

当代杰出青年科学文库

半导体量子器件物理

傅 英 陆 卫 著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书在简要论述半导体材料基本电学和光学性质的基础上,剖析了近年来半导体器件向小型化发展的趋势,结合作者自身的工作,着重讨论器件的量子效应.对传统二极管、三极管等器件在纳米尺度上的特性以及新型量子器件都作了详尽的阐述.在本书的最后一章,提供了关于量子器件的基本计算方法和程序.

本书可作为应用物理、电子学、材料专业领域内高年级本科生、研究生的教材,以及相关领域科研人员的参考读物.

图书在版编目(CIP)数据

半导体量子器件物理/傅英,陆卫著. —北京:科学出版社,2005
(当代杰出青年科学文库)

ISBN 7-03-013628-4

I. 半… II. ①傅… ②陆… III. 半导体器件 IV. TN389

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 064516 号

责任编辑:鄢德平 贾瑞娜/责任校对:曾 茹

责任印制:钱玉芬/封面设计:王 浩

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2005 年 1 月第 一 版 开本: B5 (720×1000)

2005 年 1 月第一次印刷 印张: 21 3/4

印数: 1—3 000 字数: 413 000

定价: 50.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈新欣〉)

序

量子力学无疑是 20 世纪最伟大的科学成就之一。它的诞生使人类对自然界，尤其对微观世界的认识有了质的飞跃，对许多造福人类的高新技术的发展起了奠基、催生和巨大的推动作用。当今，高速、高集成半导体器件已经到了量子尺度。目前国际上对器件物理大多也到了量子力学这个层面。新一代完全基于量子过程的器件呼之欲出，《半导体量子器件物理》这本书就是从一个侧面反映了上述这个概念和潮流。

该书在紧扣半导体量子器件这一主题的同时，由浅入深地介绍了一些固体物理、光学性质、电学性质等基本概念。与此同时，作者巧妙地穿插了一些有关量子器件的崭新研究成果，如体系维度的降低对半导体性能的影响及其潜在的应用前景等等。在论述一些具体的半导体器件时，作者也展示了他们较高的理论功底以及对实验的认知分析能力。本书的科学论述严谨、物理图像清晰。特别值得称道的是，该书包含了作者在这一领域一些重要方面所做的贡献，如发展了针对半导体纳米结构的多种理论计算方法，建立了超大原子团簇的紧束缚近似理论方法，并在量子器件上得到了成功的应用。

该书的两位作者都是 20 世纪 80 年代初，在科学的春天里大学毕业并在国内或国外获得博士学位的。他们是那个时代的佼佼者和当今科研群体的杰出带头人，他们的一些研究结果获得了国内外同行的赞誉并荣获了不少奖项。现在，他们联手编写了这本书，反映他们的研究水平到了一个新的系统性的高度。

我衷心地祝贺本书的出版，作为一本研究生和科研人员的出色参考书，它的问世必将对我国量子器件物理的发展起着积极的推动作用。

洪学砧

2004 年 5 月

前 言

本书作者之一傅英撰写的英文著作“Physical Models of Semiconductor Quantum Devices”一书，1999年由美国的 Kluwer Academic Publishers 出版社出版。该书系统地讲述了共振隧道二极管、高电子迁移率管、纳米尺度场效应管等。据出版商反馈信息，该书在国际上十分畅销，在国内也得到了许多读者的欢迎，被一些高校作为研究生的学位课程进行讲授。英文书的热销，近四年来器件物理的巨大进展，以及国内半导体器件物理的蓬勃发展，都激发了我们撰写本书的热情。本书可以说是英文书的发展和补充。在本书中，力图把我们在半导体量子器件方面的研究成果及国际上相关的最新动态，详尽地介绍给广大的读者。

我们分别是该领域的理论和实验工作者，在各自的领域中都做了一些工作。我们两人有着十多年良好合作的经历，共同发表了数十篇论文。本书是我们的又一次合作成果。本书的基本特点是：(1) 解释实验结果；(2) 提出实际半导体材料与器件的理论模型；(3) 设计并优化半导体材料与器件。因此，和其他著作不同的是：本书从最基本的量子固体理论入手，从常规半导体器件的工作原理开始，不仅论述了目前半导体工业所依赖的异质结构的物理特性以及各种量子半导体器件的工作原理，而且将两者紧密联系起来，在一个完善的基础理论框架内讨论量子半导体器件的实验结果，并在此基础上提出量子半导体器件的设计与优化。在分析半导体材料以及器件的工作原理时，给出了重要半导体材料的各种物理参数以及器件工作参量。

徐文兰研究员为本书的写作提供了许多帮助，提出了许多修改意见。沈学础院士为本书作序。作者在这里一并向他们表示深深的谢意。

作者还恳切希望读者能对本书提出宝贵的意见和建议。

作 者

目 录

序

前言

第一章 绪论	1
§ 1.1 历史和动态	1
§ 1.2 内容安排和说明	3
参考文献	6
第二章 半导体材料	6
§ 2.1 原子和固体	10
§ 2.2 固体材料的晶格特性	14
§ 2.3 半导体固体中的电子	14
§ 2.4 sp^3s^* 紧束缚近似法	18
§ 2.5 合金半导体材料的能带结构	19
§ 2.5.1 导带	20
§ 2.5.2 价带	23
§ 2.5.3 有效质量	24
§ 2.5.4 非抛物线形能带	25
§ 2.6 异质结构材料	26
§ 2.7 包络函数	28
§ 2.8 有效质量近似	32
§ 2.9 电子态密度和材料维度	35
§ 2.10 晶体材料生长	35
§ 2.10.1 体材料生长	36
§ 2.10.2 低维结构材料生长	38
§ 2.10.3 热扩散和离子注入技术	42
§ 2.10.4 材料芯片技术	48
参考文献	51
第三章 半导体的电学性质	51
§ 3.1 加速定理	54
§ 3.2 杂质和杂质态	57
§ 3.3 掺杂半导体的费米能级	59
§ 3.4 载流子的散射	59

§ 3.4.1 半经典的处理方法	60
§ 3.4.2 微扰理论	61
§ 3.4.3 声子散射	65
§ 3.4.4 载流子-载流子相互作用	66
§ 3.4.5 杂质散射	67
§ 3.5 载流子迁移率和 p 型 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 合金	68
§ 3.5.1 输运方程	71
§ 3.5.2 散射概率	73
§ 3.5.3 漂移迁移率	75
§ 3.5.4 霍尔系数	78
§ 3.5.5 扩散	79
§ 3.5.6 热电子和漂移速度	80
§ 3.5.7 瞬变输运和速度过冲	81
参考文献	83
第四章 半导体的光学特性	83
§ 4.1 电磁波	86
§ 4.2 电磁场中的电子	91
§ 4.3 光吸收	91
§ 4.3.1 光跃迁的一般考虑	93
§ 4.3.2 离散子能级之间的光跃迁	98
§ 4.3.3 子带间的光跃迁	102
§ 4.4 激子	102
§ 4.4.1 激子态的有效质量近似	106
§ 4.4.2 激子的形成和复合	109
§ 4.5 辐射复合	112
§ 4.6 无辐射效应	114
参考文献	115
第五章 二极管	115
§ 5.1 常规电子器件参数以及基本方程	116
§ 5.2 pn 结二极管	117
§ 5.2.1 空间电荷区和结电容	118
§ 5.2.2 少子注入和二极管的理想特性	121
§ 5.3 半经典近似和量子图像	123
§ 5.4 共振隧道二极管	125
§ 5.4.1 稳态 $I-V$ 关系	128
§ 5.4.2 对时间相关微扰的响应	131
§ 5.4.3 声子辅助的隧道效应	137

§ 5.5 异质结构势垒可变电抗器	140
§ 5.5.1 传导电流	142
§ 5.5.2 电容-电压关系	147
§ 5.5.3 交流偏压下的载流子输运特性	152
§ 5.5.4 Si/SiO ₂ 的可变电抗器	153
参考文献	159
第六章 晶体管	159
§ 6.1 金属氧化物半导体场效应晶体管	165
§ 6.1.1 等效电路	167
§ 6.1.2 沟道中载流子的速度限制	167
§ 6.1.3 小尺度的 MOS 场效应管	169
§ 6.1.4 互补型金属氧化物半导体场效应晶体管	170
§ 6.2 高电子迁移率晶体管	172
§ 6.2.1 远程杂质散射	176
§ 6.2.2 δ 掺杂场效应晶体管	178
§ 6.3 纳米尺度的场效应晶体管	179
§ 6.3.1 载流子的量子波分布以及阈值电压	184
§ 6.3.2 量子波输运	190
§ 6.3.3 界面粗糙和远程电离杂质散射	192
§ 6.3.4 源漏极结深对载流子波输运的影响	197
§ 6.4 纳米尺度 SOI-MOS 场效应管	200
参考文献	204
第七章 量子点单电子器件	204
§ 7.1 双栅硅 MOS 场效应管中的载流子输运	207
§ 7.2 硅微晶单电子晶体管以及库仑阻塞效应	215
§ 7.3 多栅 AlGaAs、InGaAs/GaAs 异质结构单电子晶体管	224
§ 7.4 量子点原胞自动机	228
参考文献	230
第八章 光探测器	230
§ 8.1 光探测器的基本结构	230
§ 8.1.1 p-i-n 结光电二极管	231
§ 8.1.2 雪崩光电二极管	232
§ 8.2 Si/SiGe 异质结构内部发射红外探测器	234
§ 8.3 量子阱红外探测器	235
§ 8.3.1 光跃迁的基本特性	236
§ 8.3.2 光电耦合	239
§ 8.3.3 暗电流和光电流	242

