

第八章 半导体电子论

- 8.1 半导体的基本能带结构
- 8.2 半导体中的杂质
- 8.3 载流子的统计分布
- 8.4 半导体结构
- 8.5 半导体的光学性质

半导体电子论

半导体的价带与导带之间的带隙介于 0.2—3.5 eV 范围内，其导电能力介于绝缘体与金属导体之间，室温下半导体的电阻率在 $10^{-3} \sim 10^9$ (Ωcm) 范围内。

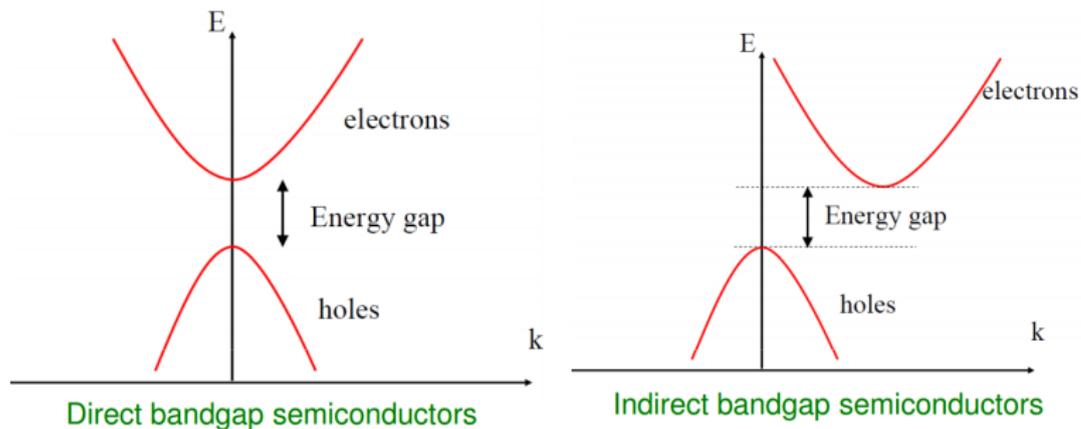
在半导体中电子可以做多种形式的运动（如漂移、扩散等），其性质与杂质、温度、光照及压力等有密切关系。通过研究半导体的物理性质，可以不断揭示出各种形式的电子运动，阐明其规律性，从而可以设计出更多的半导体器件。因此，半导体材料有极其广泛的应用前景。在所有固体材料中，半导体材料无疑是最令人感兴趣的材料，也是被人们研究最广泛的材料之一。

8.1 半导体的基本能带结构

8.1 半导体的基本能带结构

半导体中能量最高的满带称为价带，能量最低的空带称为导带。在价带顶和导带底之间的能量间隙称为带隙（或能隙），用 E_g 表示。由于半导体的带隙较窄，因此，在一定温度下，由于热激发，导带底有少量电子，而价带顶有少量空穴。半导体的导电性就来自导带底的少量电子或价带顶的少量空穴的贡献。我们将这些对电流有贡献的电子和空穴称为载流子。而载流子的运动则取决于半导体的能带结构。

直接带半导体和非直接带半导体



直接带隙半导体：GaAs、CdS、GaN 等 间接带隙半导体：Si、Ge 等。

物理性质上，直接带和间接带半导体区别主要体现在光学性质差别很大。

带边有效质量

电子的能量在能带底和能带顶取极值，因此，可将能量 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ 在导带底或价带顶附近展开

- 导带底：在 \mathbf{k}_0 附近

$$\begin{aligned}\varepsilon_c(\mathbf{k}) &= \varepsilon_c(\mathbf{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \varepsilon_c}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}) + \dots \\ &= \varepsilon_c^0 + \frac{1}{2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \overleftrightarrow{\frac{1}{m_e^*}} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \xrightarrow{\text{主轴}} \varepsilon_c^0 + \frac{\delta k_x^2}{2m_e^x} + \frac{\delta k_y^2}{2m_e^y} + \frac{\delta k_z^2}{2m_e^z}\end{aligned}$$

- 价带顶

$$\begin{aligned}\varepsilon_v(\mathbf{k}) &= \varepsilon_v(\mathbf{k}_0) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 \varepsilon_c}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} (k_\alpha - k_{0\alpha})(k_\beta - k_{0\beta}) + \dots \\ &= \varepsilon_v^0 - \frac{1}{2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \overleftrightarrow{\frac{1}{m_h^*}} (\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \xrightarrow{\text{主轴}} \varepsilon_v^0 - \frac{\delta k_x^2}{2m_h^x} - \frac{\delta k_y^2}{2m_h^y} - \frac{\delta k_z^2}{2m_h^z}\end{aligned}$$

$$\text{空穴能谱: } \varepsilon_h(\mathbf{k}) = \frac{k_x^2}{2m_h^x} + \frac{k_y^2}{2m_h^y} + \frac{k_z^2}{2m_h^z}$$

8.2 半导体中的杂质

半导体中的杂质当晶体中少量有杂质存在时，晶格的周期性就会被破坏，在杂质周围会产生一个局域场而影响电子的运动。因此，能带中的电子除了有用 Bloch 函数描述的共有化状态外，还会附加一个局域化的电子态（局域态），即电子可以被适当的杂质所束缚，就如电子被原子所束缚一样。而被束缚的电子也有确定的能级，这种能级在带隙之中。如束缚能级处于允带中，电子不需要能量就可以直接转入共有化运动状态，因此，不可能是稳定的束缚态。正是由于这个束缚态能级的存在，改变了半导体的能带结构，对半导体的性质起着决定性的作用。

当杂质能级距离导带底或者价带顶比较近时，称为浅杂质能级。相应的杂质就称为浅能级杂质。杂质能级离导带底较远，称这种能级为深杂质能级。而这种杂质就称为深能级杂质。深能级杂质研究比较复杂。我们后面讲的主要是浅能级杂质。

施主与受主

按照杂质能级的不同，可以把杂质分为施主与受主

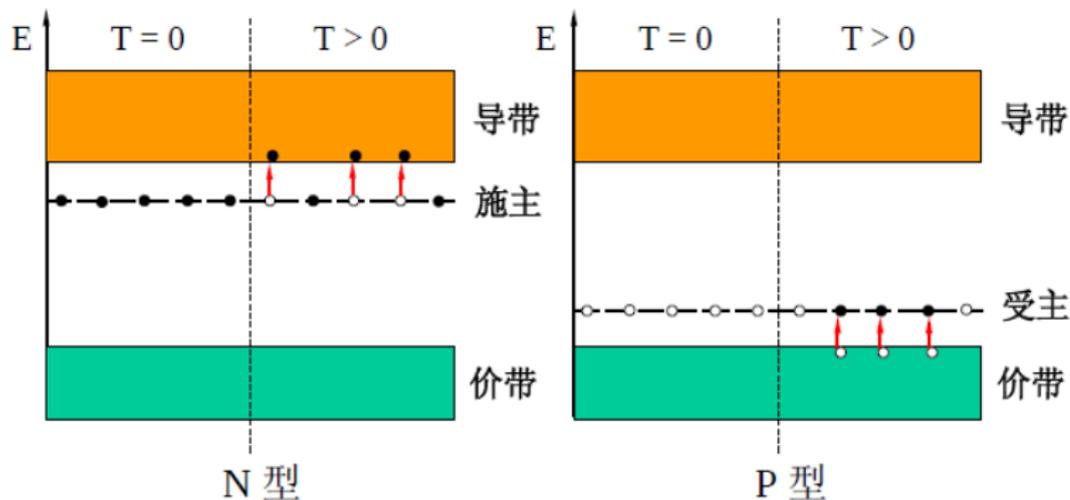
- 施主

若杂质在能隙中提供带有电子的能级，这种杂质称为施主。电子从杂质能级激发到导带远比从价带激发容易（尤其是能级离导带底很近的情况）。因此，主要含施主杂质的半导体的导电性往往几乎完全依靠施主热激发到导带的电子。这种主要依靠电子导电的半导体称为 N 型半导体。

