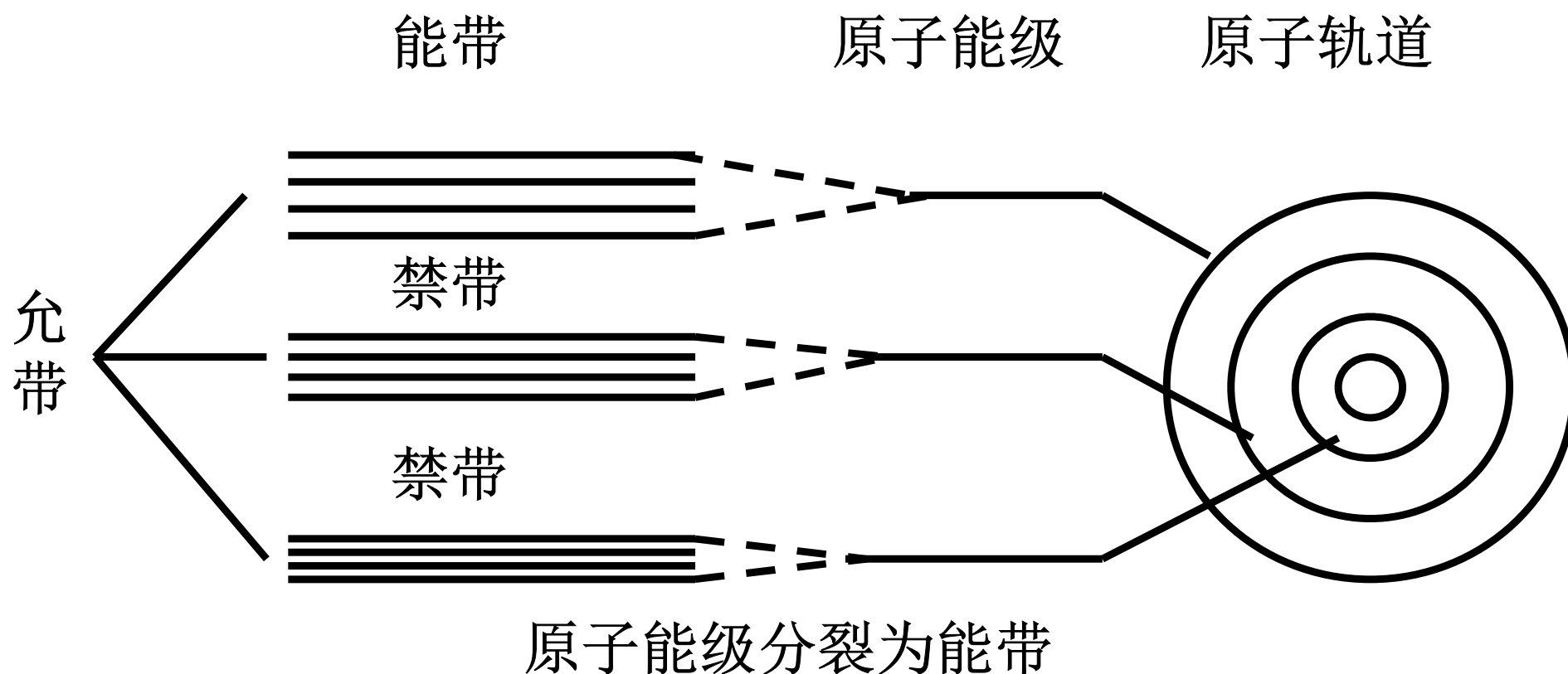
Pauli不相容原理：每一能级最多可容纳两个电子（自旋相反）

# 半导体中的能带结构

由N个原子组成晶体时：

允带-----每一个N度简并的能级都分裂成彼此相距很近的能级，这N个能级组成一个能带。

禁带-----允带之间没有能级的带。

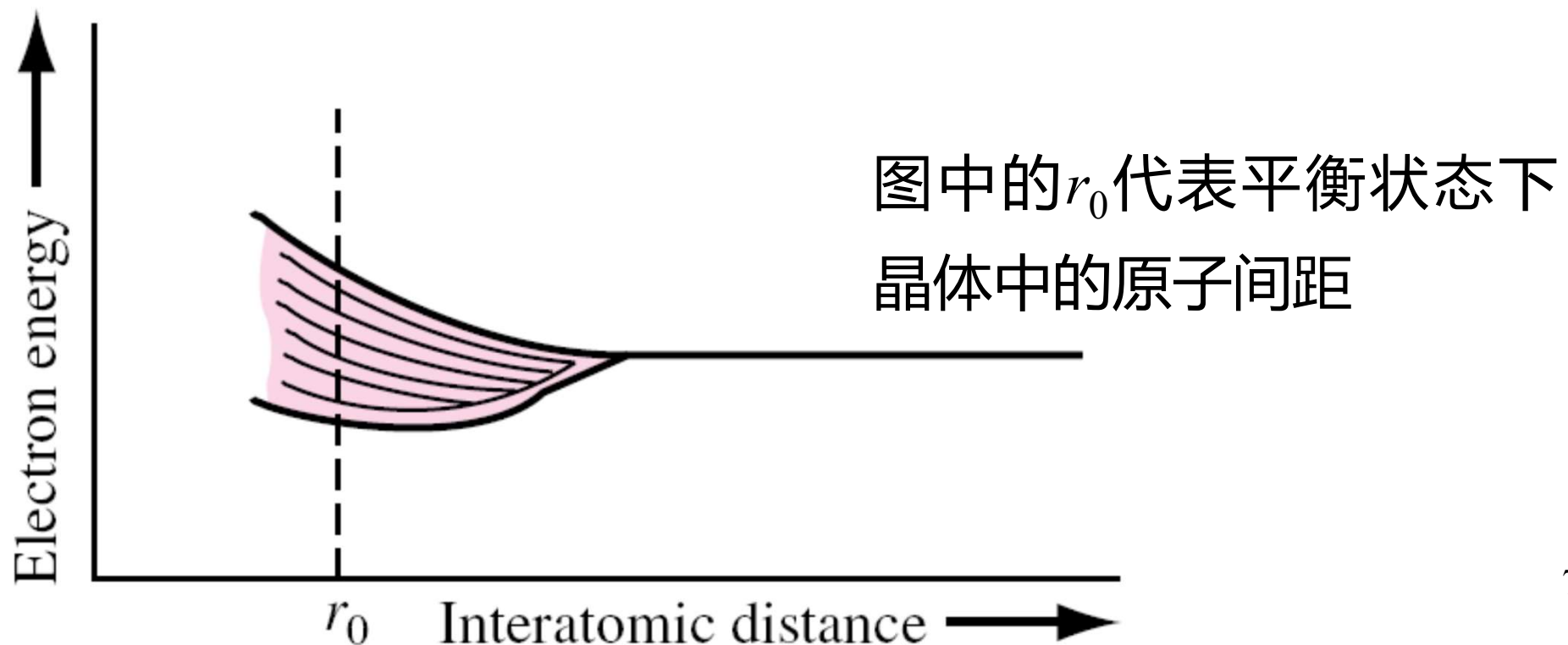