§ 8.3.4 连续态的边界条件	244
§ 8.3.5 混晶散射和载流子迁移率	246
§ 8.4 量子线红外探测器	253
参考文献	257
第九章 光辐射器件	257
§ 9.1 发光二极管	260
§ 9.2 共振隧道效应发光二极管	267
§ 9.3 半导体激光器	271
§ 9.3.1 掩埋式异质结构半导体激光器	272
§ 9.3.2 量子级联激光器	273
参考文献	275
第十章 光子晶体及光子学器件	275
§ 10.1 光子晶体基本概念	277
§ 10.2 一维光子晶体及分光技术	279
§ 10.3 二维光子晶体	282
§ 10.4 激子对介电极化的贡献	286
§ 10.5 微腔和四波混合	292
§ 10.6 三维量子点光子禁带	294
§ 10.7 入射电磁波在量子点点阵的反射与透射	294
§ 10.7.1 单量子点平面点阵	299
§ 10.7.2 双量子点平面点阵	300
§ 10.7.3 多层量子点平面	303
参考文献	307
第十一章 数值解方法	307
§ 11.1 体材料的费米积分	310
§ 11.2 一维薛定谔方程的数值解	311
§ 11.2.1 一维量子阱中的局域态	315
§ 11.2.2 量子阱超晶格	315
§ 11.2.3 二极管的电流密度	319
§ 11.3 电子局域态密度：递归方法	328
参考文献	329
附录一 英文缩略语解释	330
附录二 主题词汉英对照索引	330

第一章 绪 论

§ 1.1 历史和动态

在过去了的一百多年里,人类对自然界的认识达到了空前的高度.电磁学理论、量子力学等一系列学科的诞生和发展,不仅加深了人们对客观世界的认知,也极大地推动了高科技产业的迅猛发展.以微电子工业为主体的各种高新技术产品的尺度越来越小,功能越来越全.预计在下一个十年里,晶体管的导电沟道长度将达到 50nm、25nm、甚至 10nm,传统 CMOS(互补型金属氧化物半导体晶体管)工艺技术将达到半导体半经典理论的极限.今后,电子和光电子工业的持续发展则将取决于对已有系统的优化,以及对量子器件的开发.目前处于实验室阶段的量子器件包括量子自旋、大分子电子器件以及生物材料.但从已有的半导体工业全球性的规模和产量来看,工业界以及科研人员目前仍然在半导体材料的基础上致力于未来电子和光电子工业的发展与研究.半导体的最新发展正深入到我们日常生活的每一个角落.一个非常明显的例子便是以量子阱激光器为主的大量的光盘驱动器,量子阱红外探测器也已经商品化.目前,研究以及开发者们正把目标定位于探测器与激光器的合并,以便实现光通信的高速接口.在电子工业方面,共振隧道器件已大量应用于集成电路;高电子迁移率晶体管在移动通信中举足轻重,一个极好的例子就是低功耗的高电子迁移率晶体管延长了移动电话手机的待机和通话时间.

今天先进的信息技术主要取决于低费用、高速度、高压缩、高度可靠信息的电子化.对固态电子系统的小型化和集成化的不断追求及其发展,一直是计算机工业和计算机应用成功的关键.在微电子领域内,根据 Intel 公司的创始人之一的 Gordon E. Moore 提出的摩尔定律预测,每过 18 个月,集成电路单个芯片上集成的元件数目将增加一倍,而元件的特征尺寸则缩小 $\sqrt{2}$ 倍.目前,超大规模集成(ULSI)和巨大规模集成(GLSI)的芯片中已经集成了 1 亿到 10 亿个离散元件.随着电子线路板上集成元件数目的不断增加,离散元件的尺寸已经接近纳米尺度.在近 20 年里,离散晶体管尺度缩小的速度十分惊人:1974 年报道的金属-二氧化硅-半导体场效应晶体管栅极长度是 $1.0\mu\text{m}$ ^[1],1987 年降为 $0.1\mu\text{m}$ ^[2],1992 年为 70nm ^[3],1995 年是 40nm ^[4],1998 年就只有 30nm ^[5].Si 和 GaAs 晶体管的沟道长度也分别达到了 130nm 和 100nm 的量级^[6~11].然而,未来先进多媒体的基础结构和服务要求更小的芯片尺度.1997 年首先在 4 Gb 动态随机存取内存(DRAM)上实现了 $0.15\mu\text{m}$ 工艺技术,DRAM 晶体管的尺度在 2001 年达到了 $0.18\mu\text{m}$ (1Gb),在 2004

年将达到 $0.13\mu\text{m}$ (4Gb), 在 2007 年会达到 $0.10\mu\text{m}$ (16Gb), 在 2010 年可以达到 $0.07\mu\text{m}$ (64Gb)^[12,13]. 表 1.1 列出了集成电路规模的发展(SSI: Small Scale Integration, 小规模集成; MSI: Medium Scale Integration, 中规模集成; LSI: Large Scale Integration, 大规模集成; VLSI: Very Large Scale Integration, 很大规模集成; UL- SI: Ultra Large Scale Integration, 超大规模集成; GLSL: Giant Large Scale Integra- tion, 巨大规模集成).

表 1.1 集成电路规模

	SSI	MSI	LSI	VLSI	ULSI	GLSL
年份	1965 前	1965	1971	1978	1990	目前
芯片含元件数	$<10^2$	$10^2\sim10^3$	$10^3\sim10^5$	$10^5\sim10^7$	$10^7\sim10^9$	$>10^9$
芯片含门数	<10	$10\sim10^2$	$10^2\sim10^4$	$10^4\sim10^6$	$10^6\sim10^8$	$>10^8$

当系统的几何尺寸与电子波长可以比拟时, 量子效应将成为主导的效应^[14]. 当晶体管的尺寸不断地缩小而达到纳米量级时, 将出现许多新的量子现象, 例如电子干涉^[15]、无磁场情况时并行电导的相加性^[16~18]、电导振荡^[19]、外加磁场下电导振荡周期的突然变化^[20,21]等. 目前又发展出了许多基于量子效应的新颖电子和光电子器件, 如共振隧道二极管^[22]和量子阱红外探测器^[23].

与纳米尺度的物理相呼应, 新的电子器件以及电子线路的设计和制备工艺必须具有纳米精度. 在过去的十年里, 纳米生产技术^[24,25], 如分子束外延、金属有机化学汽相沉积以及化学束外延等让世人瞩目, 在制造人工半导体结构方面进展巨大. 目前, 在样品生长方向上已实现了小到单个原子层的精确控制尺度. 而在垂直于样品生长方向上, 电子束平版印刷术也实现了纳米尺度的平版印刷和制版工艺. 软性平版印刷术^[26]已经生产出尺度小于 100nm 的器件. 它可以应用于许多非光阻的功能材料, 刻制弯曲面, 制作三维结构, 还可以化学修改材料表面. 纳米生产技术的进步使量子效应器件从概念走向现实.

不同原理结构的器件, 当特征尺寸缩小时, 既有共性的量子效应, 也有不相同的量子特征, 需要进行仔细的理论和实验研究. 随着人们对自然界认识的深化和对提高生活水平的企求, 也随着先进材料制备方法、器件工艺的不断发展, 以及新理论、新计算方法的出现, 用先进的理论结合必要的实验手段去探索新型器件是当前科学家面临的挑战和使命. 一个非常典型的例子就是: 与经典半导体物理用掺杂改变材料性能相对应, 用维度来改变体系的特性. 二维、一维和零维度的量子阱、量子线、量子点的诞生, 开辟了器件物理的全新领域. 相应的理论, 如维度如何影响材料的电子态密度、材料的电学和光学性质, 低维度系统的求解等就势必提到器件物理学家的面前.

目前,有两类关于半导体量子器件的著作:一类是由理论研究人员撰写的半导体材料基础研究及器件物理方面的经典著作,这类书籍侧重基础理论,为了理论模型的可解以及叙述的简明,所讨论的例子往往极度理想化;另一类著作的作者一般为实验研究人员,例如每年都有很多关于各种新型器件的综述性书籍出版,它们重在器件的介绍,配以基本物理图像的描述.因为真实实验的复杂性,所涉及的理论模型一般较为简单.

本书的作者通过对自己十多年工作的总结,并结合工业发展最新现况,系统、全面地介绍了电子和光电子学最前沿的研究和开发,并深入半导体量子器件的研究领域.作者从电子和光电子工业发展的需要入手,提出理论设想,介绍实验,通过系统的理论分析来理解实验.最后,在理论和实验结合的基础上,提出量子器件的设计以及优化.除了器件工作原理,作者还对半导体材料的基础研究和对器件的影响等方面作了详细的叙述.无疑,这样的论述会对工业界开发人员、科研界研究人员,特别是半导体材料以及电子和光电子器件领域内的科技工作者有极大的帮助.

§ 1.2 内容安排和说明

本书首先用三章的篇幅阐述了作为半导体量子器件物理的基础内容:半导体材料,半导体电学性质,半导体光学性质.在半导体材料这一章里,作者简要但系统地介绍了半导体材料与器件物理相关的一些基本概念,包括晶格结构、能带论、异质结、包络函数、有效质量近似、电子态密度与维度的关系等.这一章的最后一节则对体材料、低维材料的生长做了概括的描述.比较有特点的是在这一节中,作者结合自身的工作,对目前材料、器件制作中的热扩散、离子注入和材料芯片技术都作了具体的介绍.

