

## 第三节 固体能带理论简介

一、晶体的能带结构

二、导体，绝缘体，半导体

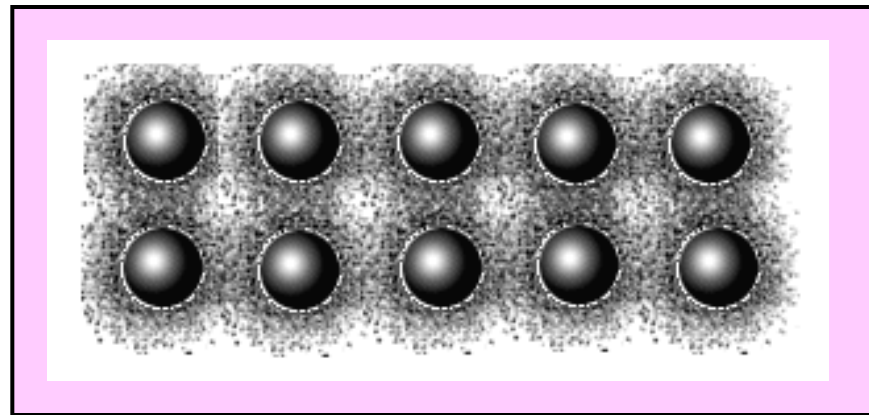
## 一、晶体的能带结构

晶体中能级 分裂 能带（由若干能级组成）

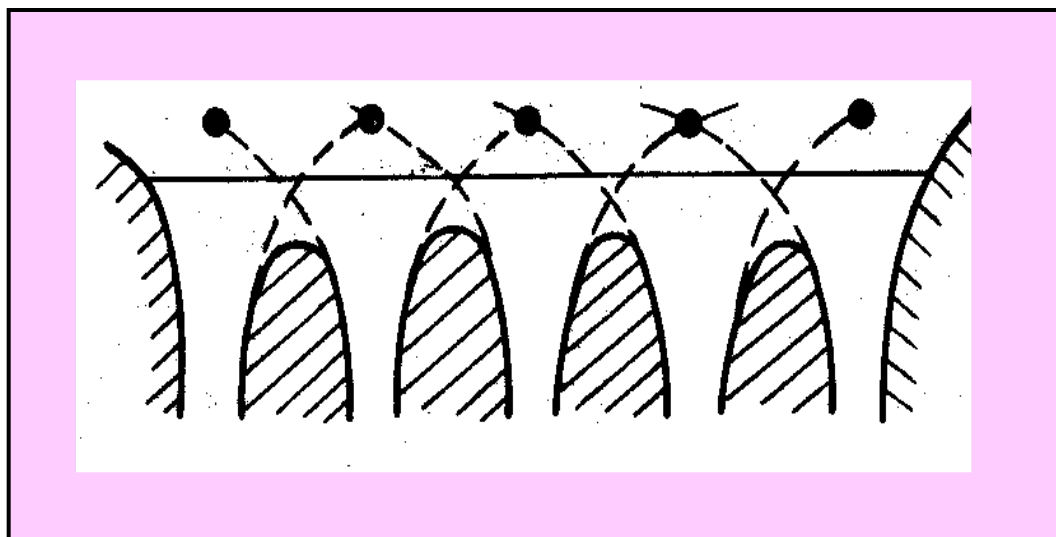
### 1. 形成能带的原因

(1) 晶体中电子的状态 —— 电子共有化

• **电子云重叠**：相邻原子的电子云重叠，重叠区域中出现的电子不能简单归属于某一特定母核，属于相邻原子或整个晶体共有。外层电子共有化趋向比内层电子更显著。

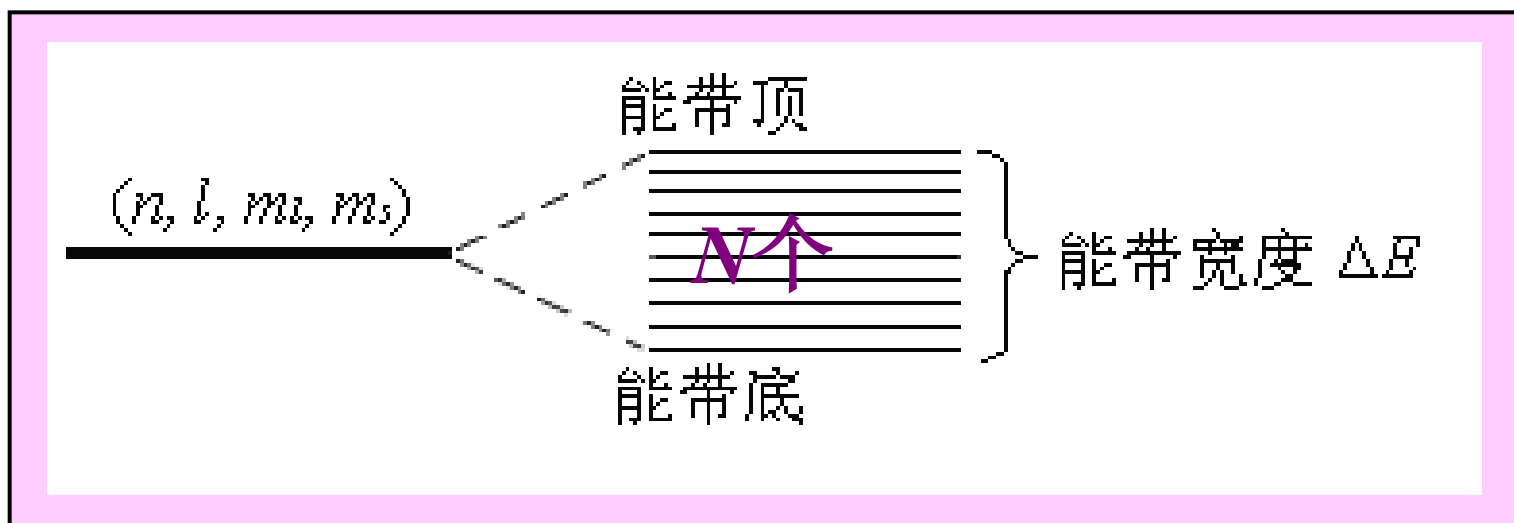