# 半导体中的能带结构

当大量的原子组成晶体材料时，也会出现类似的情况：

原来大量相同的量子化能级将分裂为一系列离散的能级，这些离散的能级形成**能带**（**允带**）。

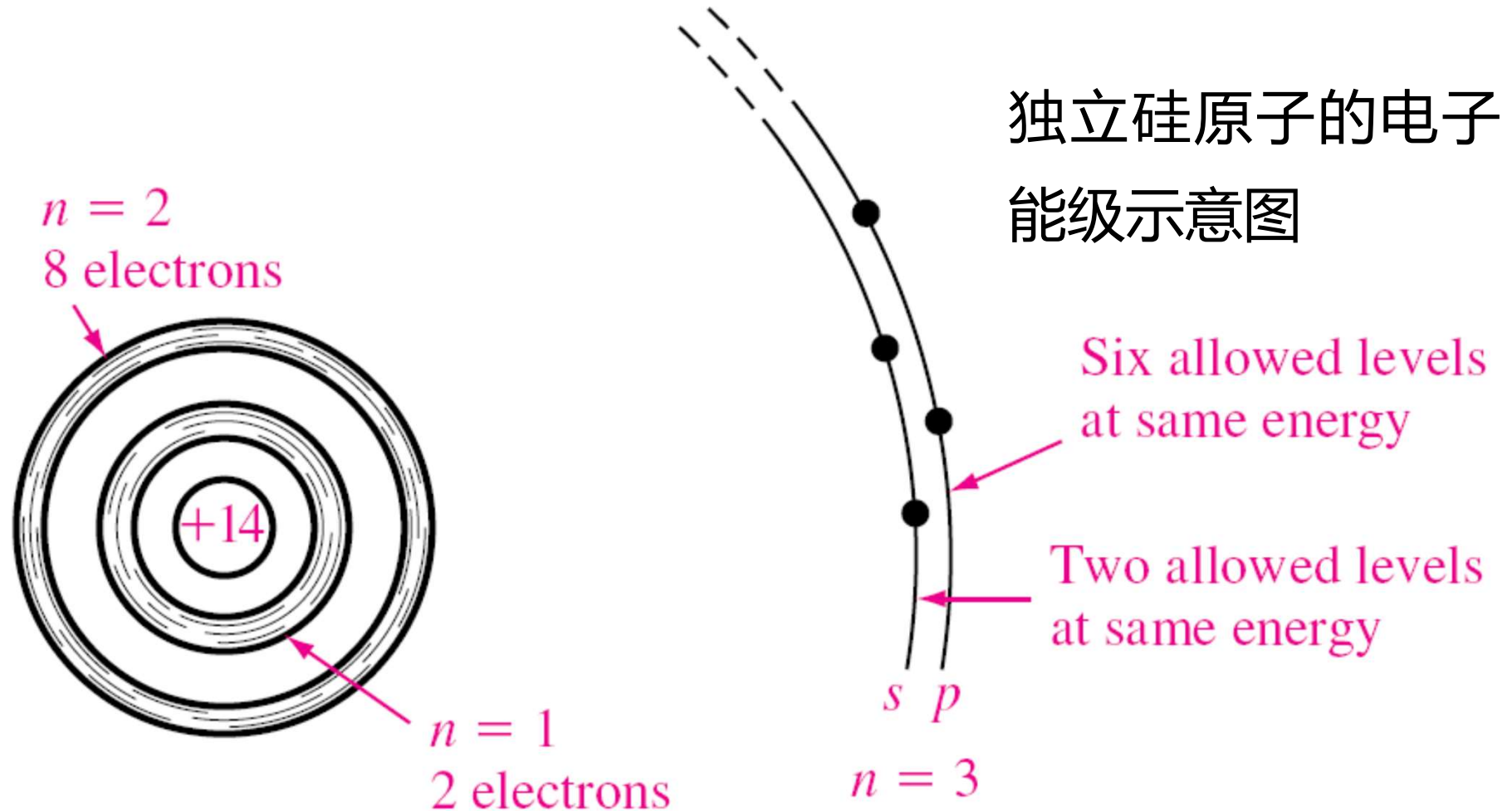
一个能带内各离散能级之间的能量间隔通常非常小，一般为 $10^{-19}\text{eV}$ ，因此可以近似认为能带是**准连续的**。