接下来的六章是本书的主体.作者对主要的半导体量子元器件,如二极管、三极管、探测器、激光器等作了从理论到实验的阐述.这些章节既包含了作者所了解的当今科技动态,也包括了作者近期在学术刊物上发表的研究结果及综合论述.其中关于量子点单电子晶体管、光子器件等工作都是当前国际研究的热点.

作者在最后一章内给出了经过大量运用考验的计算源程序以及计算实例.读者可以通过对程序的直接运行,达到对相关物理概念、器件工作机理及模型的感性直观认识,并能直接解决学习与工作中所遇到的半导体量子材料及器件分析问题.

本书既可满足科研与工程技术人员在半导体器件分析工作中的需要,同时也适用于研究生和大学生在学习半导体材料与器件时的图谱演示.因此,本书不仅是一本关于现代量子半导体材料及器件的入门书、教科书,也是科研工作者的参考书和工业界器件设计人员的设计手册.

参 考 文 献

- 1 R H Dennard, F H Gaensslen, H N Yu, V L Rideout, E Bassous, and A R LeBlanc. Design of ion-implanted MOSFET's with very small physical dimensions. IEEE J Solid-State Circuits, 1974,9;256~268
- 2 G A Sai-Halasaz, M R Wordeman, D P Kern, E Ganin, S Rishton, D S Zicherman, H Schmidt, M R Polcari, H Y Ng, P J Restle, T H P Chang, and R H Dennard. Design and experimental technology for 0.1- μ m gate-length low-temperature operation FETs. IEEE Electron Device Lett, 1987,8;463~466
- 3 T Hashimoto, Y Sudoh, H Kurino, A Narai, S Yokoyama, Y Horiike, and M Koyanagi. 3 V operation of 70 nm gate length MOSFET with new double punchthrough stopper structure. Ext Abs 1992, Int. Conf. Solid State Devices Materials, Tokyo Japan, 1992 xxviii+772;490~492
- 4 M Ono, M Saito, T Yoshitomi, C Fiegna, T Ohguro, and H Iwai. A 40 nm gate length *n*-MOSFET. IEEE Transaction on Electron Devices, 1995,42;1822~1830
- 5 H Kawaura, T Sakamoto, T Baba, Y Ochiai, J Fujita, S Matsui, and J Sone. Transistor operation of 30 nm gate length EJ-MOSFETs. IEEE Electron Device Lett, 1998,19;74~76
- 6 W Langen, H Hardtdegen, H Luth, and P Kordos. Selectively grown vertical sub-100 nm dual-gate GaAs FETs. Compound Semiconductors 1994. Proceedings of 21st International Symposium. IOP Publishing, Bristol, UK; 1995, xxvii+912;183~188
- 7 D Behammer, L Vescan, R Loo, J Moers, A Muck, H Luth, and T Grabolla. Selectively grown vertical Si-p MOS transistor with short channel lengths 130 nm. Electronics Letters, 1996, 32;406~407
- 8 W Langen, L Vescan, R Loo, H Luth, and P Kordos. Vertical 100 nm Si-p channel JFET grown by selective epitaxy. Appl. Surface Science, 1996,102;252~254
- 9 D Klaes, J Moers, A Tonnesmann, S Wickenhauser, L Vescan, M Marso, T Grabolla, M Grimm, and H Luth. Selectively grown vertical Si MOS transistor with reduced overlap capacitances. Thin Solid Films, 1998, 336;306~308
- 10 J Moers, D Klaes, A Tonnesmann, L Vescan, S Wickenhauser, M Marso, P Kordos, and H Luth. 19 GHz vertical Si p-channel MOSFET. Electronics Letters, 1999,35;239~240
- 11 J Moers, D Klaes, A Tonnesmann, V Vescan, S Wickenhauser, T Grabolla, M Marso, P Kordos, and H Luth. Vertical p-MOSFETs with gate oxide deposition before selective epitaxial growth. Solid State Electronics, 1999,43;529~535
- 12 T Murotani, I Naritake, T Matano, T Ohtsuki, N Kasai, H Koga, K Koyama, K Nakajima, H Yamaguchi, H Watanabe, and T. Okuda. A 4-level storage 4Gb DRAM. 1997 IEEE Int Solid-State Circuits Conf Dig, San Francisco, CA, Feb 1997, 74
- 13 H Yasuda. Multimedia impact on devices in the 21st century. 1997 IEEE Int Solid-State Circuits Conf Dig, San Francisco, CA, Feb 1997. 28
- 14 V V Mitin, Z S Gribnikov, and A N Korshak. Quantum heterostructures for micro-and opto-electronics. Physics of Semiconductor Devices, Narosa Publishing House, Delhi, India; 1998; 2 ,xxviii+1322;134~141
- 15 J Appenzeller, C H Schroer, T H Schapers, A van der Hart, A Forster, B Lengeler, and H Luth. Electron interference in a T-shaped quantum transistor based on Schottky-gate technology. Phys Rev, 1996,B53;9959~9963
- 16 C G Smith, M Pepper, R Newbury, H Ahmed, D G Hasko, D C Peacock, J E P Frost, D A Ritchie, G A

- C Jones and G Hill. One-dimensional quantised ballistics resistors in parallel configuration. *J Phys Condens Matter*, 1989,1;6763~6770
- 17 Y Avishai, M Kaveh, S Shatz and Y B Band. Ballistic electronic conductance of two parallel channels. *J Phys Condens Matter*, 1989,1;6907~6912
- 18 E Castano and G Kirczenow. Theory of the conductance of parallel ballistic constrictions. *Phys Rev*, 1990, B41;5055~5060
- 19 X Baie, J P Colinge, V Bayot, and E Grivei. Quantum-wire effects in thin and narrow SOI MOSFETs. 1995 IEEE International SOI Conference Proceedings (Cat. No.95CH35763). IEEE, New York, USA; 1995; xiv+183 ;66~67; J P Colinge, X Baie, V Bayot, and E Grivei. A silicon-on-insulator quantum wire. *Solid-State-Electronics*, 1996,39;49-51
- 20 G Kirczenow, A S Sachrajda, Y Feng, R P Taylor, L Henning, J Wang, P Zawadzki and P T Coleridge. Artificial impurities in quantum wires; from classical to quantum behaviour. *Phys Rev Lett*, 1994,72;2069~2072
- 21 G Kirczenow. Scattering models of conduction around an antidot in a magnetic field. *Phys Rev*, 1994,B50; 1649~1655, and references therein.
- 22 J P Sun, G I Haddad, P Mazumder, and J N Shulman. Resonant tunneling diodes: Models and properties. *Proceedings of the IEEE*, 1998,86;641~661, P Mazumder, S Kulkarni, M Bhattacharya, J P Sun, and G I Haddad Digital circuit applications of resonant tunneling diodes. *Proceesings of the IEEE*, 1998,86;664~686
- 23 J Y Andersson, J Alverbro, J Borglind, P Helander, H Martin, and M Ostlund. 320 * 240 pixels quantum well infrared photodetector (QWIP) array for thermal imaging: fabrication and evaluation. *Proceeding of the SPIE*, 1997,3061;740~748, B Brill and G Sarusi. QWIP research and development of 320 * 256 QWIP arrays in EL-OP. *Proceedings of the SPIE*, 1997,3061;781~788
- 24 D A Allee, A N Broers, and R F W Pease. Limits of nano-gate fabrication. *Proc IEEE*, 1991, 79;1093-1105
- 25 H Ahmed. Nanostructure fabrication. *Proc. IEEE*, 1991,79;1140~1148
- 26 S Brittain, K Paul, X-M Zhao, and G Whitesides. Soft lithography and microfabrication. *Physics World*, 1998,11;31~36

第二章 半导体材料

半导体的导电性介于绝缘体及金属之间.当半导体的温度从室温下降到液氮温度时,材料的导电性会下降几个数量级;到绝对零温度时,导电性几乎消失.高纯本征半导体与绝缘体极为相似,但掺杂半导体却可以像金属一样很好地导电.光照也能使半导体从类绝缘体行为转变为类金属行为.通常,半导体的光吸收光谱有一个截止频率.在截止频率以下的一个较宽频域内,光基本上能够无损耗地透过半导体;而截止频率以上的光则会被半导体强烈地吸收.

半导体的这些宏观属性起源于它的能带结构,以及电子在这些能带上的分布.绝对零度时,纯半导体的能带结构由完全被电子填充的满带和没有电子的空带两者组成.半导体与绝缘体的差别在于,前者满带和空带之间的禁带要窄得多,以至于杂质和温度能够很容易地改变电子在能带中的分布情况,从而改变材料的导电性能.

特征半导体属性的首次表征可以追溯到 1833 年法拉第的银硫化物电导率随温度增加的实验.1789 年 Ebert 和 1851 年 Bromme 分别在文章中使用了类似“半导体”的术语,英文“semiconductor”一词则是由 Königsberg 和 Weiss 在 1911 年正式引入的.1874 年,Braun 发现在某些金属硫化物和金属针尖之间的电阻率随外加电压极性转变而发生变化.这种点接触结构在 20 世纪初作为整流器被用于无线电收音机.硒和氧化铜也有相似的整流效应.1926 年 Grondahle 用氧化铜作整流器,随后硒也被用作整流器.Lang 则在 1932 年首次将氧化铜应用于光电池.

