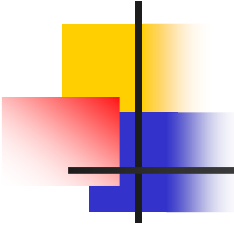


固体物理简介

西安电子科技大学 XIDIDIAN UNIVERSITY

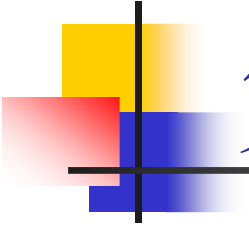
V1.0 © 2007 韩孝勇 Han XiaoYong

xyhan5151@yahoo.com.cn www.dianzichan.com



本次课内容

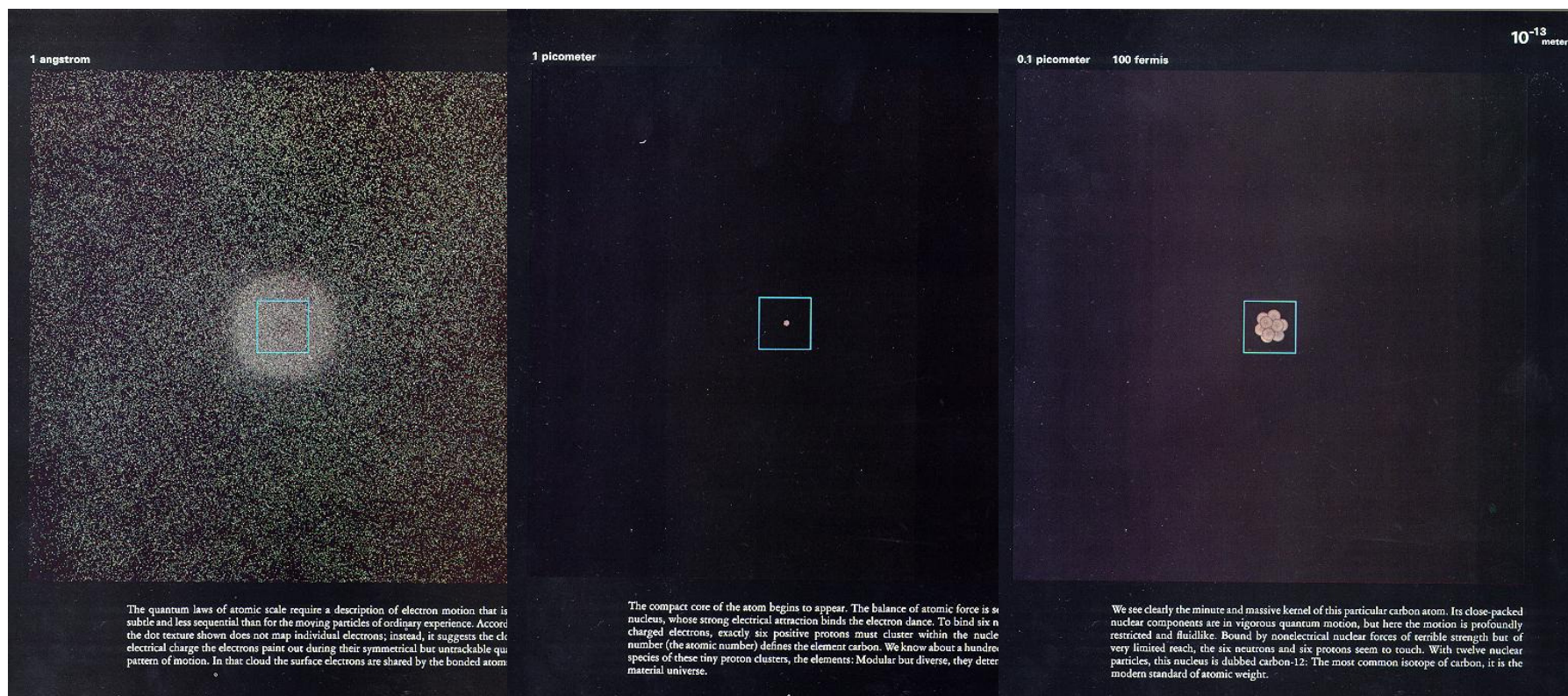
- 第1章 固体晶格结构
 - 1. 1半导体材料
 - 1. 2固体类型
 - 1. 3空间晶格
 - 1. 4原子价键
 - *1. 5固体中的缺陷和杂质
 - *1. 6半导体材料的生长
 - 1. 7小结
- 第2章量子力学初步
 - 2. 1量子力学的基本原理
 - 2. 2薛定谔波动方程
 - 2. 3薛定谔波动方程的应用
 - *2. 4原子波动理论的延伸
 - 2. 5小结
- 第3章固体量子理论初步
 - 3. 1允带与禁带
 - 3. 2固体中电的传导
 - 3. 3三维扩展
 - 3. 4状态密度函数
 - 3. 5统计力学
 - 3. 6小结



第一章 固体晶格结构

- 1. 1 半导体材料
- 1. 2 固体类型
- 1. 3 空间晶格
- 1. 4 原子价键
- *1. 5 固体中的缺陷和杂质
- *1. 6 半导体材料的生长
- 1. 7 小结

原子内部图片



1.1 半导体类型

- 元素半导体（Si Ge）
- 化合物半导体（双元素，三元素等）

表 1.1 部分元素周期表

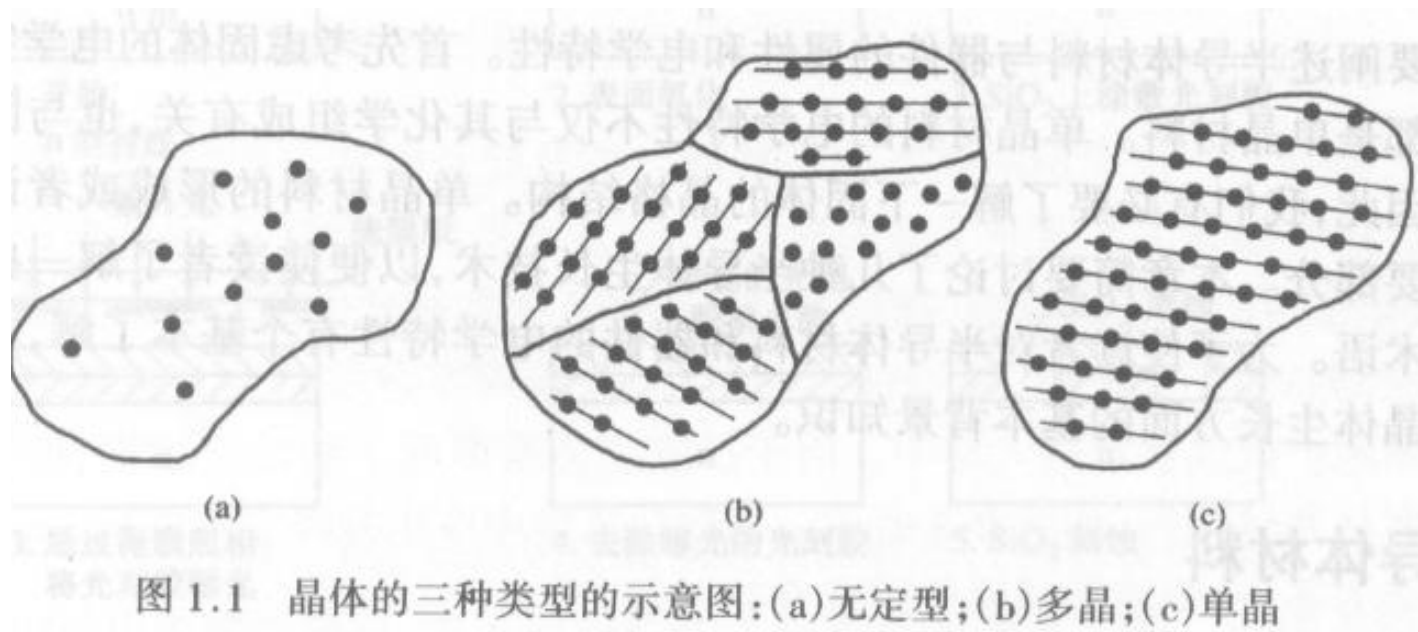
III	IV	V
B	C	
Al	Si	P
Ga	Ge	As
In		Sb

表 1.2 半导体材料

元素半导体	
Si	硅
Ge	锗
化合物半导体	
AlP	磷化铝
AlAs	砷化铝
GaP	磷化镓
GaAs	砷化镓
InP	磷化铟

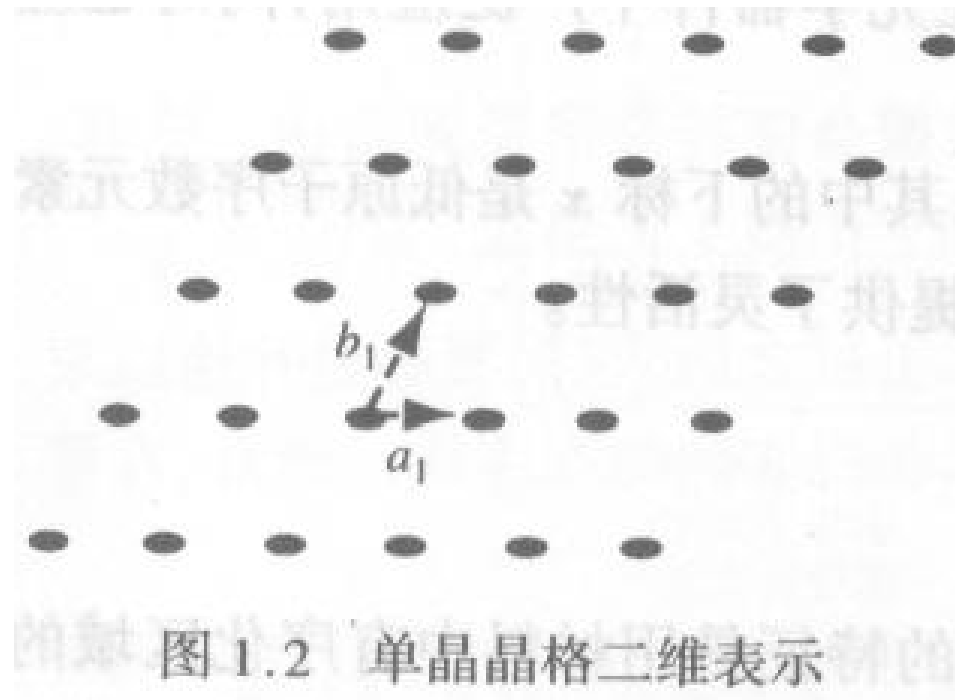
1.2 固体类型

- 无定型
- 多晶
- 单晶



1.3 空间晶格

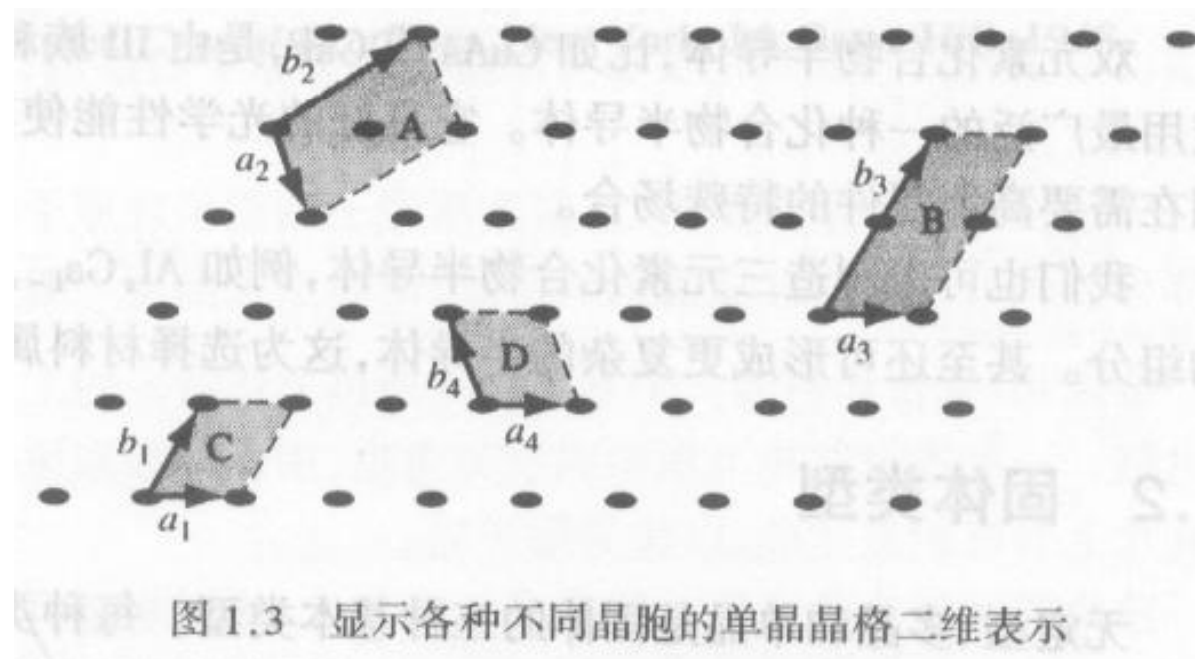
- 晶格__晶体中原子周期性的排列
- 格点__晶体中的原子



1.3 空间晶格

晶胞和原胞

- 晶胞__可以复制成整个晶体的一小部分（基本单元，可以不同）



1.3 空间晶格

晶胞和原胞

- 原胞__可以形成晶体的最小的晶胞

图 1.4 显示了一个广义的三维晶胞。晶胞和晶格的关系用矢量 $\bar{a}$, $\bar{b}$ 和 $\bar{c}$ 表示, 它们不必互相垂直, 长度可能相等也可能不相等。三维晶体中的每一个等效格点都可用矢量

$$\bar{r} = p\bar{a} + q\bar{b} + s\bar{c} \quad (1.1)$$

得到, 其中 p, q, s 是整数。由于原点的位置是任意的, 为简单起见, 我们可使 p, q, s 都是正整数。

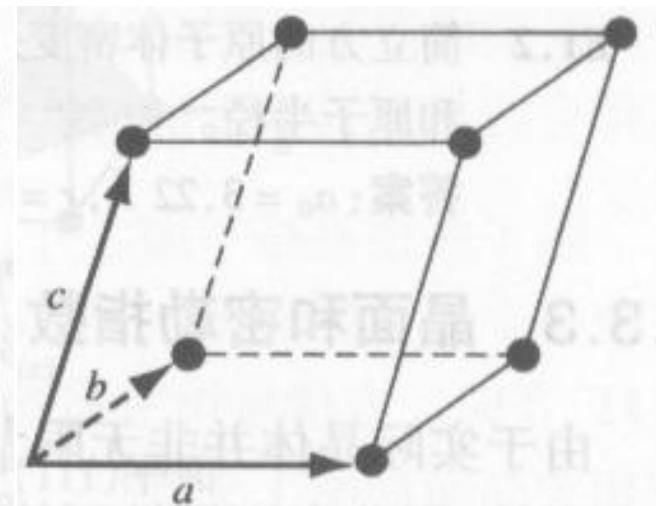
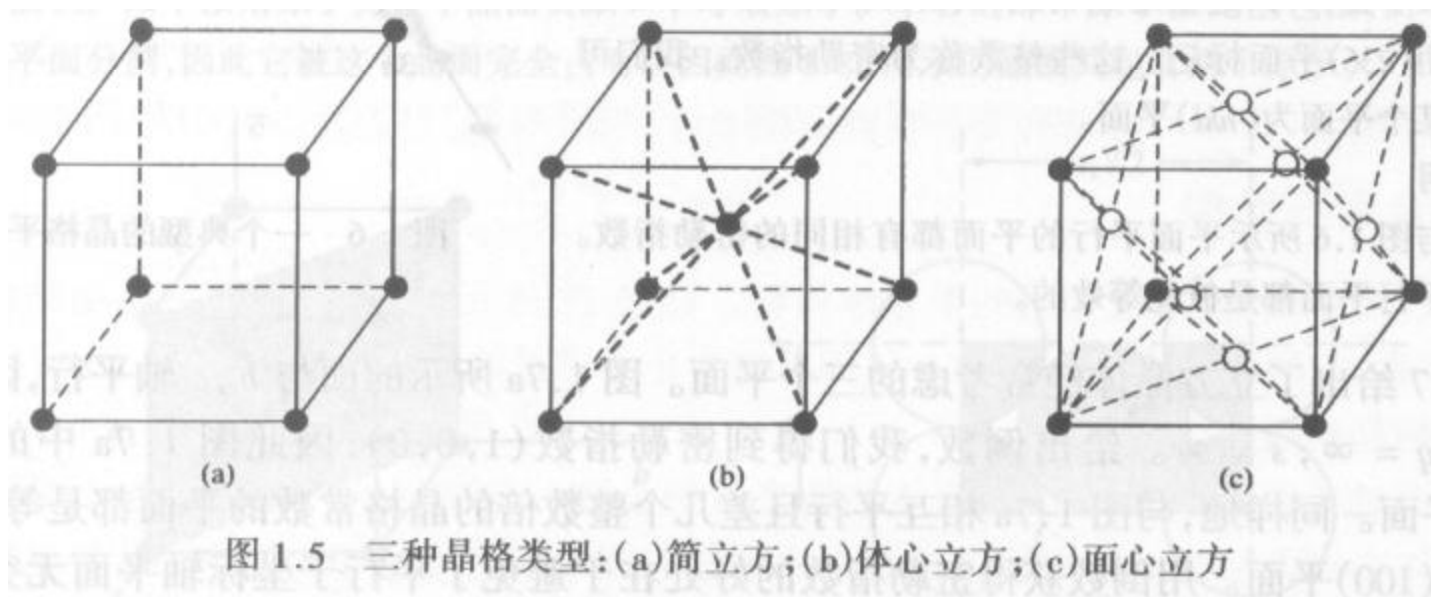


图 1.4 广义原胞

1.3 空间晶格

基本晶体结构

- 简立方sc 体心立方bcc 面心立方fcc



1.3 空间晶格

晶面与密勒指数

■ 密勒指数——截距的倒数

例 1.2 描述图 1.6 所示的平面(图 1.6 中只标出了 $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}$ 轴上的格点)。

