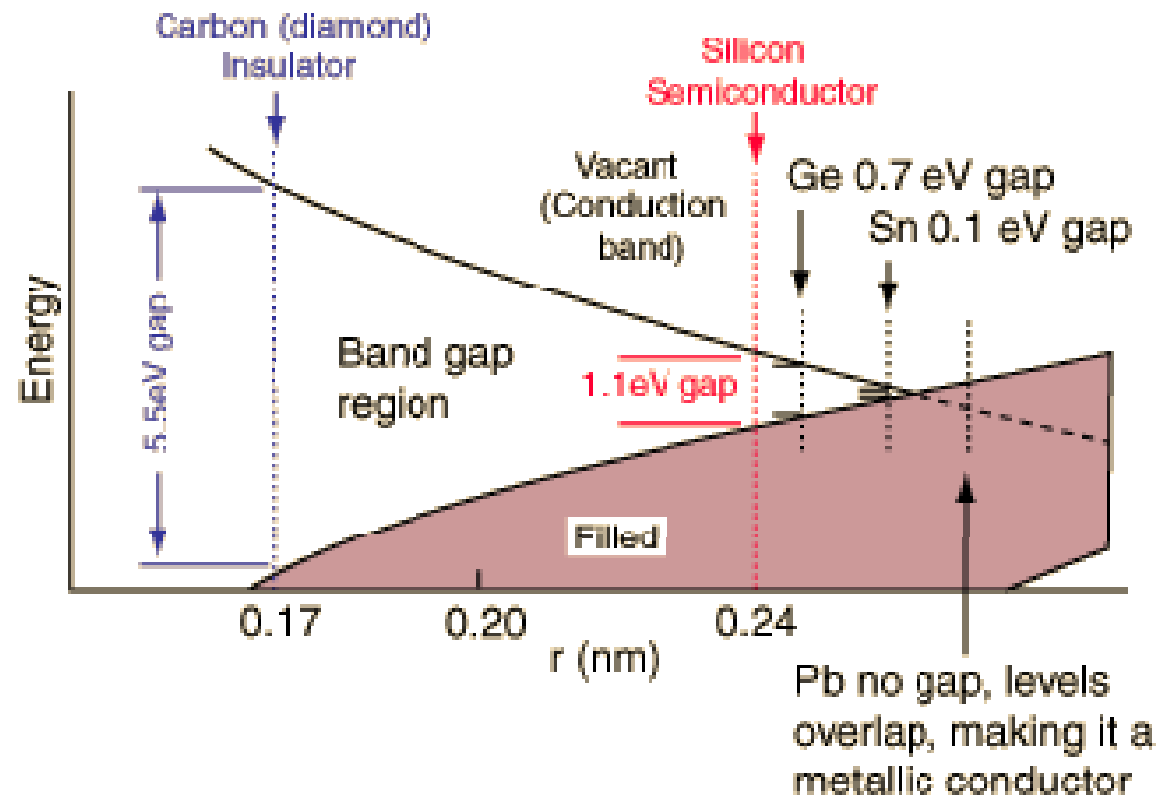


# 金刚石型晶体能带结构

随原子序数增加，原子轨道重叠增加，导带价带变宽，带隙逐渐闭合

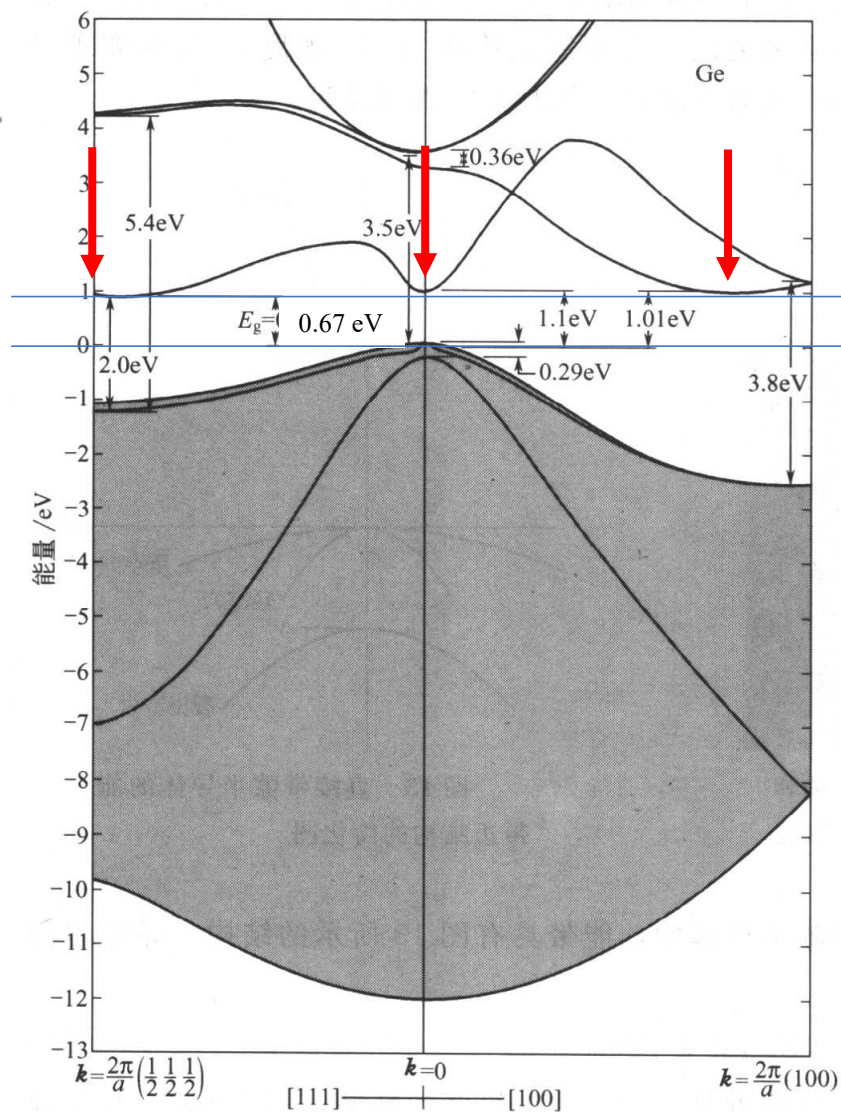
Periodic table 在能带相同的位置上，有效质量变小  
environment of  
semiconductors

B	<b>C</b> $2p^2$	N
Al	<b>Si</b> $3p^2$	P
Ga	<b>Ge</b> $4p^2$	As
In	<b>Sn</b> $5p^2$	Sb
Tl	<b>Pb</b> $6p^2$	Bi



# 锗能带的详细结构

三个能谷都是导带底候选，注意相对高度



导带 (未填电子)  
禁带  
价带 (填满电子)