## (2) 晶体中电子的共有化运动



- **隧道效应**：一个原子中的电子有可能通过**隧道效应**穿越势垒进入另一个原子，出现一批不受特定原子束缚的共有化电子。

## (3) 泡利不相容原理



由于共有化电子彼此间量子数不能完全相同，于是各原子中能量相同的能级分裂为 $N$ 个与原来能级接近的新能级，组成能带来容纳这些共有化电子。

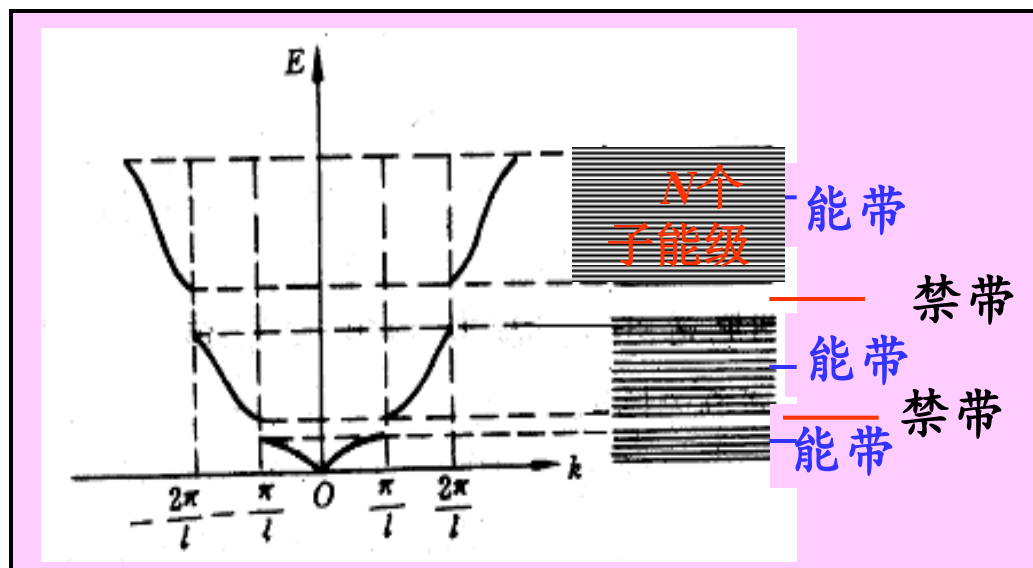
**数量级概念：**

晶格常数： $d \sim 10^{-10} \text{m}$ ， $1 \text{cm}^3$ 中点阵数： $N \sim 10^{23} - 10^{24}$