■ 解

由式(1.1), 平面截距分别为 $p = 3, q = 2, s = 1$ 。现在写出它们的倒数, 即

$$\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1}\right)$$

乘以最小公分母, 这里是 6, 得到(2, 3, 6)。图 1.6 所示平面可以用(236)平面标记。这些整数称为密勒指数。我们可以称某个平面为(hkl)平面。

■ 说明

凡是与图 1.6 所示平面平行的平面都有相同的密勒指数。任何平行平面都是彼此等效的。

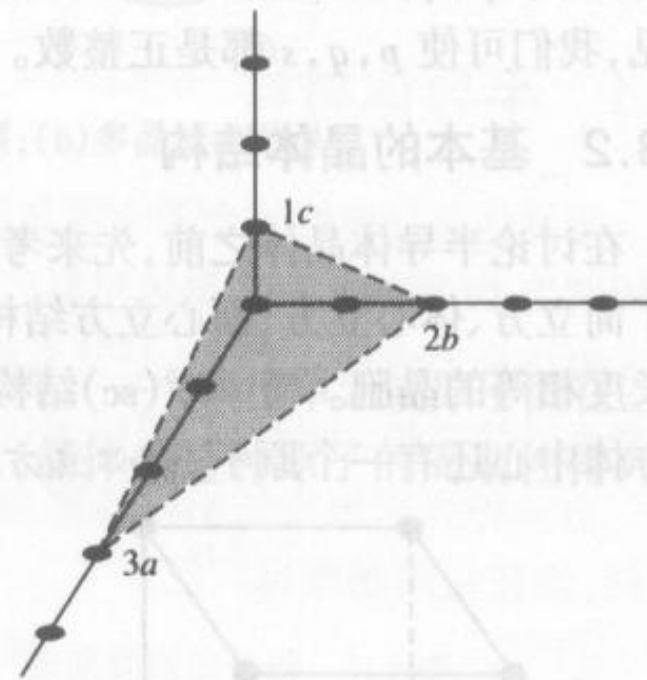
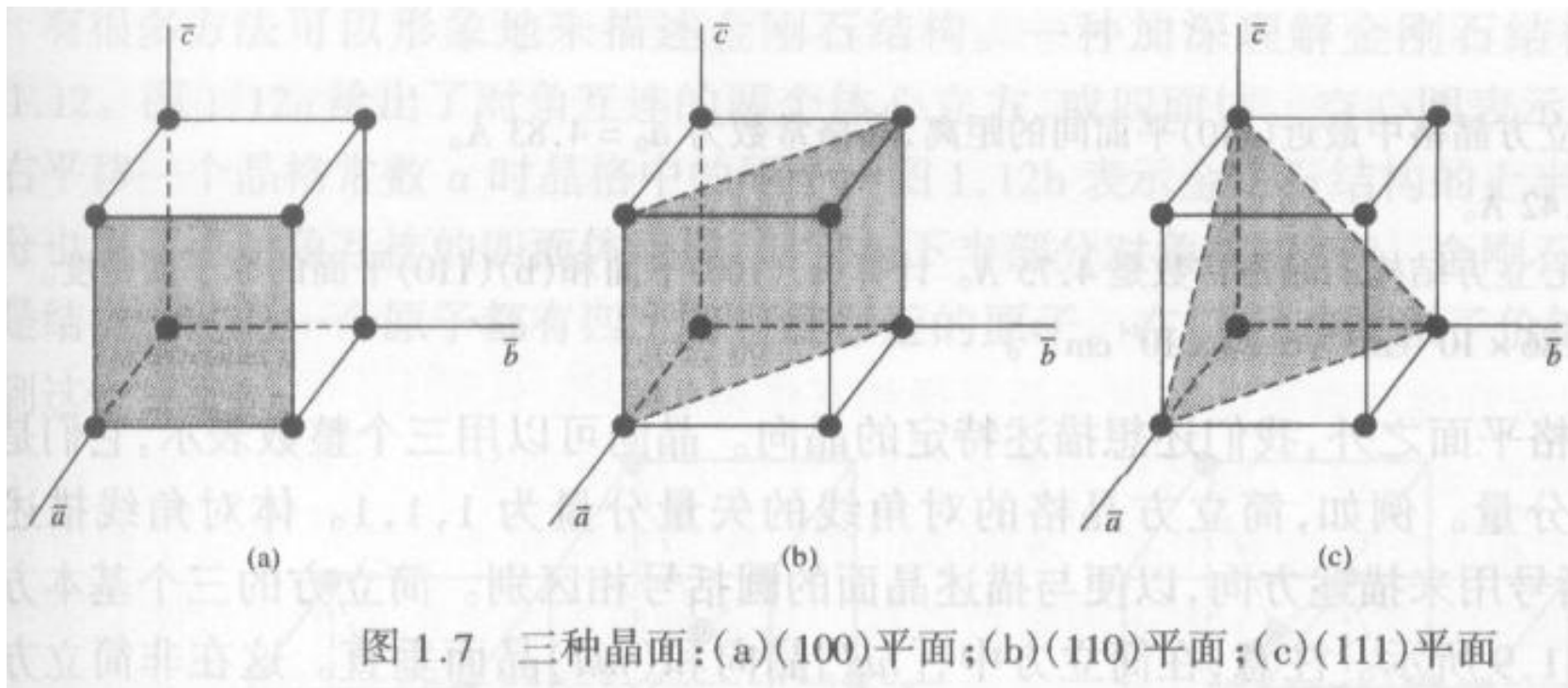


图 1.6 一个典型的晶格平面

1.3 空间晶格

晶面与密勒指数

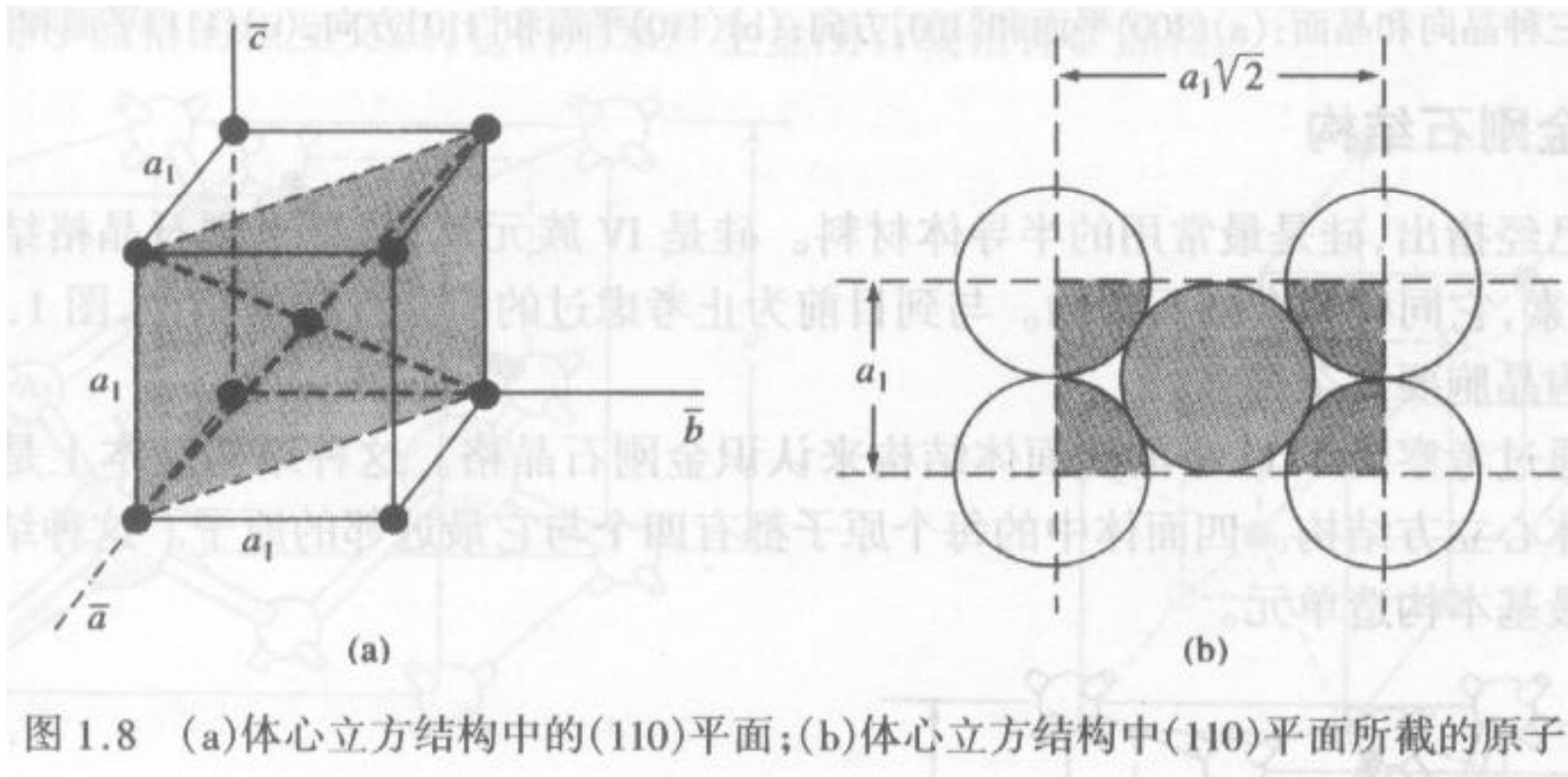
■ 简立方晶体的三种晶面



1.3 空间晶格

晶面与密勒指数

■ 体心立方结构 $1\ 1\ 0$ 晶面及所截的原子



1.3 空间晶格

晶面与密勒指数

■ 晶向__晶面的法线方向

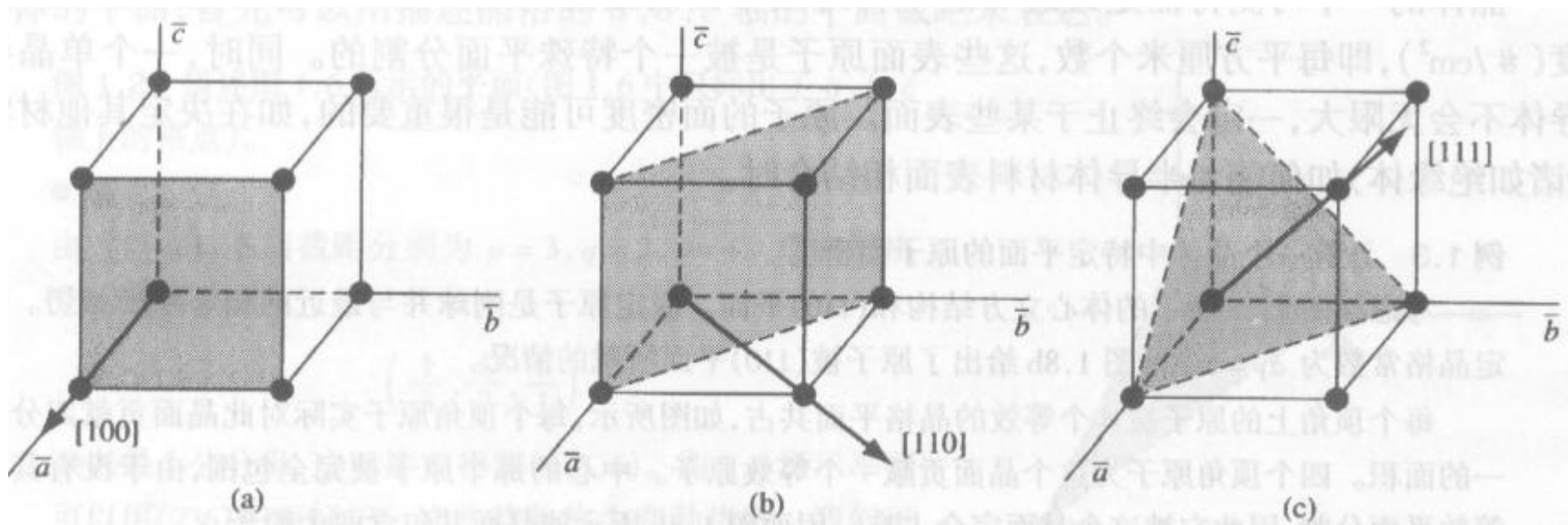


图 1.9 三种晶向和晶面:(a)(100)平面和[100]方向;(b)(110)平面和[110]方向;(c)(111)平面和[111]方向

1.3 空间晶格

金刚石结构

■ Si Ge 金刚石结构

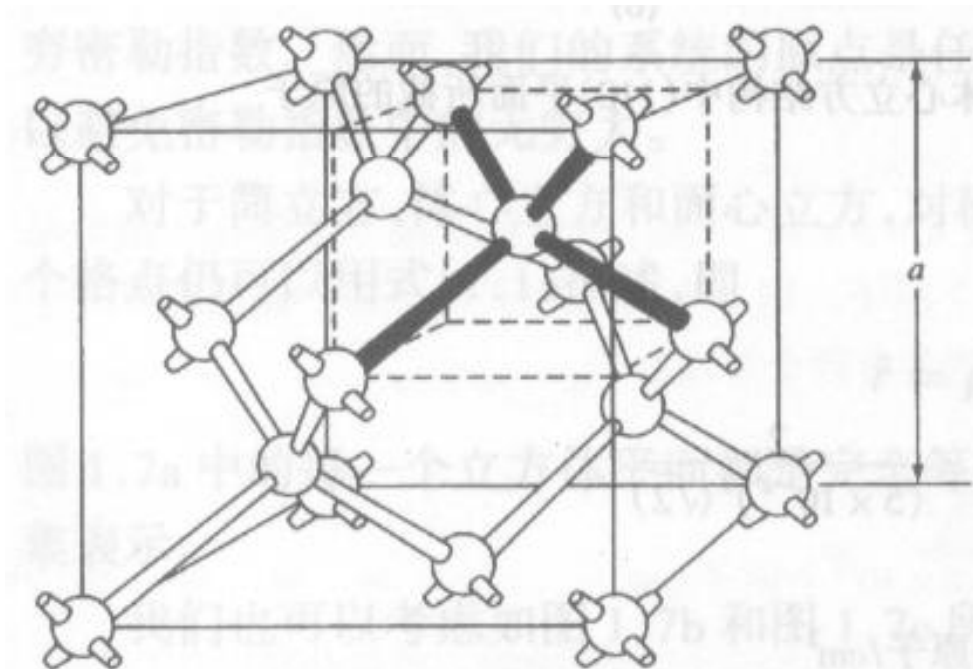


图 1.10 金刚石结构

1.3 空间晶格

金刚石结构

■ 四面体结构

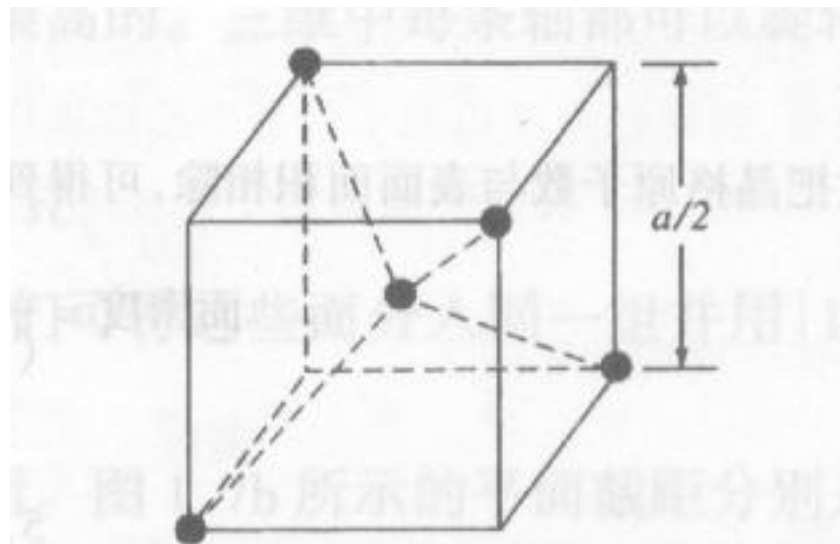
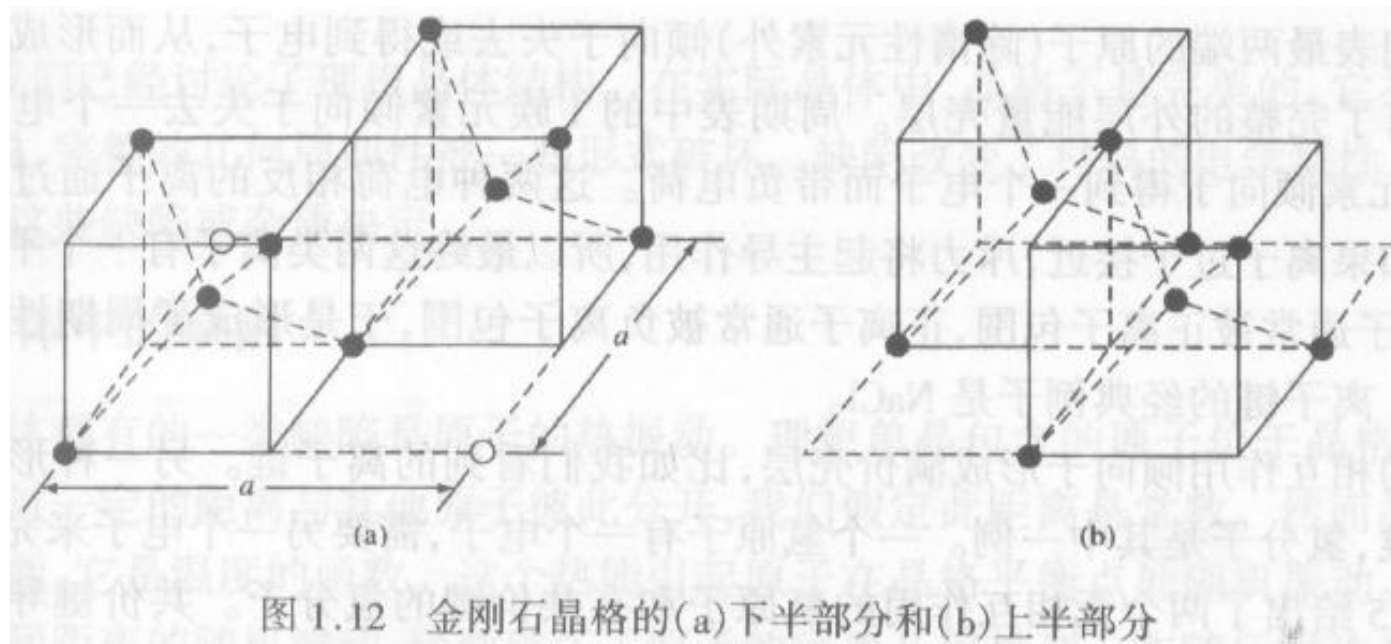