从历史上看,对半导体物理发展起决定性作用的事件是 1949 年锗基双极性晶体管的发明,以及 20 世纪 50 年代末硅场效应晶体管的实现.半导体硅的发现引发了半导体微电子学的发展.此后,元素周期表中 III-V 族以及 II-VI 族元素所组成的化合物半导体,例如砷化镓(GaAs)和碲镉汞(HgCdTe),则引发了半导体光电子学的迅猛发展.

纳米生产技术的进步使得量子效应器件的概念成为了现实,对纳米电子器件的全面理论分析和设计极大地挑战着器件物理学家^[1].作为对全书论述的铺垫,我们在本章给读者介绍量子器件的基础固体理论,以及半导体材料的制备原理.

§ 2.1 原子和固体

1913 年,玻尔(Niels Bohr)提出了只有一个电子的氢原子的量子模型.在这个

模型里,玻尔作了两个假设:

(1) 电子仅仅在某个被称为定态的环状轨道上运动. 图 2.1 显示了一个质量为 m_0 、带有一 e 电荷的电子在半径为 r 的稳定环状轨道上绕带 $+e$ 电荷的原子核的运动. 电子和原子核之间的向心力由库仑吸引力提供. 设电子速度为 v , 根据牛顿第二定律, 有

$$\frac{m_0 v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (2.1)$$

于是, 电子总能量为

$$E = \frac{1}{2} m_0 v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (2.2)$$

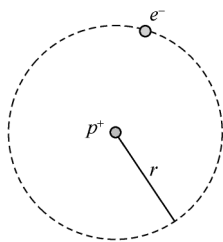


图 2.1 电子在环状轨道上
绕原子核运动的氢原子
玻尔模型

应该指出的是, 我们设真空能级为能量的参考零点.

(2) 电子从一个允许能级跃迁到能量较低的另一允许能级, 可以产生光辐射. 设 E_m 和 E_n 为两个相关能级的能量, 光辐射能量为 $\hbar\omega = E_m - E_n$.

为了限制轨道半径的容许值, 需要作第三个假设:

(3) 电子的角动量为 $\hbar$ 的整数倍:

$$m_0 v r = n\hbar \quad (2.3)$$

由 $v = n\hbar / m_0 r$ 及式(2.1)的 $v = \sqrt{e^2 / 4\pi\epsilon_0 m_0 r}$, 可得第 n 个轨道的半径

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{m_0 e^2} \quad (2.4)$$

和轨道总能量

$$E_n = -\frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad (2.5)$$

玻尔的理论也可以用于其他单电子系统, 例如一价的氦离子(He^+)或二价的锂离子(Li^{++}). 设 Z 为单电子系统的原子序数, 只要将式(2.5)中的原子电荷 e 替换成 Ze , 便可以得到这些离子第 n 个能级的能量

$$E_n = -\frac{13.6 Z^2}{n^2} \quad (2.6)$$

这里, 能级的能量以电子伏特(eV)做能量单位.

图 2.2 为氢原子的能级图($Z=1$). 氢原子的每个能级由称为主量子数的整数 n 表示. 当原子没有被激发时, 电子占据 $n=1$ 的基态. 电子可以与另外的一个电子相撞, 或者吸收一个光子而跃迁到能量较高的激发态. 被吸收光子的能量必须等于电子跃迁过程中涉及的两个能级之间的能量差. 处在激发状态的电子可以经过单一过程, 或经由几个中间过程返回到基态. 前者对应于单一频率的光辐射, 而后者将产生多频率的多光子发射. 赖曼光谱系列就对应于从高能级到 $n=1$ 基态的

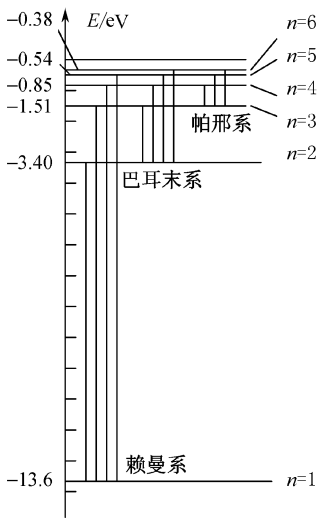


图 2.2 氢原子的能级图.当电子在两个能级之间跃迁时,光被辐射或被吸收

具有同一 n 值的所有能级定义为一个电子壳层,具有同一 l 值的能级则形成子壳层.表 2.1 列出了电子壳层结构.子壳层的头 4 个字母相应的英文是 sharp (锋利)、principal (主要)、diffuse (弥漫)和 fundamental (基本),来自原子光谱特性.

此外,电子还有一个称为自旋的本征性质.电子的自旋角动量 S 由其自旋量子数决定:

$$S = \sqrt{s(s+1)} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar \tag{2.10}$$

$s=1/2$.在磁场下,它的 z 方向分量只能有 2 个值:

$$S_z = m_s \hbar \tag{2.11}$$

这里,自旋磁量子数 $m_s = \pm 1/2$.自旋的引入使同一 n 值允许能级的数字增加了一倍.

现在我们可以用 4 个量子数,即 n 、 l 、 m_l 和 m_s 来标定原子中每个电子的能态.当然,相应同一组量子态的电子能级能量自然与电子所从属的原子有关.一个很自然的问题是,为什么在一个原子中并不是所有的电子都占据能量最低的基态.

跃迁;而到 $n=2$ 的能级跃迁形成的是巴耳末系列;到 $n=3$ 的能级跃迁形成帕邢系列.

严格地说,氢原子由如下的定态薛定谔方程来描述:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi_{nlm} = E_n \psi_{nlm} \tag{2.7}$$

电子能级的能量仅仅取决于主量子数 n , n 的取值范围从 1 到 ∞ .能级角动量 L 的大小由轨道量子数 l 决定,

$$L = \sqrt{l(l+1)} \hbar \tag{2.8}$$

$l=0,1,2,\dots,(n-1)$, l 的最大值取决于 n .为了指定角动量矢量的方向,需要设置一特定的方向轴,比如说 z 轴.沿该轴的角动量分量也是量子化的,

$$L_z = m \hbar \tag{2.9}$$

这里, m 称为轨道磁量子数,取值 $0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

表 2.1 电子原子轨道的壳层结构

n	壳层	l	子壳层
1	K	0	s(sharp, 锋利)
2	L	1	p(principal, 主要)
3	M	2	d(diffuse, 弥漫)
4	N	3	f(fundamental, 基本)
5	O	4	g
6	P	5	h
•	•	•	•

在仔细分析了原子光谱线的分类以后,泡利(W. Pauli)在 1925 年提出了现在被称为泡利不相容原理的一条重要量子力学原理:在一个原子中不能有两个或两个以上的电子有完全相同的 4 个量子数: n 、 l 、 m_l 和 m_s .

根据泡利不相容原理,我们可以看出电子是如何填充原子壳层(n)以及子壳层(l)的.对应于每一个 l 值, m 共有 $(2l+1)$ 个可能值,所以每个子壳层能容纳 $2(2l+1)$ 个电子,这里的 2 对应于电子的两度自旋简并.图 2.3 给出了一个简单的记忆规则,用来近似地表现电子填充原子中子壳层的顺序.

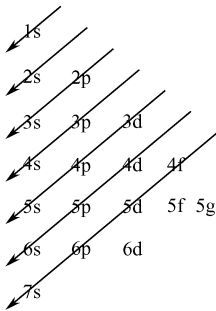


图 2.3 电子填充原子壳层顺序记忆图

在元素周期表上,原子的基态电子结构用一个子壳层加上占据该子壳层的电子数的上标来表示.例如, $2p^3$ 表示在第二原子壳层的 $l=1$ 子壳层上有 3 个电子.

孤立原子的电子能级是十分狭窄的.在数学上,其电子能级的态密度被描述为 δ 函数.当两个原子彼此靠近时,它们的电子波函数相互重叠.由于不同原子的电子

之间,以及一个原子的电子与另一个原子的原子核之间的相互作用,原先孤立原子的单一电子能级会分裂成两个不同能量的新能级,如图 2.4 所示.能级的分裂随着原子间距的减小而增加.同样,如果有 5 个原子互相靠近,原先孤立原子的单一电子能级要分裂成 5 个新能级.粗略地讲,在固体中每立方米有 10^{28} 个原子,原先孤立原子的单一电子能级要分裂成同原子数目一样多的新能级,这么高密度的新能级在能量坐标上就形成了被禁带隔离开的、准连续的能带.

在对半导体各种物理特性作进一步研究以前,先看一下组成常见半导体的元素的原子结构.由表 2.2 可以得到一个很重要的结论:组成常见半导体的元素的最外层价电子一般占据 s 或 p 轨道.这个结论对以原子状态组成常见半导体材料的

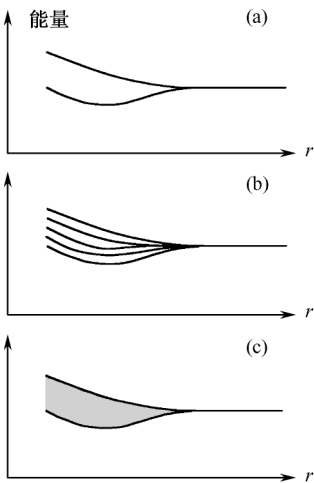


图 2.4 (a)当两个原子相互靠近时,单一原子能级分裂成两个不同能量的能级;(b)当 5 个原子相互靠近时,单一原子能级分裂成 5 个能级;(c)晶体中的原子能级分裂形成准连续的能带.