能带宽度： $\Delta E$ ：几个eV，子能级间隔： $10^{-23} \text{eV}$

### 2. 能带特点

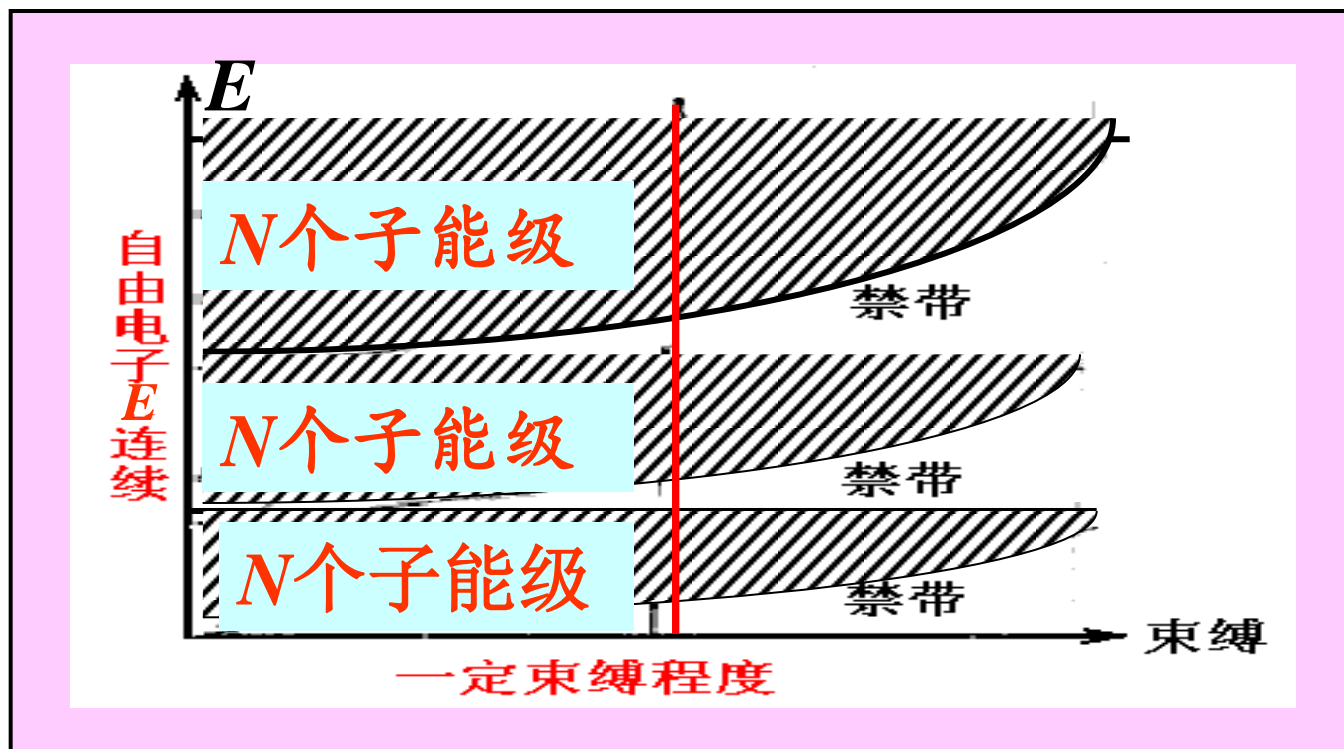
- (1) 能带由准连续的 $N$ 个子能级组成，能带之间用禁带分开，原子数 $N$ 变化时，能带宽度不变，密度变化。