图 1.11 处于金刚石晶格中的最近邻原子形成的四面体结构

1.3 空间晶格

金刚石结构

■ 金刚石晶格



1.3 空间晶格

金刚石结构

- 闪锌矿结构 (GaAs)
 - 不同原子构成的四面体

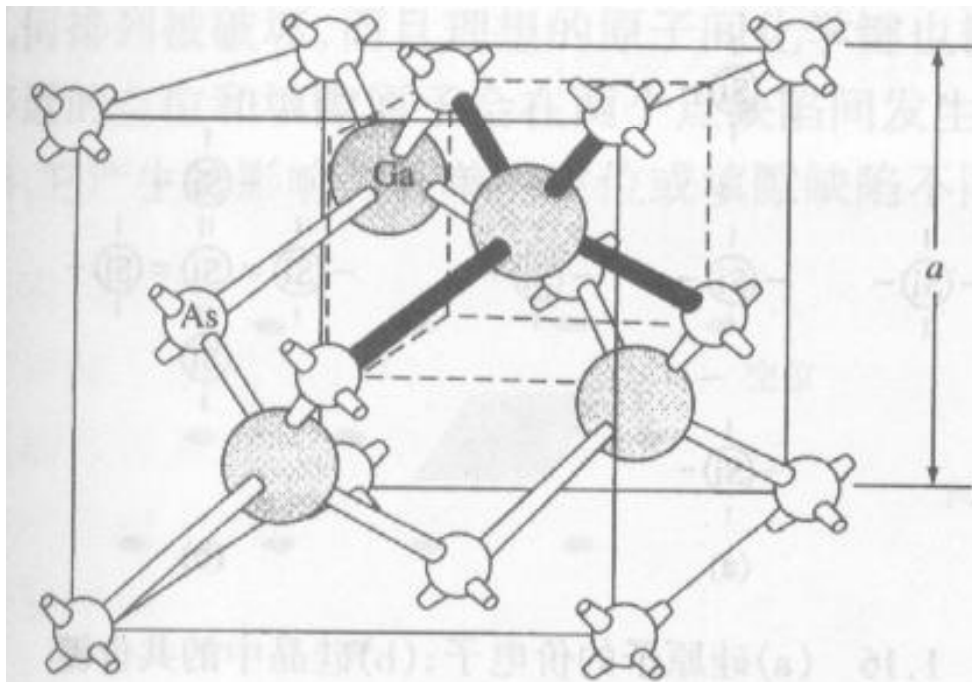
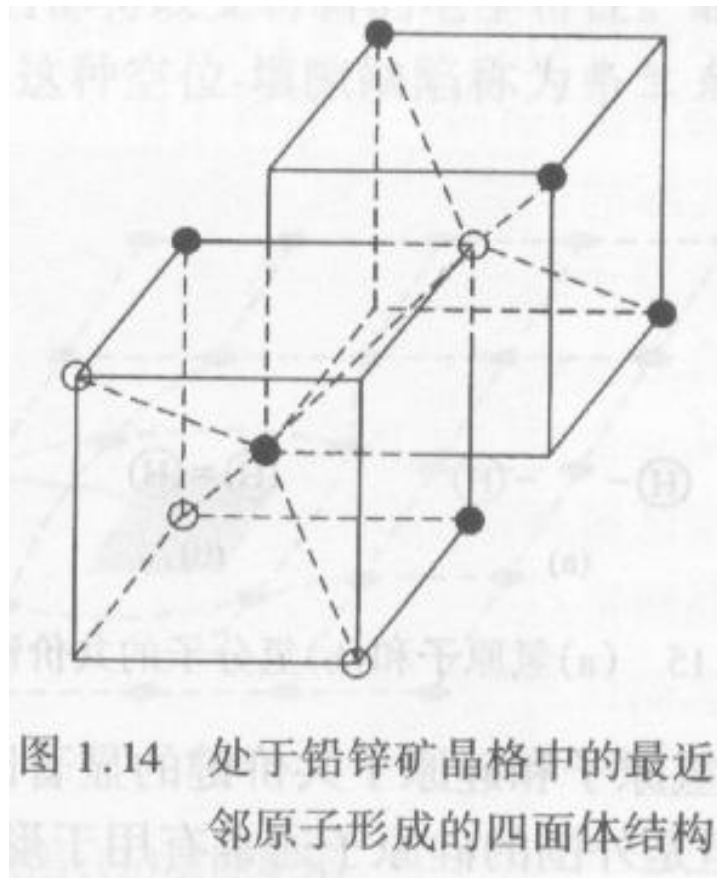
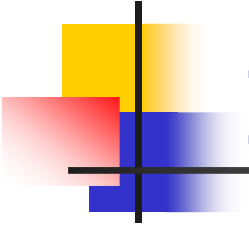


图 1.13 砷化镓的铅锌矿(闪锌矿)晶格

1.3 空间晶格

金刚石结构



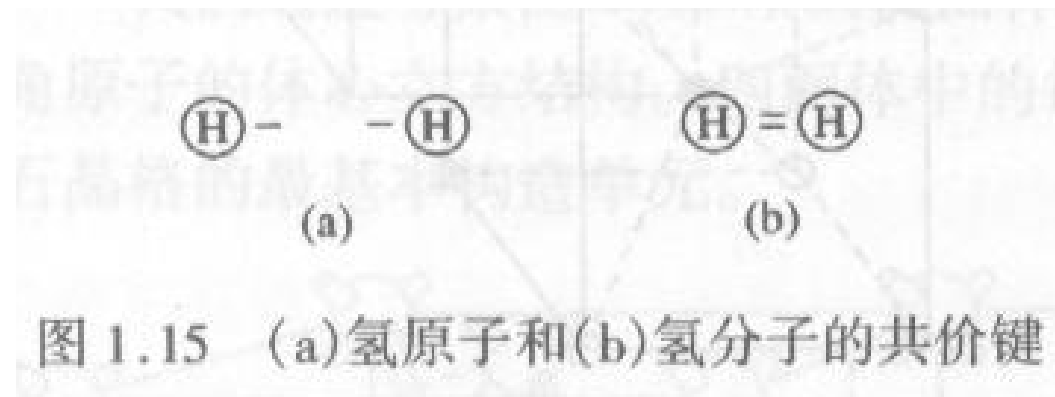


1.4原子价键

- 离子键 (NaCl 库仑力)
- 共价键 (H₂ 最小能量)
- 金属键 (Na 电子海洋)
- 范德华键 (弱 HF 电偶极子 气体)

1.4 原子价键

■ 氢原子和氢分子



1.4原子价键

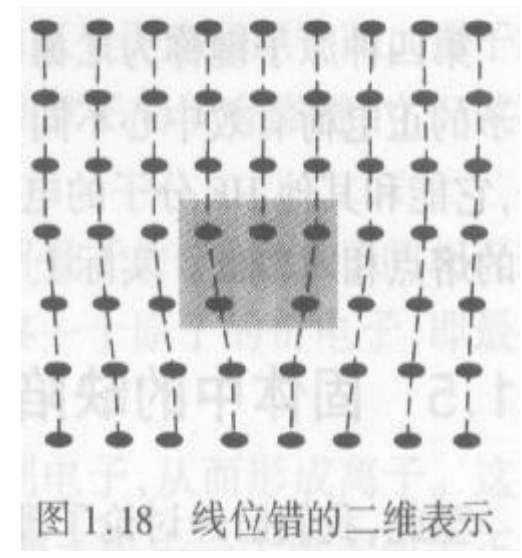
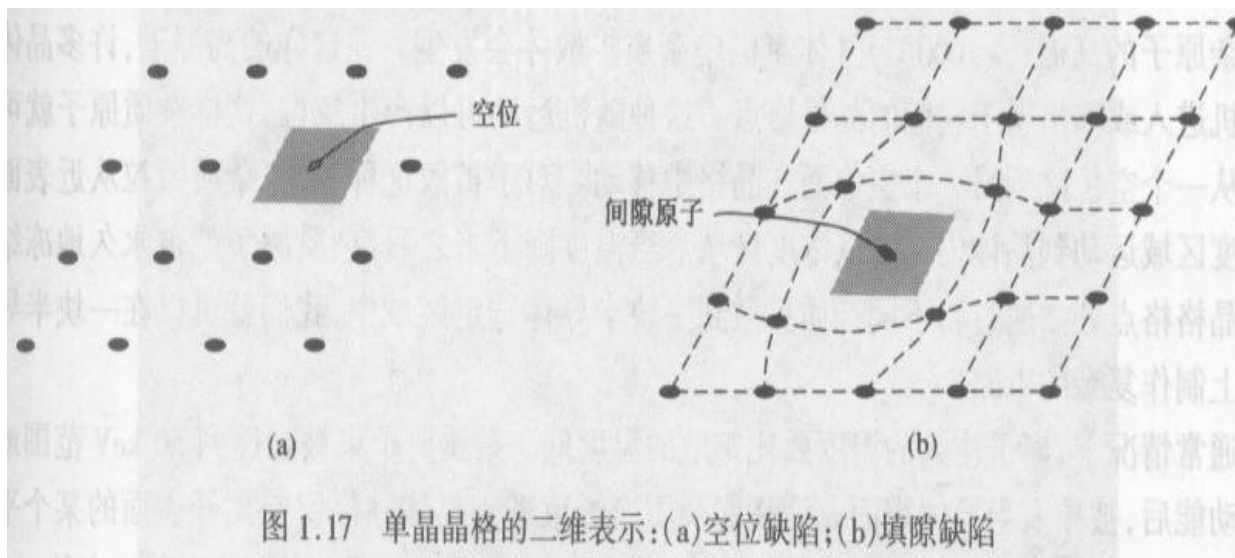
■ 硅原子和硅晶体



1.16 (a)硅原子的价电子;(b)硅晶中的共价键

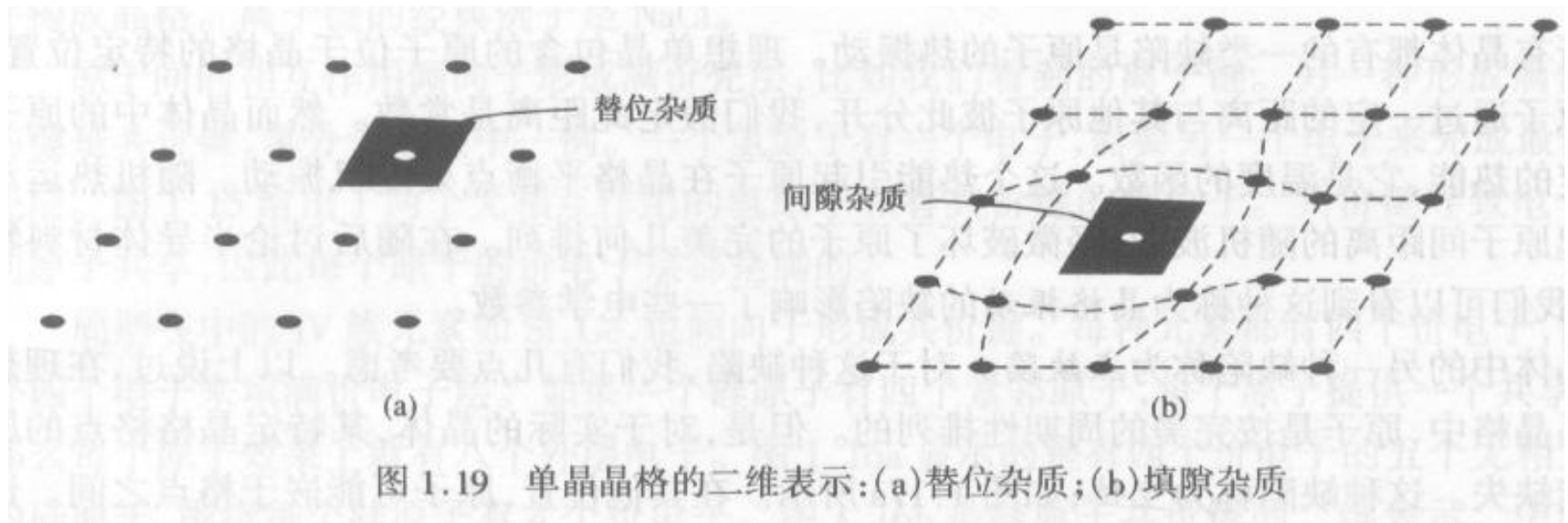
1.5 固体中的缺陷和杂质

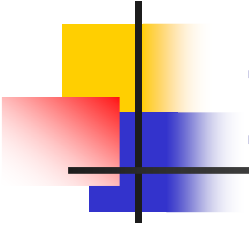
- 晶格振动
- 点缺陷（空位和填隙）
- 线缺陷



1.5 固体中的缺陷和杂质

- 替位式杂质
- 填隙式杂质



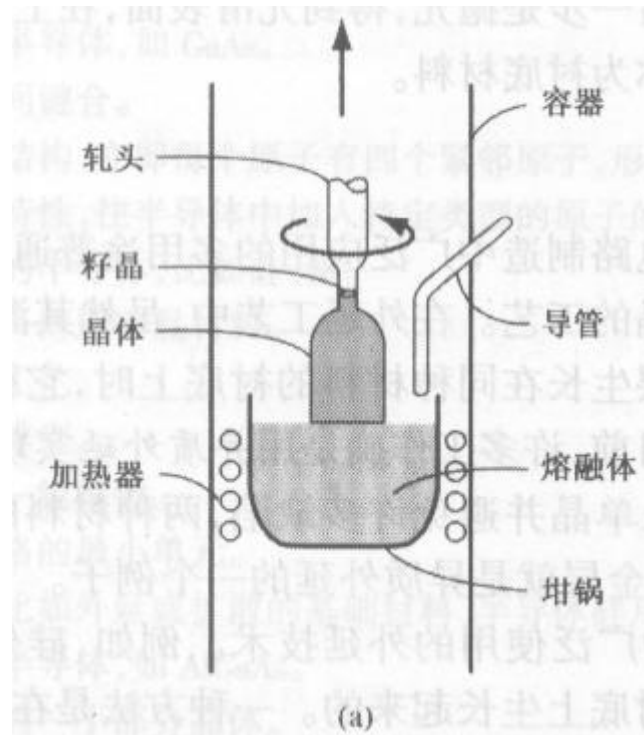


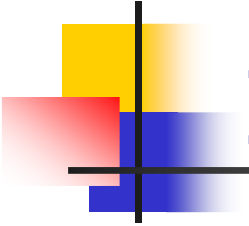
1.5 固体中的缺陷和杂质

- 掺杂__为了改变半导体的导电性而向其中加入杂质的技术.
 - 高温扩散 1 0 0 0 度
 - 离子注入 50kev 损伤与退火

1.6 半导体材料的生长

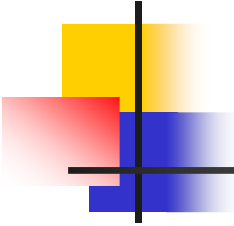
■ 直拉单晶法（Czochralski方法）





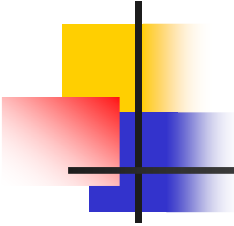
1.6 半导体材料的生长

- 外延生长：在单晶衬底表面生长一层薄单晶的工艺
 - 同质外延
 - 异质外延
- 外延技术
 - 化学气相淀积CVD
 - 液相外延
 - 分子束外延MBE



1.7小结

- 列出了一些最常用的半导体材料。硅是最普遍的半导体材料。
- 半导体和其他材料的属性很大程度上由其单晶的晶格结构决定。晶胞是晶体中的一小块体积,用它可以重构出整个晶体。三种基本的晶胞是简立方、体心立方和面心立方。
- 硅具有金刚石晶体结构。原子都被由 4 个紧邻原子构成的四面体包在中间。二元半导体具有铅锌矿结构,它与金刚石晶格基本相同。
- 引用密勒指数来描述晶面。这些晶面可以用于描述半导体材料的表面。密勒指数也可以用来描述晶向。
- 半导体材料中存在缺陷,如空位、替位杂质和填隙杂质。少量可控的替位杂质有益于改变半导体的特性。
- 给出了一些半导体生长技术的简单描述。体生长生成了基础半导体材料,即衬底。外延生长可以用来控制半导体的表面特性。大多数半导体器件是在外延层上制作的。



重要术语解释

二元半导体:两元素化合物半导体,如 GaAs。

共价键:共享价电子的原子间键合。

金刚石晶格:硅的原子晶体结构,亦即每个原子有四个紧邻原子,形成一个四面体组态。

掺杂:为了有效地改变电学特性,往半导体中加入特定类型的原子的工艺

元素半导体:单一元素构成的半导体,比如硅、锗。

外延层:在衬底表面形成的一薄层单晶材料。

离子注入:一种半导体掺杂工艺。

晶格:晶体中原子的周期性排列。

密勒指数:用以描述晶面的一组整数。

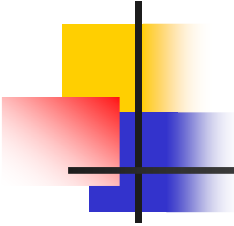
原胞:可复制以得到整个晶格的最小单元。

衬底:用于更多半导体工艺比如外延或扩散的基础材料,半导体硅片或其他原材料。

三元半导体:三元素化合物半导体,如 AlGaAs。

晶胞:可以重构出整个晶体的一小部分晶体。

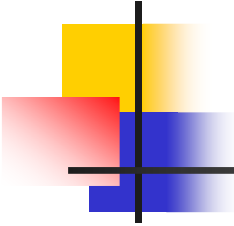
铅锌矿晶格:与金刚石晶格相同的一种晶格,但它有两种类型的原子而非一种。



知识点

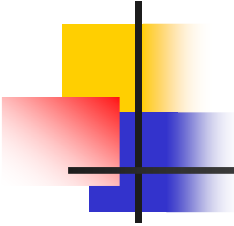
学完本章后,读者应具备如下能力:

- 确定不同晶格结构的体密度。
- 确定某晶面的密勒指数。
- 根据密勒指数画出晶面。
- 确定给定晶面的原子面密度。
- 理解并描述单晶中的各种缺陷。



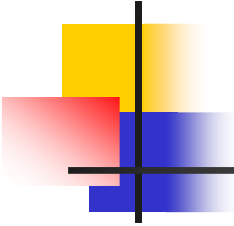
复习题

1. 例举两种元素半导体材料和两种化合物半导体材料。
2. 画出三种晶格结构:(a)简立方;(b)体心立方;(c)面心立方。
3. 描述求晶体中原子的体密度的方法。
4. 描述如何得到晶面的密勒指数。
5. 何谓替位杂质? 何谓填隙杂质?



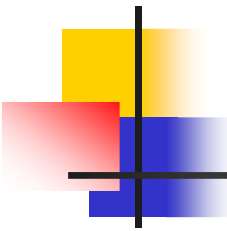
第2章 量子力学初步

- 2. 1量子力学的基本原理
- 2. 2薛定谔波动方程
- 2. 3薛定谔波动方程的应用
- *2. 4原子波动理论的延伸
- 2. 5小结



2.1 量子力学的基本原理

- 三个基本原理
 - 能量量子化原理
 - 波粒二相性原理
 - 不确定原理（测不准原理）



2.1量子力学基本原理 *能量量子化原理*

- 光电效应理论与实验的矛盾
- 1900年普朗克提出热辐射量子化的概念
 $E = h\nu$ (普朗克常数 $h=6.625 \times 10^{-34} \text{J}\cdot\text{s}$)
- 1905年爱因斯坦提出光量子概念（光子）解释了光电效应
- 功函数__电子从材料中逸出的最小能量

2.1 量子力学基本原理 能量量子化

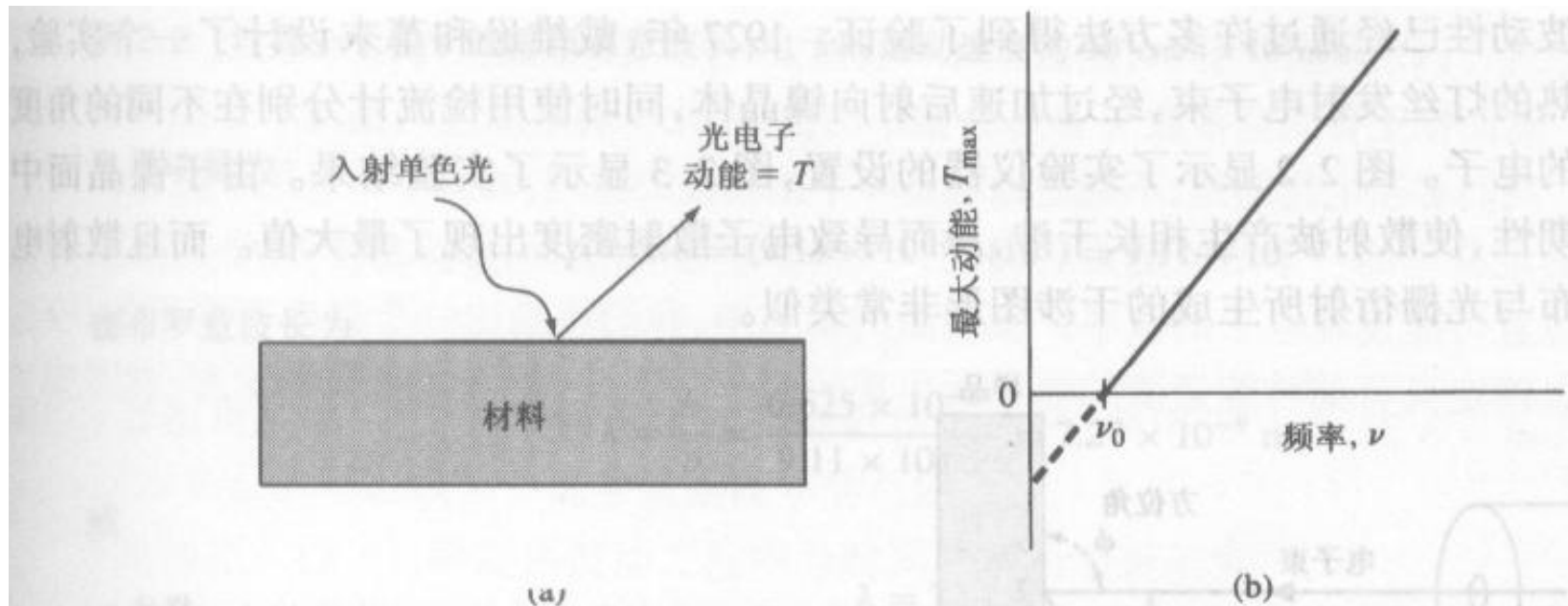
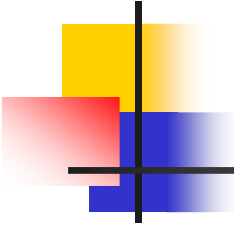


