

第 1 章 半导体中光子-电子的互作用

1.1 半导体中量子跃迁的特点

在光电子学中，一切与光有关的现象从本质上都可以认为是量子现象，或者说是物质中有关量子互作用和能量相互转换的结果，都是与量子跃迁联系在一起的。与通常两能级系统中跃迁发生在分立能级的单个电子态之间的情况不同，在半导体中与光有关的量子（电子或空穴，并统称为载流子）跃迁发生在导带与价带之间。与这种跃迁相联系的光现象有以下三种。

(1) 受激吸收：当适当能量的光子与半导体互作用，并把能量传递给价带中的电子，使之跃迁到导带，从而在半导体中出现电子-空穴对，这就是受激吸收，也是光电导、光探测器的工作原理，如图 1.1-1(a)所示。

(2) 自发发射：在热平衡下，如果在半导体的导带与价带中分别有一定数量的电子与空穴，导带中电子以一定的几率与价带中空穴复合并以光子形式放出复合所产生的能量，则称这一过程为自发发射跃迁，这是半导体发光二极管（LED）的工作原理，如图 1.1-1(b)所示。即使在半导体激光器中也可能存在一定比例的自发发射分量。

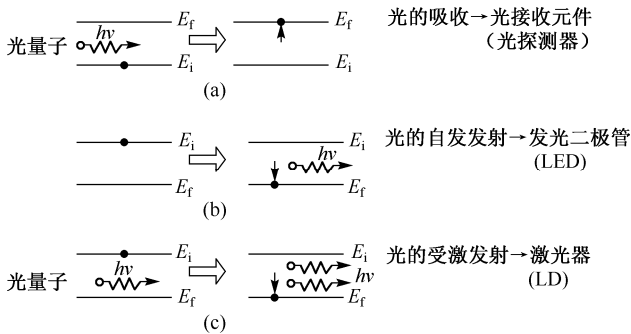


图 1.1-1 在半导体中与跃迁有关的三种光效应
(E_i 为跃迁初态能量， E_f 为跃迁终态能量)

(3) 受激发射：若上述导带电子与价带空穴复合过程不是自发的，而是在适当能量的光子激励下进行的，则由复合产生的光子就与激发该过程的光子有完全相同的特性（包括频率、相位和偏振等），这种跃迁过程称为受激发射。这是半导体激光器（LD）、半导体光放大器（SOA）的工作原理，如图 1.1-1(c)所示。

显然，上述三种过程是相互联系但又有区别。受激吸收与受激发射是互逆的跃迁过程，而受激发射与自发发射的区别在于这种辐射跃迁中是否有外来光子的参与。而且，在实际的光电子器件中，有可能存在上述一种或并存两种、三种跃迁过程，只是在一定条件下某一跃迁过程占主导地位罢了。以后还将看到，一些常用的半导体激光器、发光二极管和半导体光

探测器在材料和结构上有一些共同的基础。事实上，半导体激光器在一定工作条件下（例如在零偏压下）可用来作光探测器；而在半导体激光器芯片解理面完全增透的情况下，依偏置电流的大小将呈现出自发发射或超辐射的特性。

正是由于半导体中的量子跃迁不是发生在分立的、有限的电子态之间，而是发生在非局部能级的导带与价带之间，因而使半导体在光电子学中有异于通常两能级激光模型的突出特点和重要地位：

(1) 半导体能带中存在高的电子态密度，因而在半导体中有可能具有很高的量子跃迁速率。可以得到比其他气体或固体激光工作物质高几个数量级的光增益系数（如体材料可达 10^2cm^{-1} ，量子阱材料可达 10^3cm^{-1} 量级）。

(2) 在半导体同一能带内处在不同激励状态的电子态之间存在相当大的相互作用（或大的公有化运动），这种相互作用碰撞过程的时间常数与辐射过程的时间常数相比是很短的，因而能维持每个带内激励态之间的准平衡。一旦由于电子跃迁留下的空态，将迅速由其他原来未包括在跃迁过程中的电子所补充，这种载流子通过带内松弛的再分布过程几乎是瞬时完成的。因此，半导体激光器或其他半导体光电子器件有很高的量子效率和很好的高频响应特性。

(3) 半导体中的电子态可以通过扩散或传导在材料中传播，可以将载流子直接注入发光二极管或激光器的有源区中，因而有很高的能量转换效率。

(4) 在两能级的激光系统中，每一处于激发态的电子有它唯一返回的基态（即某一特定的原子态）。在理想的本征半导体（或电离能非常小的杂质半导体）中，这一跃迁选择定则还能成立，即每一被激发到导带的电子，存在唯一允许它返回的价带态。而实际上，由于半导体材料本身不纯或在载流子之间存在相互作用，跃迁选择定则受到扰动而变得不严格，电子跃迁发生在大量的导带电子与价带空穴之间。这种结果所造成的影响之一是使半导体激光器的光谱线宽较宽。

以上所述的只是半导体中与量子跃迁有关的一些特点。至于跃迁所需遵守的定则，跃迁速率及其影响因素将在以下各节详细分析。

1.2 直接带隙与间接带隙跃迁^[1]

1.2.1 概述

1.1 节所述的电子在半导体能带之间的跃迁过程，实质上是非平衡载流子的产生与复合过程。跃迁速率取决于与跃迁有关的初态、终态的细节。按照量子力学原理，半导体中的电子态是用含有与晶格周期有关的波函数来描述的，其电子波函数的波矢量 \mathbf{k} 是一个重要的状态变量。一般来说，半导体能带中电子的能量 E 和波矢量 \mathbf{k} 之间是一个非常复杂的、多极值的关系，并表现出复杂的能带结构。半导体的能带结构因材料而异。图 1.2-1 表示出 Ge、Si 和 GaAs 三种半导体的能带结构 ($E\sim k$ 图)。电子的跃迁发生在导带能量极小值和价带电子能量极大值之间，如果电子跃迁的初、终态对应着布里渊区的同一波矢 \mathbf{k} ，则在能带图上表现为竖直方向的跃迁，故称这种跃迁为竖直跃迁，如同电子在 GaAs 等多数 III~V 族和 II~VI 族化合物半导体中跃迁的情况；相反，若跃迁所涉及的初、终态不对应同一波矢 \mathbf{k} ，且其

差值大于晶格常数的倒数，则由能带图可以看出，电子在导带极小值与价带极大值之间的跃迁为非垂直方向，因而得名非垂直跃迁，电子在 Ge、Si 中的跃迁就属于这种情况。GaAs 等多数半导体中的垂直跃迁对应着布里渊区的中心点 (Γ)，此处的 $k = 0$ 。而另一些垂直跃迁半导体（如 IV-VI 族化合物）则有多个导带能量最小值和价带能量最大值与布里渊区中心呈对称分布，这种简并态使同一 k 值的态密度增加。

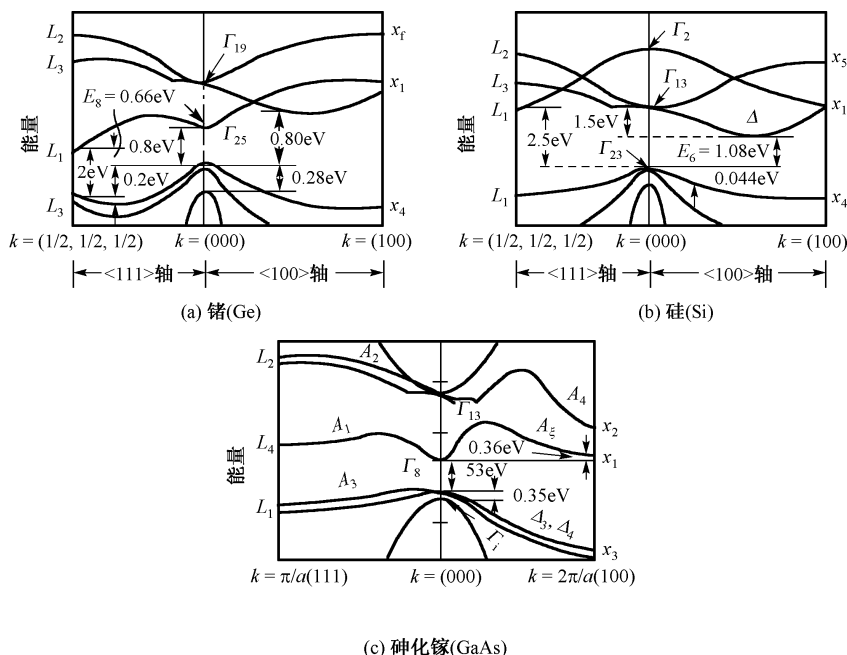


图 1.2-1 Ge, Si 和 GaAs 的能带图

不管是垂直跃迁还是非垂直跃迁，也不论是吸收光子还是发射光子，量子系统总的动量或能量必须守恒，这就叫跃迁的 k 选择定则。设与电子跃迁有关的初态能量和动量分别为 E_i 和 $\hbar k_i$ ，而终态的能量和动量分别为 E_f 和 $\hbar k_f$ ，进一步假设跃迁过程只涉及一个光子，则上述能量和动量守恒定律可表示为