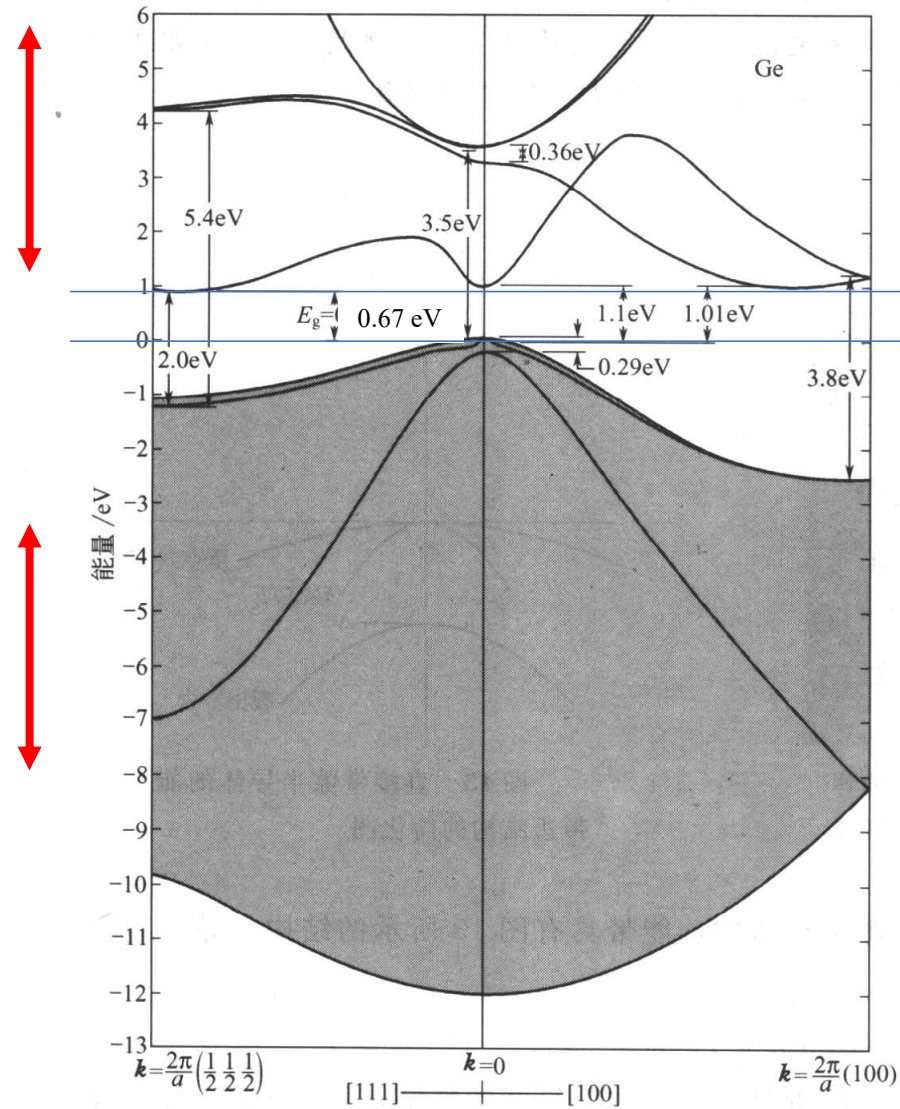
禁带宽度?  
导带底位置?  
价带顶位置?

# 硅、锗能带的特征

- 价带顶位于 $\mathbf{k}=0$ 处 ( $\Gamma$ 点)
- 价带顶附近有三个能带:
  - 重空穴带、轻空穴带 ( $\Gamma$ 点处二能带简并)、由于自旋-轨道耦合而形成的第三个带
- 导带底并非位于 $\mathbf{k}=0$ 处
  - 硅:  $\langle 100 \rangle$ 方向某处
  - 锗:  $\langle 111 \rangle$ 方向布里渊区边界
  - 无法简单预测导带底在哪里
- 带隙: 硅 (1.12 eV) 宽于锗 (0.67 eV)

# 金刚石型晶体有效质量

随原子序数增加，原子轨道重叠增加，导带价带变宽，有效质量变小



导带 (未填电子)  
禁带  
价带 (填满电子)

# 锗的导带底

- 导带底 $\mathbf{k}_0$ : L点 ([111]方向布里渊区边界)
- 能带具有明显各向异性
  - 注意: 此时取三个轴为[111]方向 (称之为纵向 longitudinal) 和与之垂直的任意两个方向 (称之为横向 transverse)

$$E(\mathbf{k}) \sim E(\mathbf{k}_0) + \underbrace{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}_{\text{行向量}} \cdot \frac{\hbar^2}{2} m_n^{*-1} \cdot \underbrace{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}_{\text{列向量}}$$

$$m_n^* = \begin{pmatrix} m_{nl}^* & 0 & 0 \\ 0 & m_{nt}^* & 0 \\ 0 & 0 & m_{nt}^* \end{pmatrix} \quad m_n^{*-1} = \begin{pmatrix} m_{nl}^{*-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_{nt}^{*-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_{nt}^{*-1} \end{pmatrix}$$