元素严格成立.其实,这个结论对晶态半导体中的价带电子和导带电子来说同样有效,即半导体中原子最外层价电子一般保持着原子中 s 或者 p 轨道特征.除了一些特殊场合外,我们通常对原子的内层核心电子不感兴趣.所谓的内层核心电子是指原子核以及被原子核紧紧束缚住的内层电子,它们几乎不受周围环境影响,保持着它们在孤立原子中的电子状态;它们在晶体材料中难以迁移,对器件的电学和光学性能往往没有贡献.我们把那些容易受环境影响,从而改变其在孤立原子中状态的电子称为外层价电子.这些电子容易在晶体中迁移,从而影响了材料以及由此组成的器件的功能.当然,内层核心电子和外层价电子之间的划分并不是绝对的.

表 2.2 常用半导体中典型元素的原子结构

Ⅳ 族半导体		Ⅲ - V 族半导体	
Si	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	Ga	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^1$
Ge	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^2$	As	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^3$

固体中原子的价电子往往与相邻原子共享.如硅有分布在能量相近的两个能级上的 4 个价电子(3s 和 3p,参阅表 2.2),它能与 4 个相邻的原子分享这 4 个价电子,最后组成一个无穷延伸的三维点阵,围绕任何 1 个原子的 4 个近邻原子组成一规则的四面体,称为四面体键(图 2.5).这样的三维点阵被称为金刚石结构.由于原子交换或共享价电子,原子在固态时的能量比原子处于分离状态时的能量要低.

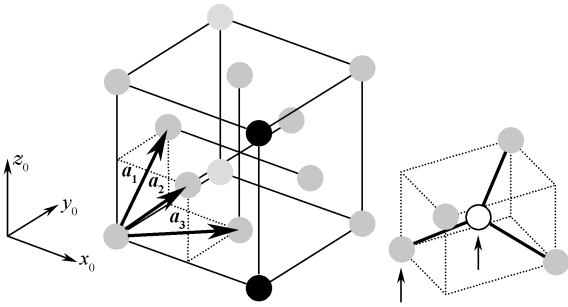


图 2.5 面心立方体晶格和闪锌矿结构

§ 2.2 固体材料的晶格特性

晶体的主要特征是每个原子或原子组的周围物理环境和其他原子或原子组的环境一样.为了理解和定义一个晶体结构,必须引入两个重要的物理概念:布拉维晶格和晶格基元.布拉维晶格是一组表示空间周期结构的点,每一个格点都有完全相同的环境.把由一个或一组原子组成的晶格基元安置到每一个格点上后,便得到

了一个晶体结构.晶格基元也称为原胞.

由于晶格的周期性,可以定义三个矢量: $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ 和 $\mathbf{a}_3$.晶格的任何一个格点 $\mathbf{R}'$ 均能由另外一个格点 $\mathbf{R}$ 通过转换

$$\mathbf{R}' = \mathbf{R} + m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3 \quad (2.12)$$

而得到.这里, m_1 , m_2 以及 m_3 是三个整数.如果这三个平移矢量 $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ 和 $\mathbf{a}_3$ 形成的六面体体积最小,则称为原胞基矢.

在以后的叙述中,晶格的周期性也被称为晶格的平移对称性.

在三维的空间里共有 14 种布拉维晶格.其中,简单立方晶格、体心立方晶格和面心立方晶格总称为立方晶格.简单立方晶格由原胞基矢 $\mathbf{a}_1 = a\mathbf{x}_0$, $\mathbf{a}_2 = a\mathbf{y}_0$ 和 $\mathbf{a}_3 = a\mathbf{z}_0$ 生成.这里 $\mathbf{x}_0$, $\mathbf{y}_0$ 和 $\mathbf{z}_0$ 是直角笛卡儿坐标的三个标准单位矢量, a 是晶格常数.

体心立方晶格由简单立方结构的立方体中心添上一个原子构成;而在简单立方晶格六个正方形面的中心添上格点则形成面心立方晶格,见图 2.5.面心立方晶格原胞基矢为

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{y}_0 + \mathbf{z}_0), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{z}_0 + \mathbf{x}_0), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{y}_0) \quad (2.13)$$

电子学和光电子学涉及的半导体材料几乎都是面心立方结构.该结构的原胞内包含两个不同原子,它们的坐标分别是(000)和 $(a/4)(111)$,图 2.5 上用两个垂直箭头表示.如果这两个原子是同一种元素,那么对应的晶格结构称为金刚石结构,例如硅、锗和碳等便属于这一类.如果两个原子不同,例如砷化镓(GaAs)、砷化铝(AlAs)以及硫化镉(CdS)等所属的结构则被称为闪锌矿结构.

具有金刚石结构的半导体通常被称为元素半导体,而闪锌矿结构的半导体通常被称为复合半导体或化合物半导体.复合半导体可以用其组合原子在元素周期表中的位置来表示.例如:Ga、Al、In 和 As、P 分别属于Ⅲ族和Ⅴ族元素;砷化镓(GaAs)、砷化铝(AlAs)和磷化铟(InP)被称为Ⅲ-Ⅴ族半导体;而 Cd、Hg 和 S、Se、Te 分别属于Ⅱ族和Ⅵ族元素,硫化镉(CdS)、硒化镉(CdSe)和碲化汞(HgTe)被称为Ⅱ-Ⅵ族半导体.

在研究具有周期性的晶体特性时,人们提出了所谓倒空间的描述方法.众所周知,人们对随时间周期性变化的信号的分析,例如,对声音信号和无线电信号的分析往往不在时间域进行,而代之以在频率域里执行.对晶体,与时间-频率这个二元性相对应的就是实空间-倒空间(或称波矢空间)的二元性.许多物理对象和过程可以利用波矢的概念进行讨论、分析和理解.例如,我们喜欢用波矢 $\mathbf{k}$ (其量值为 $2\pi/\lambda$)来描写一个波长为 λ 、沿着垂直于波前方向传播的平面波.

通过如下的简单变换可以把实空间的周期晶格映射到倒空间(也称 $\mathbf{k}$ 空间):

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3} \quad (2.14)$$

对应于一个原胞边长为 a 的简单立方晶格的布拉维晶格,其倒空间中的格点形成的倒格子也是简单立方晶格,其立方原胞的边长为 $2\pi/a$.

原胞基矢为式(2.13)的面心立方晶格的布拉维晶格的倒空间基矢则为

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{y}_0 + \mathbf{z}_0 - \mathbf{x}_0), \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{z}_0 + \mathbf{x}_0 - \mathbf{y}_0), \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{y}_0 - \mathbf{z}_0) \quad (2.15)$$

可以很容易地看出,面心立方的倒格子就是体心立方.假设 m_1, m_2 和 m_3 是 3 个或正或负的整数,满足如下关系的任何矢量:

$$\mathbf{G} = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3 \quad (2.16)$$

即被称为是倒格矢.应该注意的是如下的特殊关系:

$$e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1 \quad (2.17)$$

这里 $\mathbf{R}$ 是式(2.12)所表述的晶格矢,它通常也被称作为直接晶格矢量,以便把它同倒格矢相互区分开来.

基于上面的方程式,任何两个满足关系

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{G} \quad (2.18)$$

的波矢 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}'$ 便被认为是等价的了.这就暗示着可以把 $\mathbf{k}$ 限制在一个取值范围内.这个取值范围就称为布里渊区.布里渊区内没有两个波矢是等价的.在本书里,我们仅仅考虑距离倒格矢空间原点最近的第一布里渊区.图 2.6 显示了简单立方晶格和面心立方晶格的第一布里渊区.

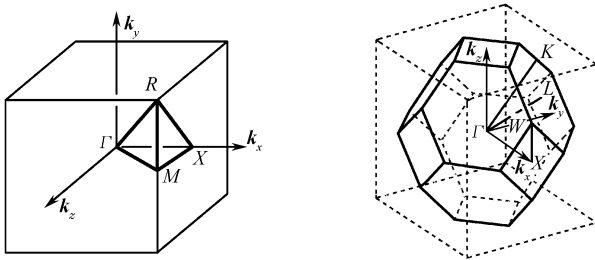


图 2.6 简单立方晶格和面心立方晶格的第一布里渊区.图中还标明了对称点和对称线

下面给出倒空间中一些高对称点和线的符号和坐标.以 $2\pi/a$ 作单位,简单立方晶格里的 $\Gamma R - R\Gamma - \Gamma X - XM$ 为

$$\Gamma = (0,0,0), \quad X = \left[\frac{1}{2}, 0, 0 \right], \quad R = \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right], \quad M = \left[\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} \right] \quad (2.19)$$

在面心立方晶格中, $XU - UL - L\Gamma - \Gamma X - XW - WK$

$$\begin{aligned} \Gamma &= (0,0,0), & X &= (1,0,0), & L &= \left[\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right] \\ W &= \left[1, 0, \frac{1}{2} \right], & U &= \left[\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 1 \right], & K &= \left[\frac{3}{4}, 0, \frac{3}{4} \right] \end{aligned} \quad (2.20)$$

以上提到的都还是自然界中存在的半导体晶体结构. 这些结构是自由能最低的原子固体状态. 而人工晶体结构材料的诞生, 如 20 世纪 70 年代中期 IBM 的 Esaki 和 Tsu 开创的超晶格以及异质结外延晶体生长技术极大地影响了半导体物理和技术、半导体电子和光电子器件工业的发展进程.