$$E_i - E_f - \hbar\nu = 0 \quad (1.2-1)$$

$$\hbar(k_i - k_f - k_p) = 0 \quad (1.2-2)$$

式中， $\hbar\nu$ 为光子的能量， $\hbar k_p$ 为光子的动量。光子的波数是很小的，如波长为 $1\mu\text{m}$ 时， $k_p \approx 6 \times 10^4 \text{ cm}^{-1} \ll \pi/a$ (π/a 为布里渊区边界的波数， a 为晶格常数)，因而可以将光子的动量忽略不计。由式 (1.2-2) 有 $k_i = k_f$ ，这正是垂直跃迁的表述。由式 (1.2-1) 和式 (1.2-2) 所表示的能量和动量守恒定律只适合于仅有电子、空穴和光子这三种量子参与的垂直跃迁。因为这种守恒是它们之间直接的、自持的平衡，故又称垂直跃迁为直接带隙跃迁或直接跃迁。从量子力学的观点来看，这种跃迁属一级微扰过程，因而有较高的跃迁几率，所有用做半导体光辐射器件 (LD 和 LED) 的有源区材料必须选用直接带隙跃迁半导体。

如果半导体中电子跃迁的初态和终态的 k 值不相等， $k_i \neq k_f$ ，这时在导带底与价带顶之间的跃迁就不遵守由式 (1.2-2) 所表示的准动量守恒，但实验上却观察到电子由价带顶到导

带底跃迁所引起的吸收，所以一定有另外的过程使得跃迁的初态和终态不为同一 k 值时仍能满足准动量守恒，这就是有声子参与的吸收与发射过程。由于多声子过程较单声子过程发生的几率小得多，故在此只考虑单声子参与的跃迁过程。如果令声子的波矢为 k_s ，这时的准动量守恒变为

$$\hbar(k_i - k_f - k_p \pm k_s) = 0 \quad (1.2-3)$$

如果略去光子的动量，则有

$$\hbar(k_i - k_f \pm k_s) = 0 \quad (1.2-4)$$

与此过程相对应的能量守恒为

$$(E_i - E_f - hv \pm \hbar\omega_s) = 0 \quad (1.2-5)$$

式中， $\hbar\omega_s$ 表示声子的能量，实质是晶格热振动能量的量子化形成的微观粒子。符号“ \pm ”有双重意义，若由吸收光子所激发的电子由价带顶到导带底的跃迁（受激吸收），则式中的正号代表吸收声子而负号代表发射声子，如图 1.2-2(a)所示。若跃迁过程是导带底的电子跃迁到价带顶并发射光子，则上式中的正号表示发射声子，负号表示吸收声子，如图 1.2-2(b)所示。与前面的直接带隙跃迁相比，这种有声子参加才满足准动量守恒的跃迁被称为间接带隙跃迁或间接跃迁，这种有四种量子参与的跃迁过程属二级微扰过程，其跃迁几率比前面所述的一级微扰过程小得多。因此，不能用间接带隙跃迁半导体来作半导体激光器或发光二极管的有源材料。无疑，对理想的半导体光电探测器，其吸收区也宜用直接带隙跃迁材料。但对于声子 $\hbar\omega_s$ 所参与的跃迁过程，只要入射光子的能量 $\hbar\omega > E_g$ (E_g 为半导体材料的禁带宽度或带隙)，那么价带内距价带顶能量范围为 $(-\hbar(\omega \pm \omega_s) - E_g)$ 的电子以及导带内距导带底能量范围为 $(\hbar(\omega + \omega_s) - E_g)$ 的电子空态都能参与跃迁，这就使参与跃迁的状态范围扩大，这在一定程度上弥补了间接带隙跃迁几率小的因素，而使总的跃迁几率并不太小。基于这点，目前硅是在短波段 ($0.6 \sim 1.0 \mu\text{m}$)、锗是在长波段 ($1.0 \sim 1.7 \mu\text{m}$) 可用的光探测器的光吸收材料。

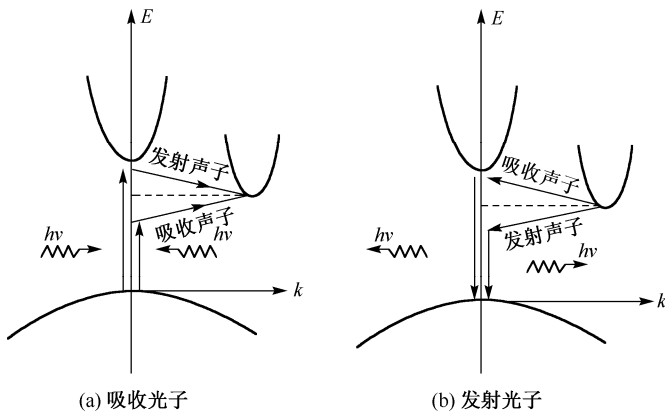


图 1.2-2 间接带隙跃迁

1.2.2 电子在能带之间跃迁的几率^[2, 3]

为了更深刻地理解电子在半导体能带之间跃迁的特点，有必要了解电子在上述两种跃迁类型中产生跃迁的几率，它是决定电子在半导体能带之间产生受激跃迁和自发辐射跃迁速率

的一个基本量。决定跃迁几率的基本出发点是考虑到与半导体中电子相互作用的辐射场是一个随时间周期变化的函数，因此，处理半导体中电子与光子相互作用的量子力学系统时要使用与时间有关的微扰论。为此，首先要确定包括微扰（把辐射场看成是微扰）在内的描述量子力学系统能量的哈密顿量和描述该系统信息的波函数，再对与时间有关的薛定谔方程求解，从而得出反映电子在辐射场作用下跃迁几率的大小。

电子在辐射场所受到的力是非保守力，因此用矢量场而不用标量场来表示辐射场。设辐射场的矢量势为 \mathbf{A} ，受到其微扰的量子力学系统的哈密顿量可表示为

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.2-6)$$

式中， m 为电子质量， \mathbf{P} 为电子的动量，相应的动量算符 $\mathbf{P} = -j\hbar\nabla$ ，其中 ∇ 是熟知的劈形或梯度算符， $V(\mathbf{r})$ 为随空间坐标 \mathbf{r} 变化的晶格周期势。对于散度 $\text{div}\mathbf{A} = 0$ 的电磁场，交换律 $\mathbf{P}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{P}$ 成立。将式 (1.2-6) 展开，可以将辐射电磁场与电子互作用的哈密顿量写为

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{j e \hbar}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2 \mathbf{A}^2}{2m} \quad (1.2-7)$$

如果忽略含 \mathbf{A}^2 的非线性项，并与本征量子力学（未受微扰）的哈密顿量 $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$

比较就可得到微扰势 \mathbf{H}' 为

$$\mathbf{H}' = \frac{j e \hbar}{m} \mathbf{A} \cdot \nabla \quad (1.2-8a)$$

或者

$$\mathbf{H}' = -\frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{P} \quad (1.2-8b)$$