# 半导体中的能带结构

大量硅原子形成硅晶体材料的情况：

(1) 独立硅原子： 14个电子,  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$





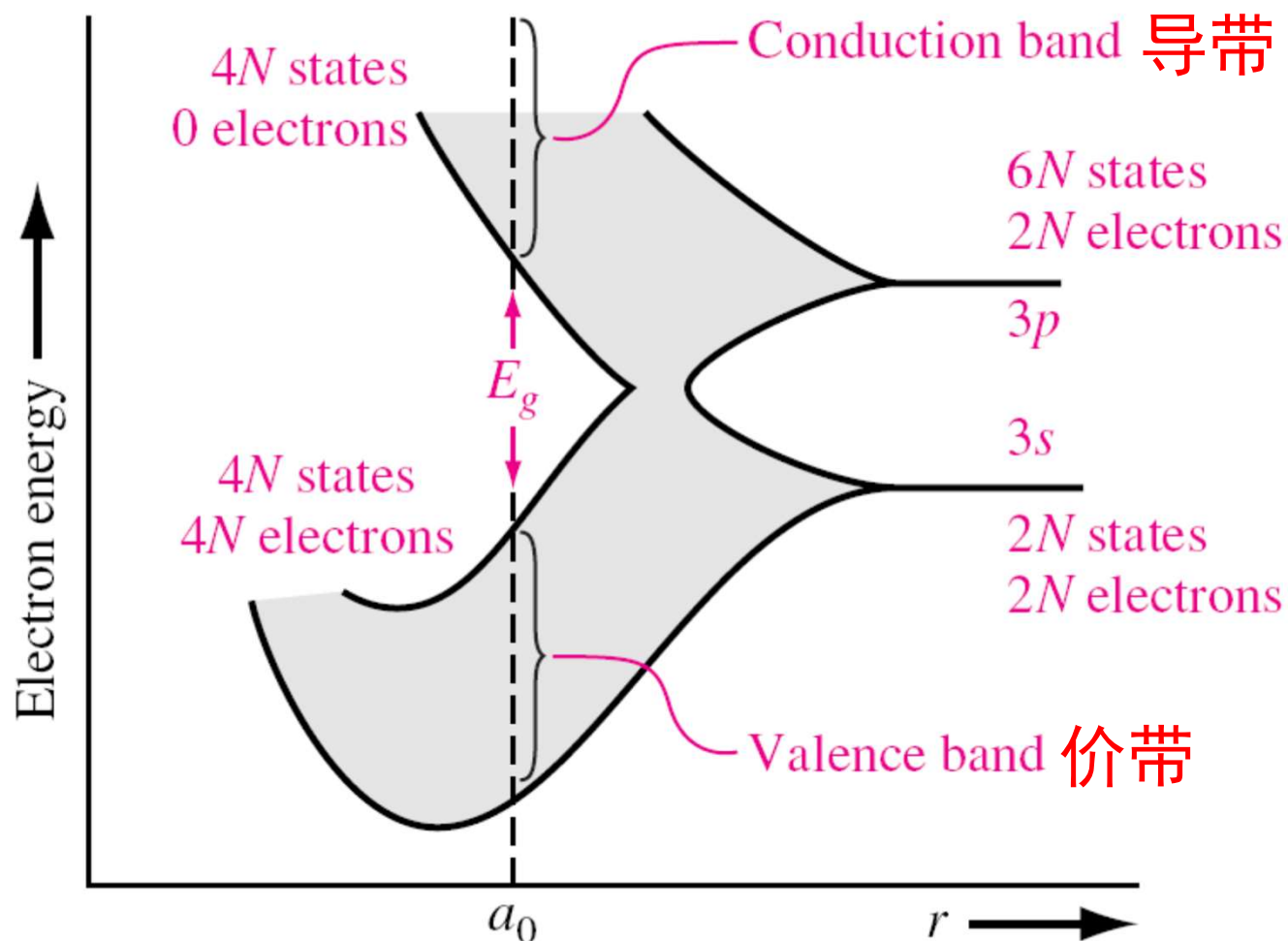
# 半导体中的能带结构

## (2) 大量硅原子形成硅晶体

- 两个较深的电子壳层是满的，而且受到核的紧密束缚，所以只需考虑 $n=3$ 能级上的价电子
- $3s$ 态对应 $n=3$ 和 $l=0$ ，每个原子包含两种量子态。在 $T=0\text{K}$ 时，该状态对应两个电子
- $3p$ 态对应 $n=3$ 和 $l=1$ ，每个原子包含六种量子态。在独立的硅原子中，该状态包含剩余的两个电子。
- 随着原子间距的减小， $3s$ 和 $3p$ 态相互作用并产生交叠，在平衡状态原子间距位置（ $r=a_0$ ）产生能带分裂，每个原子的其中4个量子态处于较低能带，另外4个量子态处于较高能带。 $T=0\text{K}$ 时，电子都处于最低能量状态。

# 半导体中的能带结构

大量硅原子形成硅晶体的电子能级分裂示意图



$T=0\text{K}$ 时，导带没有电子，价带填满电子，二者之间为禁带宽度（带隙） $E_g$

# 半导体中的能带结构

能带结构对于认识半导体的各种行为是非常重要的，理论研究和实验研究的进展,已经对一些常见的半导体的能带结构有了较清楚的认识。

能带结构是指能量 $E$ 和波矢 $k$ 之间的关系，由于三维图像不能表示出 $E$ 和三维波矢 $k$ 的关系，所以通常是在布里渊区中两个最重要对称方向给出 $E$ 与 $k$ 的函数关系。

Si、Ge和GaAs都是面心立方格子，倒格子是体心立方格子，它们的布里渊区是中心在 $k=0$ 对称的14面体---截角八面体，最重要的两个对称方向是 $\langle 100 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ ，最重要的对称点是它们与布里渊区边界的交点及布里渊区中心，分别用符号 $X$ 、 $L$ 和 $\Gamma$ 表示。

# 半导体中的能带结构

有**两种**表示能带结构的方法，简化的能带图和等能面。

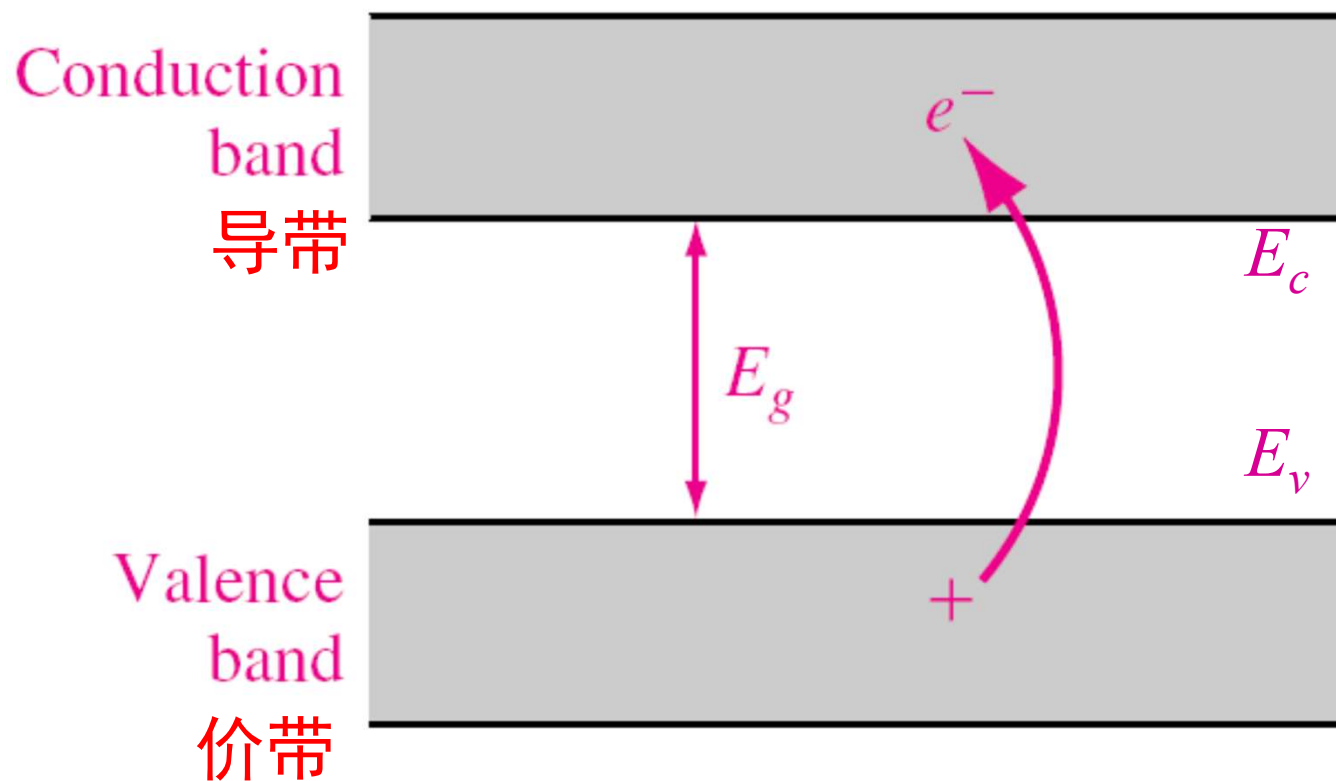
简化能带图以能量为纵坐标，横坐标一般表示空间位置，是经常用的一种能带图。

等能面由 $k$ 空间中能量相等的点构成的曲面，这种曲面的形状可以反映 $E(k)$ 所具有的某些特征。

对于半导体中的电子，通常涉及的只是能带极值附近的等能面。

# 半导体中的能带结构

简化能带图：纵坐标为电子能量，横坐标为空间位置。各个分裂出来的能级都位于导带和价带之中，导带边 $E_c$ 和价带边 $E_v$ 之间的能量差为带隙 $E_g$ 。