解方程得出：

自由电子能量曲线为抛物线，在一些位置断开。

(2) 能带宽度随能量增加而增加，随离子对电子约束程度增加而减少。



(3) 每个角量子数  $l$  一定的能带中最多容纳的电子数为：

$$2(2l+1)N$$

**例：**  $ns$  带  $l=0$ ，最多容纳电子数为  $2N$

$np$  带  $l=1$ ，最多容纳电子数为  $6N$

满带：被电子填满的能带



导带：未被电子填满的能带



空带（激发态能级）：完全未被电子填充的能带

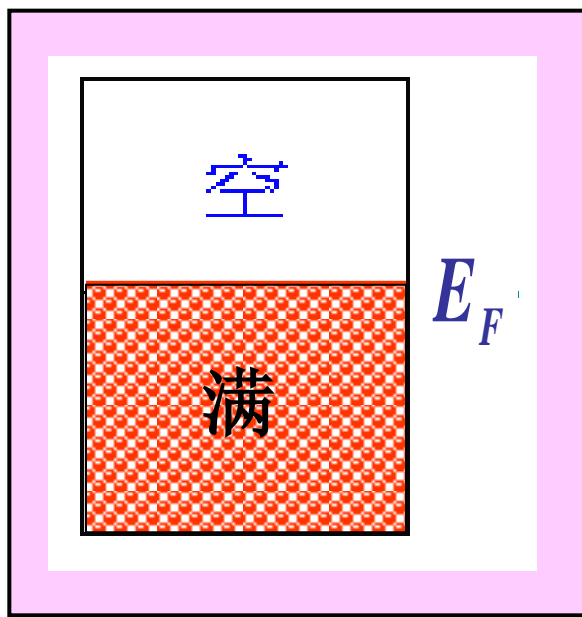


价电子：最外能级上的电子。

价带：价电子所处的能带

{ 可为满带  
可为导带

(4) 电子总是先填满能量较低的能带。



费米能级(价电子能级)： $T \longrightarrow 0\text{K}$ , 无激发电子, 原子所占据的最大能级。

费米能：费米能级对应的能量。

费米面：费米能级对应的等能量面。

(5) 不同能带有可能重叠，其间禁带消失。

(6) 晶体中有杂质或缺陷时，破坏了周期性结构，禁带中可能出现杂质能级。

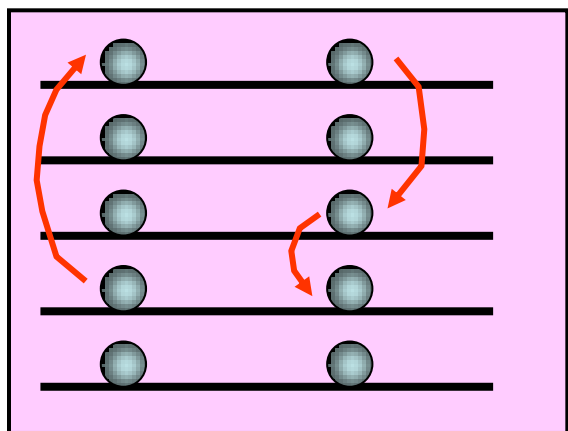


## 二、导体，绝缘体，半导体

### 1. 固体导电机理

以  $l = 0$ ，即每个子能级至多容纳 2 个电子，能带中至多容纳  $2N$  个电子为例：

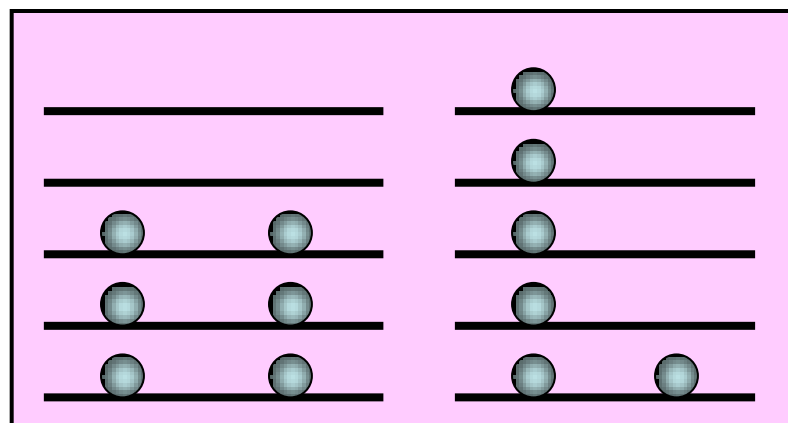
满带：



电子运动,分布不变。

满带中的电子运动不产生电流,无导电作用。

导带：



电子运动,分布变化。

导带中的电子运动可以形成电流,有导电作用。

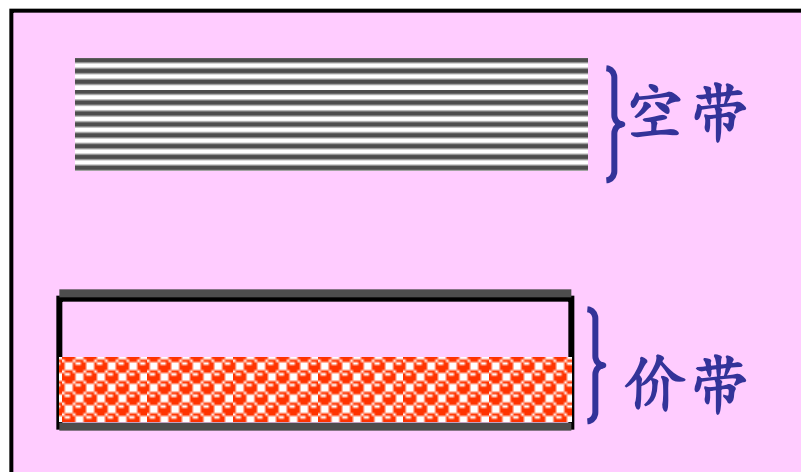
## 2. 导体，绝缘体，半导体的能带特征

### (1) 导体的能带特征

#### ① 价带为导带

**例:** Li原子: 电子组态:  $1s^2 2s^1$ , 每个原子一个价电子 ( $2s$ 态),  $N$ 个原子共有  $N$ 个价电子。

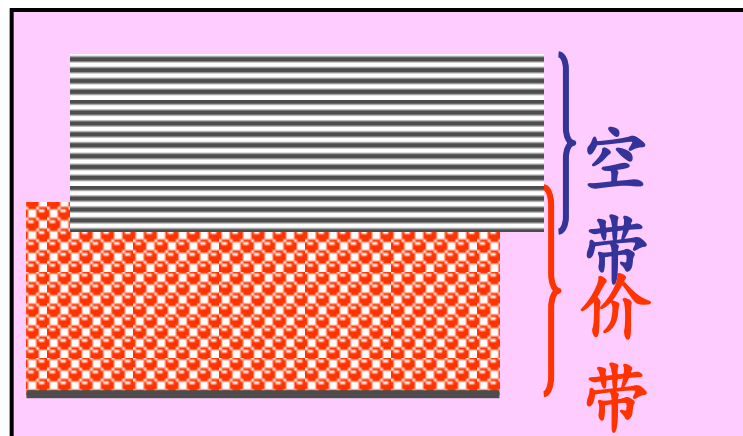
$N$ 个Li原子形成固体时,  $2s$ 能级分裂为能带(价带), 有  $N$ 个子能级。可容纳  $2N$ 个电子, 成为未满带: 导带