图 2.1 (a)光电效应;(b)光电子最大动能随入射频率变化的函数

光电子的最大动能可以表示为

$$T_{\max} = \frac{1}{2}mv^2 = h\nu - h\nu_0 \quad (\nu \geq \nu_0)$$

式中, $h\nu$ 为入射光子能量, $h\nu_0$ 为电子逸出表面所需的最小能量,即功函数。



2.1 量子力学基本原理 波粒二相性

■ 1924年 德布罗意提出物质波假说

具有波动性。德布罗意的假设就是波粒二相性原理。光子的动量可写为

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

式中 λ 为光波波长。于是,德布罗意假设将粒子的波长表示为

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

式中 p 为粒子动量,而 λ 即为物质波的德布罗意波长。

电子的波动性实验

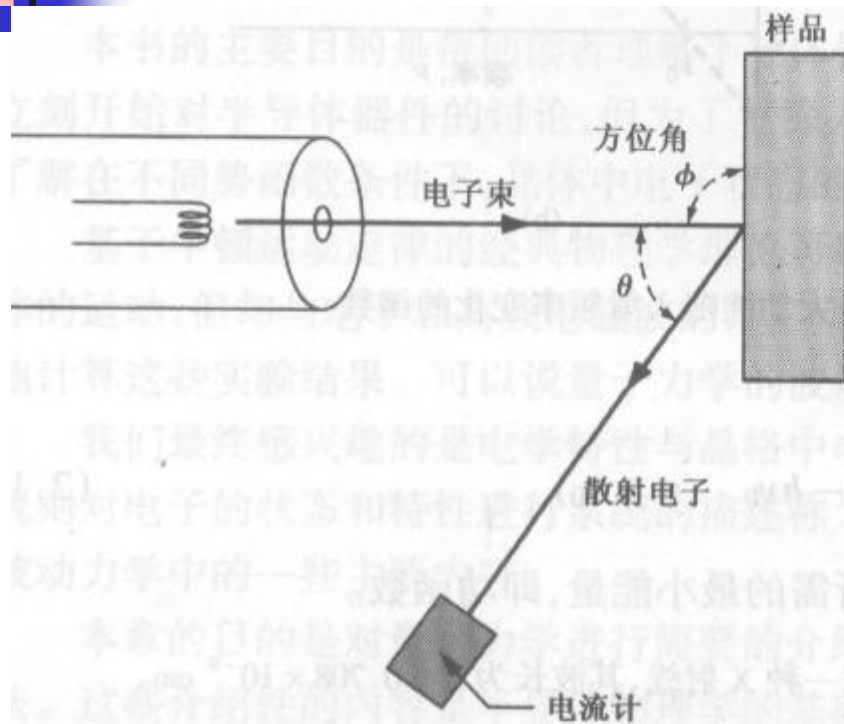


图 2.2 戴维逊和革末实验的实验装置

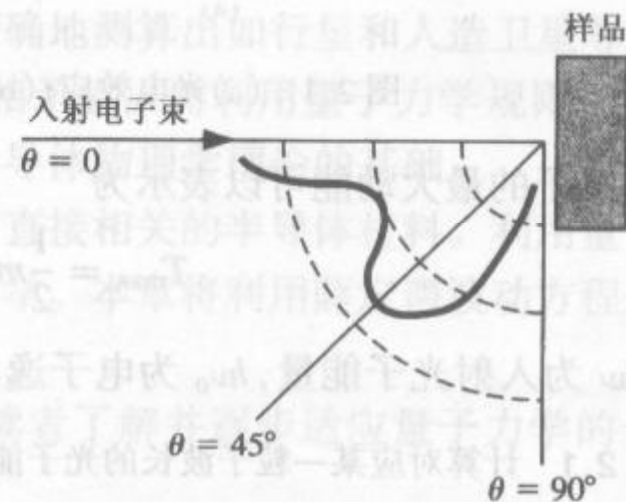


图 2.3 戴维逊和革末实验中电子散射密度随角度变化的函数

电磁波频谱

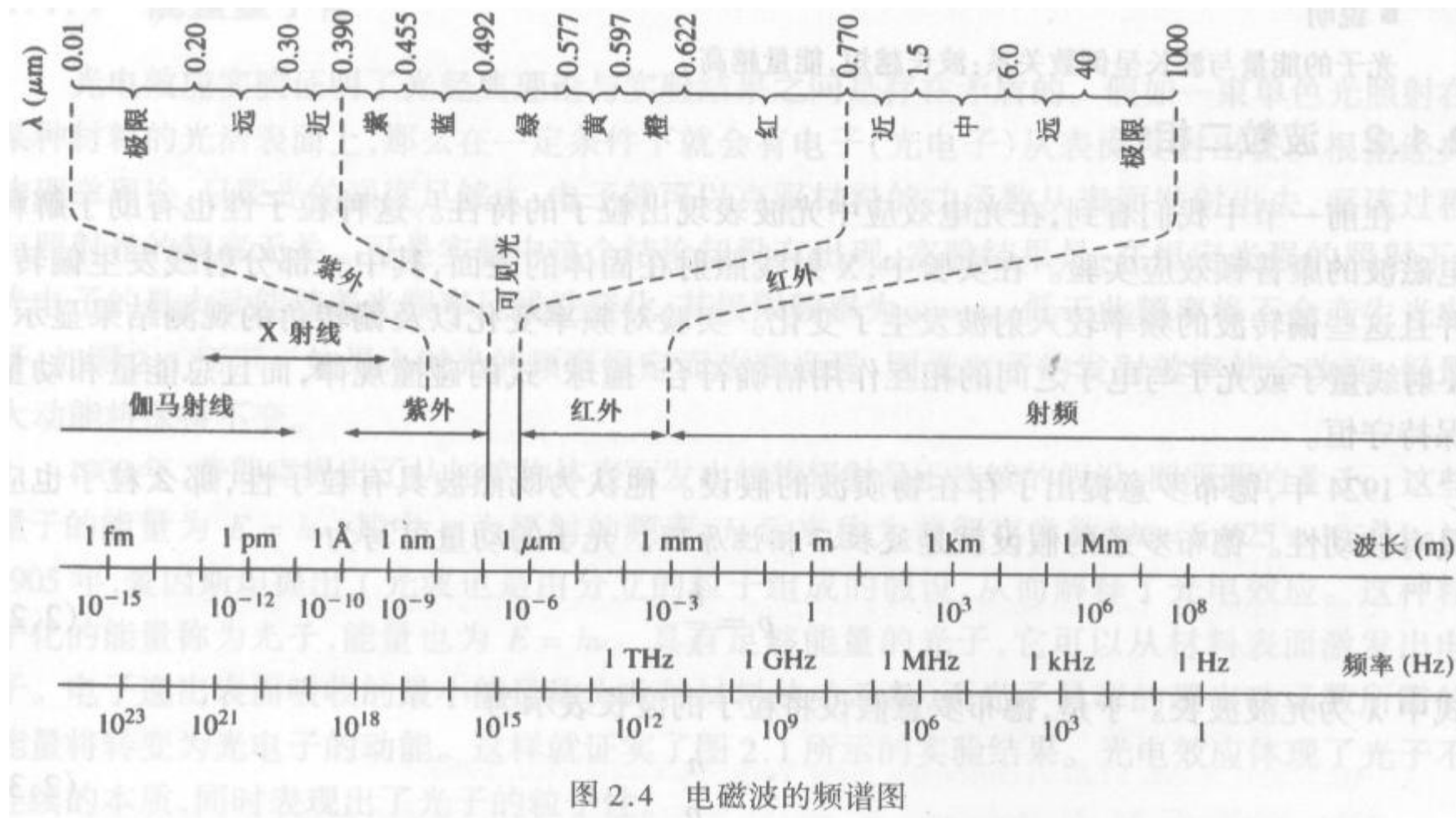


图 2.4 电磁波的频谱图

2.1 量子力学基本原理 不确定原理

于1927年出现的海森堡不确定原理,最初也是为描述较小粒子而提出的,它用于描述那些不能精确确定状态的亚原子粒子。不确定原理可以描述共轭变量之间的基本关系,包括粒子的坐标与动量以及能量与时间。

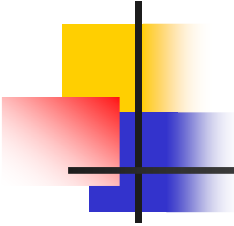
不确定原理的首要观点是对于同一粒子不可能同时确定其坐标和动量。如果动量的不确定程度为 Δp ,而坐标的不确定程度为 Δx ,则不确定关系式为①

$$\Delta p \Delta x \geq \hbar \quad (2.4)$$

式中 $\hbar$ 定义为 $\hbar = h/2\pi = 1.054 \times 10^{-34}$ J-s 并称为修正普朗克常数。该关系式同时也适用于角坐标与角动量。

不确定原理的第二个观点是,对于同一粒子不可能同时确定其能量和具有此能量的时间点。如果给定能量的不确定程度为 ΔE ,而具有此能量的时间的不确定量为 Δt ,那么不确定关系式可写为

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (2.5)$$



2.2 薛定谔波动方程

- 1926年，薛定谔提出波动力学理论

2.2.1 波动方程

一维非相对论的薛定谔波动方程表示为

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) = j\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (2.6)$$

其中, $\Psi(x, t)$ 为波函数, $V(x)$ 为与时间无关的势函数, m 是粒子的质量, j 是虚常数 $\sqrt{-1}$ 。虽然现在还存在有关薛定谔波动方程形式的争论, 但它已经成为量子力学的基本原理。波函数 $\Psi(x, t)$ 描述的是系统的状态, 以数学形式来说, 它可能是一个复数。

2.3 薛定谔波动方程的应用

■ 自由空间中的电子 (变为行波方程)

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[\frac{j}{\hbar} (x\sqrt{2mE} - Et) \right] + B \exp \left[\frac{-j}{\hbar} (x\sqrt{2mE} + Et) \right] \quad (2.22)$$

该结果是一个行波,就是说自由空间中的粒子运动表现为行波。其中系数为 A 的第一项是方向为 $+x$ 的波,而系数为 B 的第二项是方向为 $-x$ 的波。系数的值可由边界条件确定。这种行波结果我们会在讨论晶体或半导体中运动的电子时再次遇到。

假设某一时刻,有一个沿 $+x$ 方向运动的粒子,可以描述为 $+x$ 方向的行波,而系数 $B = 0$ 。该行波的表达式可写为

$$\Psi(x, t) = A \exp [j(kx - \omega t)] \quad (2.23)$$

其中 k 为波数,为

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.24)$$

参数 λ 为波长,比较式(2.23)和式(2.22)可得波长的表达式为

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad (2.25)$$

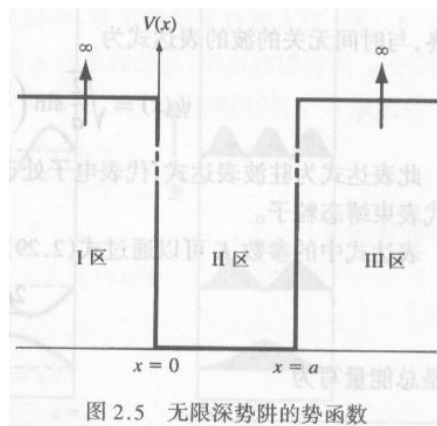
根据德布罗意的波粒二相性原理,波长还可写为

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (2.26)$$

可以说,自由粒子的能量、动量和波长都有明确的定义。

2.3 薛定谔波动方程的应用

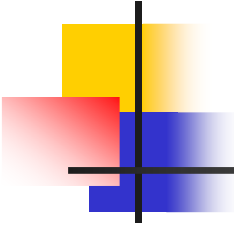
■ 无限深势阱（变为驻波方程）



最终,与时间无关的波的表达式为

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.35)$$

此表达式为驻波表达式,代表电子处于无限深势阱中。可以说,行波代表自由粒子,而驻波代表束缚态粒子。



2.3 薛定谔波动方程的应用

■ 无限深势阱（能量量子化）

$$E = E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.37)$$

综上所述,无限深势阱中粒子的波函数为

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin Kx \quad (2.38)$$

其中,常量 K 必须是分立值,相应的粒子的总能量也只能是分立值。这个结论意味着粒子能量的量子化,也就是说,粒子的能量只能是特定的分立值。能量的量子化与经典力学中允许连续的能量值的结论相矛盾。于是,能量的量子化也就引出了稍后将会详细讨论的量子论。束缚态粒子能量的量子化是一个极其重要的结论。

2.3 薛定谔波动方程的应用

■ 无限深势阱（前 4 级能量）

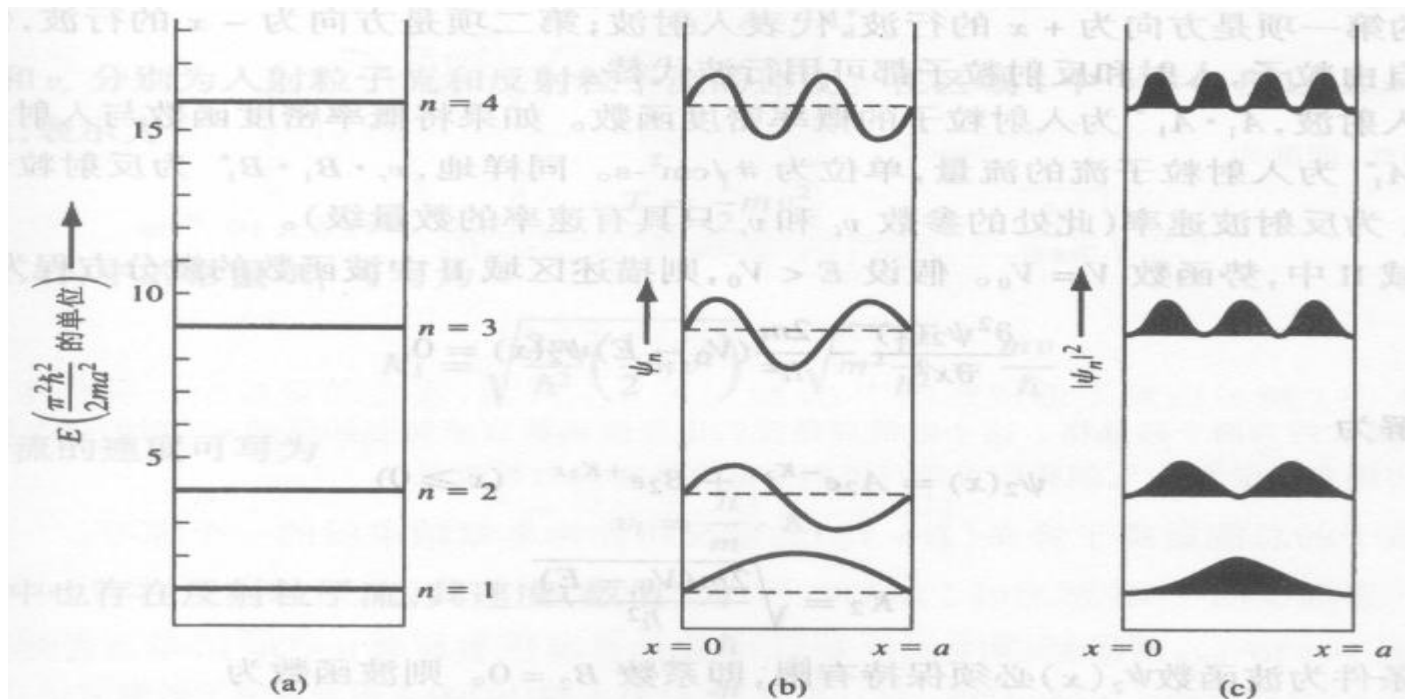
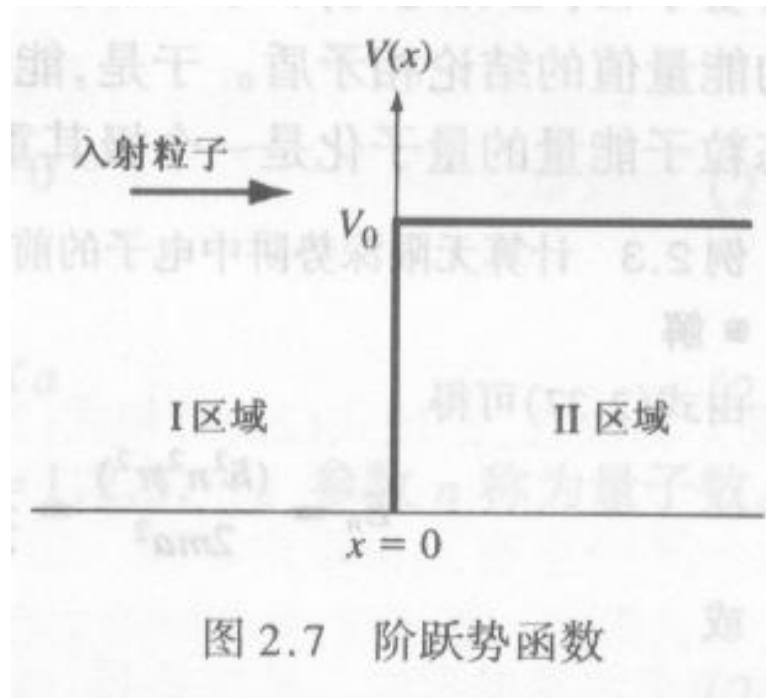