现在就可以将式 (1.2-8) 定义为系统互作用哈密顿量。令矢量势为空间和时间的函数，并表示为

$$\mathbf{A} = A_0 \mathbf{a} \exp[j(k_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-9)$$

式中， A_0 为矢量势场的振幅， k_p 为辐射光场的波矢， ω 为辐射场的角频率， \mathbf{a} 为单位矢量。为了求出 A_0 ，利用场论知识可以合理地将矢量势与电场强度 E 的关系表示为

$$-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \mathbf{E} \quad (1.2-10)$$

其中电场强度 \mathbf{E} 为

$$\mathbf{E} = eE_0 \exp[j(k_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-11)$$

式中 e 为电场的单位矢量，所以式 (1.2-9) 可写为

$$\mathbf{A} = \frac{E_0}{j\omega} \mathbf{a} \exp[j(k_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-12)$$

因而有

$$|\mathbf{A}|^2 = |\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^*| = \left(\frac{E_0}{\omega} \right)^2 \quad (1.2-13)$$

为了进一步表示 A_0 , 需计算电场强度 E_0 。为此, 把由坡印廷矢量的实部给出的电磁通量 (光子通量) 与光子能量 $\hbar\omega$ 联系起来。坡印廷矢量的实部为

$$|\mathbf{S}| = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*) \quad (1.2-14)$$

式中, \mathbf{H}^* 为磁场强度矢量的共轭 (注意不要与哈密顿算符的习惯表示混淆), 它可由电场强度矢量利用麦克斯韦方程求得

$$\mathbf{H} = \left(\frac{\mathbf{a}_\perp E_0 k_p}{\mu_0 \omega} \right) \exp[\mathbf{j}(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-15)$$

式中, \mathbf{a}_\perp 是与 \mathbf{a} 垂直的单位矢量, $k_p = \bar{n}\omega/c$, c 为真空中的光速, \bar{n} 为半导体材料的折射率, μ_0 为真空中的导磁率。将式 (1.2-11) 和式 (1.2-15) 代入式 (1.2-14) 后得到

$$|\mathbf{S}| = \frac{1}{2} \left(\frac{E_0^2 k_p}{\mu_0 \omega} \right) \quad (1.2-16)$$

另外, 光子通量是光子能量 $\hbar\omega$ 与其群速 (c/\bar{n}) 之积, 而 $c^2 = 1/(\mu_0 \epsilon_0)$, ϵ_0 为真空中的介电常数, 因而有

$$\frac{\hbar\omega c}{\bar{n}} = \frac{1}{2} \bar{n} \epsilon_0 E_0^2 c \quad (1.2-17)$$

由式 (1.2-13) 和式 (1.2-17) 可以得到

$$|\mathbf{A}|^2 = \frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \quad (1.2-18)$$

因此, 可以将 \mathbf{A} 最后表示为

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[\mathbf{j}(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (1.2-19)$$

将式 (1.2-19) 代入式 (1.2-8b), 便得到辐射场与半导体中电子相互作用的哈密顿量为

$$\mathbf{H}' = -\mathbf{a} \frac{e}{m} \left(\frac{2\hbar}{\epsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[\mathbf{j}(\mathbf{k}_p \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \cdot \mathbf{P} \quad (1.2-20)$$

在得到相互作用哈密顿量以后, 下一步便是要找到描述该量子系统的波函数。所有在晶格周期势场中运动的电子波函数, 都可以表示为反映晶格周期特点的布洛赫函数 $u(\mathbf{r})$ 和具有某一波矢 \mathbf{k} 的平面波函数之积, 即反映出晶体中的电子波函数为周期函数 $u(\mathbf{r})$ 所调制的自由电子波函数的物理意义。先考虑在某一体积 V 内只有单个电子和空穴、电子在能带之间跃迁的简单情况。设跃迁的初态用导带电子波函数 $\Psi_2(\mathbf{r})$ 表示, 跃迁的终态用价带空穴波函数 $\Psi_1(\mathbf{r})$ 表示, 两者都归一化到体积 V , 这种对初、终态的假设是无关紧要的。事实上, 后面将看到如令电子从价带跃迁到导带, 其跃迁几率和相反过程的跃迁几率是相同的。

$$\Psi_2(\mathbf{r}, t) = V^{-1/2} u_2(\mathbf{r}) \exp[\mathbf{j}(\mathbf{k}_c \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t)] \quad (1.2-21)$$

$$\Psi_1(\mathbf{r}, t) = V^{-1/2} u_1(\mathbf{r}) \exp[\mathbf{j}(\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t)] \quad (1.2-22)$$

至此, 已求得了相互作用哈密顿量 \mathbf{H}' 和有关的波函数。将它们代入薛定谔方程求解即可得到跃迁几率 B_{21} , 这也就是著名的费米“黄金准则”, 表示为

$$B_{21} = \frac{\pi}{2\hbar} \left| \langle \Psi_2^*(r, t) | \mathbf{H}' | \Psi_1(r, t) \rangle \right|^2 \quad (1.2-23)$$

将式 (1.2-20)、式 (1.2-21) 和式 (1.2-22) 代入式 (1.2-23) 便得到

$$\begin{aligned} B_{21} = & \frac{\pi}{2\hbar} \left| \left\langle V^{-1/2} u_2^*(r) \exp[j(-k_c \cdot r + \omega_2 t)] \right\rangle \leq \right. \\ & \times \left| -\mathbf{a} \times \frac{e}{m} \left(\frac{2\hbar}{\varepsilon_0 \bar{n}^2 \omega} \right)^{1/2} \exp[j(k_p \cdot r - \omega t)] \cdot \mathbf{P} \right| \\ & \times \left. V^{-1/2} u_1(r) \exp[j(k_v \cdot r - \omega_1 t)] \right|^2 \end{aligned} \quad (1.2-24)$$

考虑到动量算符 $\mathbf{P} = -j\hbar\nabla$ ，而其中梯度算符 ∇ 是沿电磁场电矢量方向，同时取光的偏振方向平行于 k_v ，则可列出在外光场作用下导带电子向价带跃迁的几率为

$$\begin{aligned} B_{21} = & \frac{\pi e^2 \hbar}{m^2 \varepsilon_0 \bar{n}^2 \hbar \omega} \left| \left\langle \frac{\hbar}{2\pi j} V^{-1} \exp[j(\omega_2 - \omega_1 - \omega)t] \right\rangle \right. \\ & \times \left. \exp[j(k_p - k_c + k_v) \cdot r] u_2^*(r) (jk_v + \nabla) u_1(r) \right|^2 \end{aligned} \quad (1.2-25)$$

当光辐射场与半导体中电子发生共振相互作用时，即满足 $\omega = \omega_2 - \omega_1$ ，则上式括号中第一个指数变为 1。由式 (1.2-25) 还可以看到，当满足

$$k_p - k_c + k_v = 0 \quad (1.2-26)$$

时，则括号中第二个指数也变为 1，这时括号中就有非零值。然而式 (1.2-26) 正是竖直跃迁动量守恒表示式 (1.2-2) 的另一种具体表述。这就从理论上证明，只有当半导体中的电子在辐射场作用下满足动量守恒 (k 选择定则) 所产生的跃迁才有最大的跃迁几率。

式 (1.2-25) 中符号 $\langle \dots \rangle$ 中的乘积常被称为跃迁矩阵元或动量矩阵元，并用 M 表示。基于电子与辐射场所产生的竖直共振跃迁，则 M 可变成如下的简单形式：

$$\begin{aligned} M = & \frac{\hbar}{2\pi j} \frac{1}{V} \left\langle u_2^*(r) (jk_v + \nabla) u_1(r) \right\rangle \\ = & \frac{\hbar}{2\pi j} \frac{1}{V} \int u_2^*(r) (jk_v + \nabla) u_1(r) d^3 r \end{aligned} \quad (1.2-27)$$

至此，可将跃迁几率写为

$$B_{21} = \frac{\pi e^2 \hbar}{m^2 \varepsilon_0 \bar{n}^2 \hbar \omega} |M|^2 \quad (1.2-28)$$