②价带为满带，与相邻空带紧密衔接或部分重叠。

例：Mg原子： $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$

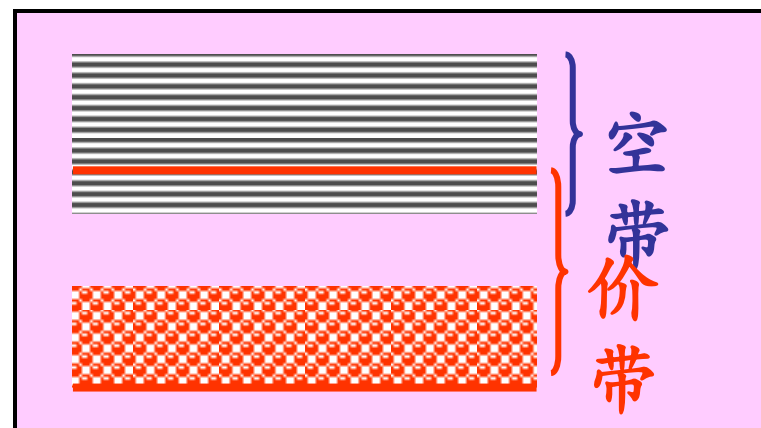
每个原子二个价电子，3s能带形成满带(价带)，但与空带重叠，形成较宽的能带，为导带。