- 受主

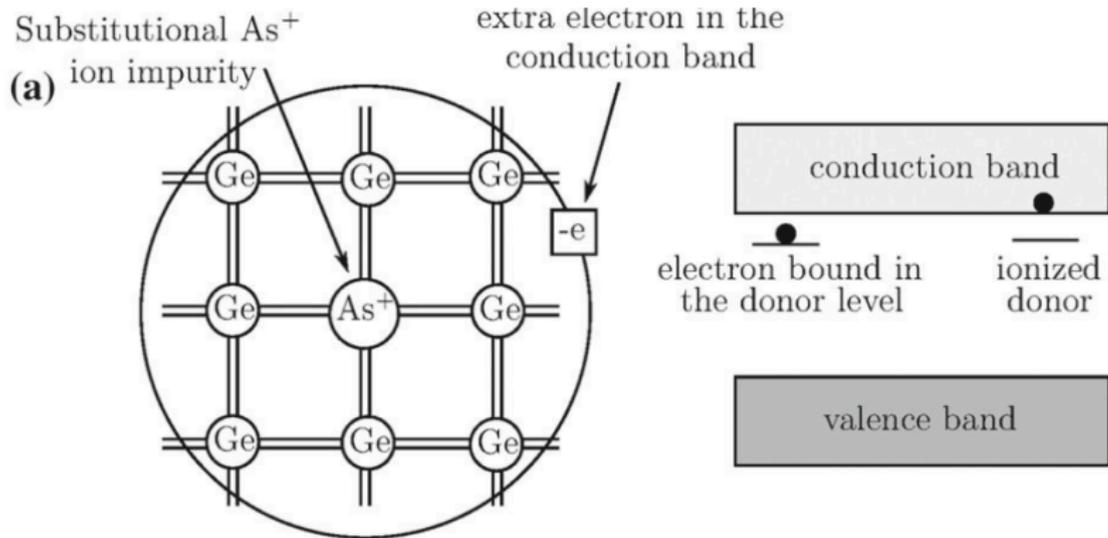
若杂质在带隙中提供空的能级，称为受主。电子从价带激发到受主比激发到导带容易得多，因此，主要含受主杂质的半导体，由于价带中有些电子被激发到受主能级而产生一些空穴，半导体的导电性主要依靠空穴。这种主要依靠空穴导电的半导体称为 P 型半导体。

N 型半导体和 P 型半导体



- 在 IV 族半导体（例如 Si 或 Ge）中加入少量五价的 P、As 或 Sb，或在 III-V 半导体中（例如 GaAs）中用 V 族元素（S、Se、Te）替代 III 族就形成 N 型半导体
- 在 IV 族半导体中掺入少量三价的 B、Al、In 等，或在 III-V 族半导体中用 II 族元素（Zn、Be、Mg）替代 III 元素则形成 P 型半导体

施主上的电子态



$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \text{ (周期场)} + \Delta V(\mathbf{r}) \text{ (杂质导致的偏离)}$$

$$\Delta V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon |\mathbf{r}|}$$

$$\mathcal{H}_{eff} = \epsilon_c(\mathbf{p} + \mathbf{k}_0) + \Delta V(\mathbf{r}) = \epsilon_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m_e^*} - \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon r} \text{ (有效质量近似)}$$

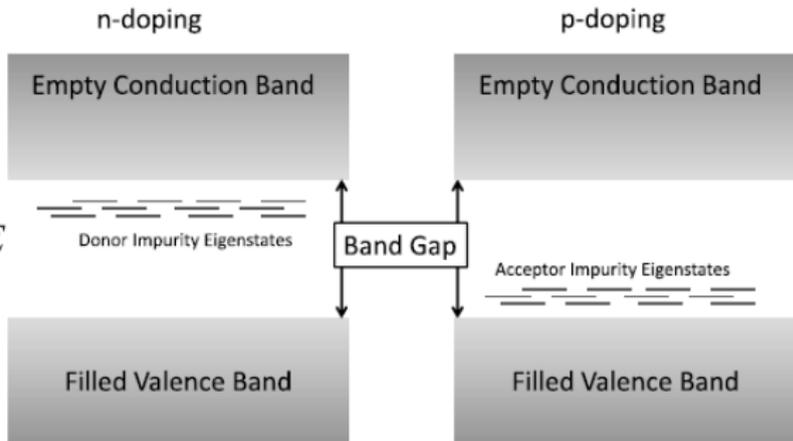
杂质能级

氢原子能级

$$Ry = \frac{m_0 e^2}{8 \epsilon_0^2 h^2} = 13.6 \text{ eV}$$

$$a_0 = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{e^2}$$

E

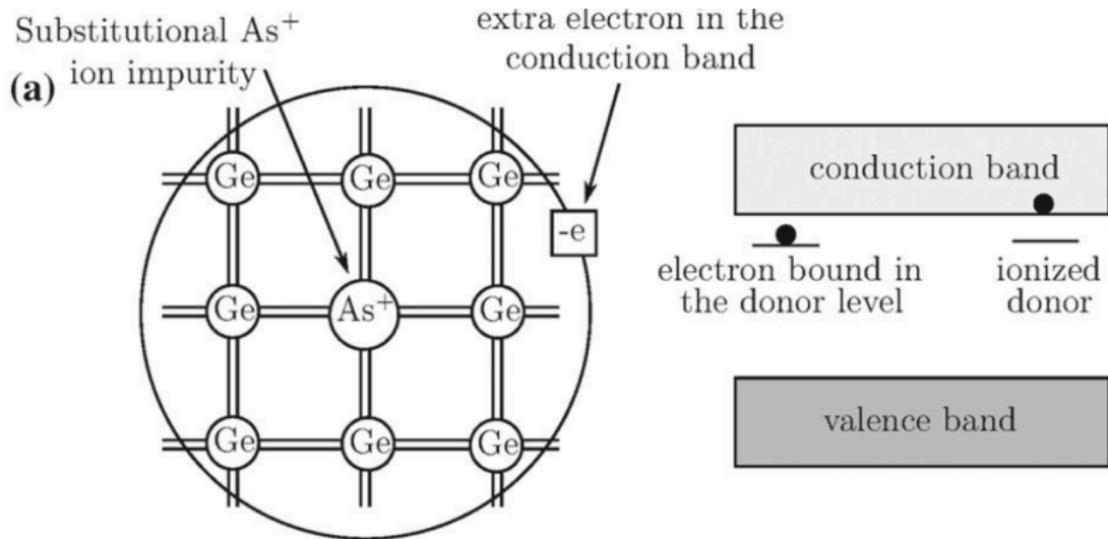


$$\epsilon_{dn} = \epsilon_c - \frac{m_e^* e^2}{8(\epsilon_0 \epsilon)^2 h^2} = \epsilon_c - \frac{Ry}{n^2} \frac{m_e^*}{m_0 \epsilon^2} = \epsilon_c - \frac{Ry^{eff}}{n^2} \sim \epsilon_c - \frac{0.1 \text{ eV}}{n^2}$$

$$r_n = n^2 \frac{4 \pi \epsilon_0 \epsilon \hbar^2}{m_e^* e^2} = n a_0 \frac{m_0 \epsilon}{m_e^*} \sim 100 n a_0 \sim 10 - 100 \text{ \AA}$$