- $m_{nl}^* (\sim 1.64m) > m_{nt}^* (\sim 0.08m)$

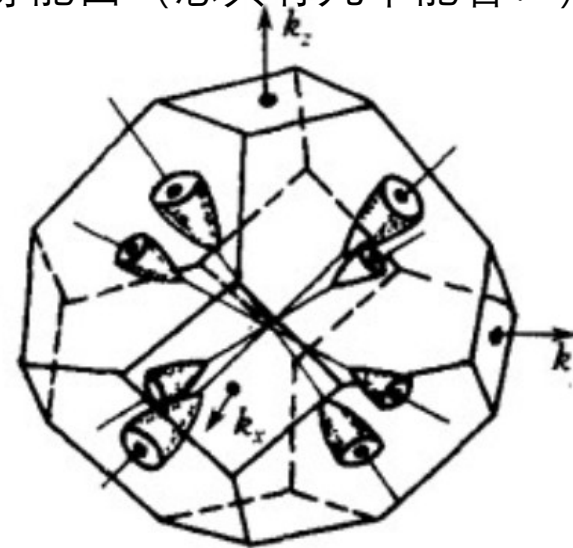
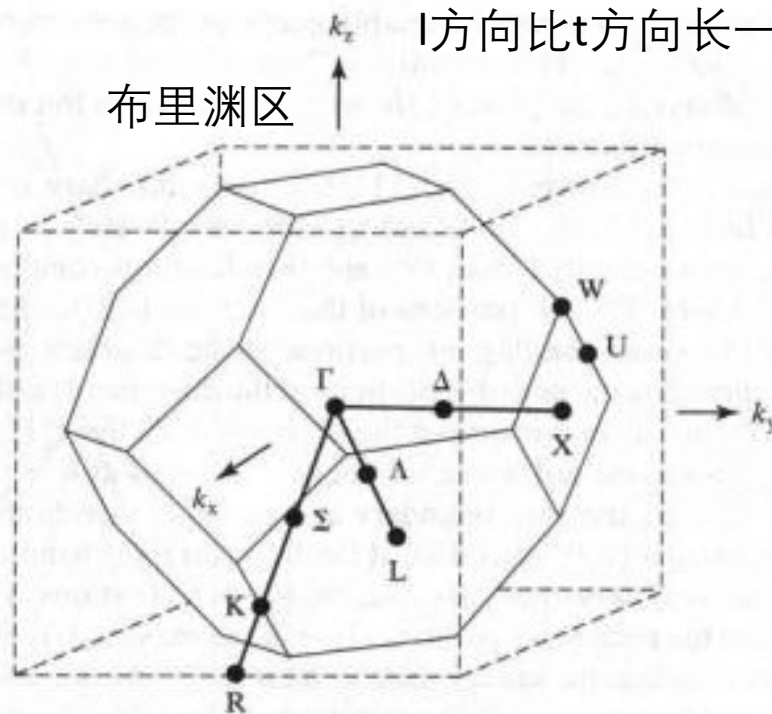
# 锗的导带底等能面

- 导带底 $\mathbf{k}_0$ : L点 ([111]方向布里渊区边界)

$$\frac{(k_l - k_{l0})^2}{m_{nl}^*} + \frac{(k_{t1} - k_{t10})^2}{m_{nt}^*} + \frac{(k_{t2} - k_{t20})^2}{m_{nt}^*} = \frac{2(E - E(\mathbf{k}_0))}{\hbar^2} \text{ 为球心在 } \mathbf{k}_0 \text{ 的椭球面}$$

l方向比t方向长一些 ( $\sqrt{1.64}:\sqrt{0.08}$ )

等能面 (总共有几个能谷?)