③价带为导带，又与空带部分重叠。

例：Na原子  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

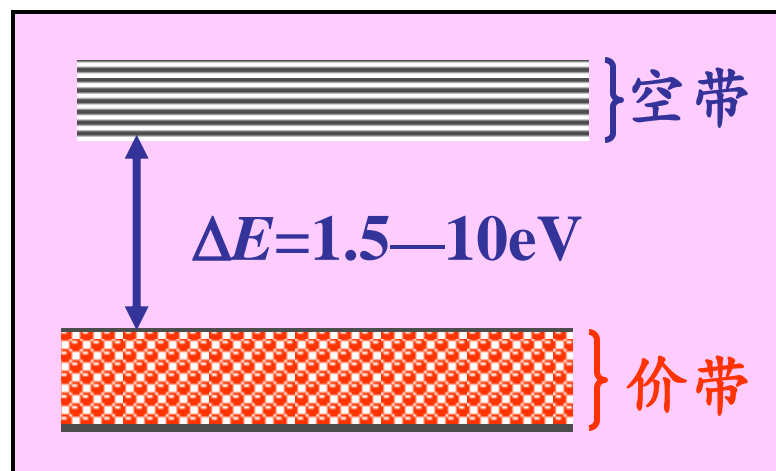
每个原子一个价电子，3s能带形成导带(价带)，又与空带重叠，形成更宽导带。



要求：将三种导体的能带结构进行比较

## (2) 绝缘体的能带特征

**能带特征：**价带为满带，且与空带之间的禁带较宽。

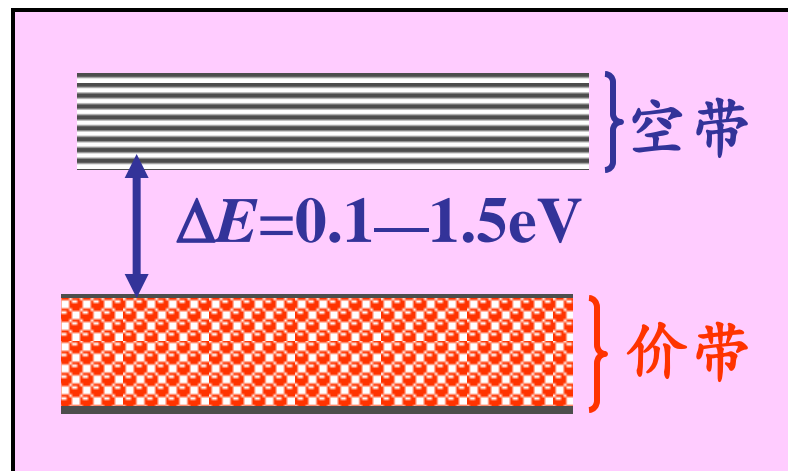


**一般：**从满带到空带激发微不足道，可以认为不存在导带。

当外来激发使较多电子越过禁带进入空带时，原空带→导带。绝缘体击穿。

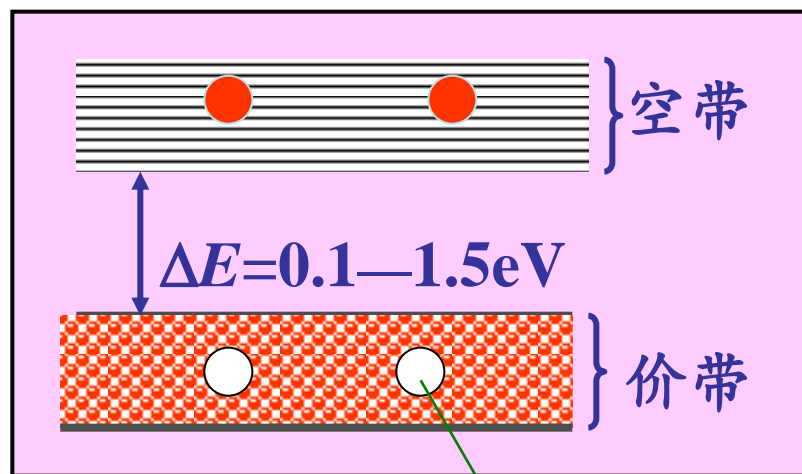
## (3) 半导体的能带特征

**能带特征：**价带为满带，与空带之间的禁带较窄。

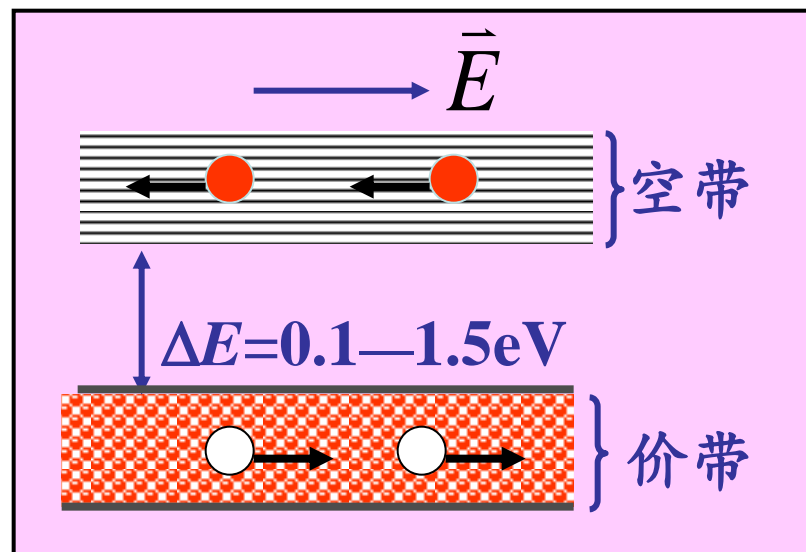


## 3. 半导体分类

### (1) 本征半导体（纯净半导体）



热运动足以使一些电子从满带进入空带，使空带成为导带，满带中留下空穴。



外场作用下

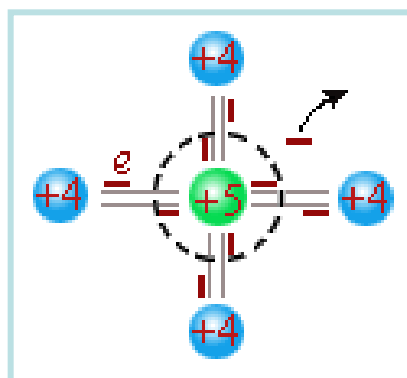
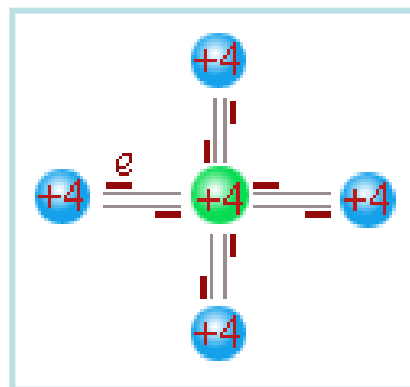
导带中电子逆电场方向运动 —— 电子导电

原满带中电子填补空穴，  
空穴沿电场方向运动 —— 空穴导电

本征导电

导带中的电子、价带中的空穴为本征载流子，  
且数目相等。(数量较少，导电能力弱)

## (2) N型半导体（四价元素中掺入五价元素）



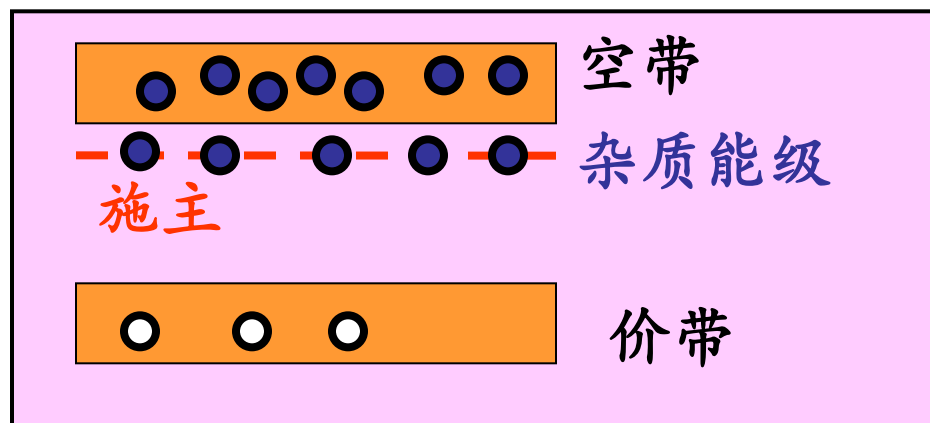
**N型半导体：**

本征半导体+施主杂质

例如

硅(Si)、  
锗(Ge)