要想从式 (1.2-27) 中得到矩阵元 M 的值，就需知道布洛赫函数的具体形式，在此不详细去研究这些函数，而直接列出凯恩 (Kane) 对直接带隙跃迁 III-V 族化合物半导体动量矩阵元的近似^[4]

$$|M|^2 \approx \frac{m_0^2 E_g}{3m_c} \cdot \frac{1 + \Delta/E_g}{1 + (2/3)\Delta/E_g} \left\{ 1 - \frac{m_c}{m_0} \right\} \quad (1.2-29)$$

式中， m_0 为自由电子质量， m_c 为导电电子的有效质量， E_g 为禁带宽度， Δ 是在 1.6 节中还将讨论的自旋-轨道裂矩带至价带顶的能量大小。以 GaAs 半导体为例，设 $m_c = 0.067m_0$ ， $E_g = 1.42\text{eV}$ ，

$\Delta = 0.33\text{eV}$ ，将这些值代入式 (1.2-29)，则有

$$|M|_{\text{GaAs}}^2 = 4.96m_0E_g \quad (1.2-30)$$

将式 (1.2-29) 代入式 (1.2-28)，并令 $h\nu = E_g$ ，则可近似得到 III-V 族化合物半导体中电子的辐射跃迁几率为

$$B_{21} = \frac{e^2\hbar}{6m_c\epsilon_0\bar{n}^2} \cdot \frac{1 + \Delta/E_g}{1 + (2/3)\Delta/E_g} \left\{ 1 - \frac{m_c}{m_0} \right\} \quad (1.2-31)$$

由上式可以看出，跃迁几率与 E_g 基本无关，不同半导体中电子跃迁几率的差别在很大程度上取决于电子的有效质量。

对竖直跃迁矩阵元式 (1.2-27) 稍做深入的分析，我们还将发现在竖直跃迁类型中还存在允许的和非允许的（禁戒）跃迁。将式 (1.2-27) 分解为

$$M = \frac{\hbar}{2\pi j} V^{-1} [u_2^*(r)\nabla u_1(r)d^3r + jk_v \int u_2^*(r)u_1(r)d^3r] \quad (1.2-32)$$

因为 ∇ 是奇宇称算符，所以只有当满足动量守恒式 (1.2-26)，且满足 $u_2^*(r)$ 与 $u_1^*(r)$ 具有相反宇称时才使式 (1.2-32) 中第一项积分不为零。这时所产生的跃迁为允许的竖直跃迁。相反，若 $u_2^*(r)$ 与 $u_1^*(r)$ 具有相同宇称，则式 (1.2-32) 中第一项积分为零，而第二项积分对矩阵元只产生很小的贡献，因而跃迁几率很小，这种竖直跃迁为非允许的跃迁。前者对应 GaAs、InP 等半导体中导带极小值与价带极大值均处于 $k=0$ 的情况，此时价带是原子的 s 态，导带是原子的 p 态；后者对应 Ge 等半导体，其价带极大值与导带极小值不对应同一 k 值，导带与价带分别由原子的 d 态和 s 态构成，这种非允许的直接带隙跃迁几率虽小，但不为零。有关这方面的问题在 9.1 节中还将详细分析。

1.2.3 电子在浅杂质能级和与其相对的能带之间的跃迁

在掺杂的半导体中，存在着束缚在局部能级（施主或受主能级）上的电子或空穴与相对能带（即施主能级与价带或受主能级与导带）中的自由载流子之间发生相互作用而产生跃迁。这时，前面所提到的由动量守恒所得出的严格 k 选择定则被松弛或不再成立，跃迁矩阵元变成只与能量有关。

束缚电子的波函数可以写成与晶格周期有关的布洛赫函数 $u(r)$ 与类氢原子中的电子态波函数 $\Psi_{\text{env}}(r)$ 之积，即

$$\Psi_1(r) = \Psi_{\text{env}}(r)u_1(r) \quad (1.2-33)$$

式中， $\Psi_{\text{env}}(r)$ 是一个依指数衰减但相对晶格周期来说变化很缓慢的函数，其形式为

$$\Psi_{\text{env}}(r) = \pi^{-1/2} \left(\frac{1}{a^*} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-r}{a^*} \right) \quad (1.2-34)$$

式中， $a^* = 4\pi\epsilon\hbar^2 / m^*e^2$ 是束缚态的有效玻尔半径， m^* 为束缚态的有效质量， ϵ 为介电常数，对 GaAs 的束缚电子或空穴的有效玻尔半径分别为 100\AA 和 10\AA ，这作为表征电子运动的特征尺寸将在第 6 章用到。

与束缚态相对的能带中自由载流子波函数可以取抛物线能带近似中波矢为 k_0 的平面波函

数。例如，在不考虑时间因素时，导带电子的波函数有和式 (1.2-21) 相同的形式，即为

$$\Psi_2(r) = V^{1/2} u_2 \exp(jk_b \cdot r) \quad (1.2-35)$$

式中， $u_2(r)$ 为抛物线能带的布洛赫函数。至此，就可将杂质能级与相对能带之间的跃连矩阵元写为

$$M_{bi} = V^{-1/2} \int_v \Psi_{env}^*(r) u_1^*(r) \mathbf{P} u_2(r) \exp(jk_b \cdot r) d^3r \quad (1.2-36)$$

式中， \mathbf{P} 为动量算符。或者将式 (1.2-36) 写成

$$M_{bi} = V^{-1/2} \langle u_1^*(r) | \mathbf{P} | u_2(r) \rangle \int_v \Psi_{env}^*(r) \exp(jk_b \cdot r) d^3r \quad (1.2-37)$$

式 (1.2-37) 中的积分为矩阵元的包络部分，写做

$$M_{env} = \int_v \Psi_{env}^*(r) \exp(jk_b \cdot r) d^3r \quad (1.2-38)$$

矩阵元 $\langle u_1^*(r) | \mathbf{P} | u_2^*(r) \rangle$ 是本征带的布洛赫平均矩阵元或带间跃迁矩阵元 M_{bb} 。对 III-V 族化合物半导体的 $|M_{bb}|^2$ 已由式 (1.2-29) 给出。因此

$$M_{bi} = M_{bb} M_{env} \quad (1.2-39)$$

将式 (1.2-34) 代入式 (1.2-38) 并完成适当的积分后就得到

$$|M_{env}|^2 = \frac{64\pi a^{*3}}{(1 + a^{*2} k_b^2)^4 V} \quad (1.2-40)$$

当跃迁发生在浅受主能级与导带之间时，式中 $k_b = (2m_e E_c / \hbar^2)^{1/2}$ ，其中 E_c 是从导带底算起的导带电子能量。图 1.2-3 给出了 $|M_{env}|^2 (V / a^{*3})$ 与 $a^* k_b$ 之间的关系。由图看出，与跃迁相联系的电子可能产生的跃迁主要是与那些 $k_b < 1/a^*$ 的空穴态相关的。因为， k_b 出现在式 (1.2-40) 的分母中，所以随着较低能量的导带被填满而使这种浅受主能级与导带之间的跃迁几率减小。也就是说，这种不遵守 k 选择定则的跃迁矩阵元是与能量有关的。随着空穴浓度的增加，束缚电子的跃迁几率起初成比例地增加，但随着低能态空穴的占满和高能态空穴的 $|M_{env}|^2$ 趋向零，跃迁几率将趋向一个有限值，即达到带与带之间的跃迁几率。这就说明，尽管上面所说的是浅受主能级与导带间的跃迁，但不管是受主还是施主能级，只要与晶格间距相比所发生的宏观变化仍能用正常晶格波函数描述任何电子或空穴态，就可用一个结合的矩阵元将它们耦合到相对能带中的所有态，而该矩阵元最终值总是等于带间矩阵元 M_{bb} 。