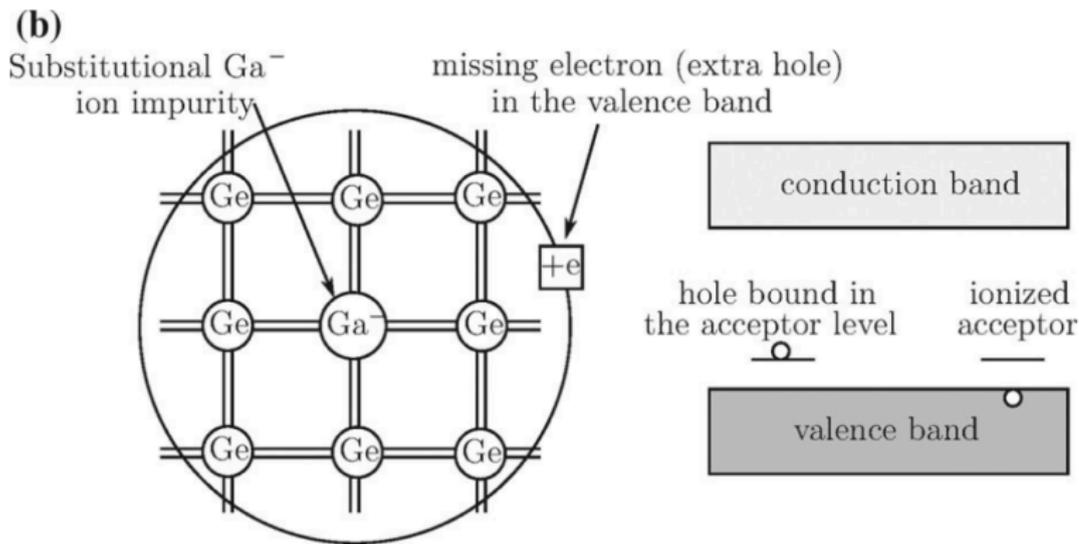
- 结果类似于氢原子能级
- 由于屏蔽 $\epsilon \sim 10$, $m_e^* \sim m_0/3 \Rightarrow$ 束缚能级很浅, 半径很大
- 如果掺杂浓度较大, 束缚波函数有交叠, 电子可以在杂质轨道上越迁, 可以形成杂质能带

施主上的电子态



- 施主杂质上没有电子时，能量为 0
- 有一个电子时，能量为 $\varepsilon_D \approx \varepsilon_c - Ry^{eff}$
- 有多个电子时，由于杂质态是局域的，粒子局限在杂质附近，此时那么需要考虑 Coulomb 相互作用，能量会变得很大。在温度不是很高时，这种情况可以忽略不计。

受主上的电子态

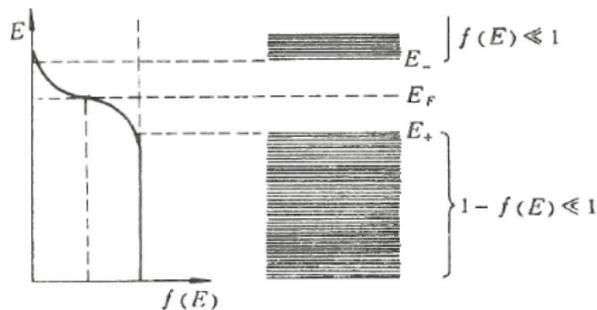


- 类似的，可以的到受主附近空穴的态和能量
- 受主杂质上没有空穴时，能量为 0
- 有一个空穴时，能量为 $\varepsilon_A = \varepsilon_D + Ry^{eff}$
- 有两个空穴时，由于 Coulomb 相互作用，能量会变得很大。在温度不是很高时，这种情况可以忽略不计。

8.3 载流子的统计分布

和金属中电子一样，半导体中的电子也遵从 Fermi 统计分布。但是由于半导体的带隙较小以及杂质能级的存在，使得半导体中的载流子和金属中的电子体现出不同的性质。例如半导体中一般情况下需要同时考虑导带上的载流子（电子）和价带上的载流子（空穴）。这些载流子的浓度受到温度和杂质的强烈地影响。严格的计算比较复杂，我们经常利用半导体的能带特点做一些近似和简化。

金属的 Fermi 能在能带中间, Fermi 面上的态密度很大, 属于强简并情况。在掺杂浓度不是很大时, 半导体的 Fermi 能落在禁带中。而且导带底和价带顶离 Fermi 能都在 eV 量级, 远大于 $k_B T$ 。



因此电子和空穴的分布函数都接近与 Boltzmann 分布。属于弱简并情况。因此计算可以极大简化。

载流子浓度的计算

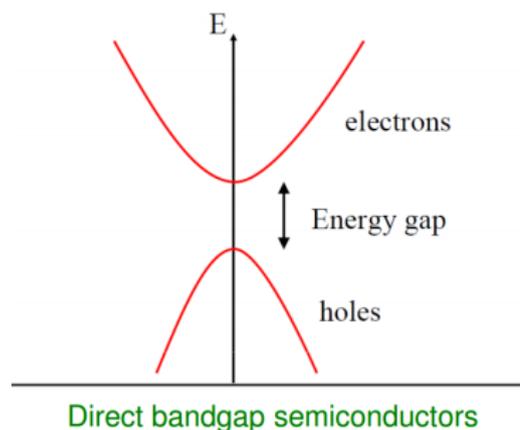
导电和价带电子能谱和态密度的近似:

$$\varepsilon_c(\mathbf{k}) = \varepsilon_c + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_e^*} \quad \text{导带}$$

$$g_c(\varepsilon) = 2 \times \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta[\varepsilon - \varepsilon_c(\mathbf{k})]$$
$$= 4\pi \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - \varepsilon_c} \quad \text{for } \varepsilon > \varepsilon_c$$

$$\varepsilon_v(\mathbf{k}) = \varepsilon_v - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_h^*} \quad \text{价带}$$

$$g_v(\varepsilon) = 2 \times \int \frac{d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta[\varepsilon - \varepsilon_v(\mathbf{k})]$$
$$= 4\pi \left(\frac{2m_h^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon_v - \varepsilon} \quad \text{for } \varepsilon < \varepsilon_v$$



能带宽度一般在几个 eV, 远远比 $k_B T$ 大, 因此我们可以把导带顶当初无穷大, 价带底当初负无穷大。

载流子浓度

载流子浓度：电子浓度 $n(T)$ 和空穴浓度 $p(T)$

$$\begin{aligned}n(T) &= \int d\varepsilon g_c(\varepsilon) f_e(\varepsilon) = \int d\varepsilon g_c(\varepsilon) f_0(\varepsilon) \\&= \int_{\varepsilon_c}^{\infty} g_c(\varepsilon) \frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T} + 1} \quad \varepsilon_c - \mu \gg k_B T \quad \simeq \int_{\varepsilon_c}^{\infty} g_c(\varepsilon) e^{-(\varepsilon-\mu)/k_B T} \\&= 4\pi \left(\frac{2m_e^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{-(\varepsilon_c-\mu)/k_B T} \int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} e^{-\varepsilon/k_B T} d\varepsilon \\&= 2 \left(\frac{2\pi m_e^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{-(\varepsilon_c-\mu)/k_B T} = g_c(T) e^{-(\varepsilon_c-\mu)/k_B T}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}p(T) &= \int d\varepsilon g_v(\varepsilon) f_h(\varepsilon) = \int d\varepsilon g_v(\varepsilon) [1 - f_0(\varepsilon)] \\&= \int_{-\infty}^{\varepsilon_v} g_v(\varepsilon) \frac{1}{e^{(\mu-\varepsilon)/k_B T} + 1} \quad (\mu - \varepsilon_v) \gg k_B T \\&= 2 \left(\frac{2\pi m_h^* k_B T}{h^2} \right)^{3/2} e^{-(\mu-\varepsilon_v)/k_B T} = g_v(T) e^{-(\mu-\varepsilon_v)/k_B T}\end{aligned}$$