图 2.6 无限深势阱中的粒子:(a)前四级能量;(b)对应的波函数;(c)对应的概率函数

2.3 薛定谔波动方程的应用

■ 阶跃势函数

- 入射粒子能量小于势垒时也有一定概率穿过势垒（与经典力学不同）



2.3 薛定谔波动方程的应用

■ 矩形势垒 （隧道效应）

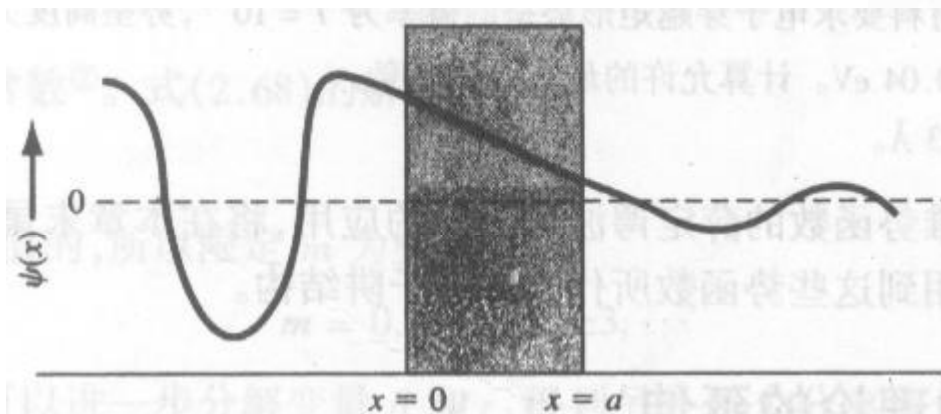


图 2.9 穿过势垒的波函数

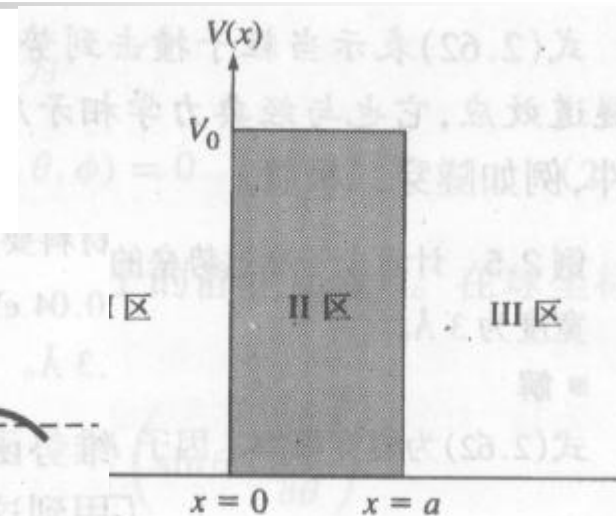


图 2.8 矩形势垒

$$T \approx 16 \left(\frac{E}{V_0} \right) \left(1 - \frac{E}{V_0} \right) \exp(-2K_2 a) \quad (2.62)$$

式(2.62)表示当粒子撞击到势垒时,存在有限的概率穿过势垒到达区域 III。这种现象称为隧道效应,它也与经典力学相矛盾。后面会看到这种量子力学的隧道效应会应用到半导体器件,例如隧穿二极管。

2.4 波动理论的延伸

■ 单电子原子

量子数 n, l 和 m 称为量子数, 并具有以下关系:

$$n = 1, 2, 3, \dots$$

$$l = n - 1, n - 2, n - 3, \dots, 0$$

$$|m| = l, l - 1, \dots, 0$$

每一组量子数对应一个量子态的电子。

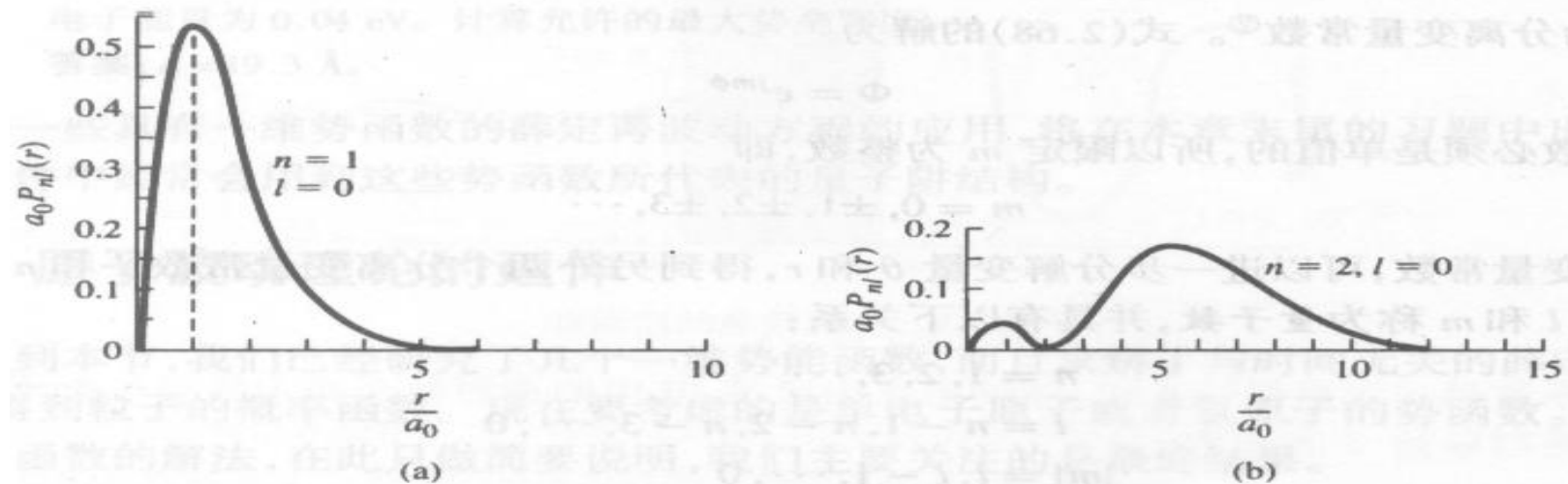


图 2.10 单电子原子的径向概率密度函数:(a)最低能级;(b)次低能级

元素周期表

- 根据电子自旋和泡利不相容原理： $n l m s$ 四个量子数可以推出元素周期表（框架）
(每层可以容纳 $2n^2$ 个电子)

表 2.1 周期表的初始部分

元素	元素表示法	n	l	m	s
氢	$1s^1$	1	0	0	$+\frac{1}{2}$ 或 $-\frac{1}{2}$
氦	$1s^2$	1	0	0	$+\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$
锂	$1s^2 2s^1$	2	0	0	$+\frac{1}{2}$ 或 $-\frac{1}{2}$
铍	$1s^2 2s^2$	2	0	0	$+\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$
硼	$1s^2 2s^2 2p^1$	2	1	$m = 0, -1, +1$ $s = +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	
碳	$1s^2 2s^2 2p^2$	2	1		
氮	$1s^2 2s^2 2p^3$	2	1		
氧	$1s^2 2s^2 2p^4$	2	1		
氟	$1s^2 2s^2 2p^5$	2	1		
氖	$1s^2 2s^2 2p^6$	2	1		

n l m s 四个量子数

- (1) 主量子数 n : 决定体系能量 E 或电子离核远近距离 r 。

$n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$

电子层数: K L M N O P Q

- (2) 角量子数 l : 确定原子轨道的形状并在多电子原子中和主量子数一起决定电子的能级。

$l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, \dots, n-1$

相应的能级: s p d f g, ...

$l = 0$ 球形对称

$l = 1$ 原子轨道呈哑铃形分布

$l = 2$ 其原子轨道呈花瓣形分布

- (3) 磁量子数 m : 决定原子轨道在空间的取向。

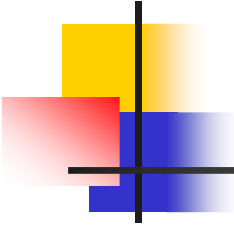
$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm L$ 共 $(2L+1)$ 个

- (4) 自旋量子数: 只决定电子运动状态与薛定谔方程无关。

$s = \pm 1/2$

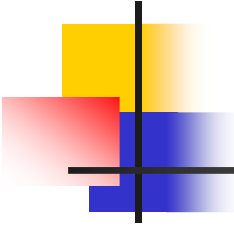
元素周期表

周期	I 族		II 族		III 族		IV 族		V 族		VI 族		VII 族		VIII 族					
	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b	a					b
I	1 H 1.0079																			2 He 4.003
II	3 Li 6.94		4 Be 9.02		5 B 10.82		6 C 12.01		7 N 14.01		8 O 16.00		9 F 19.00							10 Ne 20.18
III	11 Na 22.99		12 Mg 24.32		13 Al 26.97		14 Si 28.06		15 P 30.98		16 S 32.06		17 Cl 35.45							18 Ar 39.94
IV	19 K 39.09		20 Ca 40.08		21 Sc 44.96		22 Ti 47.90		23 V 50.95		24 Cr 52.01		25 Mn 54.93		26 Fe 55.85	27 Co 58.94	28 Ni 58.69			
	29 Cu 63.54		30 Zn 65.38		31 Ga 69.72		32 Ge 72.60		33 As 74.91		34 Se 78.96		35 Br 79.91							36 Kr 83.7
V	37 Rb 85.48		38 Sr 87.63		39 Y 88.92		40 Zr 91.22		41 Nb 92.91		42 Mo 95.95		43 Tc 99		44 Ru 101.7	45 Rh 102.91	46 Pd 106.4			
	47 Ag 107.88		48 Cd 112.41		49 In 114.76		50 Sn 118.70		51 Sb 121.76		52 Te 127.61		53 I 126.92							54 Xe 131.3
VI	55 Cs 132.91		56 Ba 137.36		57-71 稀土元素		72 Hf 178.6		73 Ta 180.88		74 W 183.92		75 Re 186.31		76 Os 190.2	77 Ir 193.1	78 Pt 195.2			
	79 Au 197.2		80 Hg 200.61		81 Tl 204.39		82 Pb 207.21		83 Bi 209.00		84 Po 210		85 At 211							86 Rn 222
VII	87 Fr 223		88 Ra 226.05		89 Ac 227		90 Th 232.12		91 Pa 231		92 U 238.07	93 Np 237	94 Pu 239	95 Am 241	96 Cm 242	97 Bk 246	98 Cf 249	99 Es 254	100 Fm 256	101 Md 256



2.5小结

- 我们讨论了一些量子力学的概念,这些概念可以用于描述不同势场中的电子状态。了解电子的运动状态对于研究半导体物理是非常重要的。
- 波粒二相性原理是量子力学的重要部分。粒子可以有波动态,波也可以具有粒子态。
- 薛定谔波动方程是描述和判断电子状态的基础。
- 马克思·玻恩提出了概率密度函数 $|\psi(x)|^2$ 。
- 对束缚态粒子应用薛定谔方程得出的结论是,束缚态粒子的能量是量子化的。
- 利用单电子原子的薛定谔方程推导出周期表的基本结构。



重要术语解释

德布罗意波长:普朗克常数与粒子动量的比值所得的波长。

海森堡不确定原理:该原理指出我们无法精确确定成组的共轭变量值,从而描述粒子的状态,如动量和坐标。

泡利不相容原理:该原理指出任意两个电子都不会处在同一量子态。

光子:电磁能量的粒子形态。

量子:热辐射的粒子形态。

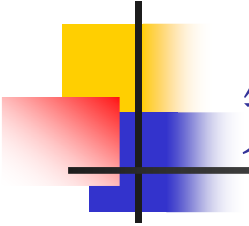
量子化能量:束缚态粒子所处的分立能量级。

量子数:描述粒子状态的一组数,例如原子中的电子。

量子态:可以通过量子数描述的粒子状态。

隧道效应:粒子穿透薄层势垒的量子力学现象。

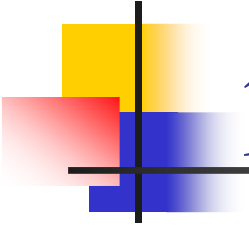
波粒二相性:电磁波有时表现为粒子状态,而粒子有时表现为波动状态的特性。



知识点

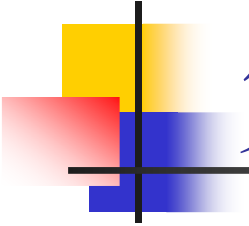
学完本章后,读者应具备如下能力:

- 论述能量量子化原理、波粒二相性原理和不确定原理。
- 应用薛定谔方程和边界条件分析各种势函数。
- 计算束缚态粒子的量子能级。
- 计算入射粒子穿透势垒的概率。



复习题

1. 论述波粒二相性原理,论述动量与波长的关系。
2. 薛定谔波动方程的物理意义是什么?
3. 什么是概率密度函数?
4. 列出薛定谔方程解的边界条件。
5. 什么是量子化能级?
6. 描述隧穿效应的概念。
7. 列出单电子原子的量子数,并讨论它们的由来。