温度升高，价带中的电子跃入导带，价带中留下“空位”，产生正负电荷。材料本身仍然保持电中性。

# 半导体中的能带结构

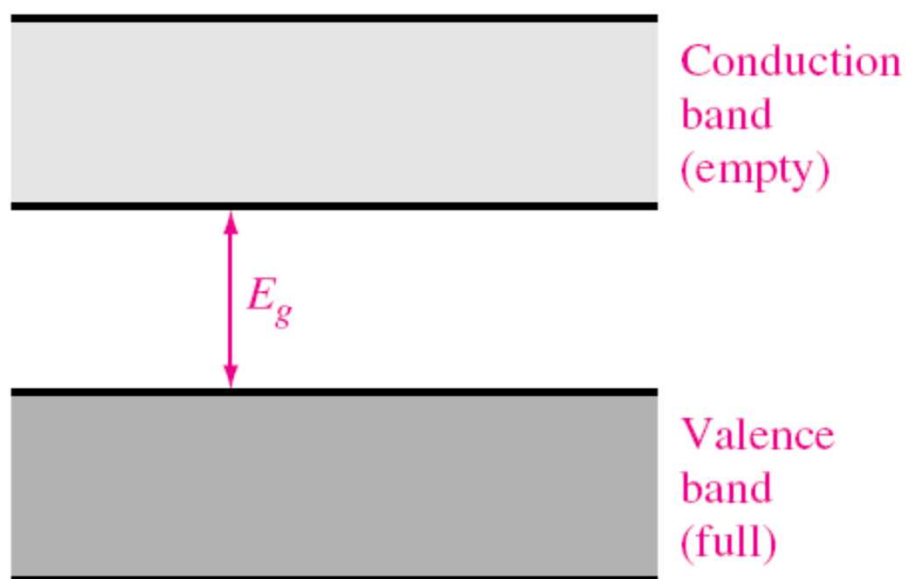
## 金属、绝缘体与半导体

### (1) 绝缘体 (Insulator)

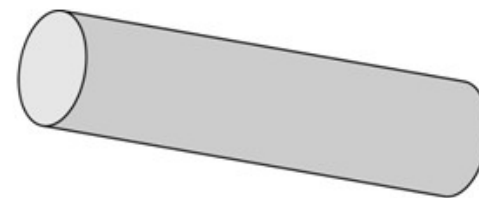


允带全空或全满都不会形成电流

绝缘体能带图：  
价带全满、导带全空，  
禁带宽度  $E_g$  比较宽  
(3.5~6 eV以上)



满带电子不导电。用玻璃试管中的液体进行类比

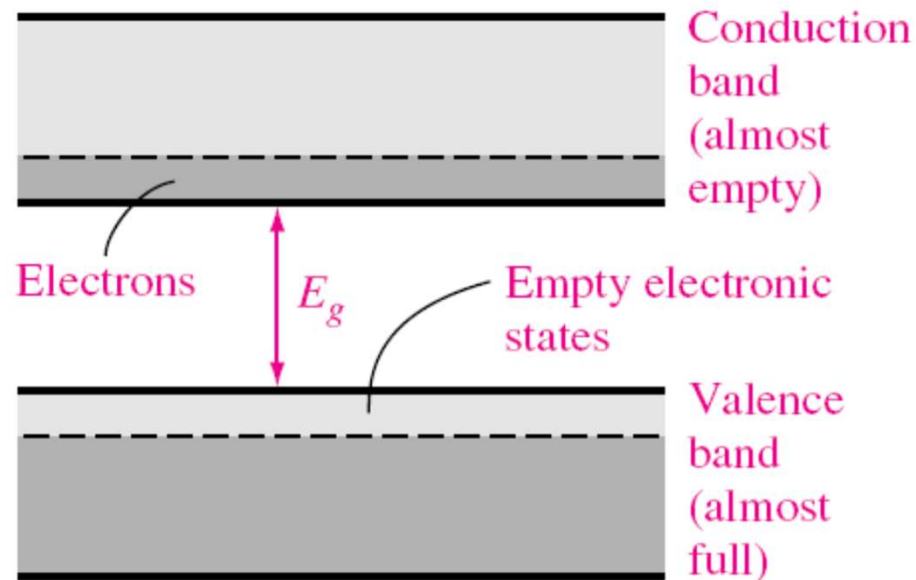


# 半导体中的能带结构

## (2) 半导体 (Semiconductor)



允带几乎全空或几乎全满，在外加电场的作用下，载流子(电子或空穴)在晶体中运动，形成电流



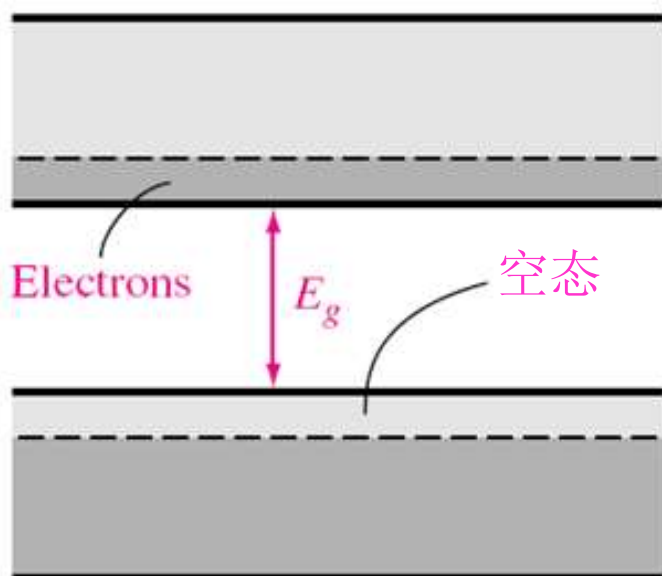
半导体能带图：

导带底有少量电子或价带顶有少量空穴，禁带宽度  $E_g$  在1eV左右，其电阻率可在很大范围内改变

# 半导体中的能带结构

## 空穴

当电子被激发到导带时，价带中就留下了空态。如果存在外加电场，电子可在电场的作用下进入这些空态而产生电流。



价带中所有电子： $J_{vb} = \sum_{vb} (-q) v_i$

$$J_{vb} = \sum_{vb} (-q) v_i = \sum_{\text{满带}} (-q) v_i - \sum_{\text{空态}} (-q) v_i$$

$$J_{vb} = 0 - \sum_{\text{空态}} (-q) v_i = \sum_{\text{空态}} q v_i$$

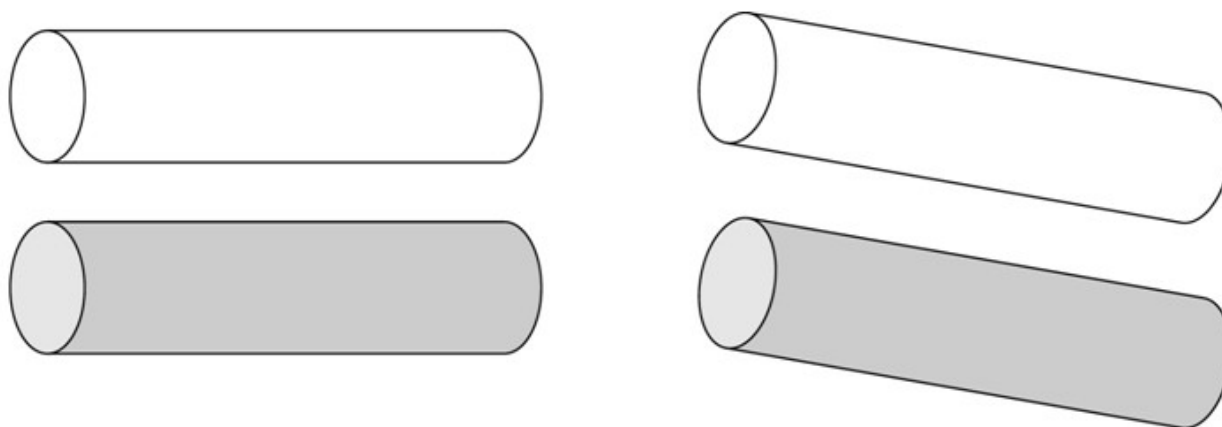
空态看成是带正电的粒子后，便可用空态来表示价带中的电荷运动了。这些粒子被称作**空穴**。