$g_c(T)$ 和 $g_v(T)$ 被称为有效态密度。

载流子浓度

电子浓度 n 和空穴浓度 p 依赖于化学势 μ 和温度。化学势 μ 依赖于杂质浓度和温度。因此杂质浓度或者温度改变时， n 和 p 都会发生改变。但是在相同温度下， n 和 p 的乘积是一个常数（反应常数），不随杂质浓度变化。

反应常数：

$$\begin{aligned}\kappa(T) &= n(T)p(T) = g_c(T)g_v(T)e^{-(\varepsilon_c - \varepsilon_v)/k_B T} \\ &= 4\left(\frac{2\pi k_B T}{h^2}\right)^3 (m_e^* m_h^*)^{3/2} e^{-(\varepsilon_c - \varepsilon_v)/k_B T} \\ &= 4\left(\frac{2\pi k_B T}{h^2}\right)^3 (m_e^* m_h^*)^{3/2} e^{-\varepsilon_g/k_B T}\end{aligned}$$

半导体中两种载流子浓度的乘积是一个仅与禁带宽度 ε_g 及温度有关的量，而与半导体的化学势 μ 无关。在一定温度下，导带中的电子越多，价带中的空穴就越少；反之亦然。

本征半导体

我们将无杂质及缺陷的半导体称为本征半导体，这时半导体的 μ 和载流子浓度完全取决于半导体本身的性质。显然，这时导带中的电子浓度等于价带中的空穴浓度。即 $n(T) = p(T)$

$$1 = \frac{n(T)}{p(T)} = \frac{g_c(T)}{g_v(T)} e^{[2\mu - (\varepsilon_v + \varepsilon_c)]/k_B T}$$
$$= \left(\frac{m_e^*}{m_h^*}\right)^{3/2} e^{[2\mu - (\varepsilon_v + \varepsilon_c)]/k_B T}$$

$$\mu = \frac{\varepsilon_v + \varepsilon_c}{2} + k_B T \ln \frac{g_c(T)}{g_v(T)} = \frac{\varepsilon_v + \varepsilon_c}{2} + \frac{3k_B T}{4} \ln \frac{m_h^*}{m_e^*}$$

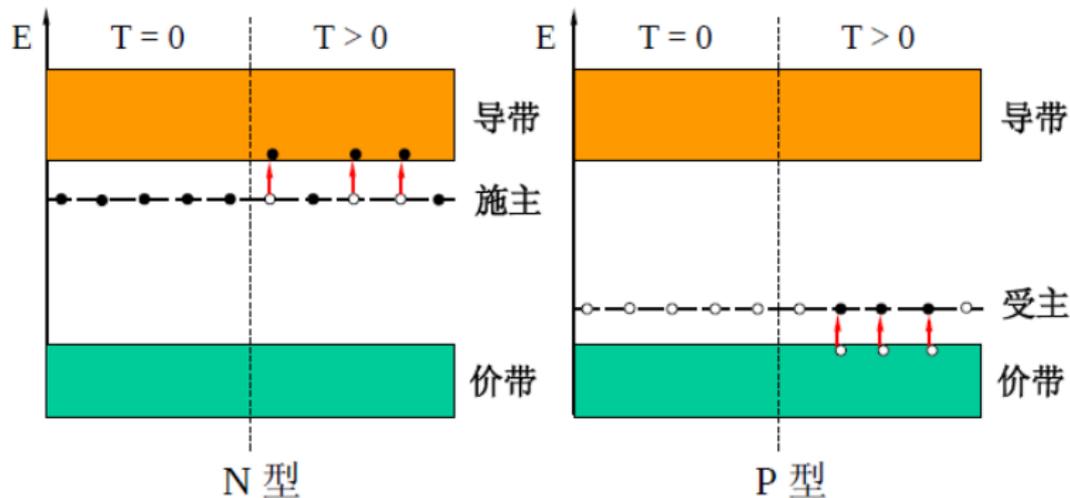
$$\varepsilon_F = \mu(T=0) = \frac{\varepsilon_v + \varepsilon_c}{2}$$

$$n(T) = p(T) = \sqrt{n(T)p(T)} = \sqrt{\kappa(T)} = \sqrt{g_c(T)g_v(T)} e^{-\varepsilon_g/(2k_B T)}$$

- 本征半导体的化学势在带隙中心
- 在一般情况下，由于 $k_B T$ 较小，且 m_h^* 和 m_e^* 相差不大，所以，本征半导体的化学势也是近似地在带隙的中间

非本征半导体

对于非本征半导体，其化学势及载流子浓度均与杂质原子有关。假设单位体积半导体中有 N_D 个浅施主和 N_A 个浅受主。在一定温度下，导带中的电子可以来自施主的热电离，也可以来自价带的热激发；而价带中的空穴可以产生于带间的热激发或受主的热电离。此外，电子还可以从施主能级落入受主能级。因此，在一定温度下，半导体中两种载流子的浓度并不相同。



施主上的电子

简单考虑，假设施主杂质的单电子能级为 ε_D 。由于杂质态是局域的，粒子局限在杂质附近，如果每个杂质能级上有两个电子的话，那么需要考虑 Coulomb 相互作用，能量会变得很大。在温度不是很高时，这种情况可以忽略不计。因此每个杂质上可以没有电子，此时能量为零，简并度为 1。也可以有一个电子的话，能量为 ε_D ，简并度为 2（自旋向上或者向下）。因此施主上电子巨配分函数为

$$\Xi_D = [1 + 2e^{-(\varepsilon_D - \mu)/k_B T}]^{N_D}$$

因此施主能级上的电子数为

$$n_D = \frac{\partial \ln \Xi_D}{\partial -(\varepsilon_D/k_B T)} = \frac{2e^{-(\varepsilon_D - \mu)/k_B T} N_D}{1 + 2e^{-(\varepsilon_D - \mu)/k_B T}} = \frac{N_D}{\frac{1}{2}e^{(\varepsilon_D - \mu)/k_B T} + 1}$$

施主上的正电荷总数为 $N_D - n_D$ ：

$$N_D - n_D = \frac{N_D}{2e^{(\mu - \varepsilon_D)/k_B T} + 1}$$

受主上的空穴

假设受主杂质的单空穴能级为 ε_A ，类似得到受主上空穴数目

$$n_A = \frac{N_A}{\frac{1}{2}e^{(\mu-\varepsilon_A)/k_B T} + 1}$$

受主上的负电荷为

$$N_A - n_A = \frac{N_A}{2e^{(\varepsilon_A-\mu)/k_B T} + 1}$$

因此系统中正电荷数目为 $p + N_D - n_D$ ，负电荷总数为 $n + N_A - n_A$ ，由于系统必须保持电中性，因此 $p + N_D - n_D = n + N_A - n_A$ ，

$$\begin{aligned} & g_v(T)e^{-(\mu-\varepsilon_v)/k_B T} + \frac{N_D}{2e^{(\mu-\varepsilon_D)/k_B T} + 1} \\ &= g_c(T)e^{-(\varepsilon_c-\mu)/k_B T} + \frac{N_A}{2e^{(\varepsilon_A-\mu)/k_B T} + 1} \end{aligned}$$