这种离化的杂质态向相对能带的跃迁，对半导体的光吸收将产生影响，在吸收谱中将出现由此产生的吸收峰，即使光子能量略小于 E_g ，也能导致光电导。

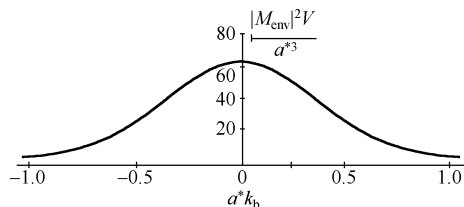


图 1.2-3 束缚电子与相对能带中自由电子之间辐射复合概率与 $a^* k_b$ 的函数关系

1.2.4 重掺杂下带-带跃迁

当掺杂浓度高到一定程度时，杂质原子外层电子的波函数（按经典说法是外层电子运动的轨道）发生相互交叠而形成杂质能带，当杂质带与本征抛物线能带相接时，就相当于原来的导带或价带长出了一个带尾，相当于带隙变窄，因而光谱变宽。

因为杂质相对于晶格来说是随机分布的，因此，带尾的形成是各杂质电势无规则涨落的结果。处在带尾中的电子或空穴态，既不同于本征带内的电子或空穴态，又区别于处于单个杂质原子上的束缚态，这就需要有另外一种形式的波函数来描述它们，因而也有一种与这种波函数有关的矩阵元来反映涉及与能带尾态跃迁的有关特点。

斯特恩（Stern）^[5]对高掺杂半导体中的跃迁几率作了理论分析，为了反映出在带尾中的半局部电子态的特点，提出了一个既有晶体中电子所具有的周期性特点，又有如束缚电子那样其振幅随距离杂质中心位置指数衰减的波函数（ad hoc 波函数），和前面描述杂质能级上的束缚电子一样，这种波函数也表示为一个包络函数 Ψ_{env} 与一个布洛赫函数之积，所不同的是 Ψ_{env} 取以下形式：

$$\Psi_{\text{env}} = \left(\frac{\beta^3}{\pi} \right)^{1/2} \exp(\mathbf{jk} \cdot \mathbf{r}) \exp[-\beta(r - r_i)] \quad (1.2-41)$$

式中， β 是一个决定波函数从中心点 $r - r_i$ 衰减速率的系数， k 是反映出平面波特点的波矢量， k 和 β 可以这样确定，设施主杂质带底以上能量为 E' 的某一特定态的 k 值等于本征抛物导带底 E_c 以上某一能量为 E^* 的态的 k_c 值，则有

$$\frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_e} = E^* - E_c \quad (1.2-42)$$

$$\frac{\hbar^2 \beta^2}{2m_e} = h_c(E^* - E') \quad (1.2-43)$$

式中， E_c 为本征导带底， m_e 为本征带电子有效质量， h_c 为与带尾形状有关的拟合因子。

可以用前面所述求单个束缚态跃迁矩阵元方法得出重掺杂下的跃迁矩阵元，只需将由式 (1.2-41) 所表示的包络函数的共轭复数代替式 (1.2-38) 中的 Ψ_{env}^* ，然后，在所有波矢量方向上对所有局部波函数中心位置积分，求平均而得出 M_{env} ，所要求的矩阵元同样可表示为本征带间跃迁矩阵元 M_{bb} 与 M_{env} 之积。

图 1.2-4 画出了净受主浓度为 $1.2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ 的 GaAs 半导体的 $|M_{\text{env}}|^2 (1 + \rho_c / \rho_v)^{-1}$ 与本征价带顶向上算起的空穴能量 ($E'' - E_v$ 取正值) 的关系 (ρ_c 和 ρ_v 是后面将谈到的导带和价带的态密度)。图 1.2-4 中虚线表示有效质量小的轻空穴，实线表示有效质量大的重空穴。显然，在同样光子能量下，轻空穴的跃迁几率比重空穴大，图中画出了三种不同光子能量的情况。随着 ($E'' - E_v$) 的增加，参与跃迁的空穴移向空穴态密度逐渐减少的杂质带顶，因而参与跃迁的空穴能量范围变宽，表现在图 1.2-4 中的曲线随 ($E'' - E_v$) 的增加而变平坦。随着参与跃迁的空穴移向杂质带顶，激励空穴跃迁所需的光子能量也可以相应减少。反过来说，随着与跃迁有关的空穴能量的增加而逐渐接近本征价带顶， k 选择定则也逐渐得到加强。

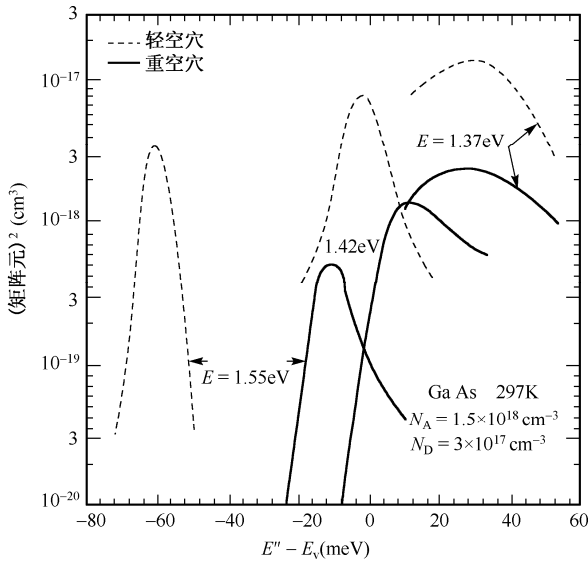


图 1.2-4 GaAs 中由价带至导带的光跃迁包络矩阵元与价带内始态能量的关系

对半导体重掺杂必然会造成大的晶格畸变，只是早期同质结半导体激光器为实现粒子数反转条件而不得已为之。在现在的半导体光发射器件中只是在 P 型限制层上外延一重掺杂 P 型 (P^+) 层，以便与 P^+ 层上的金属层形成良好的欧姆接触，而不涉及光跃迁的过程。

1.3 光子密度分布与能量分布^[6, 2]

既然半导体光电子学涉及的是电子与光子的相互作用，了解二者的态密度及其能量分布是基本的，关系到电子在半导体能带间的跃迁速率。本节和 1.4 节将分别阐述光子和电子的态密度及其能量分布。与电子相作用的光场，即使是单色性好的激光，光子随能量仍分布在一个有限的光谱范围内。在此用黑体辐射理论分析光子密度分布。

将黑体辐射作为辐射场来分析两能级系统中的量子跃迁特点是由爱因斯坦所确立和被广泛采用的方法。分析表明，将黑体辐射作辐射场来分析其与具有能带结构的半导体中电子相互作用所得到的规律并不失其普遍意义。

对于黑体辐射，要推导的物理量是单位体积、单位频率间隔内的光子数，即光子密度分布，这就是普朗克研究黑体辐射早已得出的黑体辐射公式。在研究光与电子相互作用的问题中所感兴趣的是辐射场某一振荡模式中的辐射（光子）密度。在此，我们将考虑两个通常使用的描述，即每个模中的辐射密度和单位振荡频率带宽中总的辐射密度。对于后者，在所考虑的辐射腔（谐振腔）中就可包含多个振荡模式。研究黑体辐射能量密度所常用的方法是在辐射场内取出一个立方体来计算该体积内单位体积的态密度。可以用不同的推导方法来得到相同的态密度，差别在于对立方盒内辐射场的特点及形成稳定振荡所需边界条件的处理不同。下面我们用一种结合激光器常用的驻波条件来推导光子态密度。

设辐射腔为一边长为 L 的立方光学谐振腔，取 $L \gg \lambda$ ，从而就会有多个允许的振荡模式

在腔内存在。光子在谐振腔内能产生稳定振荡的所谓谐振条件（驻波条件）要求光子在腔内来回一周的光程应等于所传播的平面波波长 λ 的整数倍，可以用波数 k 来表示这三维空间的驻波条件，即

$$k_x = \frac{m\pi}{L}; \quad k_y = \frac{p\pi}{L}; \quad k_z = \frac{q\pi}{L} \quad (1.3-1)$$