半导体材料中可以用来传导电流的微观粒子称为“**载流子**”，包括电子和空穴

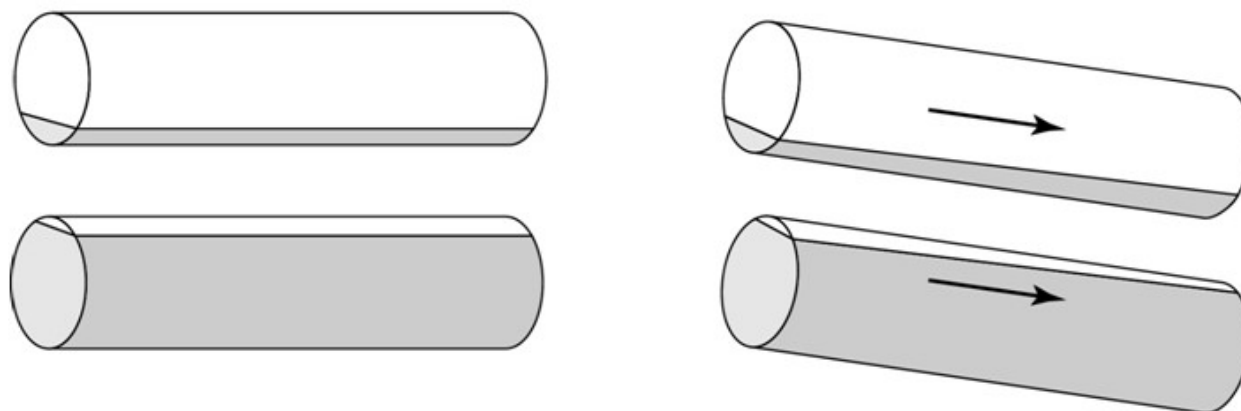


# 半导体中的能带结构

空穴的概念也可以玻璃试管中的液体进行类比



✓ 在充满的和空的试管中没有发生液体的流动



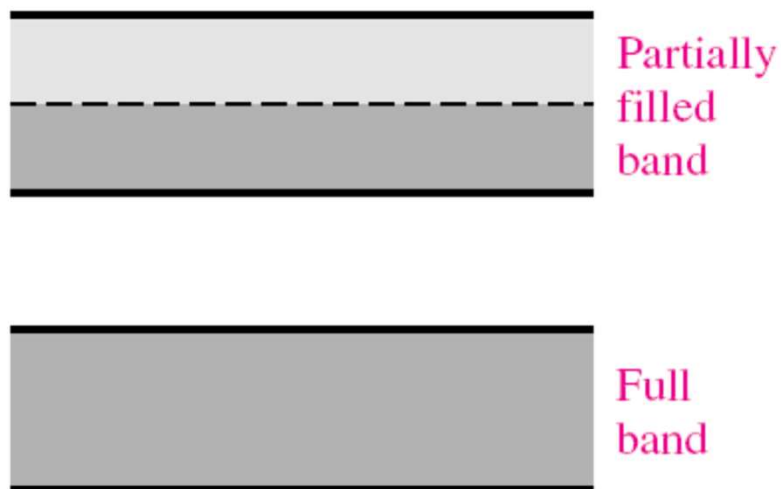
✓ 将部分液体从充满的试管转移到空试管中，液体在两个试管中就都可以流动

# 半导体中的能带结构

## 金属、绝缘体与半导体

### (3) 金属 (Metal)

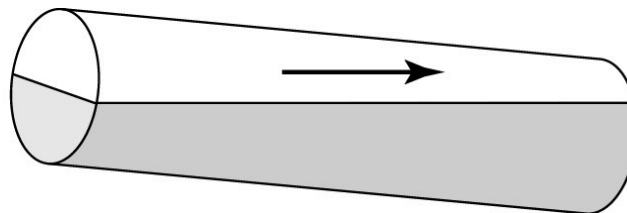
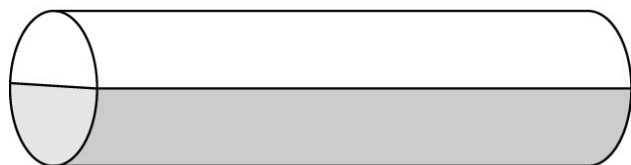
金属材料最大的特点就是其电阻率极低，其能带结构主要分为以下两大类：半满型和交叠型。