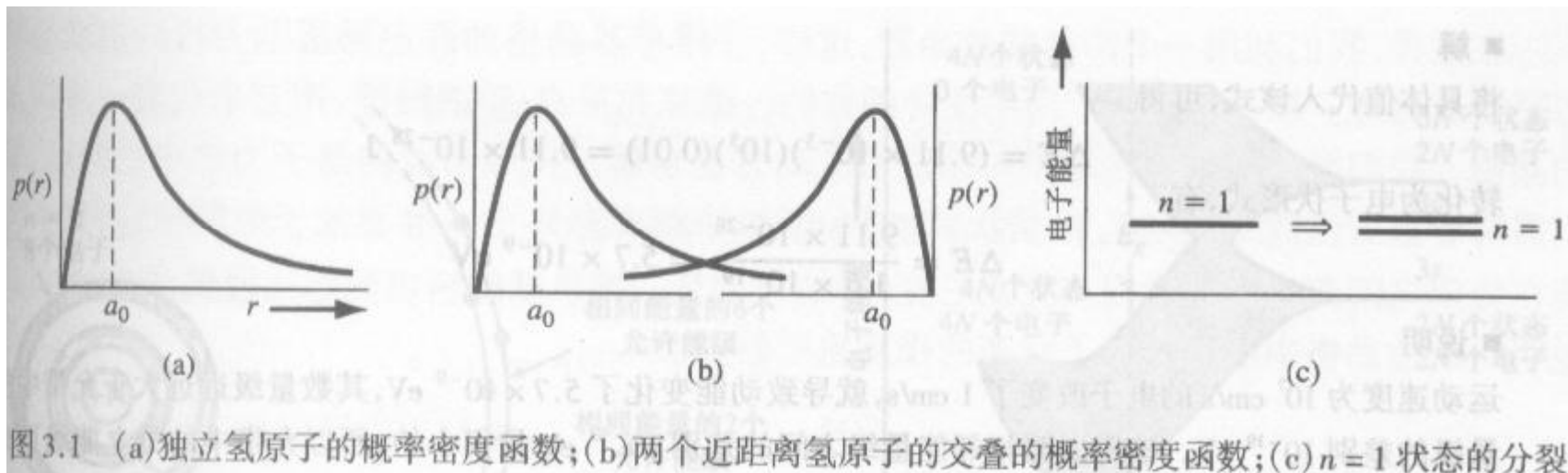


第3章 固体量子理论初步

- 3. 1 允带与禁带
- 3. 2 固体中电的传导
- 3. 3 三维扩展
- 3. 4 状态密度函数
- 3. 5 统计力学
- 3. 6 小结

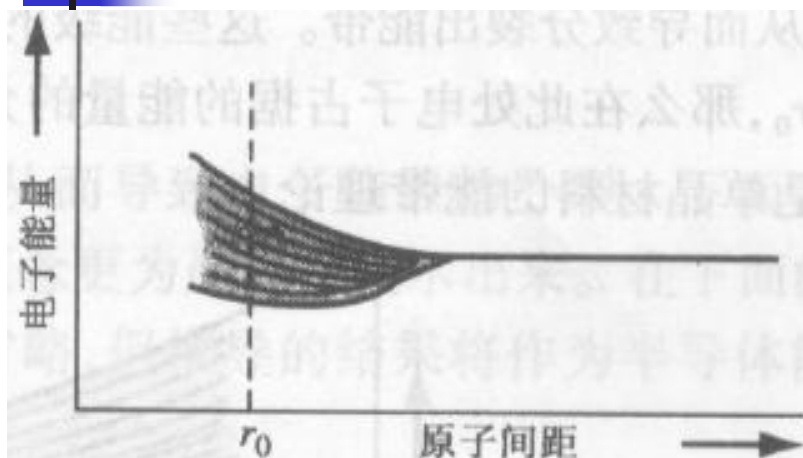
3.1 允带与禁带 能级分裂为能带

■ 赛车 大雁



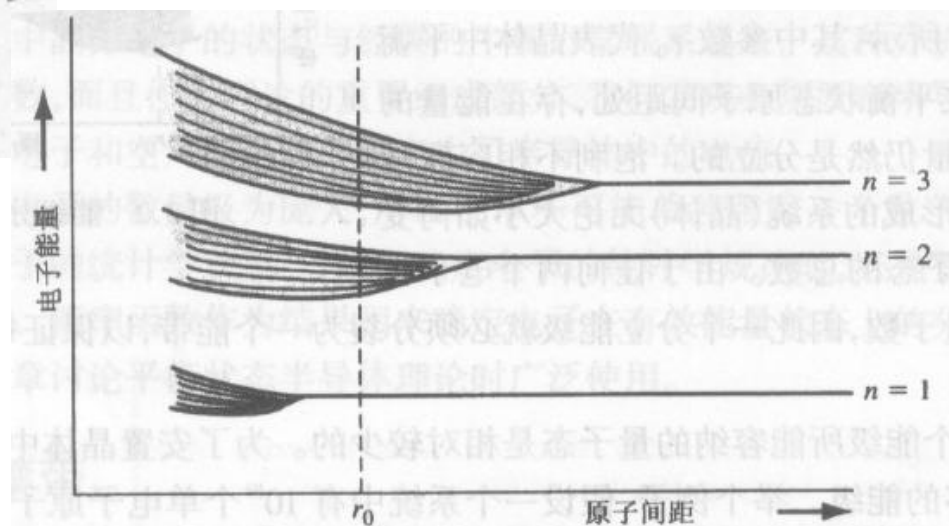
3.1 允带与禁带

能级分裂为能带



r_0 平衡时的距离

外层先分裂



3.1 允带与禁带

硅原子外电子允带与禁带

■ 3s和3p距离近时产生交叠

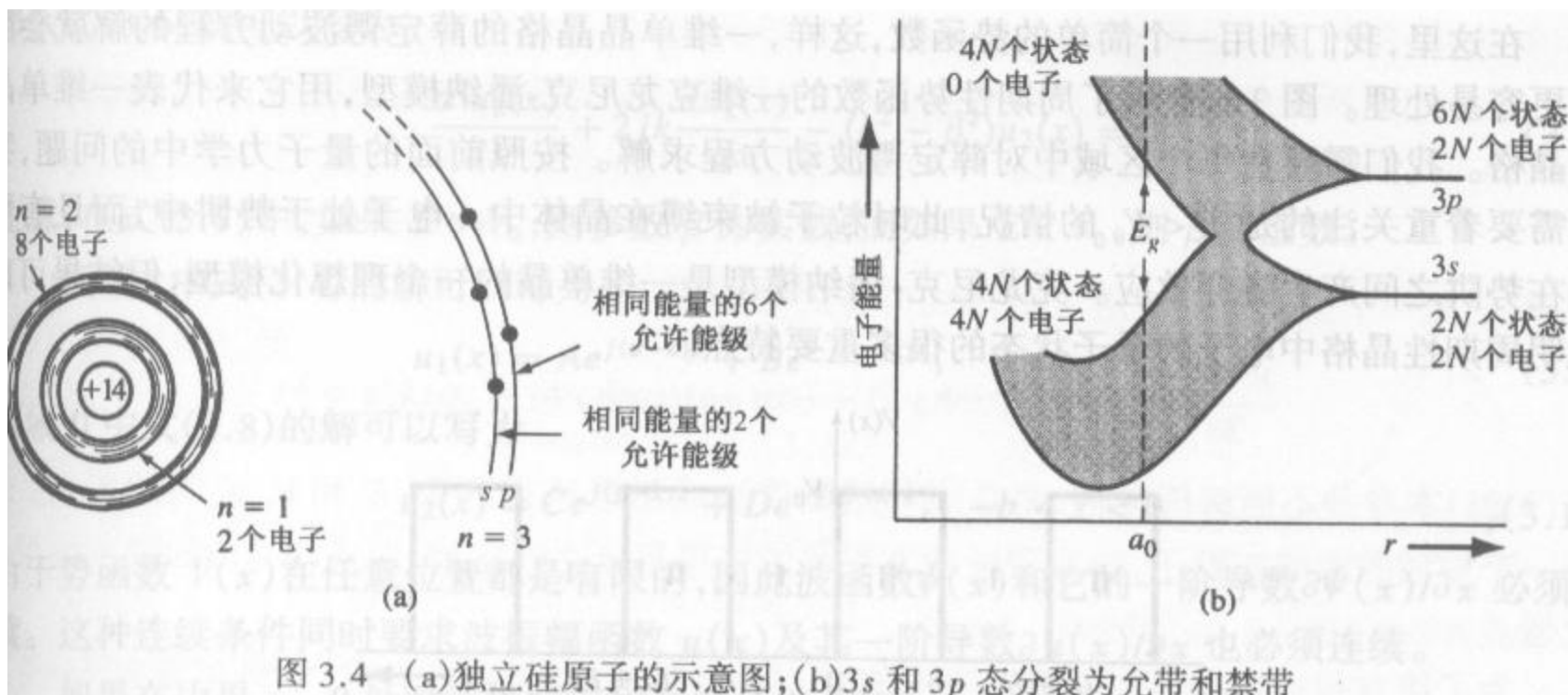


图 3.4 (a)独立硅原子的示意图;(b)3s 和 3p 态分裂为允带和禁带

3.1 允带与禁带

克龙尼克—潘纳模型

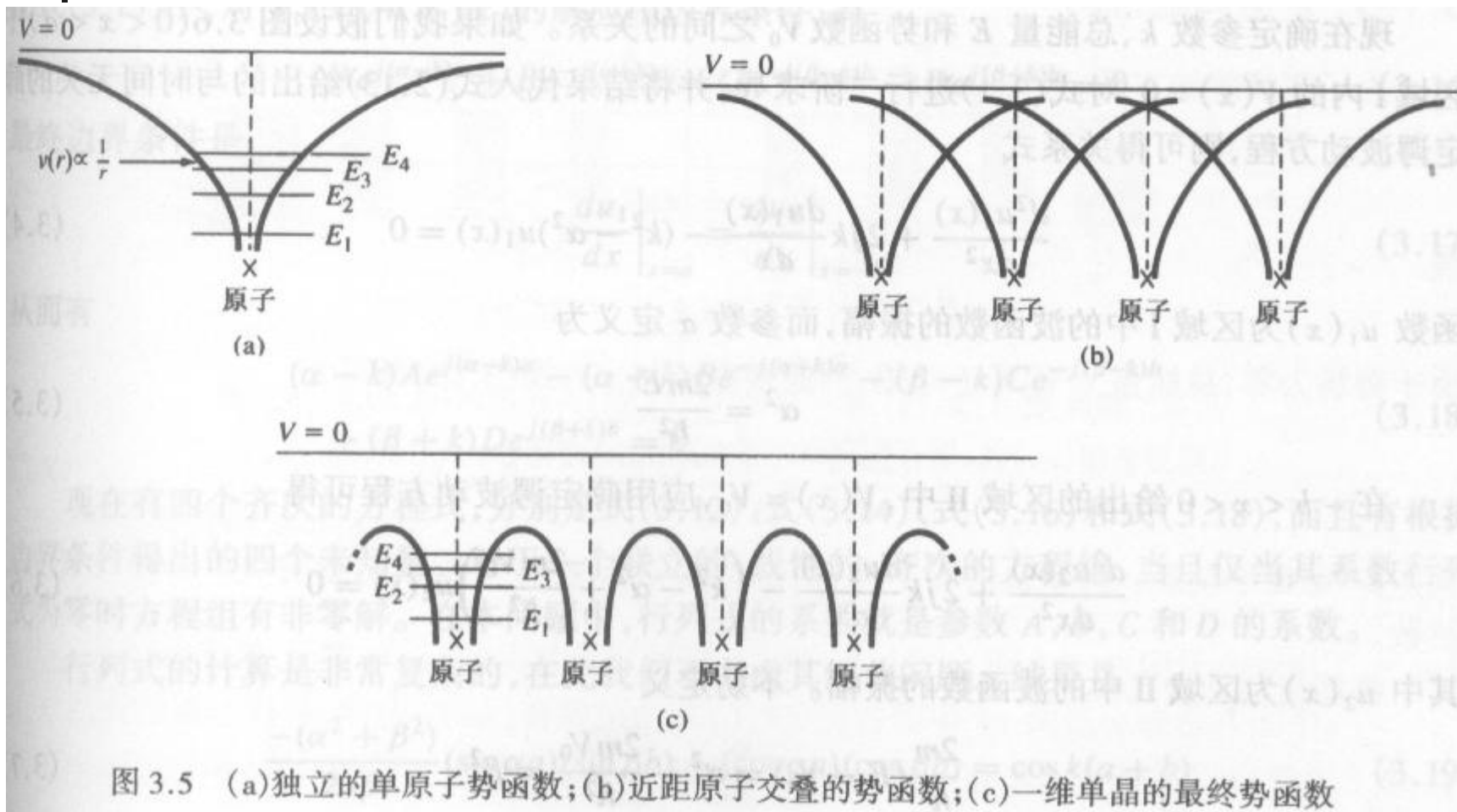
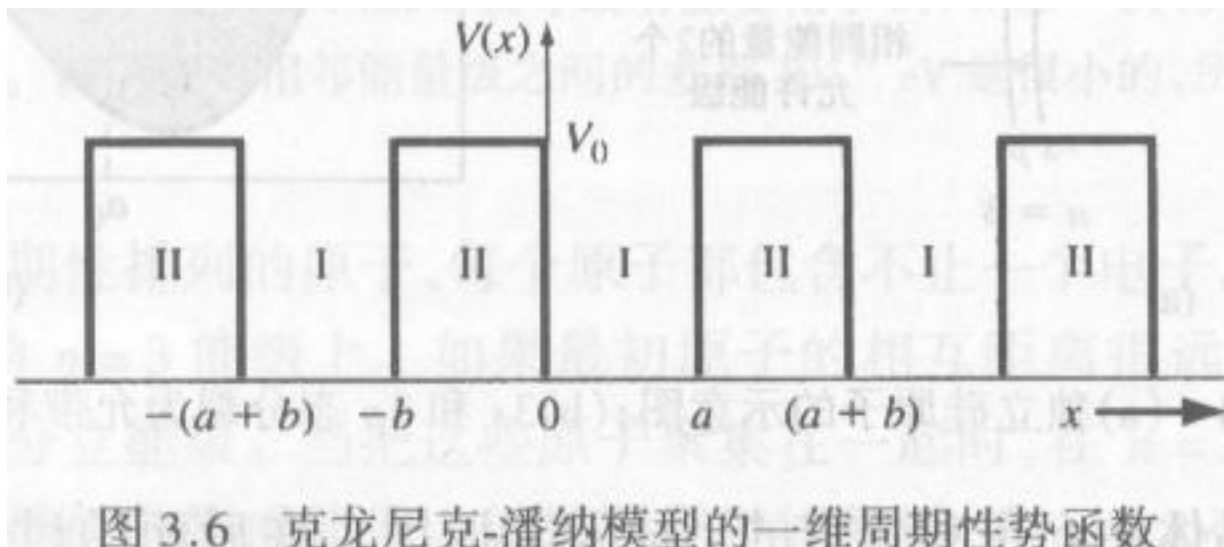


图 3.5 (a)独立的单原子势函数;(b)近距原子交叠的势函数;(c)一维单晶的最终势函数

3.1 允带与禁带

克龙尼克-潘纳模型



参数 k 称为运动常量

最后,可得关系式

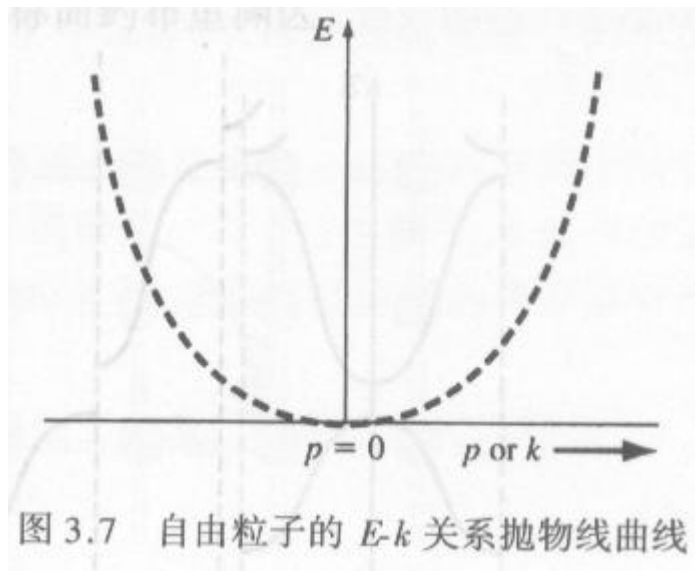
$$P' \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \cos \alpha a = \cos ka \quad (3.24)$$

式(3.24)再一次给出了参数 k 、总能量 E (通过参数 α) 和势垒 bV_0 之间的关系。值得注意的是,式(3.24)并不是薛定谔波动方程的解,但却给出了薛定谔波动方程有一个解的条件。若假设晶体无限大,则式(3.24)中的 k 就可假设为连续值,并且是实值。