式中， m 、 p 和 q 均为正整数，因此每个模所占体积为 $(\pi/L)^3$ 。在以 k_x 、 k_y 和 k_z 为直角坐标系所表示的 k 空间内，代表每一个状态（或模式）的点表示为

$$\mathbf{k} = \mathbf{a}k_x + \mathbf{b}k_y + \mathbf{c}k_z \quad (1.3-2)$$

式中， \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 和 \mathbf{c} 分别为三个坐标轴上的单位矢量，在 k 空间中，波数从 $k \rightarrow k + \delta k$ 的球壳体积为 $4\pi k^2 \delta k$ ，因式（1.3-1）中 m 、 p 和 q 取正整数，所以我们只需考虑 $1/8$ 球壳内的 k 态数，其值为

$$\begin{aligned} \frac{1}{8} \text{球壳内的态数} &= \frac{1}{8} (4\pi k^2 \delta k) \left/ \left(\frac{\pi}{L} \right)^3 \right. \\ &= \frac{k^2 L^3}{2\pi^2} \delta k \end{aligned} \quad (1.3-3)$$

考虑到光场有 TE 与 TM 两个偏振态，故 $1/8$ 球壳内的总态数应是式（1.3-3）的两倍。同时，光子态密度是体积 $V = L^3$ 中单位体积中的态数，因此，光子态密度为

$$dN(k) = \left(\frac{k}{\pi} \right)^2 \delta k \quad (1.3-4)$$

实际上，这里所讨论的并不是一个空腔，而是具有折射率为 \bar{n} 的半导体材料，而在半导体中色散又往往是不能忽略的，所以介质中的波数 k 及其微分 δk 可写为

$$k = \frac{2\pi\bar{n}\nu}{c} \quad (1.3-5)$$

$$\delta k = 2\pi \frac{\bar{n}}{c} \left[1 + \frac{\nu}{\bar{n}} \frac{d\bar{n}}{d\nu} \right] \delta \nu \quad (1.3-6)$$

式中， ν 为光子谐振频率，式（1.3-6）方括号内的因子表示折射率色散。还可用光子的能量 $E = h\nu$ 来表示 k 与 δk

$$k = \frac{2\pi\bar{n}E}{hc} \quad (1.3-7)$$

$$\delta k = 2\pi \left[\frac{\bar{n} + E d\bar{n}/dE}{hc} \right] \delta E \quad (1.3-8)$$

将式（1.3-5）和式（1.3-6）代入式（1.3-4）即得

$$dN(\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3 \nu^2}{c^3} \left[1 + \frac{\nu}{\bar{n}} \frac{d\bar{n}}{d\nu} \right] d\nu \quad (1.3-9)$$

每个态的平均光子数或每个态为光子所占据的概率服从玻色-爱因斯坦分布：

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp(h\nu_i/k_B T) - 1} \quad (1.3-10)$$

式中, k_B 为玻耳兹曼常数。由式 (1.3-9) 和 (1.3-10) 就可给出光子密度分布或单位体积内频率在 ν 与 $\nu + d\nu$ 之间的光子数:

$$dD(\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3\nu^2}{c^3} \cdot \frac{1 + (\nu/\bar{n})(d\bar{n}/d\nu)}{\exp(h\nu/k_B T) - 1} d\nu \quad (1.3-11)$$

为了与普朗克黑体辐射公式一致, 常将 (1.3-11) 的光子密度分布以光子能量分布形式给出, 为此, 将普朗克常数 h 引入式 (1.3-11) 后得出:

$$dD(h\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3\nu^2}{hc^3} \cdot \frac{1 + (\nu/\bar{n})(d\bar{n}/d\nu)}{\exp(h\nu/k_B T) - 1} h d\nu \quad (1.3-12)$$

有时也把光子密度分布式 (1.3-11) 表示为单位体积内在能量 E 和 $(E+dE)$ 之间的光子数

$$dD(E) = \frac{8\pi\bar{n}^3 E^2}{h^3 c^3} \cdot \frac{1 + (E/\bar{n})(d\bar{n}/dE)}{\exp(E/k_B T) - 1} dE \quad (1.3-13)$$

式中, $dE = h d\nu$ 。如果令 $P(E)$ 表示单位体积、单位能量间隔内的光子态密度, 显然有

$$P(E) = \frac{8\pi\bar{n}^3 E^2}{h^3 c^3} \cdot \frac{1 + (E/\bar{n})(d\bar{n}/dE)}{\exp(E/k_B T) - 1} \quad (1.3-14)$$

而通常采用的是单位体积、单位频率间隔内的光子能量密度, 则由式 (1.3-12) 有

$$P(h\nu) = \frac{8\pi\bar{n}^3 h\nu^2}{c^3} \cdot \frac{1 + (\nu/\bar{n})(d\bar{n}/d\nu)}{\exp(h\nu/k_B T) - 1} \quad (1.3-15)$$

1.4 电子态密度与占据几率^[1, 8]

在半导体导带中的电子和价带中的空穴分布通常可表示为某一能量下电子或空穴的态密度 $\rho(E)$ 与该能态为电子所占据的几率 $f(E)$ 之积, 这类似于上一节所讨论的光子态密度分布。下面还将发现, 在推导电子态密度分布过程中还有一些与前面对光子态密度分布的推导相似的地方, 所不同的是电子属费米子, 它受泡利不相容原理所制约。因此, 电子与光子不同, 它服从费米-狄拉克统计分布。

在纯半导体中, 单位能量间隔的态密度是从电子波函数得来的。在 1.2 节中已经谈到, 本征半导体能带的电子波函数是一个具有波矢为 k 的平面波。和光子能态一样, 半导体中电子的每一能态也对应着某特定波矢为 k 的波函数的驻波图案。这样, 我们可以再一次在半导体中隔出一个边长为 L 的立方体, 在该立方体中波矢为 k 的平面波得到稳定驻波图案所需要满足的条件同样为

$$k_x = \frac{m\pi}{L}, \quad k_y = \frac{p\pi}{L}, \quad k_z = \frac{q\pi}{L} \quad (1.4-1)$$

在 k 空间的每一电子态同样占据 $(\pi/L)^3$ 的体积, 在 $k \rightarrow k + \delta k$ 的能量间隔内单位体积的电子态数同样由厚度为 δk 的 1/8 球壳体积与 π^3 之比求得

$$dN(k) = \rho(k)\delta k = \left(\frac{k}{\pi}\right)^2 \delta k \quad (1.4-2)$$

显然式 (1.4-2) 中的 $\rho(k)$ 具有 k 空间态密度的物理意义。和光子具有两个偏振态一样，在式 (1.4-2) 中已经计入了电子所具有的两个自旋态。由能带论指出，晶体中电子与自由电子的差别在于晶体中的电子有与自由电子质量不同的有效质量。为了用能量而不用 k 来表示电子的态密度，我们利用电子动量 $P = \hbar k$ 与其能量的关系 $E = P^2/2m$ ，以导带底为坐标原点，分别写出导带电子能量 E_c 和价带空穴能量 E_v 的表达式：

$$E_c = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \quad (1.4-3)$$

$$-(E_v + E_g) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad (1.4-4)$$

式中， m_c 和 m_h 分别代表导带电子和价带空穴的有效质量， E_g 为禁带宽度。从式 (1.4-3) 或式 (1.4-4) 分别所得到的 k 和 δk 代入式 (1.4-2) 中，便得到导带态密度 ρ_c 或价带态密度 ρ_v

$$\rho_c = \frac{m_c(2m_c E_c)^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (1.4-5)$$

$$\rho_v = \frac{m_h[2m_h(-E_g - E_v)]^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (1.4-6)$$

由图 1.2-1 可以看出，具有金刚石结构的 Ge、Si 和具有闪锌矿结构的 GaAs 等 III-V 族化合物半导体的能带结构中，除了重空穴带外，还有轻空穴带，两者在价带顶是重合的。轻空穴的有效质量不比自由电子质量 m_0 大多少，因此轻空穴带的态密度与重空穴带相比非常小。图 1.4-1 是根据式 (1.4-5) 和式 (1.4-6) 画出的典型半导体导带和价带态密度。在所有直接带隙跃迁的 III-V 族化合物半导体中，导带电子的有效质量几乎比价带重空穴小一个数量级，例如在 GaAs 中有 $m_c = 0.067m_0$ ， $m_h = 0.55m_0$ 。因为态密度正比于有效质量的 3/2 次方，所以价带态密度与导带相比要大 25 倍。