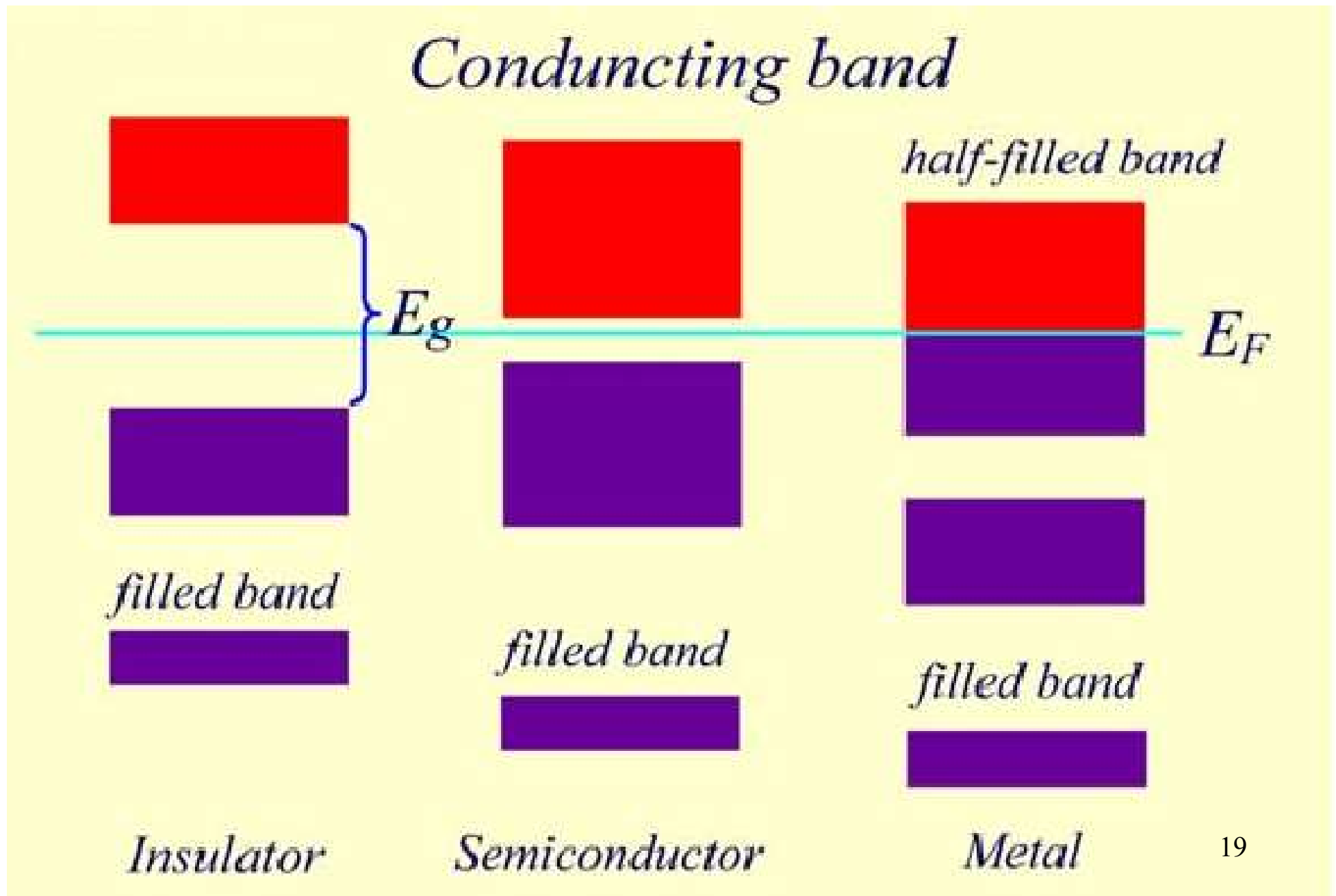
**半满型**：部分填满带中有很多有助于导电的电子



**允带交叠型**：导带和价带交叠，出现很多可供导电的电子和空穴



# 半导体中的能带结构



# 半导体中的能带结构

## 基于等能面的能带图—— $E \sim K$ 关系图

**等能面**由 $k$ 空间中能量相等的点构成的曲面，这种曲面的形状可以反映 $E(k)$ 所具有的某些特征。

对于半导体中的电子，通常涉及的只是能带极值附近的等能面。

设导带极小值附近的波矢为 $k_0$ ，在其附近把 $E(k_0)$ 展开成 $(k-k_0)$ 的幂级数，并只保留到二次项，由于在极值处 $E$ 对 $k$ 的一次微商为零，所以展开式中不存在一次项，选择适当的坐标轴，使交叉的二次微商等于零，则有：

$$E(k) = E(k_0) + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_1^2} \right)_{k=k_{10}} (k_1 - k_{10})^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_2^2} \right)_{k=k_{20}} (k_2 - k_{20})^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k_3^2} \right)_{k=k_{30}} (k_3 - k_{30})^2$$

# 半导体中的能带结构

利用有效质量定义可写为：

$$E(k) = E(k_0) + \frac{\hbar^2}{2m_1^*} (k_1 - k_{10})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_2^*} (k_2 - k_{20})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_3^*} (k_3 - k_{30})^2$$

对于极值在 $k=0$ 有效质量是各向同性的能带，等式可简化为：

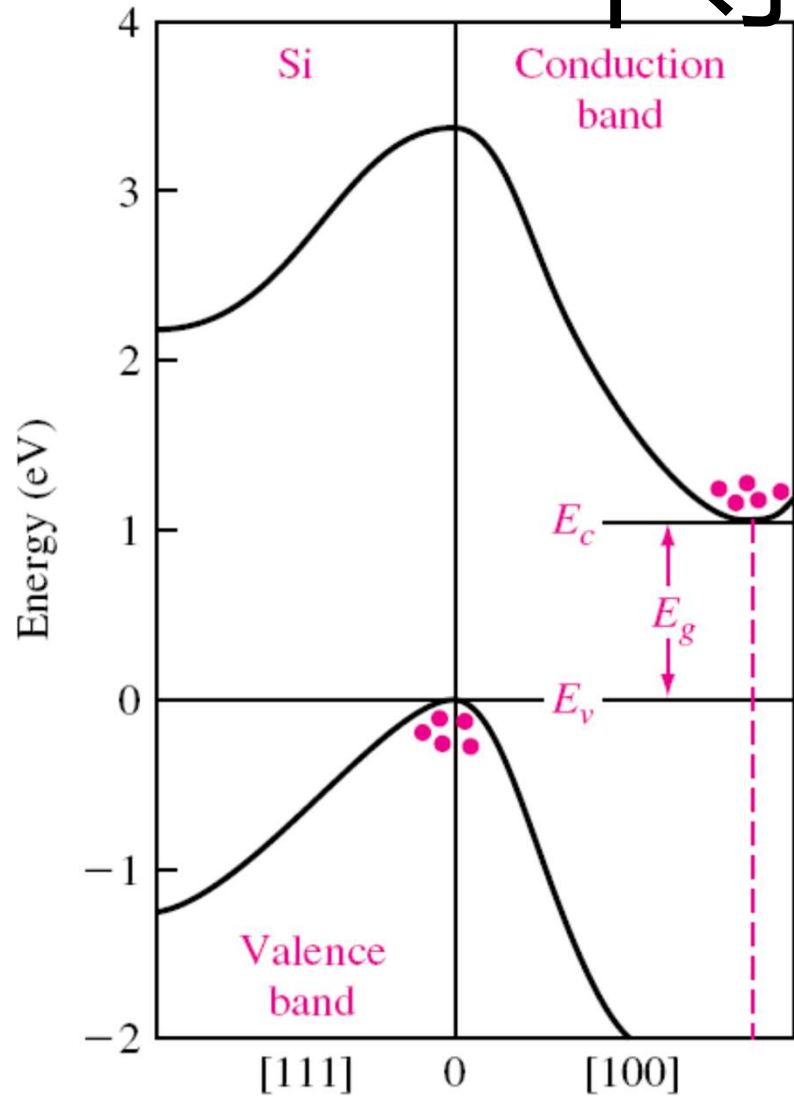
$$E(k) = E(0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