磷(P)、  
砷(As)



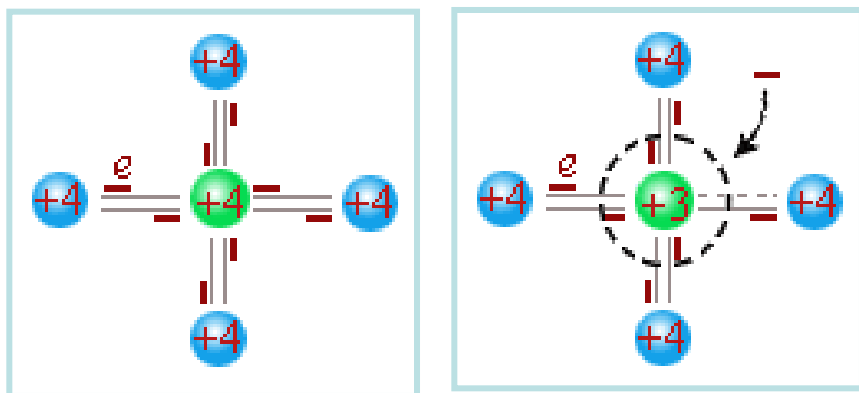
杂质能级接近空带底，其上电子容易受激发进入空带，使其电子浓度增大。

电子：多数载流子；空穴：少数载流子

杂质能级 —— 施主能级

半导体以多数载流子电子导电为主

## (3)P型半导体（四价元素中掺入三价元素）

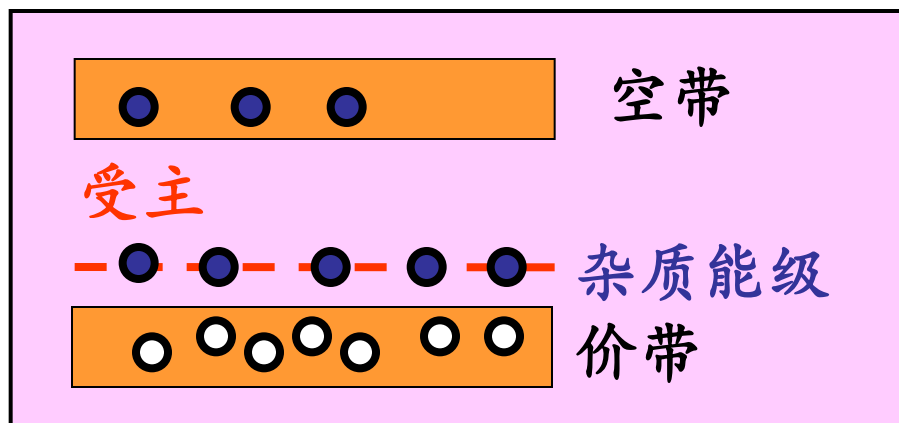


P型半导体：

本征半导体+受主杂质

例 如 硅(Si)、 锗(Ge) 硼(B)、 镓(Ga)