3.1 允带与禁带

K 空间能带图

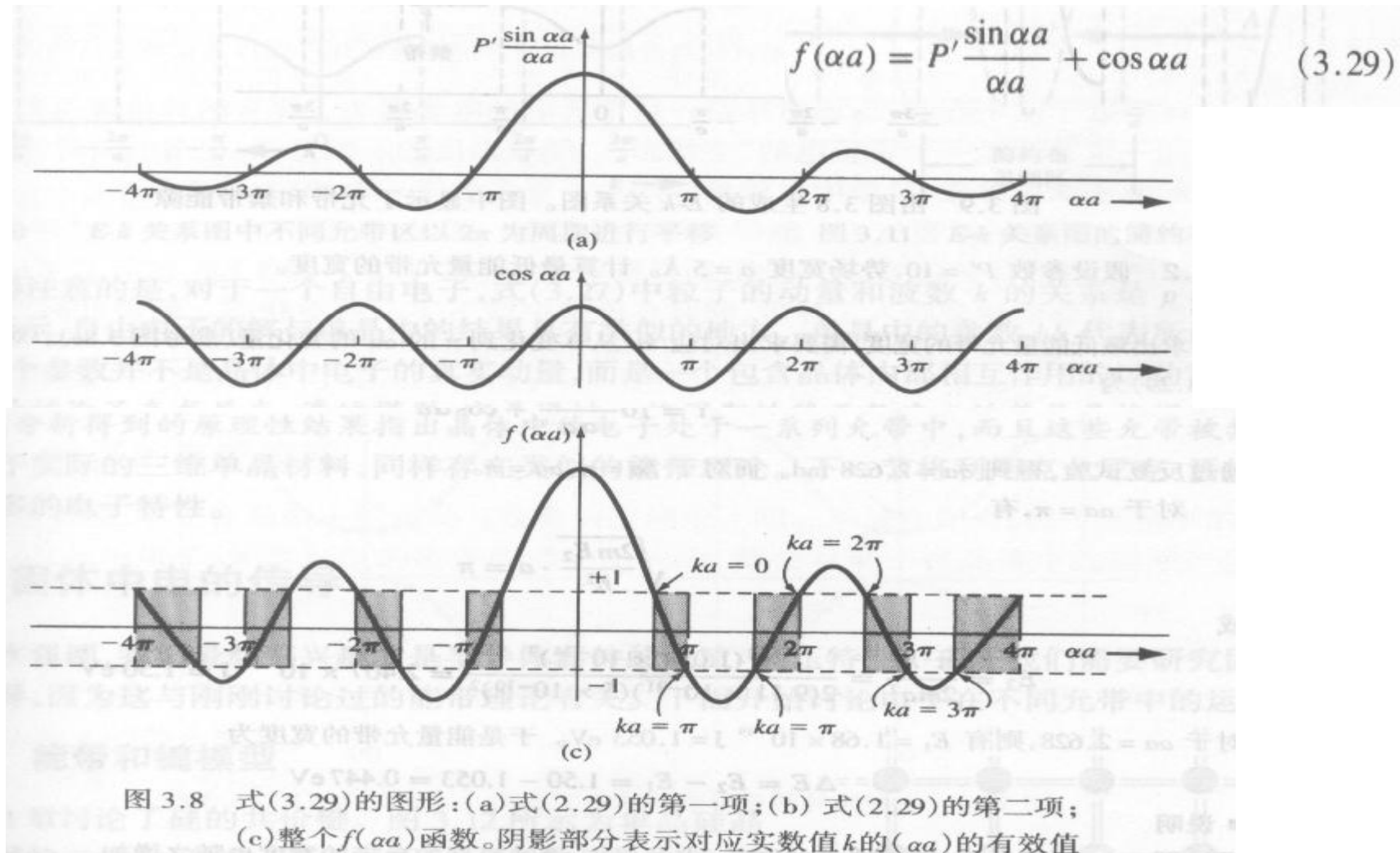
- 自由粒子的 E - k 关系



P 为粒子的动量， p 与 k 为线形关系

3.1 允带与禁带

K空间能带图



3.1 允带与禁带

K 空间能带图

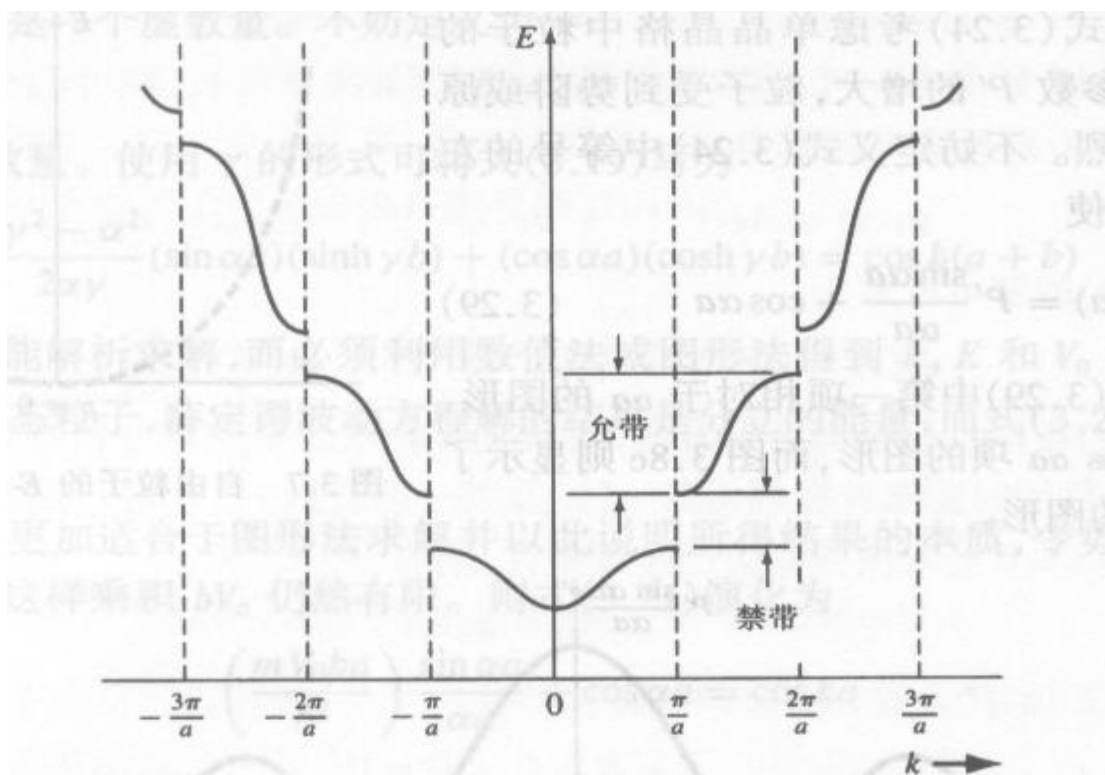


图 3.9 由图 3.8 生成的 $E-k$ 关系图。图中显示了允带和禁带能隙

3.1 允带与禁带

简约布里渊区

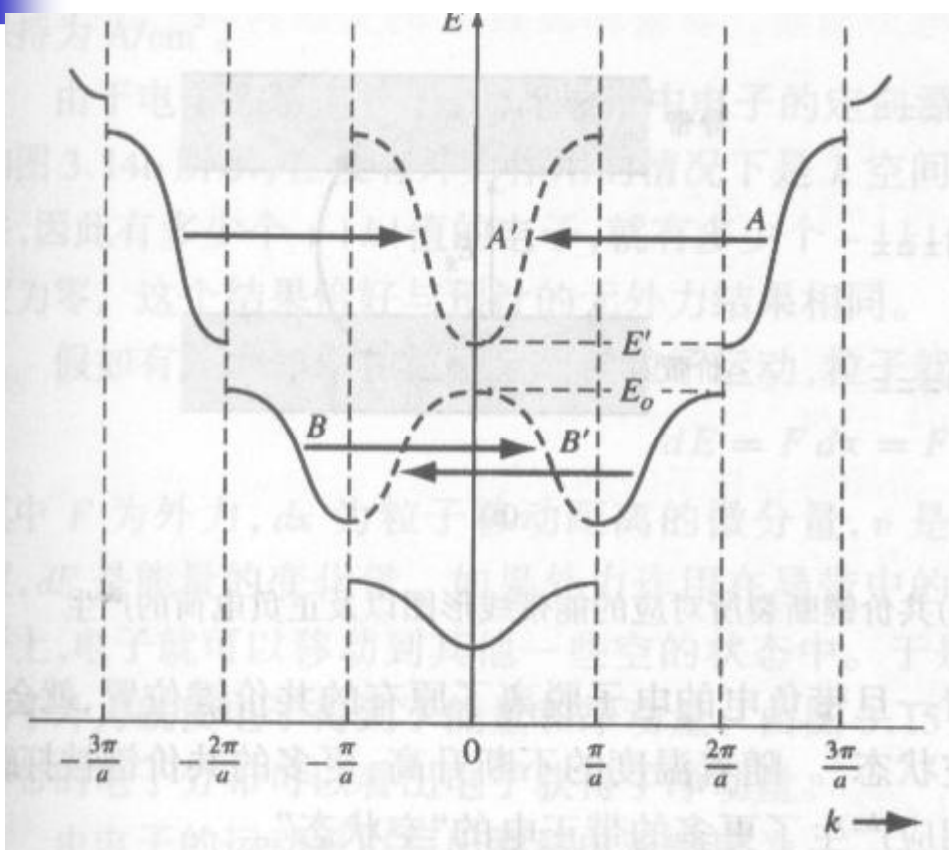


图 3.10 $E-k$ 关系图中不同允带区以 2π 为周期进行平移

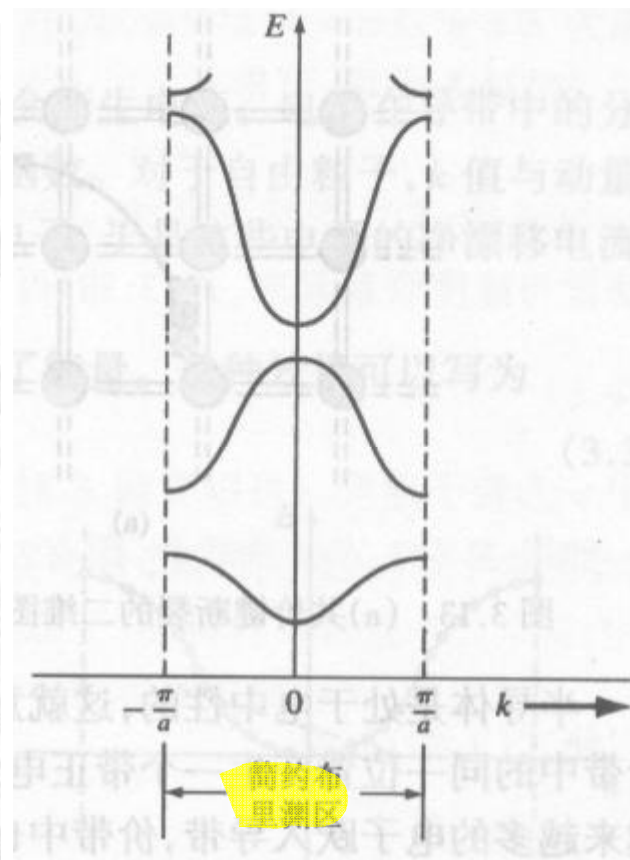
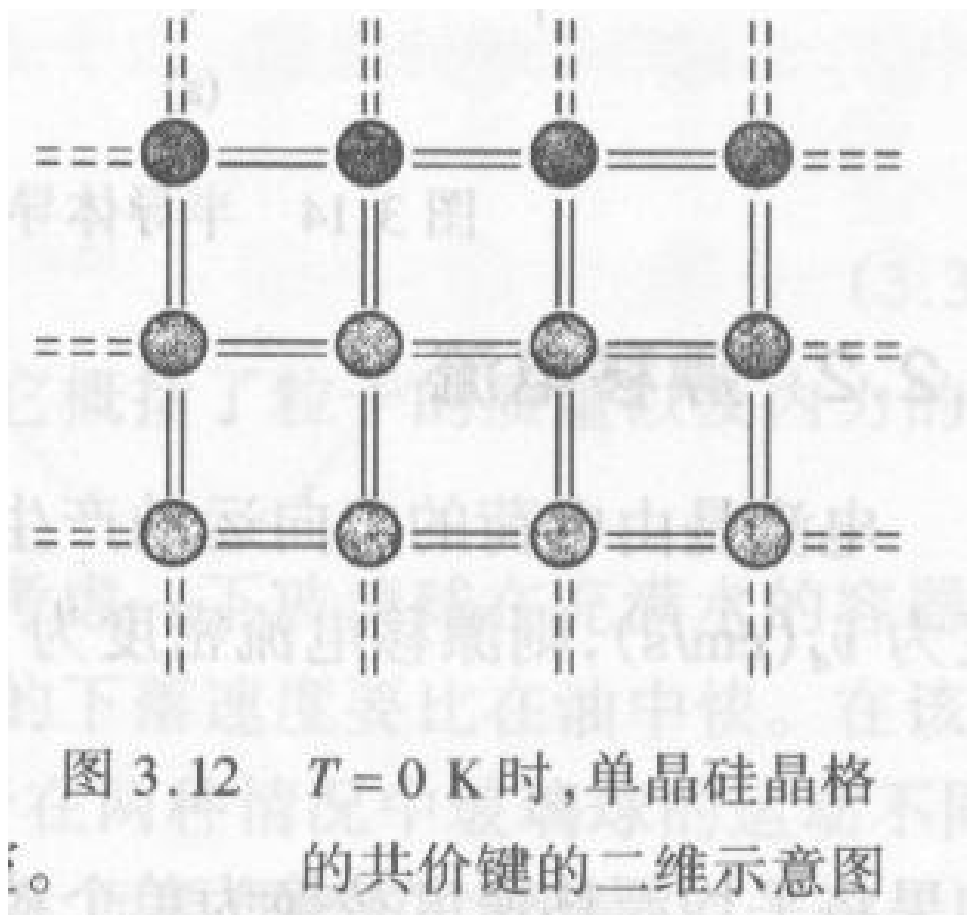


图 3.11 $E-k$ 关系图的简约布里渊区

3.2 固体中电的传导



3.2 固体中电的传导

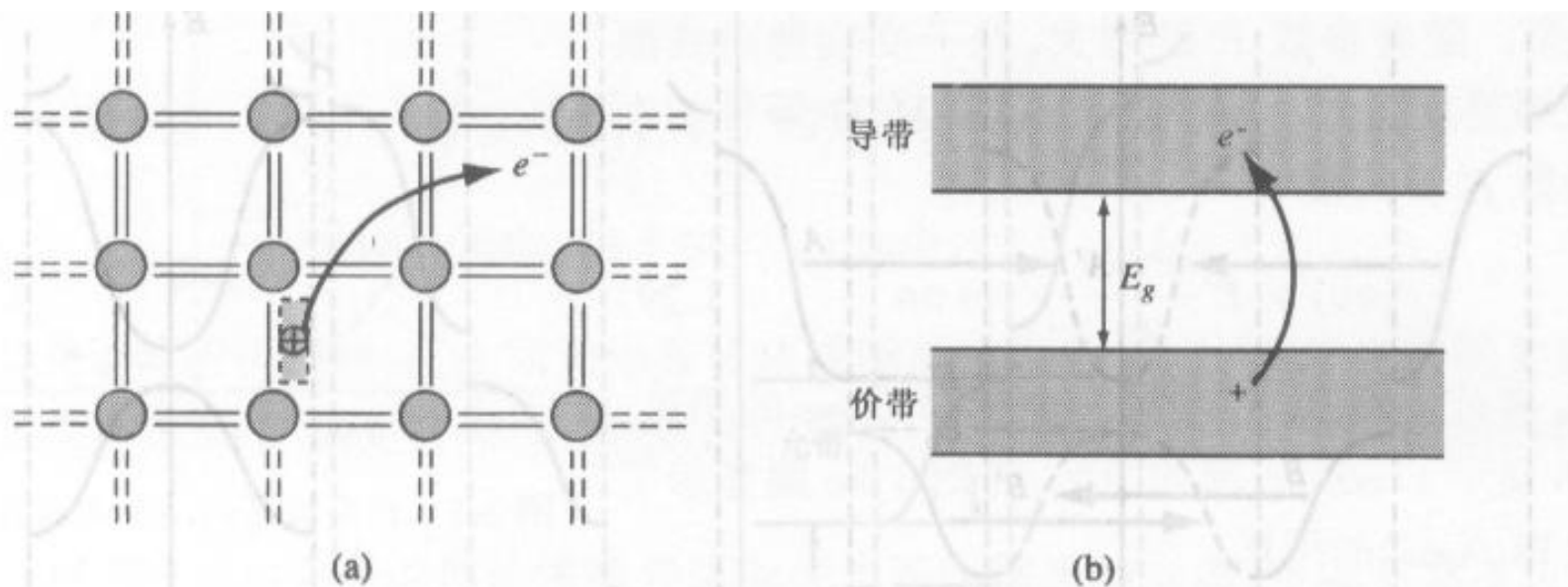
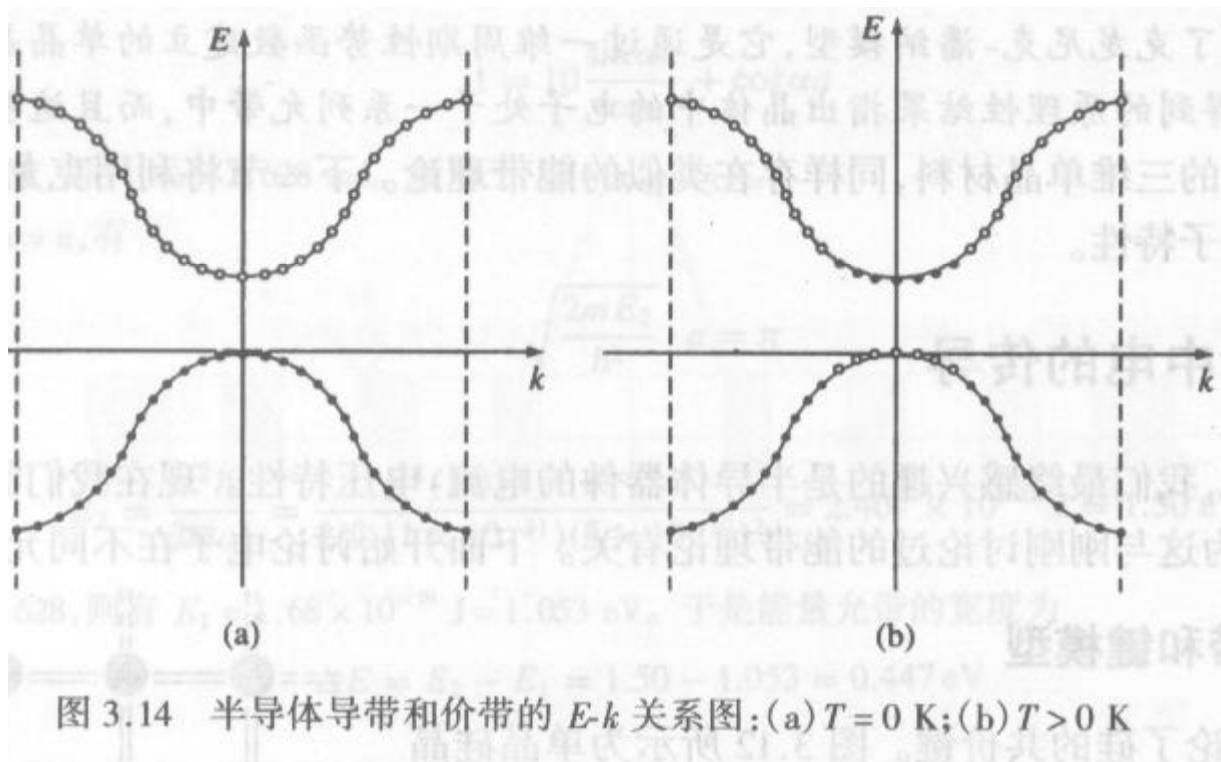


图 3.13 (a)共价键断裂的二维图示;(b)共价键断裂所对应的能带线形图以及正负电荷的产生

3.2 固体中电的传导

E - k 关系图

■ 无外电场时的情况



3.2 固体中电的传导

漂移电流

电流是由电荷的定向运动产生的。假设有一正电荷集,体密度为 $N(\text{cm}^{-3})$, 平均漂移速度为 $v_d(\text{cm/s})$, 则漂移电流密度为

$$J = qNv_d \quad \text{A/cm}^2 \quad (3.32)$$

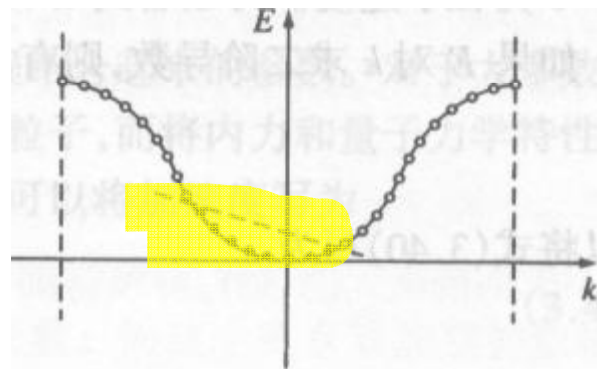


图 3.15 外力作用下 $E-k$ 关系图中电子的不对称分布

有外电场时的情况

3.2 固体中电的传导

电子的有效质量

- 负有效质量的概念

$$F_{\text{total}} = F_{\text{ext}} + F_{\text{int}} = ma$$

$$F_{\text{ext}} = m^*a$$

参数 m^* 称为有效质量

$$a = \frac{-eE}{m_n^*}$$

其中 m_n^* 为电子的有效质量。接近导带底的电子的有效质量 m_n^* 为一个常量。

3.2 固体中电的传导

空穴的运动

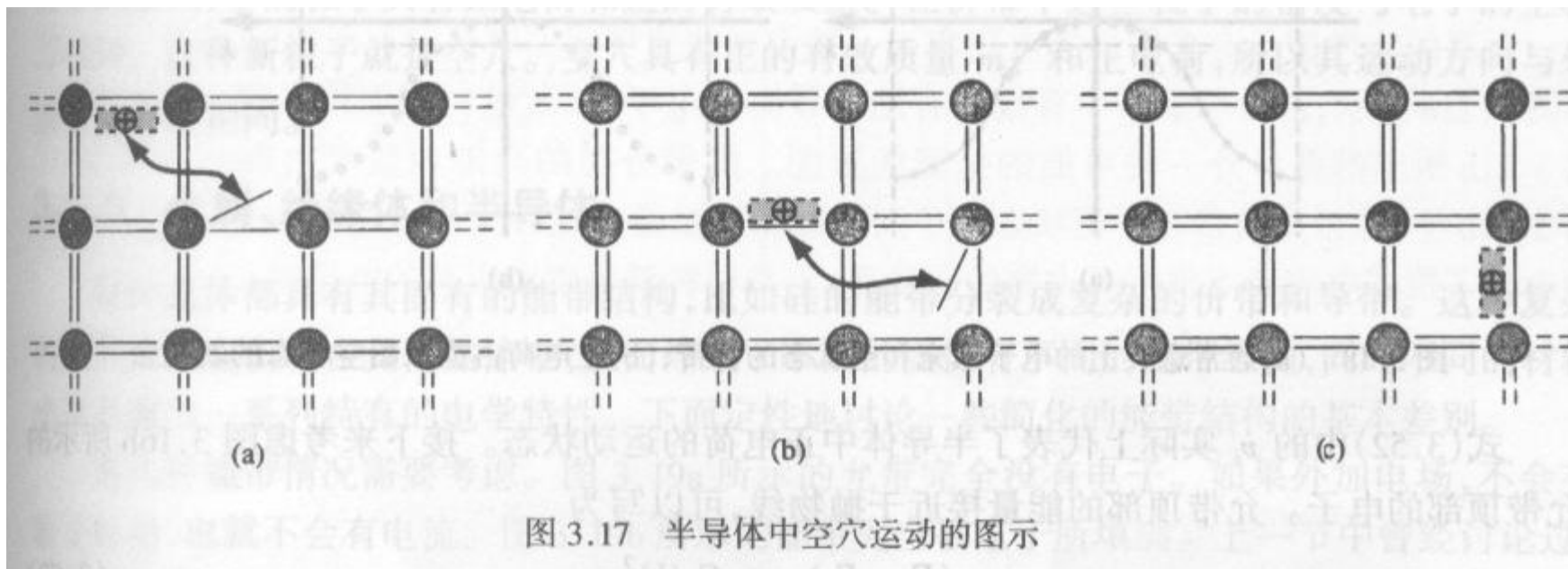
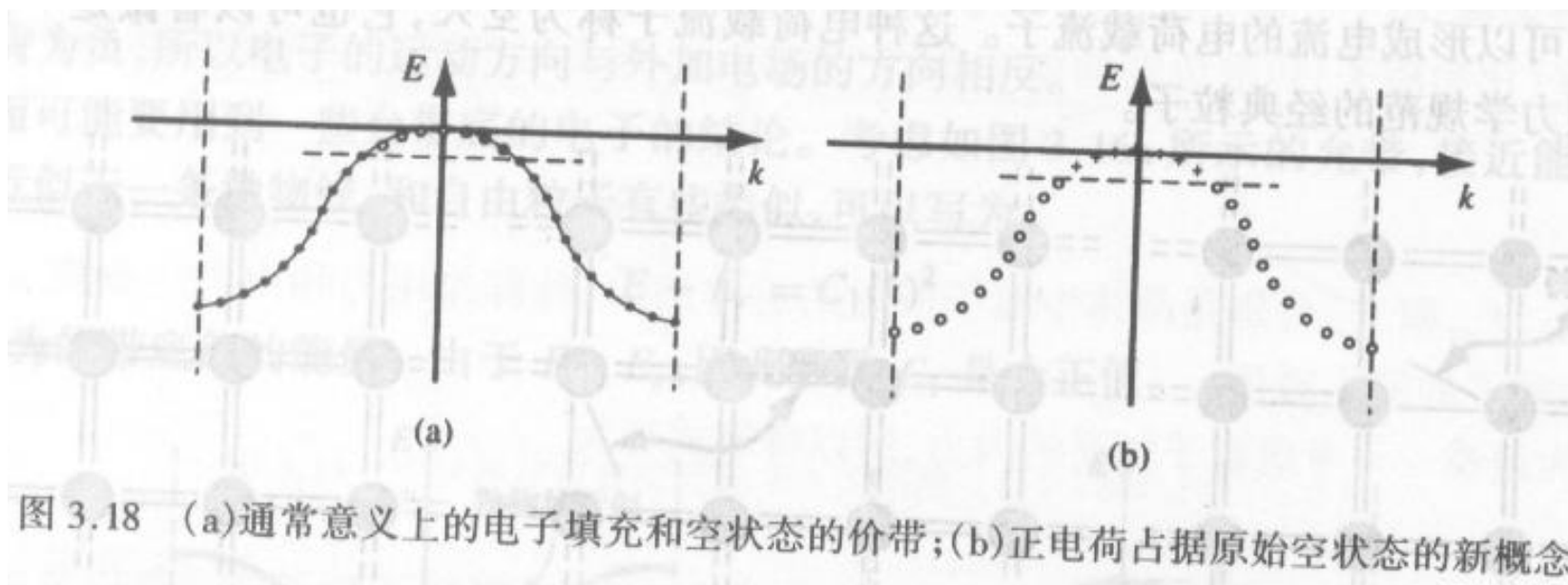