等能面是球面。

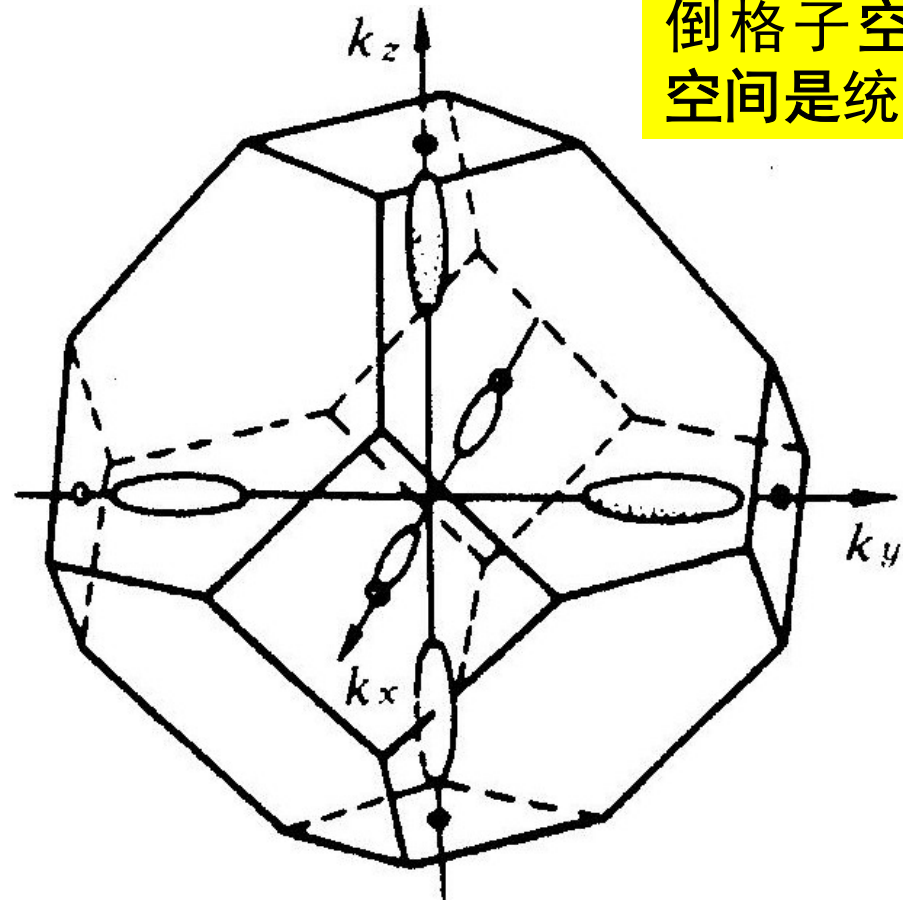
## 一、硅和锗的能带结构

硅的导带在沿 $[100]$ 方向布里渊区内部的一点上有一个极小值，这个点与布里渊区中心的距离约为 $0.8k_x$ ，（ $k_x$ 为 $k$ 在 $[100]$ 方向上布里渊区边界上的值）。由于硅是具有立方对称性的晶体，所以在六个彼此对称的极小值。通常把导带的极小值也称能谷，所以硅的导带有六个能谷<sup>21</sup>。

# 半导体中的能带结构



倒格子空间与k空间是统一的



## 硅的能带图和布里渊区

Si 晶体材料沿着 $[100]$ 和 $[111]$ 方向的 $E \sim k$ 关系示意图。

从图中可见，Si材料导带的最低点位于 $[100]$ 方向，价带的最高点位于 $k=0$ 点。具有这种能带结构的半导体材料通常称为间接带隙半导体材料。此时电子在不同能带之间的跃迁涉及到动量的改变，除了必须满足能量守恒之外，还必须要满足动量守恒。

# 半导体中的能带结构

在[100]方向上极小值附近，电子能量可以表示为：

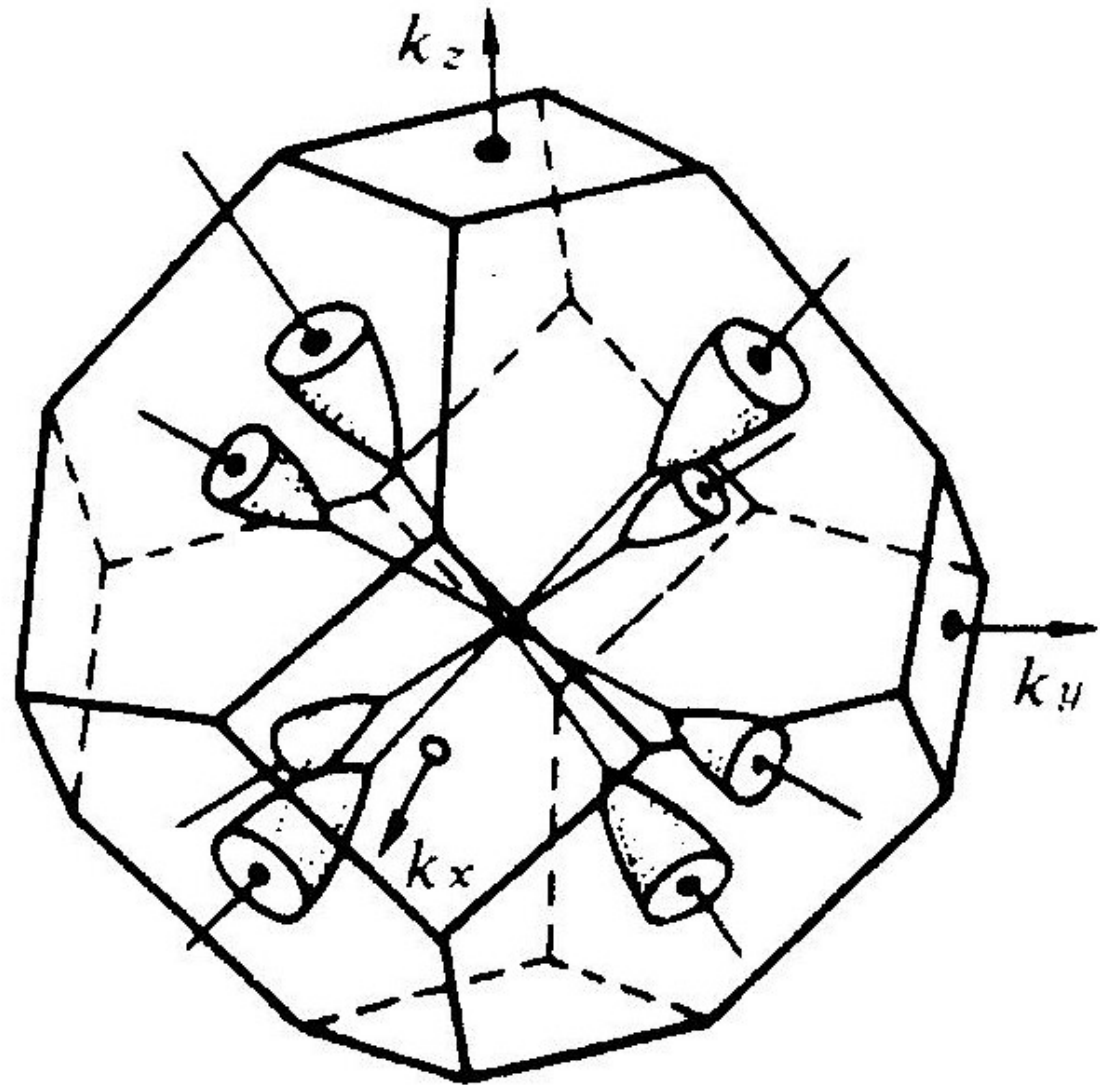
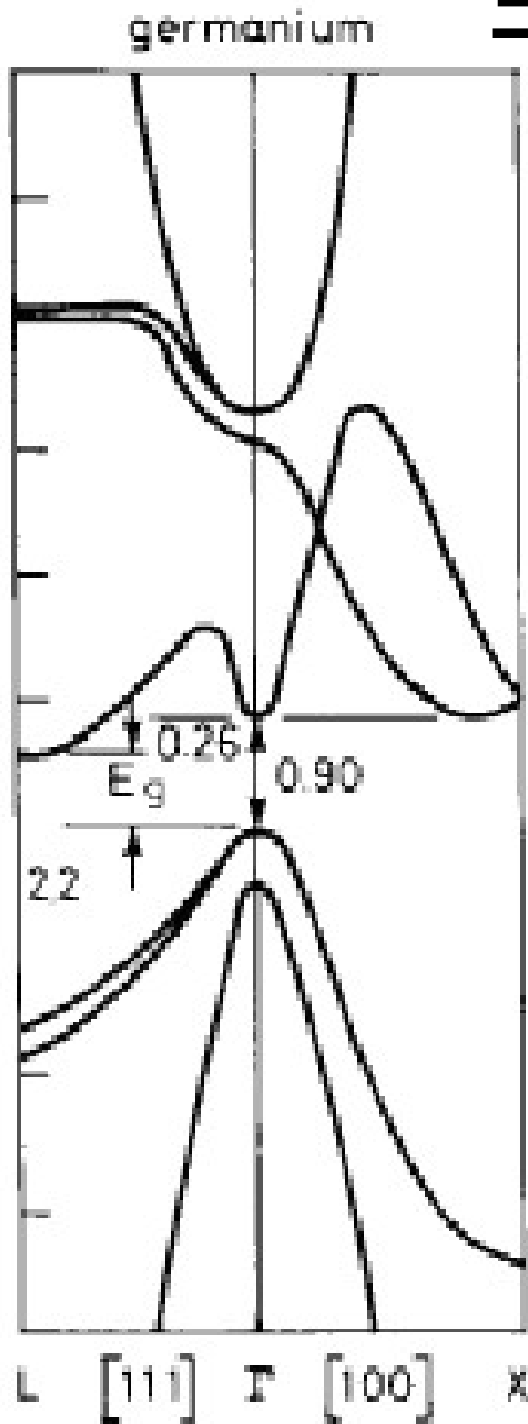
$$E(k) - E_c = \frac{\hbar^2}{2m_l}(k_1 - k_{10})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_t}[(k_2 - k_{20})^2 + (k_3 - k_{30})^2]$$