由于外延生长技术可以在原子量级的控制精度上生长异质结材料, 我们便可以在材料的生长方向改变晶格的周期性, 由此引出了超晶格的概念. 超晶格由两种 (或两种以上) 半导体材料 A 和 B 沿着生长方向以厚度 d_A 和 d_B 交替生长而成. 在材料生长方向上, 其晶格周期为 $d_A + d_B$. 图 2.7 演示了 AlGaAs/GaAs 量子阱的分子束外延生长过程. 按组成材料晶格失配程度区分, 超晶格可以大致分为三类: (1) 晶格常数匹配超晶格; (2) 应力超晶格; (3) 带有中间衬底的应力超晶格. 在超晶格系统中, 由于超晶格周期 $d_A + d_B$ 大于体晶材料的晶格周期 a , 其倒格矢 $\mathbf{G}$ 就比体材料晶体的倒格矢小. 这就造成了超晶格体系中的能带在原体材料晶体中布里渊区的折叠.

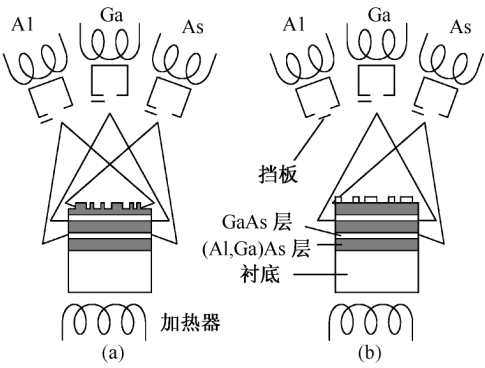


图 2.7 AlGaAs/GaAs 多量子阱的分子束外延生长示意图
图.(a) (Al,Ga)As 的沉积;(b) GaAs 的沉积. 整个系统
置于高真空状态

§ 2.3 半导体固体中的电子

在介绍了半导体固体材料的晶体结构以后,本节来讨论材料中的电子态.周期晶格中电子的薛定谔方程为

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.21)$$

等式左边的第一项代表电子的动能, m_0 是自由电子的质量. $V(\mathbf{r})$ 是周期性的晶格势能,

$$V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

这里, $\mathbf{R}$ 是实空间中的任意晶格矢(即直接晶格矢量).

布洛赫定理指出,满足式(2.22)周期条件的薛定谔方程式(2.21)的本征解,也就是布洛赫波函数,有如下属性:

$$\begin{aligned} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \\ u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \\ \int_{\text{原胞}} d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= 1 \end{aligned} \quad (2.23)$$

$E = E_n(\mathbf{k})$, 为能量色散关系. $N = N_x N_y N_z$, N_x 、 N_y 与 N_z 分别是沿着 x 、 y 以及 z 方向的原胞数, n 是能带指数, $\hbar\mathbf{k}$ 是布洛赫电子的晶格动量. 这里,波函数满足以下周期性边界条件:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + N_x \mathbf{a}_x) = \psi(\mathbf{r} + N_y \mathbf{a}_y) = \psi(\mathbf{r} + N_z \mathbf{a}_z) \quad (2.24)$$

而 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 一般称作周期晶格函数.

在外力 $\mathbf{F}$, 比如外部电磁场($\mathbf{E}$, $\mathbf{B}$)的作用下,

$$\begin{aligned} \hbar\mathbf{k} &= \mathbf{F} = -e \left[\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right] \\ v_n(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} \end{aligned} \quad (2.25)$$

“ $-e$ ”是电子所带电荷, $v_n(\mathbf{k})$ 是电子在能带 $E_n(\mathbf{k})$ 上的群速度.

§ 2.4 $\text{sp}^3 \text{s}^*$ 紧束缚近似法

原子形成晶体后,原先孤立原子的价电子能级受到周围原子的影响而发生变化.孤立原子的电子波函数当然就不再是晶格原子中电子的本征态,但这些孤立原子的电子波函数仍然可以作为晶体中电子波函数的基函数来描述晶体中的电子,

这就是紧束缚近似方法的基础. 对大多数我们感兴趣的半导体材料来说, 需要描述最外层电子的原子波函数分别是 s 、 p_x 、 p_y 以及 p_z 型的(参阅表 2.2). 而且, 如上一节指出的, 因为半导体的晶格基元一般含两个不同的原子, 这就需要 8 个原子基函数来组成布洛赫波函数:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_i} \sum_{m=1}^4 \sum_{j=1}^2 C_{mj}(\mathbf{k}) \phi_{mj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j - \mathbf{R}_i) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (2.26)$$

对 $\mathbf{R}_i$ 的求和遍及所有的原胞, m 是不同原子波函数 ϕ_{mj} 的指数, $j=1, 2$ 表示原胞中的不同原子.

选择了基函数后, 便要确定展开系数 C_{mj} . 此时, 薛定谔方程便被表示为久期方程

$$|\langle \phi_{m'j'} | H - E | \psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \rangle| = 0 \quad (2.27)$$

这里, H 是系统的哈密顿量.

从理论上说, 通过式(2.27)应该能够由晶体的势能得到久期方程的哈密顿量矩阵元. 但实际上, 这个过程是十分复杂和困难的. 在 Slater 和 Koster 首次以经验方式提出的紧束缚近似中, 久期方程的哈密顿量矩阵元被当作拟合参数, 调整这些参数使计算得到的能级与实验测量数据符合, 以此来最终确定矩阵元的准确数值.

1983 年, Vogl, Hjalmarson 和 Dow 发表了关于金刚石结构和闪锌矿结构材料能带的半经验 sp^3s^* 最近邻紧束缚近似理论^[2], 该理论是从 Harrison 的 sp^3 最近邻紧束缚近似理论^[3]发展而来的. 该紧束缚近似理论在每个原子位置 $\mathbf{R}_i$ 上引进 5 个 Löwdin 原子轨道, $|s\rangle, |p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle, |s^*\rangle$, 用 $h(\alpha\beta, ij)$ 表示第 i 个原子 α 轨道 $|\alpha, i\rangle$ 和第 j 个原子 β 轨道 $|\beta, j\rangle$ 的哈密顿量矩阵元. $i=j$, 或 i 是 j 原子的最近邻原子.

sp^3s^* 最近邻紧束缚近似理论中的 sp^3 Löwdin 原子轨道即为前面所述的原子轨道(或称原子基函数), 它们描述原子的价电子, 在体材料中对应的则是价带, 所以 sp^3 紧束缚近似理论能很好地描述材料的价带. 而 sp^3s^* 理论则引入了额外的 s^* 轨道来近似描述原子中电子的激发态, 由此改进了紧束缚理论对半导体材料的导带的描述.

表 2.3 列出了晶体 Si、C、Ge、AlAs、InAs 以及 GaAs 的哈密顿量矩阵元^[2]. 在表 2.3 中, E 为矩阵对角元, 即原子的轨道能量, V 是矩阵非对角元, 为原子轨道间相互作用的能量. a 代表阴离子, c 代表阳离子.

作为例子, 现将 sp^3s^* 最近邻紧束缚近似理论应用于 $Si_{1-x}C_x$ 合金半导体. 目前已经有了许多以应变 $Si_{1-x}Ge_x/Si$ 异质结构为基础的电子和光电子器件, 这些器件又极大地激发了 IV-VI 族二元和三元合金半导体的研究^[4,5]. 但是, 只有用低温生长技术才能在硅衬底上生长出无失配位错的 $Si_{1-x}Ge_x$ 应变外延层^[4]. 另外, $Si_{1-x}Ge_x/Si$ 材料的应用还受到外延层中应变的限制. 为了补偿应变, 在硅-锗系统

表 2.3 sp^3s^* 最近邻紧束缚近似理论的能带结构参数 (单位: eV)

	Si	C	Ge	AlAs	InAs	GaAs
$E(s,a)$	-4.2000	-4.5450	-5.8800	-7.5273	-9.5381	-8.3431
$E(p,a)$	1.7150	3.8400	1.6100	0.9833	0.9099	1.0414
$E(s^*,a)$	6.6850	11.3700	6.3900	7.4833	7.4099	8.5914
$E(s,c)$	-4.2000	-4.5450	-5.8800	-1.1627	-2.7219	-2.6569
$E(p,c)$	1.7150	3.8400	1.6100	3.5867	3.7201	3.6686
$E(s^*,c)$	6.6850	11.3700	6.3900	6.7267	6.7401	6.7386
$V(s,s)$	-8.3000	-22.7250	-6.7800	-6.6642	-5.6052	-6.4513
$V(x,x)$	1.7150	3.8400	1.6100	1.8780	1.8398	1.9546
$V(x,y)$	4.5750	11.6700	4.900	4.2919	4.4693	5.0779
$V(sa,pc)$	5.7292	15.2206	5.4649	5.1106	3.0354	4.4800
$V(sc,pa)$	5.7292	15.2206	5.4649	5.4965	5.4389	5.7839
$V(s^*a,pc)$	5.3749	8.2109	5.2191	4.5216	3.3744	4.8422
$V(pa,s^*c)$	5.3749	8.2109	5.2191	4.9950	3.9097	4.8077
ΔE_v	2.63	0.0		0.4	0.1	0.0

中引入原子直径比硅和锗都小的碳原子,从而形成了 $Si_{1-x-y}Ge_xC_y$ 合金半导体. 这就为材料结构多提供了一个调节能带的参数^[5]. 因此,有关 $Si_{1-y}C_y$ 和其他相关合金半导体的研究,对了解以硅为基础的半导体材料的能带调制显得尤为重要.