# 锗的价带顶

- 价带顶 $\mathbf{k}_0$ :  $\Gamma$ 点
- 能带不具有明显各向异性
- 能带分为重空穴带 $m_{ph}^*$ (heavy)、轻空穴带 $m_{pl}^*$ (light)、自旋-轨道耦合(spin-orbit)产生的“第三个”带 $m_{p3}^*$ 
  - 其中, 重空穴带、轻空穴带在 $\Gamma$ 点处能量完全相等
  - 自旋-轨道耦合带在 $\Gamma$ 点处能量低较多 (-0.29 eV)
    - 因为4p轨道较大, 轨道磁矩比硅的大
- $m_{ph}^* \sim 0.28m$ ,  $m_{pl}^* \sim 0.044m$ ,  $m_{p3}^* \sim 0.077m$

# 硅、锗的有效质量

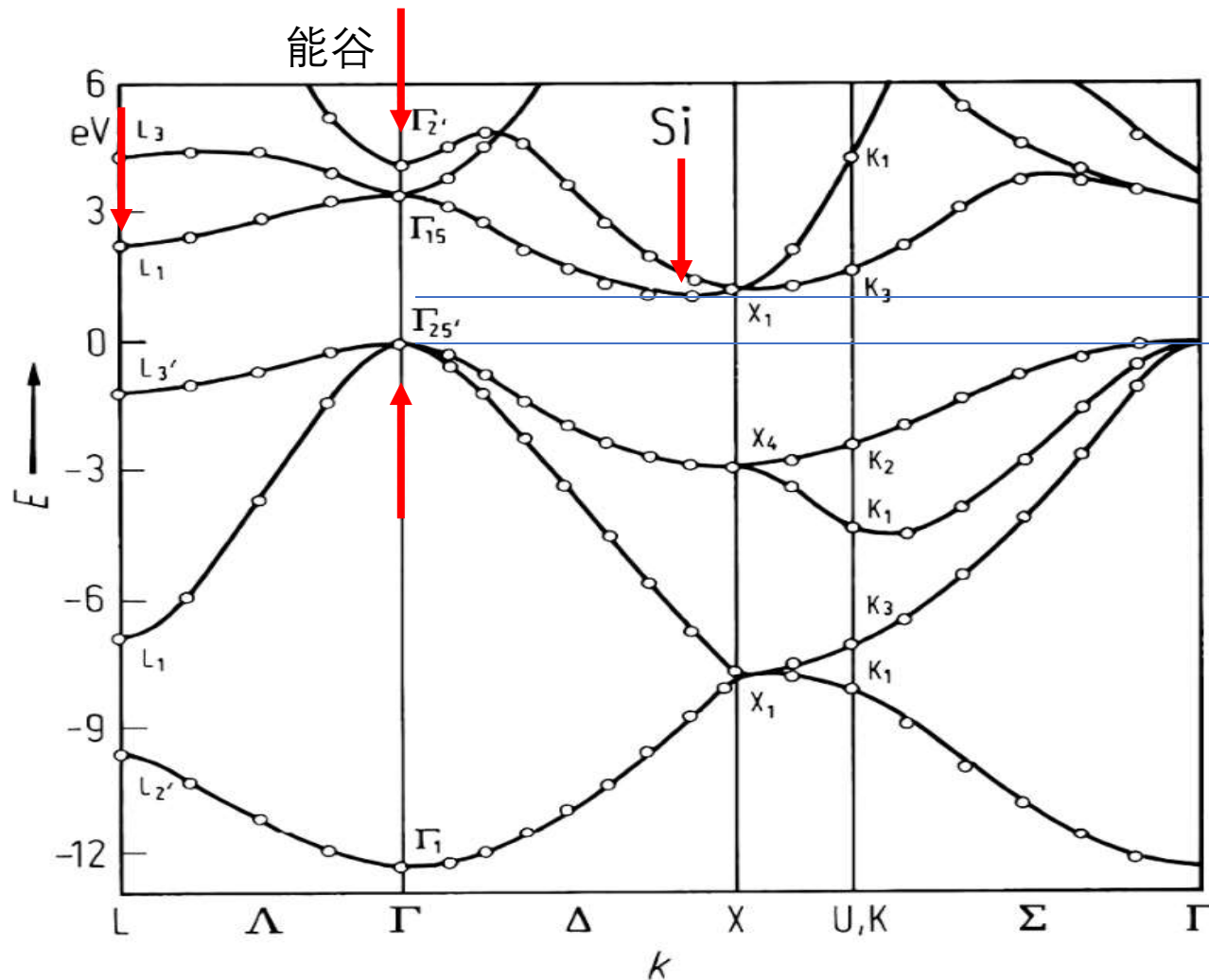
- 导带底（位置不同，无法直接比较）
  - 硅不同方向 $m_{nx}^*(\sim 0.92m)$ ,  $m_{ny}^* = m_{nz}^*(\sim 0.19m)$ 
    - x方向也可以叫做纵向，y、z也可以叫做横向，和锗对应
  - 锗纵、横有效质量 $m_{nl}^*(\sim 1.64m)$ ,  $m_{nt}^*(\sim 0.08m)$
- 价带顶
  - 不管是重空穴带、轻空穴带（ $\Gamma$ 点处二能带简并）、自旋-轨道耦合带，锗的有效质量均小于硅