$E_c$ 是导带底的能量， $m_l$ 为沿[100]方向的有效质量，纵有效质量， $m_t$ 是垂直于[100]方向的有效质量，横有效质量。由于晶体的立方对称性，[100]方向垂直的两个方向上的有效质量应该相等。

$$m_l = 0.97m_0, m_t = 0.19m_0$$

Ge的导带极小值发生在[111]方向的布里渊区边界上，共有8个极小值，但是相对于原点对称的两个极小值，它们的波矢之间相差一个倒格矢，这两个波矢量实际上代表的是同一个状态，因此Ge的导带只有四个彼此对称的极小值，或者说有四个对称的能谷。极小值附近的等能面是旋转椭球面，旋转主轴为[111]。

# 半导体中的能带结构



锗的能带图和布里渊区

$$m_l = 1.58m_0, m_t = 0.082m_0$$



# 半导体中的能带结构

硅和锗的价带中有三个能带，两个带在 $k=0$ 处有相同的即它们是简并的。

上面的带 $E$ 随 $k$ 变化的曲率小，空穴的有效值量大，称为重空穴带，下面的带曲率大，空穴的有效质量小，称为轻空穴带。这两个带的等能面是复杂的扭曲面，通常可以近似地用两个球形等极大值，即它们在 $k=0$ 处有相同的极大值，能面来代替它们。对应的有效值量分别称为重空穴有效质量和轻空穴有效质量。

$$\text{Si: } m_{ph}=0.50m_0, \quad m_{pl}=0.167m_0$$

$$\text{Ge: } m_{ph}=0.30m_0, \quad m_{pl}=0.044m_0$$

# 半导体中的能带结构

第三个带是由于自旋轨道耦合分裂出来的，它的极大值也在 $k=0$ 处，但比上述两个带的极大值低，存在一个能量裂距，这个带的等能面是球面的。

Si和Ge的能带有一个共同的特点，就是导带底和价带顶发生在 $k$ 空间的不同点，具有这种类型能带的半导体称为间接禁带半导体。

砷化镓的导带极小值发生在布里渊区中心，极小值附近的等能面是球面，电子的有效质量是各向同性的，另外在 $[111]$ 方向还有极小值存在，其能量比 $k=0$ 的极小值高 $0.31\text{eV}$ ，在强电场作用下，电子可以有 $k=0$ 能谷转移到 $[111]$ 能谷，产生所谓转移电子效应。

# 半导体中的能带结构

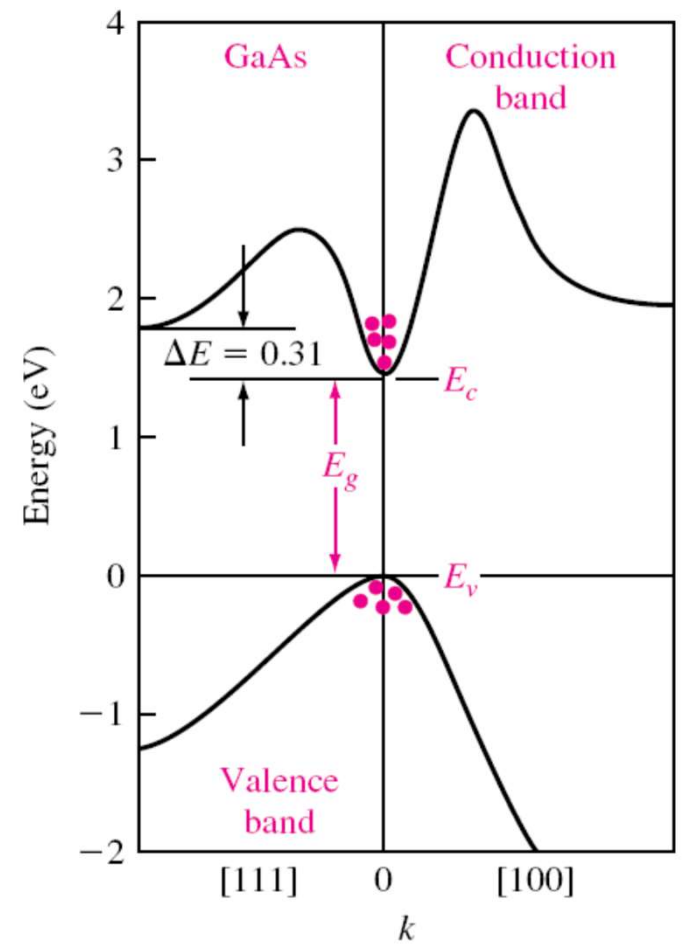
GaAs的价带与Si和Ge的价带是类似的，有一个重空穴带和一个轻空穴带，它们在 $k=0$ 处有相同的极大值。在 $k=0$ 处还有一个极大值较低的第三个带。

电子的有效质量： $0.068m_0$ ，空穴的有效质量：

$$m_{pl}=0.082m_0, \quad m_{ph}=0.45m_0$$

GaAs晶体材料沿着 $[100]$ 和 $[111]$ 方向的 $E \sim k$ 关系示意图。

GaAs材料导带的最低点与价带的最高点都位于 $k=0$ 点，具有这种能带结构的半导体材料通常称为**直接带隙**半导体材料，电子在不同能带之间的跃迁没有动量的改变，这对于半导体材料的光电特性具有重要意义。



# 半导体中的能带结构

注意区分能带不同的表示方法