除了态密度外，决定载流子在半导体能带中分布的另一个因素是电子态为电子或空穴所占据的几率，即前面曾提到的费米-狄拉克分布函数。正确的理解是由式 (1.4-5) 和式 (1.4-6) 所表示的都只是允许电子存在的状态密度，只有考虑了费米-狄拉克分布函数后才是能带中确定的电子或空穴分布情况。费米-狄拉克分布函数是用费米能 F 作为参数来描述的，它反映了电子微观系统的热平衡情况。当导带与价带之间处于严格的热平衡状态时，就可用统一的费米能级来描述在一定能量范围内导带与价带电子的分布。而当向能带中注入载流子时，原来的平衡就会受到扰动与破坏，这就意味着导带与价带之间不再存在统一的费米能级。如果注入速率不是太大，虽然被注入带与相对的另一带之间不存在平衡，但每个带中的载流子却仍处在准平衡的状态。因此，对每个带来说，可以用各自的费米能级 F_c 和 F_v 来描述导带与价带载流子的分布，我们称 F_c 和 F_v 为准费米能级。那么，导带和价带中某一能量 E_c 和 E_v 为电子所占据的几率分别为

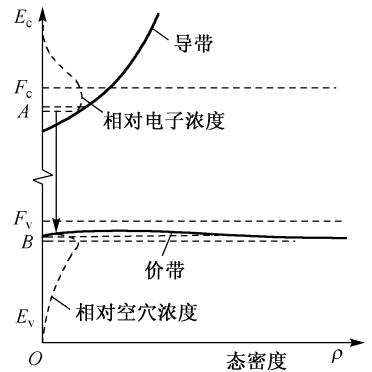


图 1.4-1 半导体中典型的电子态密度与能量的关系

$$f_c = \left[1 + \exp\left(\frac{E_c - F_c}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (1.4-7)$$

$$f_v = \left[1 + \exp\left(\frac{E_v - F_v}{k_B T}\right) \right]^{-1} \quad (1.4-8)$$

显然，当导带与价带处于平衡时有 $F_c = F_v = F$ ，而且， $1 - f_c$ 代表导带某能级 E_c 未被电子占据的几率， $1 - f_v$ 表示价带某能级 E_v 为空穴所占据的几率。和前面由光子态密度与玻色分布函数之积给出单位体积、某一频率间隔内的光子数的概念一样，电子态密度与相应的费米-狄拉克分布函数之积就表示单位体积内某一特定能级上的电子数。因而，导带中总的电子浓度为

$$n = \int \frac{\rho_c(E_c)}{1 + \exp[(E_c - F_c)/k_B T]} dE_c \quad (1.4-9)$$

价带空穴浓度为

$$p = \int \frac{\rho_v(E_v)}{1 + \exp[(F_v - E_v)/k_B T]} dE_v \quad (1.4-10)$$

在高注入速率或重掺杂情况下，态密度随能量的分布与式 (1.4-5) 和式 (1.4-6) 表示的不同，随机分布的杂质电荷与自由载流子电荷所造成的晶格场的波动，使导带底和价带顶将出现能带尾态，如图 1.4-2 所示。由于半导体介电常数一般较高（参看第 2 章表 2.3-1），而且载流子（特别是电子）的有效质量较小，因此，局部杂质态的玻尔半径 $a^* = 4\pi\epsilon\hbar^2/m^*e^2$ 比氢原子半径大得多。例如，在 GaAs 中束缚电子和空穴的 a^* 分别为 100\AA 和 10\AA 。当杂质原子之间的距离 r_s 与 a^* 之比 $r_s/a^* \approx 3$ 时，可以认为杂质电离能减少到零，出现与本征能带衔接的杂质带。这时电导率迅速增加，产生所谓“金属性”导电。计算和测量表明，在 GaAs 中当施主杂质与受主杂质浓度分别达到 $2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ 或 $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ 时，就会出现能带尾态效应。一些文献在不同的假设条件下给出了不同的带尾模型，从而也就给出了带尾对载流子密度分布的不同影响。例如，凯恩（Kane）假设杂质随机分布引起的电势涨落具有高斯几率分布，其均方根值 V_{rms} 为

$$V_{\text{rms}} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \right) \left[2\pi(N_D^+ + N_A^-)L_S \right]^{1/2} \quad (1.4-11)$$

式中， N_D^+ 和 N_A^- 分别为电离的施主和受主浓度， L_S 为自由载流子不受电离杂质电荷影响的平均距离，称为屏蔽长度， V_{rms} 给出带尾深度 η 为

$$\eta = 2^{1/2} V_{\text{rms}} \quad (1.4-12)$$

这样，凯恩对 n 型掺杂半导体给出的导带有效态密度为

$$\rho_{\text{eff}}(E_c) = \left\{ \frac{m_c(2m_c)^{1/2}}{\pi^2\hbar^3} \right\} \eta^{1/2} y \left(\frac{E_c}{\eta} \right) \quad (1.4-13)$$

式中， $y(x)$ 为凯恩函数，定义为

$$y(x) = \pi^{-1/2} \int_{-\infty}^x (x-z)^{1/2} \exp(-z^2) dz \quad (1.4-14)$$

由式 (1.4-13) 可以看出, 当 $E_c > \eta$, 因 $y(E_c/\eta) \approx (E_c/\eta)^{1/2}$, 这时式 (1.4-13) 就与式 (1.4-5) 相同; 而当 $E_c < 0$ 时, $y(E_c/\eta) \approx \exp(-E_c^2/\eta^2)$, 从而出现尾态。

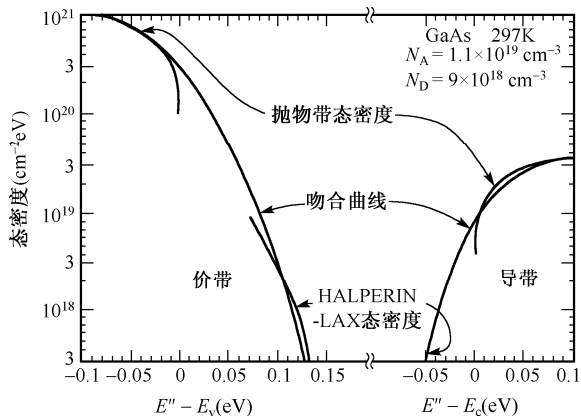


图 1.4-2 净受主浓度为 $2 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 的 GaAs 中导带与价带态密度

在凯恩的这个带尾模型中, 由于将所有尾态无区别对待, 带尾只是带边的随机滑移。然而, 当滑移幅度大时, 易出现很靠近杂质电荷团的小区域, 在此区内不再有大量密布的载流子态, 而使该区对带尾不产生明显的贡献, 这等效于减少了尾深, 因此凯恩模型对尾深作了过高的估计。

哈尔普林 (B.I.Halperin) 和拉克斯 (M.Lax) 考虑了上述深势阱处载流子局部化的影响而提出了对尾深合理减少的模型。他们对宽度为 πL_s (L_s 为屏蔽长度) 势阱中的载流子能态用阱中的最低态进行规一化, 提出了一个比凯恩高斯带尾形式复杂得多的能带尾态密度的表达式, 在此不列出其繁琐的数学形式, 只是将其结果与凯恩带尾曲线一并示于图 1.4-3 中。该图是由黄振嘉 (C.J.Huang) 在比较以上两种模型的基础上, 对半补偿重掺杂 p 型半导体分析计算得出的。由图看出, 哈尔普林-拉克斯带尾与凯恩带尾相比, 尾深有明显减少, 特别是有效质量小的导带, 其态之间的间隔较大, 因而导带尾深减少幅度较大, 这是比较符合实际的。