表 1-2 空穴的有效质量

材 料	$\frac{(m_p)_h}{m_0}$	$\frac{(m_p)_l}{m_0}$	$\frac{(m_p)_3}{m_0}$
硅	0.53	0.16	0.245
锗	0.28	0.044	0.077



# 小结：硅的能带结构



半导体中由于很多原因  
(后述)，导带底和价  
带顶会填一些电子/空穴

导带三种能谷  
 $\Gamma$ 、 $X$ 、 $L$

导带 (未填电子)

禁带

价带 (填满电子)

价带三条能带

导带的极小值和价带的  
极大值也叫做“能谷”

导带底 (最小值) 和价  
带顶 (最大值) 分别在  
哪里?

$k$ : 三维, 较复杂; 布里渊区中注意  $\Gamma$   $X$   $K$   $L$  这几个点

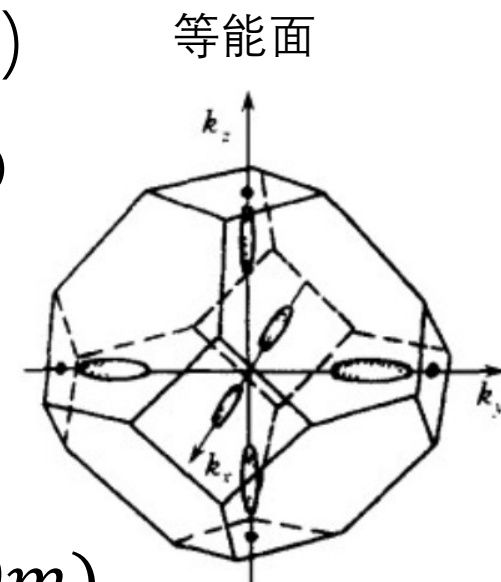
# 小结：硅的导带底

- 导带底 $\mathbf{k}_0$ ： $\Gamma$ X方向（ $\langle 100 \rangle$ 方向某处）
- 能带具有明显各向异性（一纵两横）

$$E(\mathbf{k}) \sim E(\mathbf{k}_0) + \underbrace{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}_{\text{行向量}} \cdot \frac{\hbar^2}{2} m_n^{*-1} \cdot \underbrace{(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)}_{\text{列向量}}$$

$$m_n^* = \begin{pmatrix} m_{nl}^* & 0 & 0 \\ 0 & m_{nt}^* & 0 \\ 0 & 0 & m_{nt}^* \end{pmatrix}$$