杂质能级接近满带顶，  
满带中电子容易受激发  
进入杂质能级，使满带  
中空穴浓度增大。



空穴:多数载流子; 电子:少数载流子

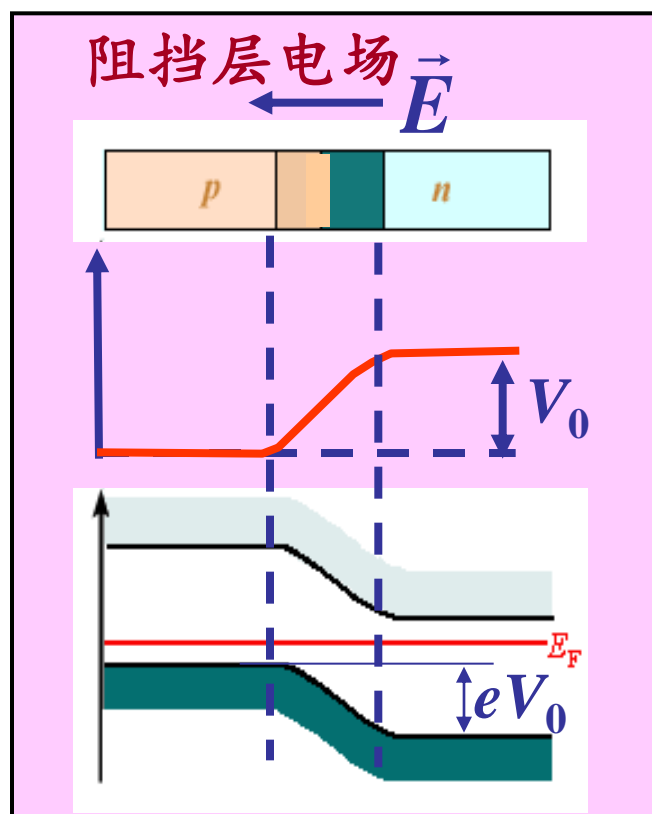
杂质能级——受主能级

半导体以多数载流子空穴导电为主



## 4.p-n结及其单向导电性

### (1)p-n结的形成及其对扩散的阻挡作用



扩散运动 { 电子: n  $\longrightarrow$  p  
空穴: p  $\longrightarrow$  n

扩散运动为多数载流子的运动

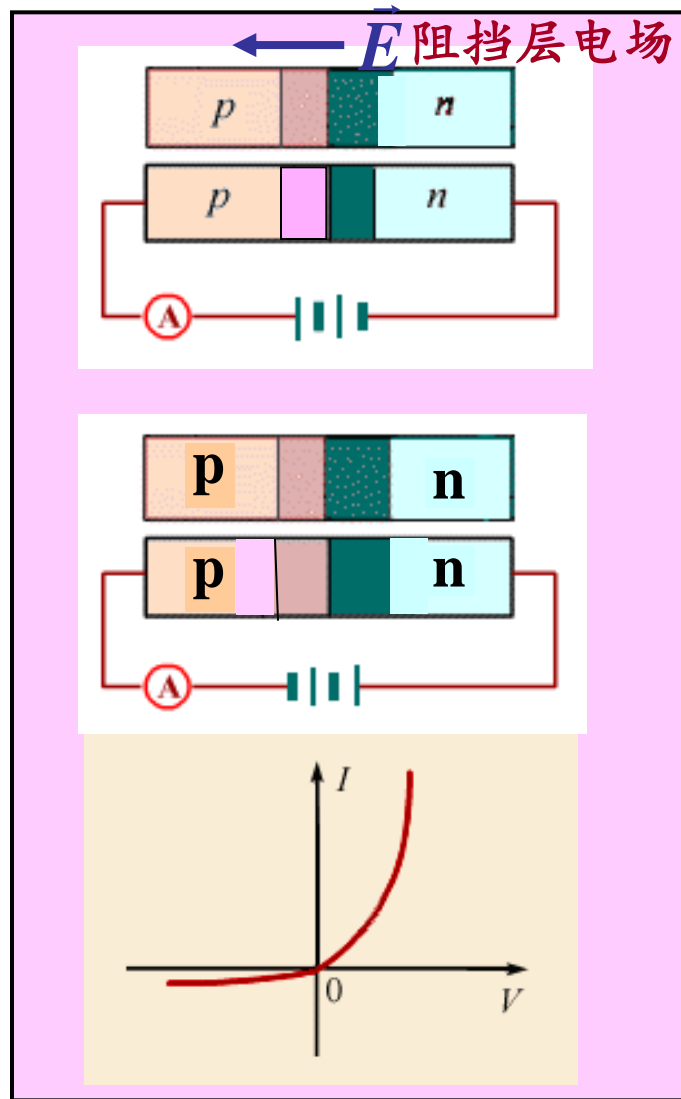
漂移运动 { 电子: p  $\longrightarrow$  n  
空穴: n  $\longrightarrow$  p

漂移运动为少数载流子的运动

若扩散运动和漂移运动速率相当，半导体达到平衡。

电子能带弯曲，电势高处，电势能低。

## (2)p-n结的单向导电性



$p: +$   
 $n: -$

电场  $E$ :  $p \rightarrow n$ , 阻挡层减弱, 多数载流子导电, 半导体导电。

$p: +$   
 $n: -$

电场  $E$ :  $n \rightarrow p$ , 阻挡层加强, 少数载流子导电, 半导体不导电。

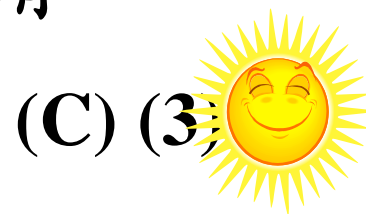
因此: **p-n 结具有单向导电性**

**练习：**激发本征半导体中传导电子的几种方法有 (1) 热激发，(2) 光激发，(3) 用三价元素掺杂，(4) 用五价元素掺杂。对于纯锗和纯硅这类本征半导体，在上述方法中不能激发其传导电子的有

(A) (1)

(B) (2)

(C) (3)



(D) (4)

**解：**热激发、光激发均能在导带中激发传导电子；用三价元素掺杂时，在价带中激发空穴；用五价元素掺杂时，在导带中激发传导电子。

因此：只有(3)，即用三价元素掺杂不能激发传导电子。

## 作业

1.No.9。

2:自学本章各例题并完成书上的习题(对照书后的参考答案自己订正)。

3:自学:超导、超流、液晶。



第十四周星期三交作业

*Thank You!*