N 型半导体

只有施主，没有受主 ($N_A = 0$), $p \ll n$,

$$\frac{N_D}{2e^{(\mu-\varepsilon_D)/k_B T} + 1} = g_c(T)e^{-(\varepsilon_c-\mu)/k_B T} \Rightarrow$$
$$e^{\mu/k_B T} = e^{\varepsilon_D/k_B T} \frac{\sqrt{(8N_D/g_c)e^{(\varepsilon_c-\varepsilon_D)/k_B T} + 1} - 1}{4}$$

温度很低时, $\varepsilon_c - \varepsilon_D \gg k_B T$,

$$\mu = \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_D}{2} + \frac{k_B T}{2} \ln \frac{N_D}{2g_c} \simeq \frac{\varepsilon_c + \varepsilon_D}{2}$$

$$n = g_c e^{-\varepsilon_c/k_B T} e^{\mu/k_B T} = \sqrt{\frac{g_c N_D}{2}} e^{-(\varepsilon_c - \varepsilon_D)/(2k_B T)}$$

$$p = \kappa(T)/n = \frac{g_c g_v e^{-(\varepsilon_c - \varepsilon_v)/k_B T}}{\sqrt{g_c N_D/2} e^{-(\varepsilon_c - \varepsilon_D)/(2k_B T)}} = g_v \sqrt{\frac{2g_c}{N_D}} e^{-(\varepsilon_g - \mu)/k_B T} \ll n$$

低温下, N 型半导体表现为一个带隙 $\varepsilon_g = \varepsilon_c - \varepsilon_D$ 的本征半导体

电子: 多数载流子 \gg 空穴: 少数载流子

高温

- 饱和区/强电离区

高温下 $N_D/g_c e^{(\epsilon_c - \epsilon_D)/k_B T} \ll 1$ ，但仍然有 $p \ll N_D$ ，

$$e^{\mu/k_B T} = e^{\epsilon_D/k_B T} \frac{N_D}{g_c} e^{(\epsilon_c - \epsilon_D)/k_B T} = \frac{N_D}{g_c} e^{\epsilon_c/k_B T}$$

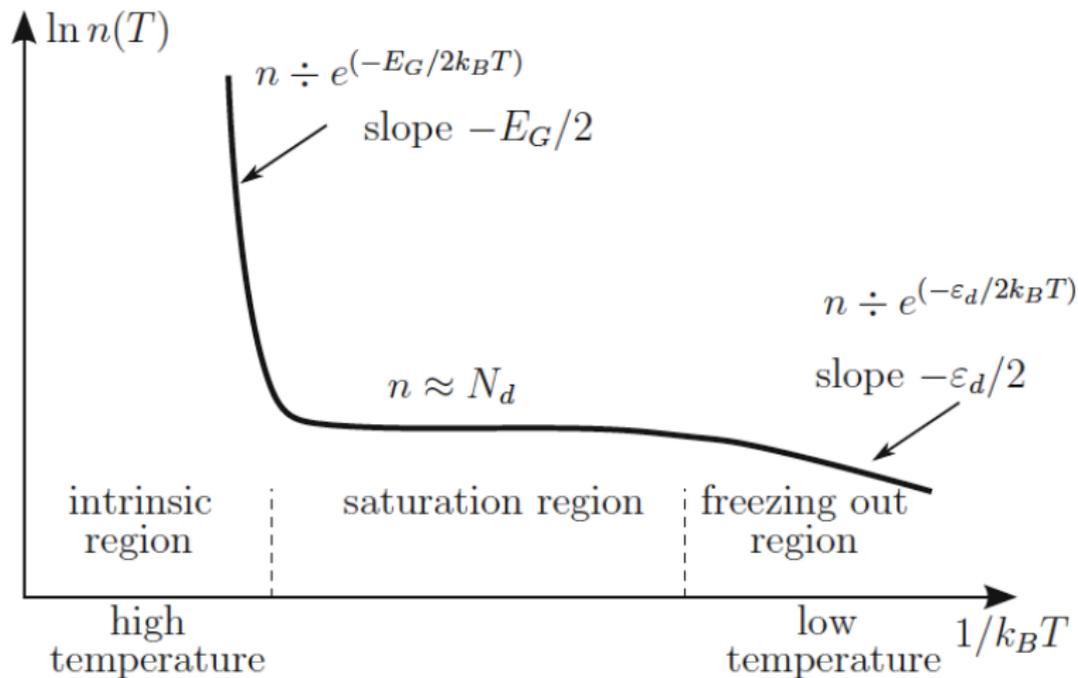
$$n = g_c e^{-(\epsilon_c - \mu)/k_B T} = N_D$$

☞ 这时施主杂质已全部电离，导带中的电子浓度就等于施主杂质浓度 N_D ，称为强电离情形或者饱和情形。在这区间，载流子密度和温度关系不大。

- 本征区：温度进一步升高，那么本征激发（即从价带到导带的激发）很大，可以超过杂质密度，此时

$$n = p + N_D \simeq p \simeq \sqrt{g_c g_v} e^{-\epsilon_g/(2k_B T)}$$

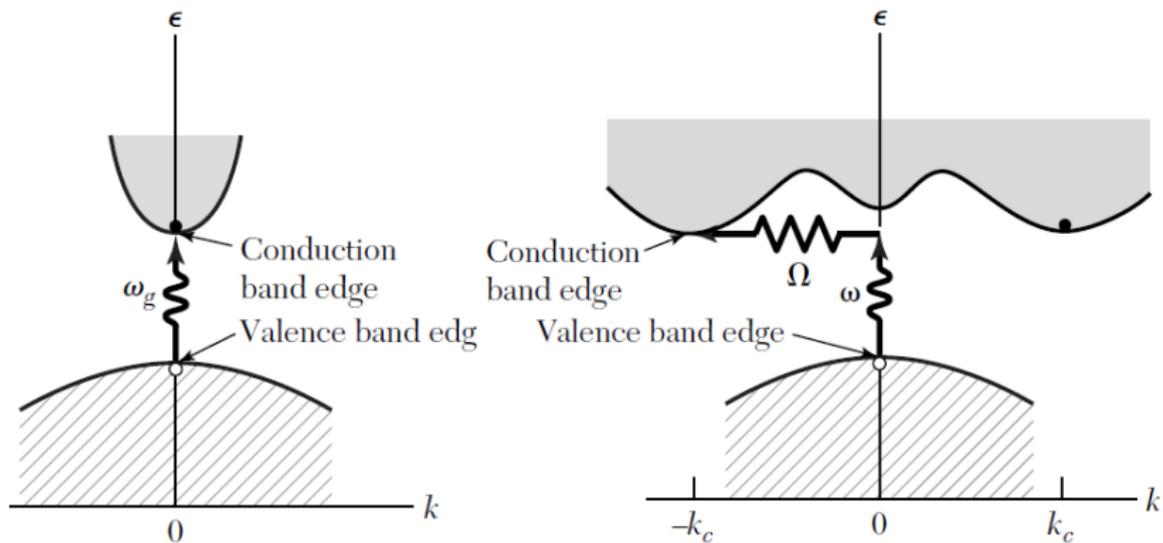
N 型半导体载流子密度



☞ p 型半导体中空穴浓度变化规律和此类似

pN 节

8.5 半导体的光学性质



Kittel, Fig 8.5

直接吸收和间接吸收

- 半导体吸收光子时，满足能量守恒和准动量守恒
- 直接吸收：直接带半导体中，光子能量在带隙附近时，可以直接吸收，吸收系数比较大

$$\hbar k' \text{ (导带电子动量)} = \hbar k \text{ (价带电子动量)} + \hbar k_0 \text{ (光子动量)}$$

$$\varepsilon_c(k') \text{ (导带电子能量)} = \varepsilon_v(k) \text{ (价带电子能量)} + \hbar c |k_0| \text{ (光子能量)}$$