图 3.17 半导体中空穴运动的图示

3.2 固体中电的传导 空穴

■ 空穴



金属半导体绝缘体

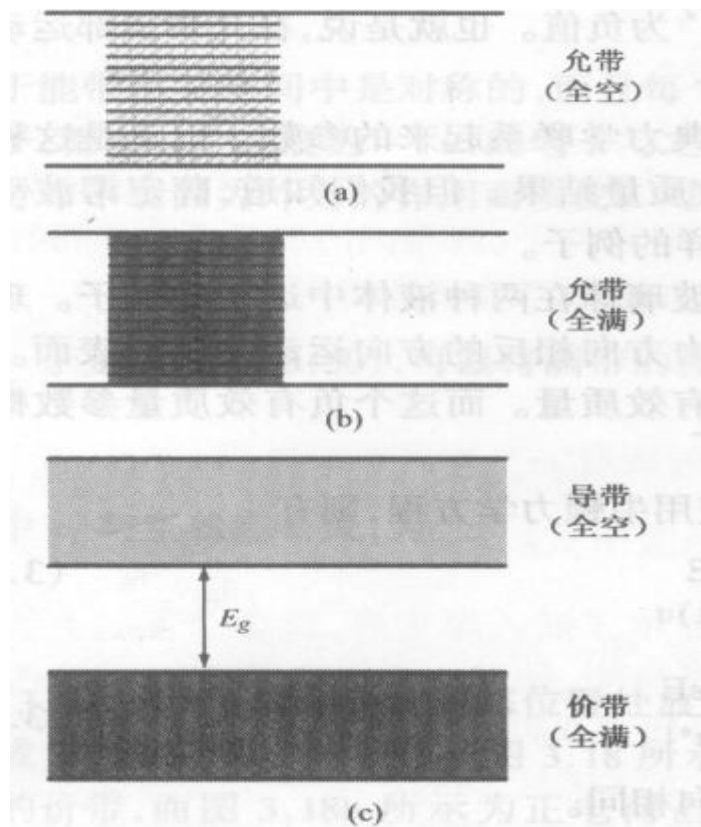


图 3.19 能带示意图:(a)空能带;(b)全满带;(c)两个允带间的能隙

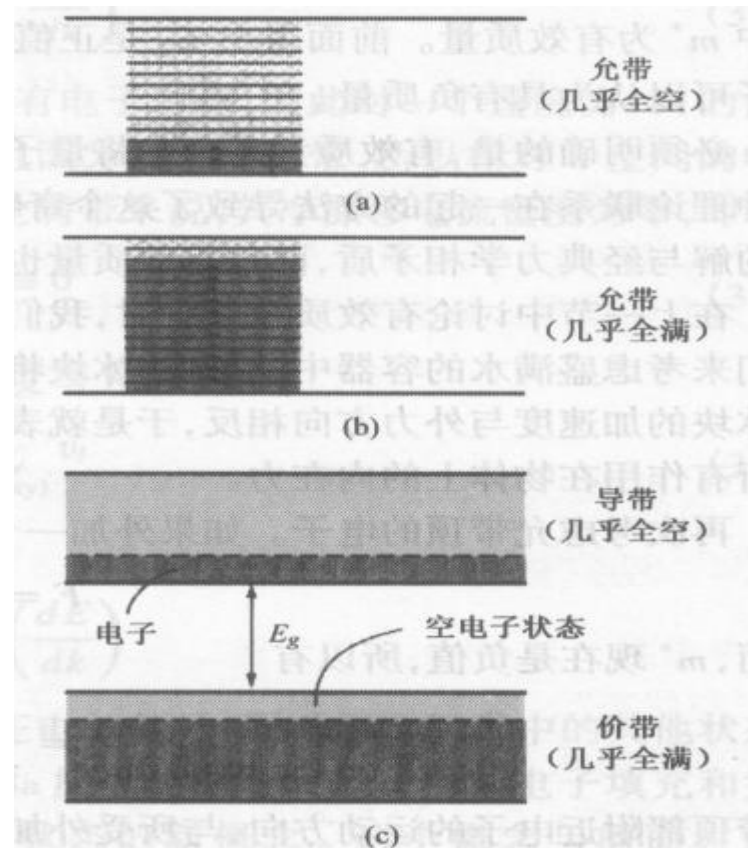


图 3.20 能带示意图:(a)近似空带;(b)近似满带;(c)两个允带间的能隙

金属半导体绝缘体

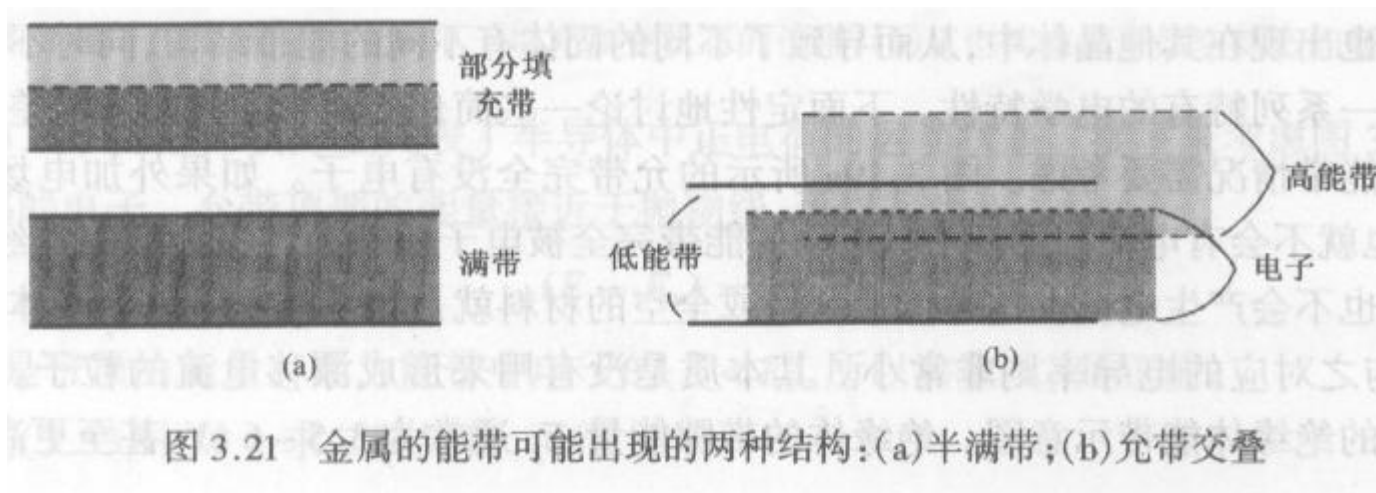
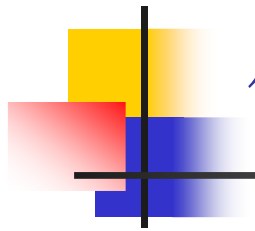


图 3.21 金属的能带可能出现的两种结构:(a)半满带;(b)允带交叠

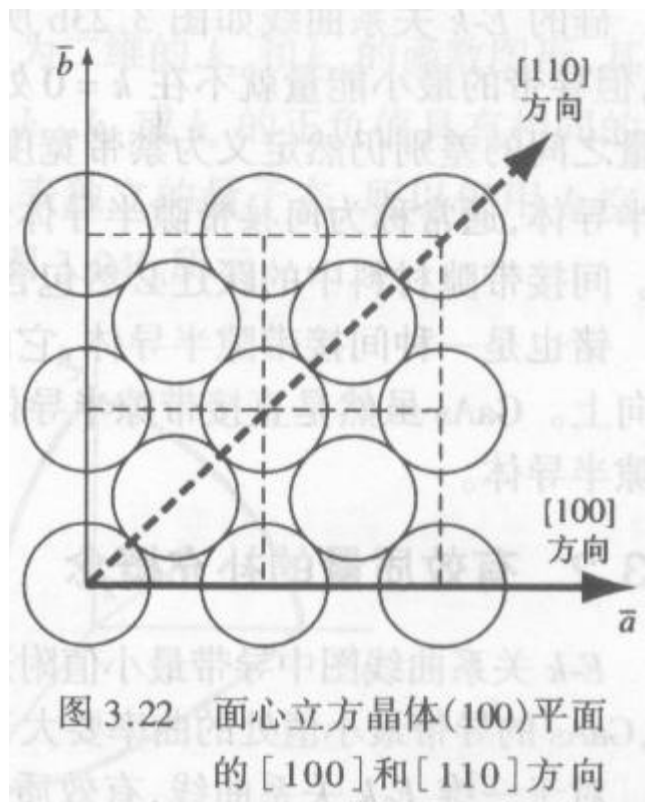


简单概念

- 3. 3三维扩展
- 3. 4状态密度函数
- 3. 5统计力学

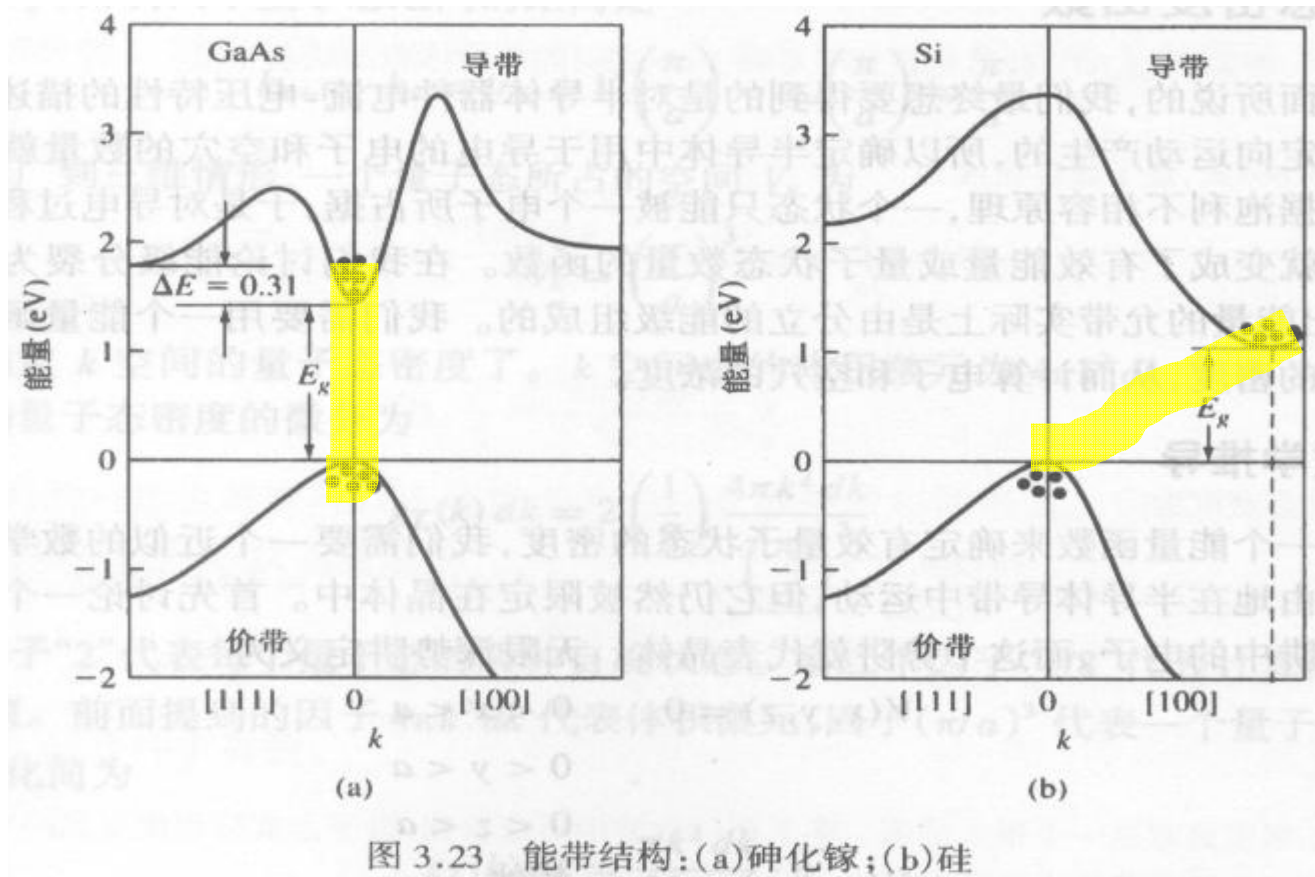
三维扩展

- 三维情况下各方向势场不同



直接带隙半导体和间接带隙半导体

- 价带能量最大值和导带能量最小值的K坐标一致或不一致



费米概率函数

- 理想情况，能量小于 E_F 的概率为 1

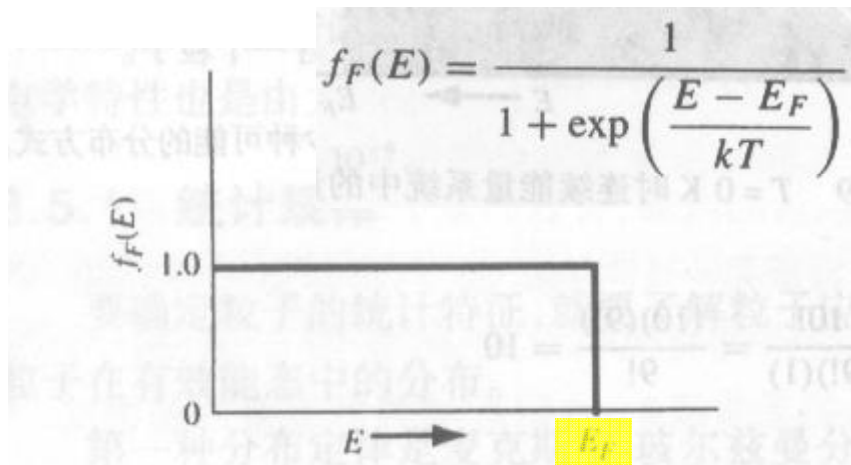


图 3.27 $T=0$ K 时费米概率函数与能量的关系图

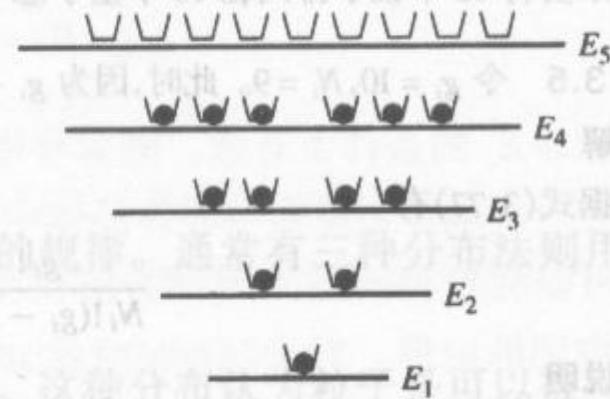


图 3.28 $T=0$ K 时一个特定系统的分立能级和量子态

能量 $E > E_F$ $E < E_F$ $E = E_F$

概率 = 0 1 1/2

费米能级 E_F

- 有一定温度时

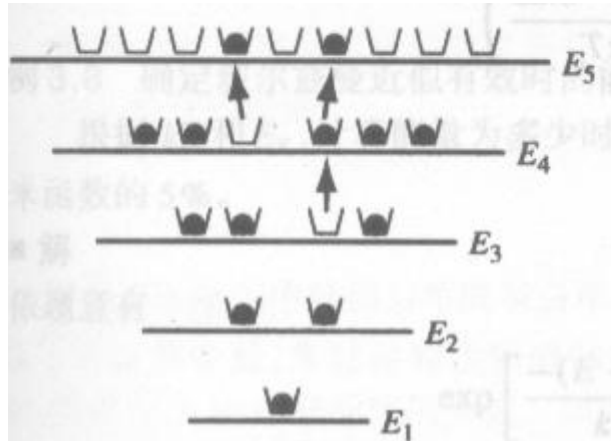


图 3.30 图 3.28 所示系统在 $T > 0$ K 时的分立能级和量子态

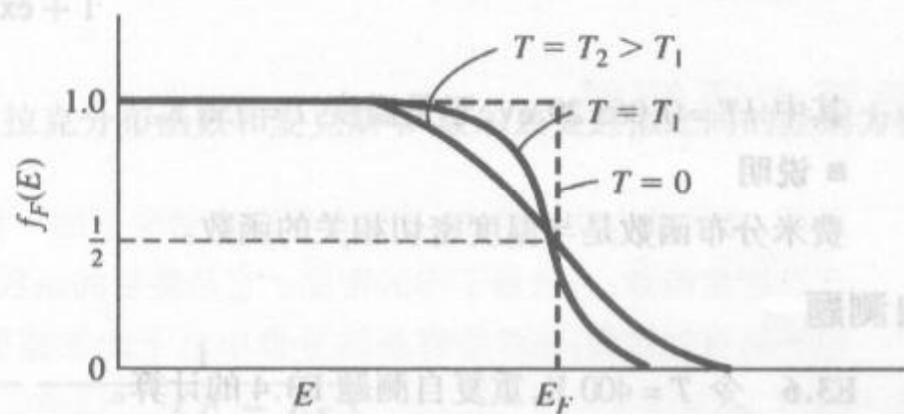


图 3.31 不同温度下的费米概率函数与能量的关系

费米能级 E_F

例 3.6 令 $T = 300\text{ K}$, 试计算比费米能级高 $3 kT$ 的能级被电子占据的概率。

■ 解

根据式(3.79), 有

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{3kT}{kT}\right)}$$

即

$$f_F(E) = \frac{1}{1 + 20.09} = 0.0474 = 4.74\%$$

■ 说明

比 E_F 高的能量中, 量子态被电子占据的概率远小于 1, 或者说电子与有效量子态的比值很小。

小结

- 当原子聚集在一起形成晶体时,电子的分立能量也就随之分裂为能带。
- 对表征单晶材料势函数的克龙尼克-潘纳模型进行严格的量子力学分析和薛定谔波动方程推导,从而得出了允带和禁带的概念。
- 得出了有效质量的概念。有效质量的概念将粒子在晶体中的运动与外加作用力联系起来,而且涉及到晶格对粒子运动的作用。
- 半导体中存在两种带电粒子。其中电子是具有正有效质量的负电荷粒子,一般存在于允带的底部;空穴是具有正有效质量的正电荷粒子,一般存在于允带的顶部。
- 给出了硅和砷化镓的 $E-k$ 关系曲线,并讨论了直接带隙半导体和间接带隙半导体的概念。
- 允带中的能量实际上是由许多的分立能级组成的,而每个能级都包含有限数量的量子态。单位能量的量子态密度可以根据三维无限深势阱模型确定。
- 在涉及大量的电子和空穴时,就需要研究这些粒子的统计特征。本章讨论了费米-狄拉克概率函数,它代表的是能量为 E 的量子态被电子占据的几率。本章还定义了费米能级。



重要术语解释

允带:在量子力学理论中,晶体中可以容纳电子的一系列能级。

状态密度函数:有效量子态的密度。它是能量的函数,表示为单位体积单位能量中的量子态数量。

电子的有效质量:该参数将晶体导带中电子的加速度与外加的作用力联系起来,该参数包含了晶体中的内力。

费米-狄拉克概率函数:该函数描述了电子在有效能级中的分布,代表了一个允许能量状态被电子占据的概率。

费米能级:用最简单的话说,该能量在 $T=0\text{ K}$ 时高于所有被电子填充的状态的能量,而低于所有空状态能量。

禁带:在量子力学理论中,晶体中不可以容纳电子的一系列能级。

空穴:与价带顶部的空状态相关的带正电“粒子”。

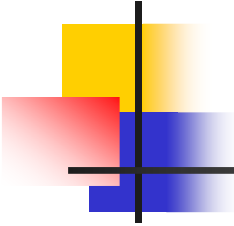
空穴的有效质量:该参数同样将晶体价带中空穴的加速度与外加的作用力联系起来,而且包含了晶体中的内力。

k 空间能带图:以 k 为坐标的晶体能量曲线,其中 k 为与运动常量有关的动量,该运动常量结合了晶体内部的相互作用。

克龙尼克-潘纳模型:由一系列周期性阶跃函数组成,是代表一维单晶晶格周期性势函数的数学模型。

麦克斯韦-玻尔兹曼近似:为了用简单的指数函数近似费米-狄拉克函数,从而规定满足费米能级上下若干 kT 的约束条件。

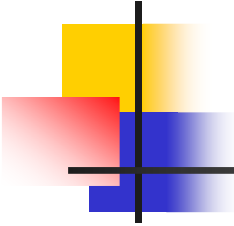
泡利不相容原理:该原理指出任意两个电子都不会处在同一量子态。



知识点

学完本章后,读者应具备以下能力:

- 对单晶中的允带和禁带的概念进行定性的讨论,并利用克龙尼克-潘纳模型对结果进行严格的推导。
- 讨论硅中能带的分裂。
- 根据 $E-k$ 关系曲线论述有效质量的定义,并讨论它对于晶体中粒子运动的意义。
- 讨论空穴的概念。
- 定性地讨论金属、绝缘体和半导体在能带方面的差异。
- 讨论有效状态密度函数。
- 理解费米-狄拉克分布函数和费米能级的意义。



复习题

1. 什么是克龙尼克-潘纳模型?
2. 叙述克龙尼克-潘纳模型的薛定谔波动方程的两个结果。
3. 什么是有效质量?
4. 什么是直接带隙半导体? 什么是间接带隙半导体?
5. 状态密度函数的意义是什么?
6. 推导状态密度函数的数学模型是什么?
7. 一般来说,状态密度与能量之间有什么联系?
8. 费米-狄拉克概率函数的意义是什么?
9. 什么是费米能级?



本次课回顾