# 复习:能带结构(一)

- 自由电子的状态: V=0解、准经典近似、传播态
- 原子中电子的状态: 库仑势、束缚态
  - 氢原子模型: 五个量子数n l m s m<sub>s</sub>, 波函数形态
  - 多电子原子模型: 电子填充
- 晶体中电子的状态: 原子轨道线性组合
  - 分子中电子的状态: 化学键(成键反键)、电子填充
  - 共价键在晶体中的推广与紧束缚模型: 能带
- 绝缘体、半导体、导体的区别
  - 能带的填充
  - 空穴

# 复习: 能带结构 (二)

- 晶体能带的严谨处理方法
  - 抛物线(体)近似、有效质量、群速度、运动方程、等能面、态密度
- 实际半导体的能带结构
  - 硅的能带结构
  - 金刚石晶体的能带结构
  - 闪锌矿晶体的能带结构
  - 纤锌矿晶体的能带结构
- 实际半导体能带结构的规律

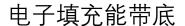
# 复习: 常见半导体的能带结构

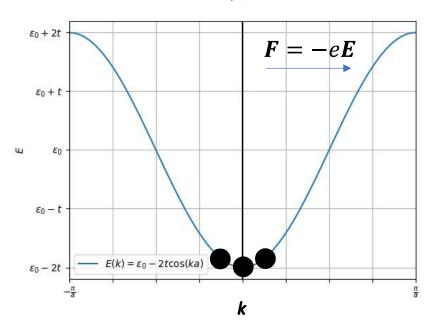
- •导带底、价带顶、能隙/带隙/禁带宽度
  - (平均)原子序数越大,带隙越小,有效质量越小
  - 化学键极性(离子性)越低,带隙越小,有效质量越小
- 直接带隙和间接带隙
  - IV族、III-V族、II-VI族的特征
- 导带底的位置和能谷的简并度
- 价带顶的结构:重空穴带、轻空穴带、自旋-轨 道耦合带
- 混合晶体

### 复习:测量能带结构的方法

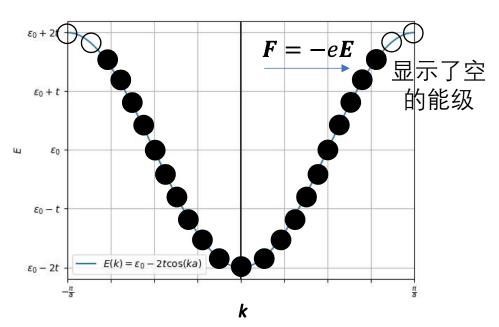
- 高能谱学手段(UPS、XPS、XAS、ARPES)
  - 能带整体特征
  - 测量价带和导带
- 回旋共振
  - 载流子各向异性有效质量
  - 半导体中最常用的测量方法之一
- 紫外-可见-红外吸收光谱
  - 测量不同波长光的吸收
  - 精确确定带隙宽度和类型

# 半导体电子填充的两种情况





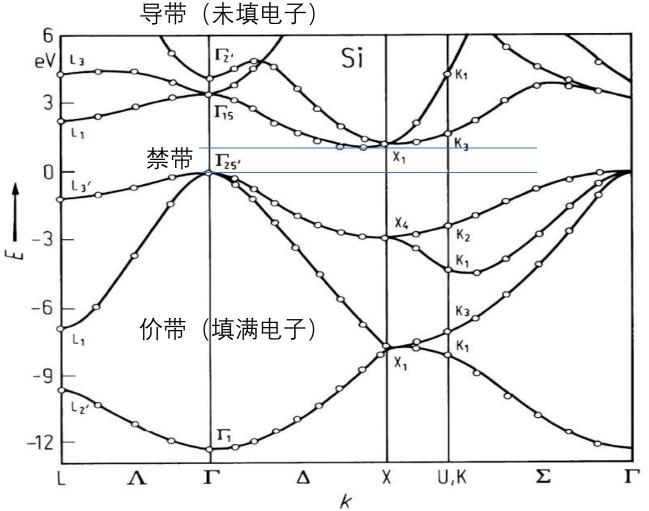
#### 电子填充除了能带顶的其余部分



怎样填充半导体的能带?

# 如何利用价带顶和导带底导电?

# 如何利用价带顶和导带底导电?



总共8条能带(8N个波函数,每条能带N个波函数)

下面4N条能带和上面4N 条能带之间有明显的禁 带(带隙)

硅的电子填到哪里? (N 个原胞,每个原胞2个硅 原子,硅原子4个sp<sup>3</sup>轨 道中各一个电子)

如何往导带中填入电子?

k: 三维, 较复杂; 布里渊区中注意「XKL这几个点

# 如何利用价带顶和导带底导电?

半导体的掺杂