在文献[2]中,每种材料的价带顶端(Γ'_{15})都被设定为势能的零点,即 $\Gamma'_{15}=0$. 对于 $Si_{1-x-y}Ge_xC_y$ 合金半导体,如果我们设定碳原子的价带顶为系统的势能零点,在碳原子和硅原子之间便出现一个能带偏移

$$\Delta E_v(Si) = \Gamma'_{15}(Si) - \Gamma'_{15}(C) \tag{2.28}$$

相对于碳原子,硅的原子轨道能量都要加上这一能带偏移值. 我们可以从材料的电子亲和势计算出价带顶相对于真空能级的能量位置. 晶体硅的电子亲和势为 4.05 eV,但金刚石结构碳的电子亲和势与衬底的取向有关^[6],在(001)方向上为 2.2 eV. 由此可得,在真空能级以下;硅的价带顶为 5.17 eV,碳为 7.8 eV. 所以 $\Delta E_v(Si)=2.63$ eV.

$Si_{1-y}C_y$ 合金半导体的相互作用矩阵元可由著名的 d^{-2} 缩放比例规则^[3]得到. 这里, d 为原子间的距离.

知道了原子轨道能量以及原子轨道间的相互作用后,电子在晶体系统中的本征态可表示为

$$\sum_{\alpha,i} C(\alpha,i) \mid \alpha,i \rangle$$

其线性组合系数满足本征值方程

$$\sum_{\beta, j} h(\alpha\beta, ij) C(\beta, j) = EC(\alpha, i) \quad (2.29)$$

应用傅里叶变换

$$\begin{aligned} C(\alpha, \mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i C(\alpha, i) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i} \\ H(\alpha\beta, \mathbf{k}\mathbf{q}) &= \frac{1}{N} \sum_{ij} h(\alpha\beta, ij) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j)} \end{aligned} \quad (2.30)$$

这样,式(2.29)便可化成

$$\sum_{\beta, \mathbf{q}} H(\alpha\beta, \mathbf{k}\mathbf{q}) C(\beta, \mathbf{q}) = E(\mathbf{k}) C(\alpha, \mathbf{k}) \quad (2.31)$$

这里,和前面式(2.23)一样, N 是在系统中的原子数目.

由于晶格的平移对称性, $h(\alpha\beta, ij) = h(\alpha\beta, \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$,

$$\begin{aligned} H(\alpha\beta, \mathbf{k}\mathbf{q}) &= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} H(\alpha\beta, \mathbf{k}) = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{ij} h(\alpha\beta, ij) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \\ \sum_{\beta} H(\alpha\beta, \mathbf{k}) C(\beta, \mathbf{k}) &= E(\mathbf{k}) C(\alpha, \mathbf{k}) \end{aligned} \quad (2.32)$$

图 2.8 显示由 sp^3s^* 紧束缚理论计算出的晶体碳和硅的能带结构.

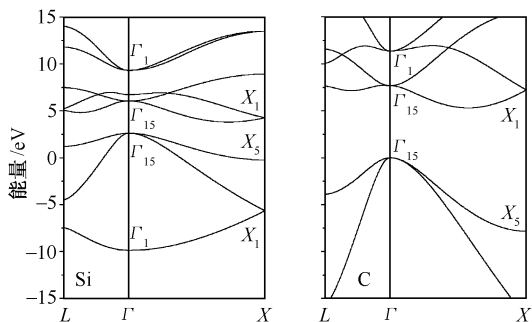


图 2.8 由 sp^3s^* 紧束缚理论计算出的晶体碳和硅的能带结构

在 $Si_{1-y}C_y$ 合金半导体中,由于 Si 和 C 原子在晶格点上的无序排列(参见下节分析), $h(\alpha\beta, ij)$ 不再具有晶格平移对称性,式(2.32)因而不再成立.但是,当我们用长波长,即小波矢 $|\mathbf{k}|$ 情况下 $h(\alpha\beta, ij)$ 的平均值来近似 $h(\alpha\beta, ij)$ 时,式(2.30)中指数项

$$e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j)} = e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_j} \quad (2.33)$$

可以在晶格中一个较大的区域内被近似为一个常量,这就是有效介质近似.设

$$h'(\alpha\beta, ij) = \frac{\sum_{mn} h(\alpha\beta, mn) \delta_{r_m - r_n, r_i - r_j}}{\sum_{mn} \delta_{r_m - r_n, r_i - r_j}} \quad (2.34)$$

$h'(\alpha\beta, ij)$ 在晶格平移下不变, 便有

$$H'(\alpha\beta, \mathbf{k}q) \approx \frac{1}{N} \sum_{ij} h'(\alpha\beta, ij) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i - \mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j)} \quad (2.35)$$

和

$$H'(\alpha\beta, \mathbf{k}q) = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} H'(\alpha\beta, \mathbf{k}) = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \sum_{ij} h'(\alpha\beta, ij) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \\ \sum_{\beta} H'(\alpha\beta, \mathbf{k}) C(\beta, \mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) C(\alpha, \mathbf{k}) \quad (2.36)$$

数学上, 上述方程等同于式(2.32). 必须提醒的是, 此方程的解仅仅对小波矢 $|\mathbf{k}|$ 成立. 这种近似通常对 Γ_{15}' 的价带区顶端成立. 对间接带隙材料, 例如硅的导带则需要更复杂的理论分析.

§ 2.5 合金半导体材料的能带结构

混合两种不同材料是改变材料特性的一种常用技术. 通过某种生长技术把两种半导体 A 和 B 混合成合金时, 必须明确:

(1) 混合材料的晶格结构.

(2) 原子在合金材料内的分布状况. 设 x 为材料 A 的量, 形成 $A_x B_{1-x}$ 时, 有以下几种情况:

- 两种原子分布在材料的不同区域, 形成分凝相;
- 在每个合金格点上, A 原子占据的概率为 x , B 原子占据的概率为 $(1-x)$,

形成随机合金材料, 这就是混晶;

- A 原子和 B 原子按一定的规则形成周期结构, 由此形成超晶格.

电子和光电子工业使用的大多数合金半导体都是不同原子随机分布的混晶材料. 在通常情况下, 偏离随机性将导致器件工作性能变坏.

由同样晶格结构半导体材料组成的混晶的晶格常数一般服从 Vegard 定律

$$a_{\text{合金}} = x a_A + (1-x) a_B \quad (2.37)$$

$a_{\text{合金}}$ 、 a_A 和 a_B 分别是混晶、材料 A 和材料 B 的晶格常数. 在虚晶近似下, 混晶的势能由一个平均周期势近似:

$$V_{\text{合金}}(\mathbf{r}) = x V_A(\mathbf{r}) + (1-x) V_B(\mathbf{r}) \quad (2.38)$$

$V_A(\mathbf{r})$ 和 $V_B(\mathbf{r})$ 是材料 A 和材料 B 如式(2.21)所示的周期晶格势能.

基于同样的考虑, 在用紧束缚近似模型研究混晶半导体能带时, 只要对组分材料的相互作用矩阵元进行加权平均, 便可以得到混晶的相互作用矩阵元. 对直接禁

带半导体材料,材料的禁带宽度 E_g 和电子的有效质量 m^* 满足

$$E_g^{\text{合金}} = xE_g^A + (1-x)E_g^B$$

$$\frac{1}{m_{\text{合金}}^*} = \frac{x}{m_A^*} + \frac{1-x}{m_B^*} \quad (2.39)$$

结合上一小节的理论分析和公式推导,可以知道虚晶近似的物理前提是小波矢.在大多数的电子和光电子器件运用中,对器件性能贡献最大的载流子都分布在小波矢的导带底或价带顶.所以,在器件物理中,虚晶近似是一种很好的近似.

下面集中讨论最具有器件应用背景的金刚石结构(硅和锗)和闪锌矿结构(Ⅲ-V族材料)立方半导体的导带和价带.这类材料的导带一般都由三个能带极小区集合成: $\mathbf{k}=0$ 的 Γ_{15} 对称点; $\mathbf{k}=(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ 的 L 对称点;以及从 $(0,0,0)$ 到 $(\pi/a, 0, 0)$ 、从 $(0,0,0)$ 到 $(0, \pi/a, 0)$ 和从 $(0,0,0)$ 到 $(0, 0, \pi/a)$ 的 Δ 对称线.价带顶端则位于 Γ'_{15} 对称点.一般情况下,这一对称点包含简并的重空穴能带和轻空穴能带,还有因自旋-轨道相互作用引起的自旋分裂能带.

§ 2.5.1 导带

设导带的能量最小值位于 $\mathbf{k}_0$, 能量色散关系 $E(\mathbf{k})$ 可以表示为

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \sum_i \frac{\partial E}{\partial k_i} [k_i - k_{0,i}] + \sum_{ij} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} [k_i - k_{0,i}] [k_j - k_{0,j}] + \dots \quad (2.40)$$

这里, $i, j = x, y, z$. 线性项因为 $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ 转换下空间不变性而消失.在可以忽略高级幂级项的 $\mathbf{k}_0$ 附近, 能量色散关系 $E(\mathbf{k})$ 可以由 $\mathbf{k}$ 的一个二次函数来近似,

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \sum_{ij} \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m} \right]_{ij} [k_i - k_{0,i}] [k_j - k_{0,j}]$$

$$\left[\frac{1}{m^*} \right]_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{\partial^2 E(\mathbf{k})}{\partial k_i \partial k_j} \right]_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_0} \quad (2.41)$$

这里, m_{ij}^* 是电子的有效质量张量.稍后,我们将对有效质量进行专门的讨论.