之后, 还有一些学者对带尾作了进一步研究, 如斯特恩 (Stern) 将凯恩高斯带尾与哈尔普林-拉克斯带尾进行吻合; 还有人将图 1.4-3 中的哈尔普林-拉克斯带尾与本征抛物线带尾进行吻合等。

经许多实验测量发现, 带尾中的态密度按指数曲线变化, 即

$$\rho_c \propto \exp\left(\frac{E_c}{E_t}\right) \quad (1.4-15)$$

$$\rho_v \propto \exp\left(\frac{-E_g - E_v}{E_t}\right) \quad (1.4-16)$$

式中, E_t 也被定义为尾深, 可以通过经验确定。

不管何种带尾模型, 带尾的存在总是增加任何特定电子能级上可能的态数。恩格尔 (Unger) 指出, 对某一给定的费米能级 F , 由于带尾的存在所增加的注入载流子总量相当于

温度从 T 增加到 $[T^2 + (E_t/k_B)^2]^{1/2}$ 所引起的载流子增量，其中 k_B 为玻耳兹曼常数。在 1.2 节中已经谈到带尾对电子跃迁概率的影响，以后还将看到，带尾将对半导体激光器的增益、阈值和光谱特性等产生影响。达到“重掺杂”所要求的掺杂浓度与所掺杂质是施主还是受主有关，同时由于价带空穴与导带电子相比有较大的有效质量，因而空穴杂质带有较深的带尾，因此在与主带相衔接后显得突出，这在图 1.4-2 中已能看出当掺受主杂质浓度约为 10^{18}cm^{-3} 时，杂质带尾已处于价带较深的位置。

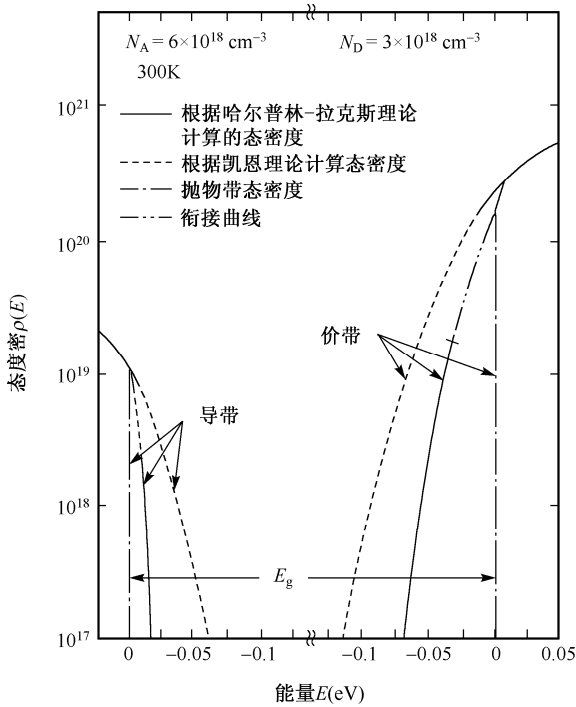


图 1.4-3 几个不同模型态密度的比较

1.5 跃迁速率与爱因斯坦关系

前面几节我们分别讨论了与电子在半导体能带之间跃迁速率的有关因素，这一节将具体分析与半导体光电子器件工作原理有关的三种跃迁（受激吸收、受激发射和自发发射）过程的跃迁速率以及联系这几种跃迁速率的爱因斯坦关系。

首先扼要地讨论一下影响以上三种跃迁速率的因素：

(1) 与跃迁有关的电子能级的情况。显然电子在半导体能带之间的跃迁只能始于电子的占有态而终止于电子的空态，因此跃迁速率应正比于与跃迁有关的初态被电子占据的几率和跃迁终态被空着的几率。

(2) 在受激发射与受激吸收跃迁中，跃迁速率应正比于激励该跃迁过程的入射光子密度。为产生受激跃迁，需使入射光子的能量大于或等于与跃迁有关的两能级之间的能量差。如果激励这种跃迁过程的入射光是光谱很纯的单色（或单模）光，则跃迁速率比例于单频中的光子密度。然而，多数实际情况是作用在这种过程中的光子有一定的能量范围，或光子的振荡

频率分布有一定的宽度，则电子在能带之间的跃迁速率将比例于式 (1.3-15) 所表示的单位能量间隔中的光子密度 $P(h\nu)$ 。

(3) 每单位能量间隔中光跃迁的密度，这对激励光为多模时固然重要，但即使是单色光，也同样应该考虑在单位能量间隔中参与光跃迁的电子态密度。因为对某一特定能量的光子能使半导体能带中一定能量范围内的电子跃迁。按照量子力学原理，光子与电子相互作用时间越短或相互作用过程越快，则跃迁所涉及的能量范围就越宽。因此，在有多对能级参与跃迁的情况下，有必要在总的跃迁速率表达式中引进有关电子和能量的态密度。用 $\rho_{\text{red}}(h\nu)$ 表示单位能量间隔中，两自旋方向之一的电子参与光跃迁的密度。 $\rho_{\text{red}}(h\nu)$ 是受选择定则限制的。严格的 k 选择定则要求导带中每一能级只能与价带中具有同样电子自旋的一个能级相关。因此 $\rho_{\text{red}}(h\nu)$ 具有折合态密度的意义，并表示为

$$\rho_{\text{red}}(h\nu) = \frac{\delta N}{2(\delta E_c + \delta E_v)} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\rho_c} + \frac{1}{\rho_v} \right)^{-1} \quad (1.5-1)$$

式中， $\delta N/2$ 是两个自旋方向之一的电子态数的增量，这对导带与价带都是相同的； δE_c 和 δE_v 分别为导带与价带中的能量增量，在此能量范围内有相同的态数以保证跃迁在相等 k 值下进行； ρ_c 和 ρ_v 分别为由式 (1.4-5) 和式 (1.4-6) 表示的电子和空穴的态密度。以后将看到，即使实际上不可能存在严格的 k 选择定则，但这并不影响目前的讨论。

(4) 决定跃迁速率的第四个因素是跃迁几率系数，这已在 1.2 节中讨论。它们包括受激吸收跃迁几率 B_{12} 、受激发射跃迁几率 B_{21} 和自发发射跃迁几率 A_{21} 。对于严格的 k 选择定则，这些系数描述了在光子能量 $h\nu$ 下所有可能发生的跃迁，因此这些系数的确定需和前面所讨论的那样，从跃迁初态到终态对分布态函数进行积分。然而，不论所涉及的 k 选择定则严格与否，均不影响下面将讨论它们之间的关系——爱因斯坦关系，它反映了热平衡下量子跃迁系统的普遍规律。

基于上面这些讨论，就很容易写出三种跃迁情况的跃迁速率并确定它们之间的相互关系。因所考虑的跃迁量子系统处在热平衡下，则导带与价带的准费米能级应相等，即 $F_c = F_v$ 。因此描述电子占据几率的函数 f_c 和 f_v 就可使用统一的费米能级。若激励该系统的光子能量具有连续谱，则所求的跃迁速率是单位体积、单位能量间隔的速率。对于电子从价带向导带的受激吸收，其跃迁速率为

$$r_{12} = B_{12} f_v (1 - f_c) \rho_{\text{red}}(h\nu) P(h\nu) \quad (1.5-2)$$

而电子从导带向价带的受激发射跃迁速率为

$$r_{21} = B_{21} f_c (1 - f_v) \rho_{\text{red}}(h\nu) P(h\nu) \quad (1.5-3)$$

上述受激吸收几率系数 B_{12} 与受激发射几率系数 B_{21} 有相同的量纲[能量×体积/时间]，而单位体积、单位能量间隔的自发发射速率为

$$r_{\text{sp}} = A_{21} f_c (1 - f_v) \rho_{\text{red}} \quad (1.5-4)$$

式中， A_{21} 为自发发射跃迁几率系数，它的量纲为[1/时间]。

在热平衡情况下，向上跃迁的速率必须等于向下跃迁的总速率，即

$$r_{12} = r_{21} + r_{\text{sp}} \quad (1.5-5)$$