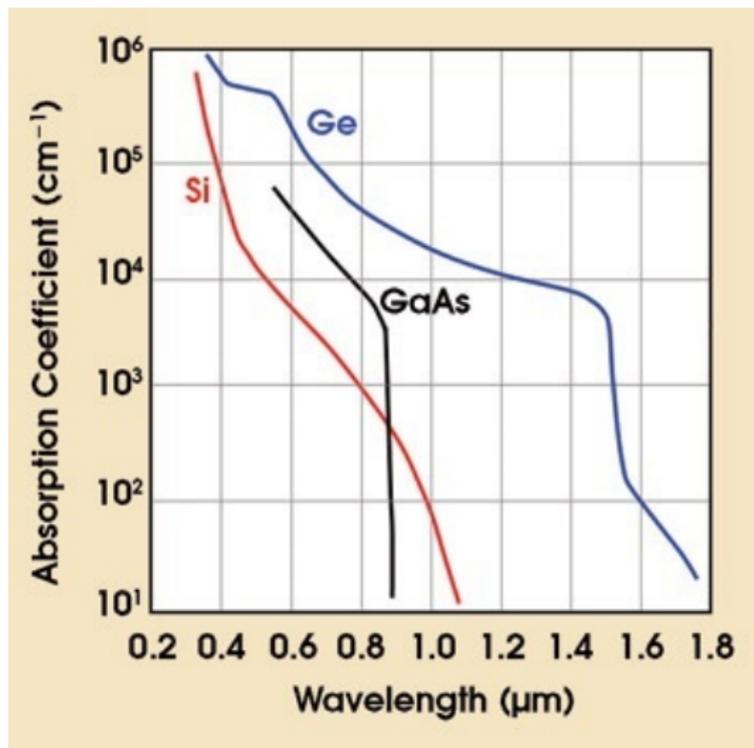
$$|k_0| = \frac{\varepsilon_c(k') - \varepsilon_v(k)}{\hbar c} \sim 10^8 \text{ m}^{-1} \ll \frac{\pi}{a} \sim 10^{10} \text{ m}^{-1} \Rightarrow k' \simeq k$$

- 声子辅助吸收：间接带半导体中，光子能量在带隙附近时，无法被直接吸收，需要声子辅助

$$\hbar k' \text{ (导带电子动量)} = \hbar k \text{ (价带电子动量)} + \hbar q \text{ (声子动量)}$$

$$\varepsilon_c(k') = \varepsilon_v(k) + \hbar c |k_0| + \hbar \omega_\lambda(q) \text{ (声子能量)}$$

半导体的光学性质



直接吸收

半经典近似：经典电磁场 + 量子化电子

$$\mathcal{H} = \frac{[\mathbf{p} + e\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2}{2m} - e\varphi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}) \quad V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

$$= \boxed{\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = \mathcal{H}_0} + \boxed{\frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A})}{2m} + \frac{e^2 \mathbf{A}^2}{2m} - e\varphi + \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}}{m} = \mathcal{H}_I}$$

Coulomb 规范 ($\varphi = 0, \nabla \cdot \mathbf{A} = 0$), 线性响应 ($\mathbf{A}^2 \simeq 0$)

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi - \partial_t \mathbf{A} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = 0$$

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{E}_0}{i\omega} e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

$$\begin{aligned} P_{j\mathbf{k}' \leftarrow i\mathbf{k}}^{abs} &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{j\mathbf{k}'} | \mathcal{H}_I | \psi_{i\mathbf{k}} \rangle|^2 \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_{j\mathbf{k}+\mathbf{q}} | \frac{\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}}{m} | \psi_{i\mathbf{k}} \rangle|^2 \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{q} - \mathbf{k}) \delta[\varepsilon_j(\mathbf{k}') - \varepsilon_i(\mathbf{k}) - \hbar\omega] \\ &= \frac{2\pi}{\hbar m^2} |\langle \psi_{j\mathbf{k}} | \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} | \psi_{i\mathbf{k}} \rangle|^2 \delta[\varepsilon_j(\mathbf{k}) - \varepsilon_i(\mathbf{k}) - \hbar\omega] \end{aligned}$$

直接吸收

$$\text{光强 } I = |\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)|^2,$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$$

$$q = \frac{\tilde{n}\omega}{c} = \frac{(n + i\kappa)\omega}{c}$$

$$P_{ji}^{abs} \hbar\omega = -\frac{dI}{dt} = -\frac{dI}{dz} \times \frac{dz}{dt} = \frac{2\omega\kappa}{c} \boxed{= \alpha} \times I(z) \times \frac{cn}{c}$$

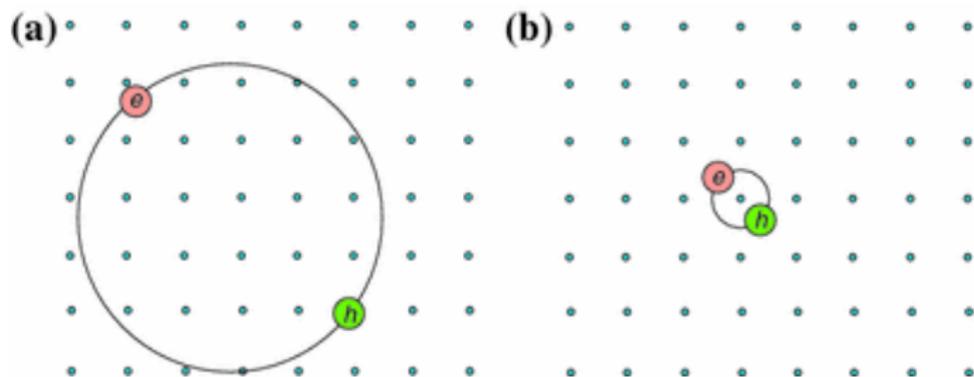
$$P_{ji}^{abs}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} P_{j\mathbf{k} \leftarrow i\mathbf{k}}^{abs}$$

$$= \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{2\pi}{\hbar m^2} |\langle \psi_{j\mathbf{k}} | \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} | \psi_{i\mathbf{k}} \rangle|^2 \delta[\varepsilon_j(\mathbf{k}) - \varepsilon_i(\mathbf{k}) - \hbar\omega]$$

$$\simeq \frac{2\pi}{\hbar m^2} |\langle \psi_{j\mathbf{k}_0} | \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} | \psi_{i\mathbf{k}_0} \rangle|^2 \left[\int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \delta[\varepsilon_j(\mathbf{k}) - \hbar\omega - \varepsilon_i(\mathbf{k})] = \Omega_{ji}(\hbar\omega) \right]$$