(1) 球形能带.有效质量张量退化为标量,

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)^2}{2 m^*} \quad (2.42)$$

(2) 椭球形能带.对旋转形椭球,有

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(\mathbf{k}_t - \mathbf{k}_{0,t})^2}{m_t^*} + \frac{(\mathbf{k}_l - \mathbf{k}_{0,l})^2}{m_l^*} \right] \quad (2.43)$$

$\mathbf{k}_l$ 和 $\mathbf{k}_t$ 分别是波矢 $\mathbf{k}$ 的纵向和横向分量, m_l^* 和 m_t^* 则是纵向和横向有效质量.

§ 2.5.2 价带

价带包括重空穴带、轻空穴带以及自旋分裂带,三个能带之间的混合相互作用使得价带情况较导带复杂.具有

$$\frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{m^*}$$

形式的 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 微扰哈密顿量被广泛地用来描述电子的价带.这里, m^* 是载流子的有效质量.和紧束缚近似理论类似,我们首先选择一组基矢: $|x\uparrow\rangle, |y\uparrow\rangle, |z\uparrow\rangle, |x\downarrow\rangle, |y\downarrow\rangle, |z\downarrow\rangle$. 这儿, x, y 以及 z 代表价带与 Γ_{15} 对称点相关的三个轨道波函数, $\uparrow$ 和 $\downarrow$ 代表自旋向上和自旋向下.根据一般的微扰理论,本征态的波函数和能量可以对 $\mathbf{k}$ 进行幂函数展开:

$$\begin{aligned} \psi_\alpha &= |\alpha_0\rangle + \sum_i k_i \psi_i^{\alpha_1} + \sum_{ij} k_i k_j \psi_{ij}^{\alpha_2} \\ &+ \sum_{ijm} k_i k_j k_m \psi_{ijm}^{\alpha_3} + \sum_{ijmn} k_i k_j k_m k_n \psi_{ijmn}^{\alpha_4} + \dots \\ E_\alpha &= E^{\alpha_0} + \sum_i k_i E_i^{\alpha_1} + \sum_{ij} k_i k_j E_{ij}^{\alpha_2} + \sum_{ijm} k_i k_j k_m E_{ijm}^{\alpha_3} \\ &+ \sum_{ijmn} k_i k_j k_m k_n E_{ijmn}^{\alpha_4} + \dots \end{aligned} \quad (2.44)$$

这里, $|\alpha\rangle$ 为六个基轨道波函数之一,上标 $\alpha_0, \alpha_1, \dots$ 代表波函数和能量的修正等级. E^{α_0} 是价带顶的能量,一般被设定为势能零点. $E_i^{\alpha_1}, E_{ijm}^{\alpha_3}$ 和其他奇数级的能量修正项由于对称性的考虑而消失.

在 Dresselhaus, Kip 和 Kittel 著名的 6×6 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理论中^[7],

$$L \equiv E_{xx}^{|\uparrow x\rangle^2}, \quad M \equiv E_{yy}^{|\uparrow x\rangle^2} = E_{zz}^{|\uparrow x\rangle^2}, \quad N \equiv E_{xy}^{|\uparrow x\rangle^2}$$

无应变晶体的价带哈密顿矩阵有如下形式:

$$\begin{aligned} H_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} &= \begin{bmatrix} H & 0_{3 \times 3} \\ 0_{3 \times 3} & H \end{bmatrix} \\ H &= \begin{bmatrix} Lk_x^2 + Mk_y^2 & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_y k_x & Lk_y^2 + Mk_z^2 & Nk_y k_z \\ Nk_z k_x & Nk_z k_y & Lk_z^2 + Mk_x^2 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.45)$$

其中, $k_{ij}^2 \equiv k_i^2 + k_j^2$, $0_{3 \times 3}$ 是 3×3 的零矩阵, L, M 和 N 是能带参数.自旋-轨道相互作用矩阵为^[8]

$$H_{\text{so}} = \frac{\Delta}{3} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 1 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & -1 & i & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -i & -i & 0 & 0 \\ 1 & i & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.46}$$

表 2.4 列出了硅和锗的能带参数 L, M, N 和 Δ ^[7,8].

表 2.4 硅和锗 $k \cdot p$ 模型的价带参数

参量	单位	硅	锗
L	$\text{eV} \cdot \text{\AA}^2$	-25.51	-143.32
M	$\text{eV} \cdot \text{\AA}^2$	-15.17	-22.90
N	$\text{eV} \cdot \text{\AA}^2$	-38.10	-161.22
Q	$\text{eV} \cdot \text{\AA}^4$	-125.0 ^[9]	
Δ	eV	0.044	0.282
a	eV	2.1	2.0
b	eV	-1.5	-2.2
d	eV	-3.4	-4.4
a_0	\AA	5.4309	5.6561
c_{11}	10^6N/cm^2	16.56	12.853
c_{12}	10^6N/cm^2	6.39	4.826

式(2.45)仅仅包括了 $k_i k_j$ 的幂级项.对于大 $\mathbf{k}$ 空穴的高能态,必须引入 k_i 的更高幂级项.在一级近似下,可以假设 $E_{xxx}^{\alpha_4} = Q$ 是一个与 $|\alpha\rangle$ 无关的常量,而且,如果 i, j, m 和 n 不同,则 $E_{ijmn}^{\alpha_4} = 0$,

$$H = \begin{pmatrix} Lk_x^2 + Mk_{yz}^2 + Qk_x^4 & Nk_x k_y & Nk_x k_z \\ Nk_y k_x & Lk_y^2 + Mk_{zx}^2 + Qk_y^4 & Nk_y k_z \\ Nk_z k_x & Nk_z k_y & Lk_z^2 + Mk_{xy}^2 + Qk_z^4 \end{pmatrix} \tag{2.47}$$

表 2.4 中所列出的硅的 Q 值是通过计算不同掺杂浓度下的费米能级,并与实验相比较而得到的^[9].

由于晶格常数失配引起的晶格应变可以由价带区形变势矩阵 $H_{\text{形变}}$ 表示^[10]

$$H_{\text{形变}} = \begin{bmatrix} H' & 0_{3 \times 3} \\ 0_{3 \times 3} & H' \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

这里,

$$H' = \begin{bmatrix} l\epsilon_{xx} + m(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) & n\epsilon_{xy} & n\epsilon_{xz} \\ n\epsilon_{yx} & l\epsilon_{yy} + m(\epsilon_{zz} + \epsilon_{xx}) & n\epsilon_{yz} \\ n\epsilon_{zx} & n\epsilon_{zy} & l\epsilon_{zz} + m(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

参数 l 、 m 和 n 由形变势参数 a 、 b 和 d 定义为

$$a = \frac{l+2m}{3}, \quad b = \frac{l-m}{3}, \quad d = \frac{n}{\sqrt{3}} \quad (2.50)$$

考虑一个在(001)硅衬底上沿 z 方向生长的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 层. 衬底具有立方结构, 晶格常数为 a_s . $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 层有一个无应变晶格常数

$$a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = (1-x)a_{\text{Si}} + xa_{\text{Ge}} \quad (2.51)$$

a_{Si} 和 a_{Ge} 分别为硅和锗体材料的晶格常数. 在(001)硅衬底上生长的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 外延层在垂直于[001]方向的 xy 平面上有双轴应变,

$$\epsilon_1 = \epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}}{a_s} \quad (2.52)$$

以便与硅衬底进行晶格匹配, 即 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 层在 xy 平面上的晶格常数 $a_{xy} = a_s$; 由于泊松效应, 样品在 z 方向, 即[001]方向上有单轴应变

$$\epsilon_2 = \epsilon_{zz} = -\frac{\epsilon_1}{\sigma} \quad (2.53)$$

这里, σ 是泊松率. 对生长在(001)衬底上的样品,

$$\sigma = \frac{c_{11}}{2c_{12}} \quad (2.54)$$

c_{11} 和 c_{12} 是材料的刚性张量分量.

$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 层的其他应变分量为零, 即如果 $i \neq j$, $\epsilon_{ij} = 0$.

图 2.9 显示了分别在 Si 和 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 衬底上生长的 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 和 Si 合金半导体的价带结构. 这里, 我们取不考虑自旋-轨道相互作用时的合金材料价带顶作为势能零点. 在无应变的 $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ 和 Si 材料中, 重空穴能带和轻空穴能带在 $k_z = 0$ 点是简并的. 然而, 在伸张(压缩)应变的 $\text{Si}(\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3})$ 材料中, 轻空穴带发生了向上(向下)的移动, 重空穴带则不受应变太大的影响.

如前所讨论, 在异质结构的界面上存在有价带能量偏移. 考虑[001]生长方向并设 ΔE_v 为价带顶 Γ'_{15} 对称点的能带偏移值, van de Walle 和 Martin^[11] 得到 ΔE_v 与晶格常数 a_{xy} 的线性关系: 对生长在(001)硅上的 $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ 异质结构,