$\Omega_{ji}(\hbar\omega)$ 联合态密度

激子/Exciton



考虑电子之间的相互作用之后，电子-空穴形成束缚态：激子

- Wannier-Mott 激子

无机半导体中，介电常数比较大，激子半径很大；

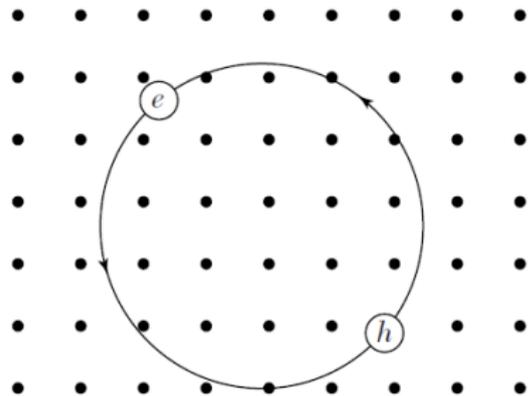
$\Delta\epsilon_{ex} \sim 10 \text{ meV}$ ，低温下稳定

- Frenkel 激子

绝缘体、有机半导体中，介电常数比较小，激子半径比较小，集

集中在一个原胞内； $\Delta\epsilon_{ex} \sim 0.1-1 \text{ eV}$

Wannier-Mott 激子

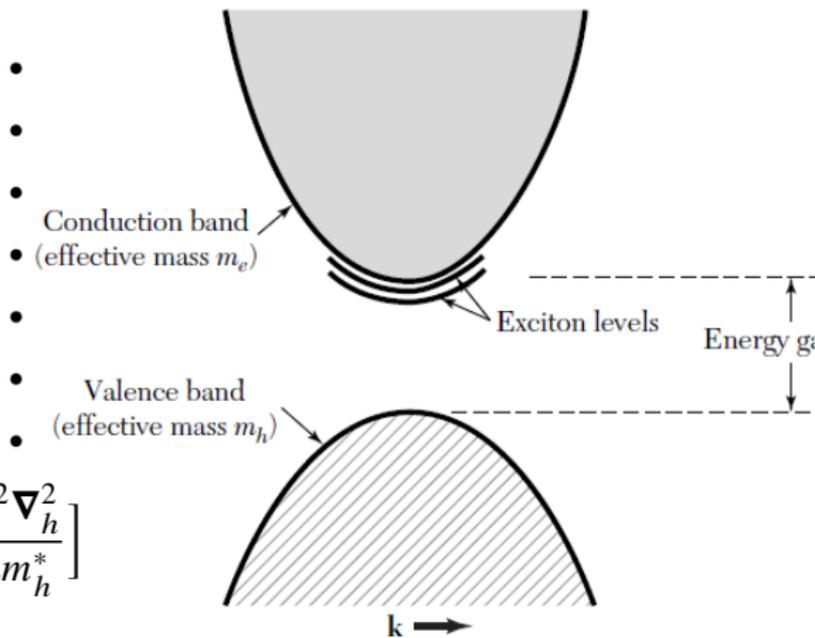


$$H = \left[\varepsilon_c - \frac{\hbar^2 \nabla_e^2}{2m_e^*} \right] + \left[-\varepsilon_v - \frac{\hbar^2 \nabla_h^2}{2m_h^*} \right] - \frac{e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}$$

$$H\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \varepsilon\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$$

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r\hbar^2}{\mu e^2} = \frac{\varepsilon_r m_e}{\mu} a_B$$

$$\sim 10 - 100 a_B$$



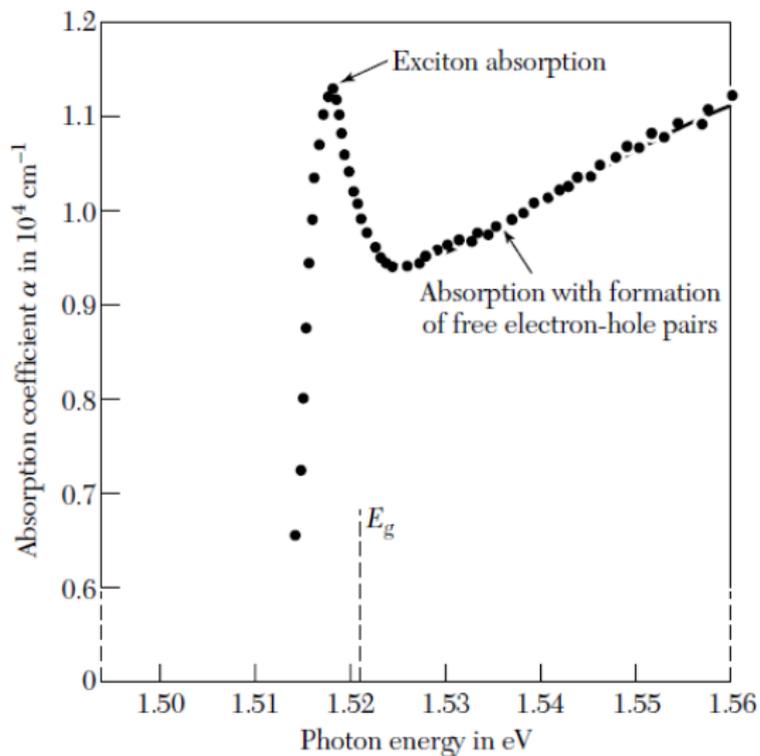
Kittel, Fig 15.4,5

$$\varepsilon = \varepsilon_g + \frac{\hbar^2 k_c^2}{2M} - \frac{\mu e^4}{8\hbar^2 \varepsilon_0^2 \varepsilon_r^2 n^2} = \frac{Ry}{n^2} \frac{\mu}{m_e \varepsilon_r^2}$$

$$\varepsilon_{ex} \sim 10^{-3} Ry \sim 100\text{meV}$$

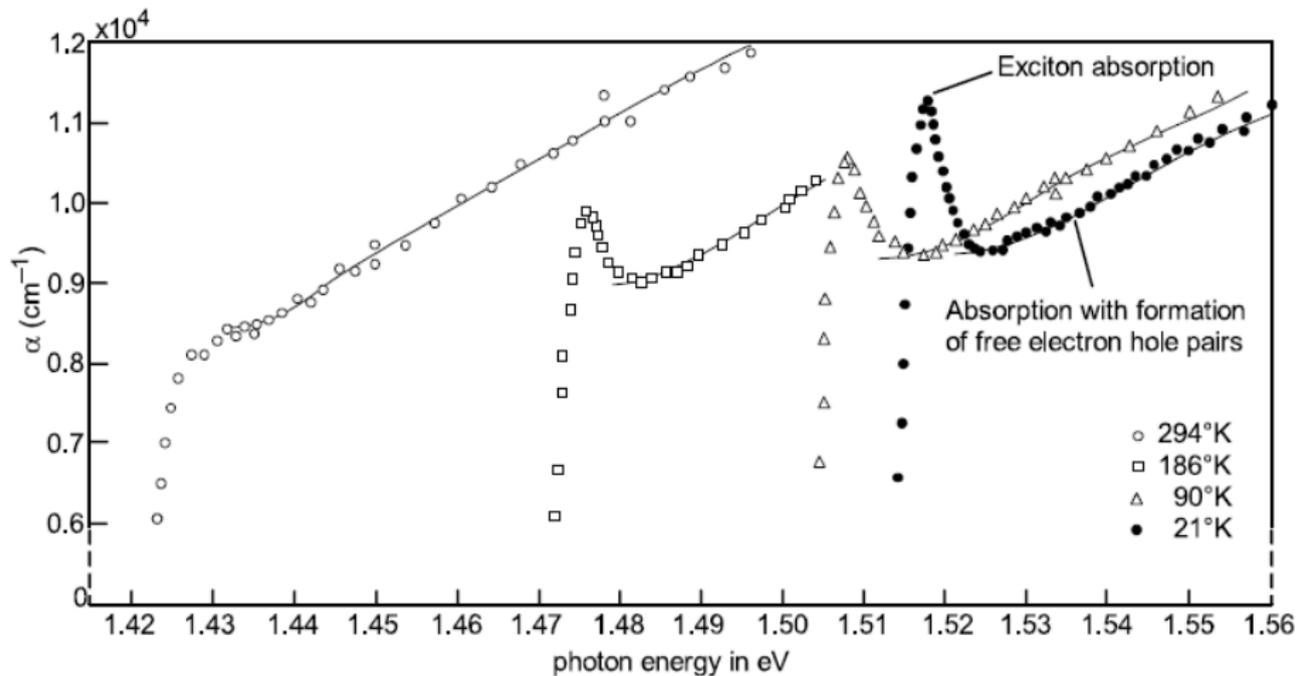
Wannier 激子, $a \gg a_0$

Wannier-Mott 激子



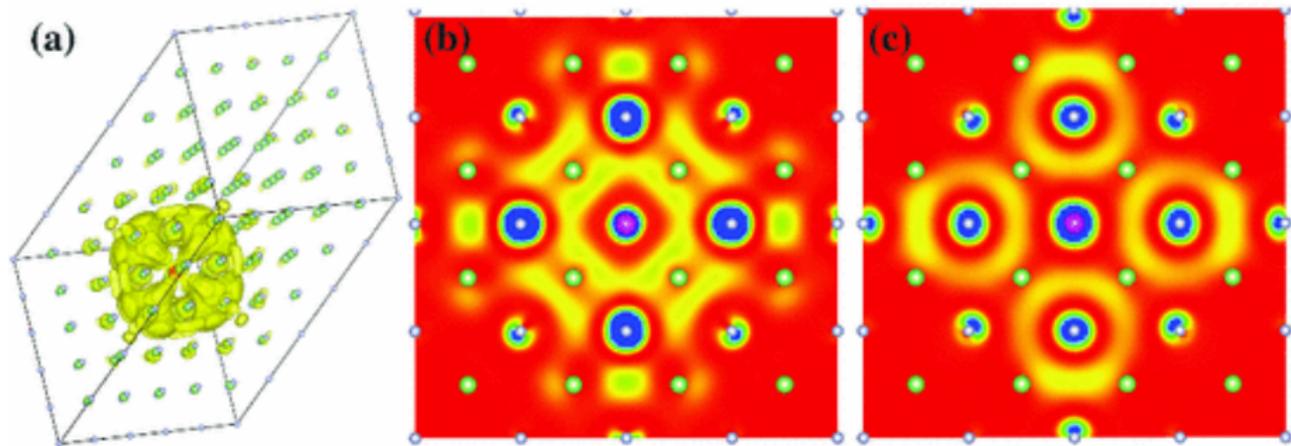
Kittel, Fig 15.7

Wannier-Mott 激子



不同温度下的 GaAs 吸收系数。Patterson, Fig 10.8

LiF 里的 Frenkel 激子



Bechstedt, “Many-Body Approach to Electronic Excitations”, Fig 21.2

(a) $S=0$ 的激子波函数 (空穴处于 F^- 离子上)

(b) $[111]$ 面上的 $S=0$ 激子波函数

(c) $[111]$ 面上的 $S=1$ 激子波函数

高浓度下的激子

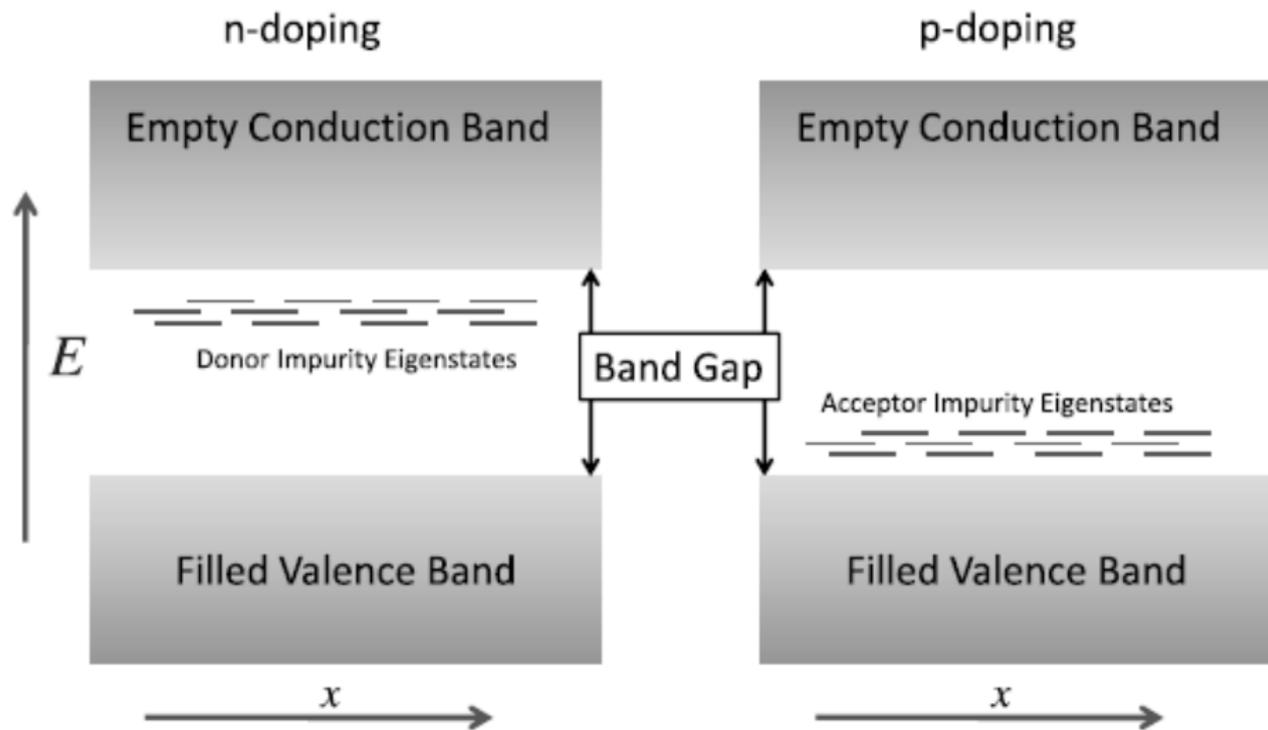
- 激子是玻色型集体激发
- 低浓度时是 Bose 气体
散射可能导致激子解体
- 浓度比较高时，形成双激子 (biexciton)：激子“分子”
- 电子-空穴液滴
- 激子的玻色-爱因斯坦凝聚
Cu₂O, CuCl

色心/Color center



不同类型、浓度的缺陷导致晶体（钻石）颜色不同
缺陷 / 杂质能级影响光学性质

杂质能级



杂质能级。Patterson, Fig 10.9