- $m_{nl}^* (\sim 0.92m) > m_{nt}^* = m_{nt}^* (\sim 0.19m)$ 
  - 对角化的三个轴就是x、y、z



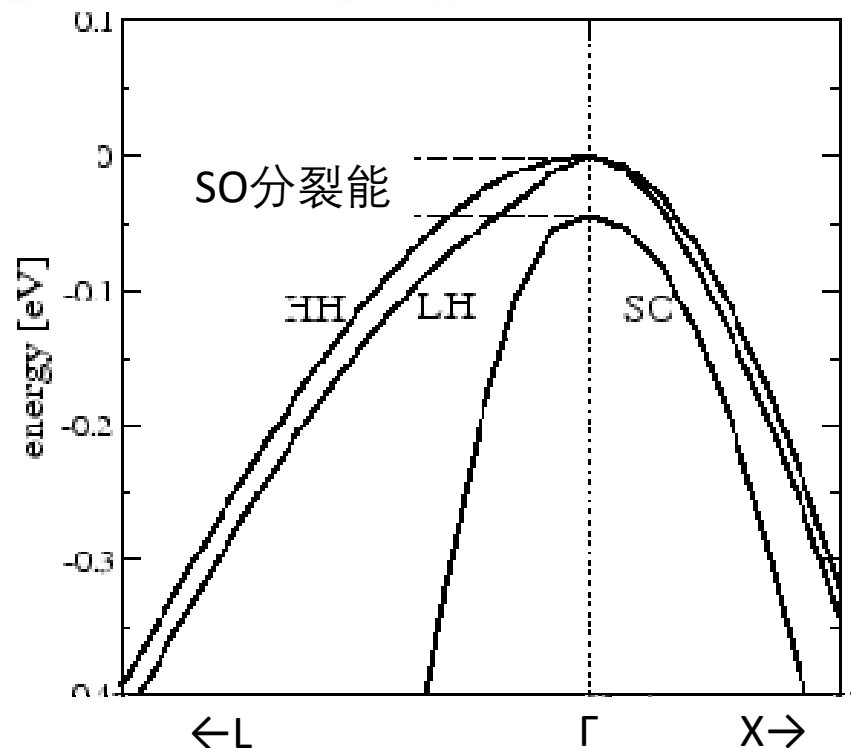
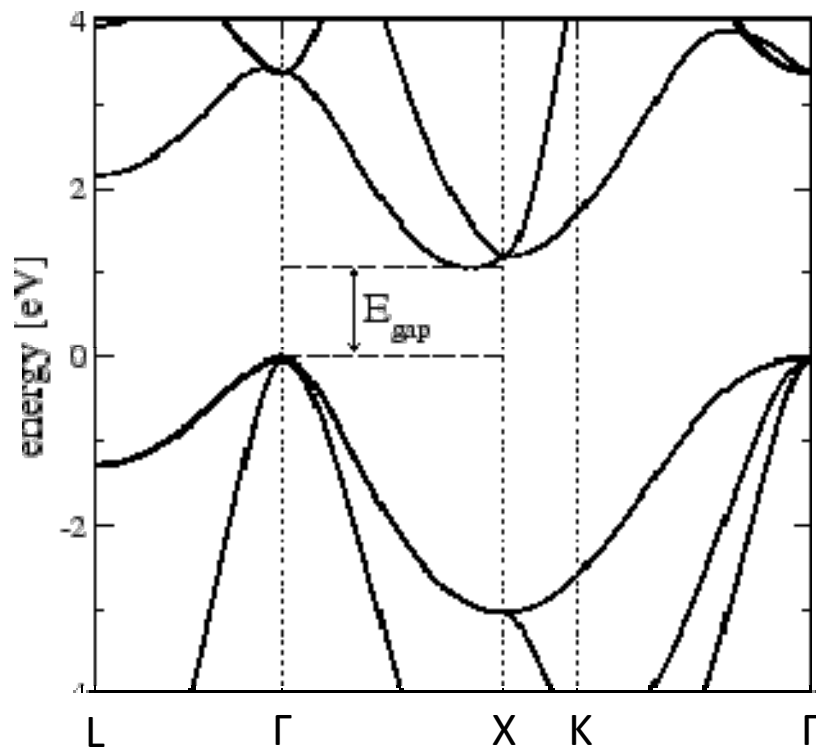
# 小结： 硅的价带顶

- 价带顶 $\mathbf{k}_0$ ：  $\Gamma$ 点 ( $\mathbf{k}_0 = \mathbf{0}$ )
- 能带不具有明显各向异性
- 能带分为3支，有效质量不同，在 $\Gamma$ 点处能量大致相等
- 分别叫做重空穴带 $m_{ph}^*$ (heavy)、轻空穴带 $m_{pl}^*$ (light)、自旋-轨道耦合(spin-orbit)产生的“第三个”带 $m_{p3}^*$ 
  - 其中，重空穴带、轻空穴带在 $\Gamma$ 点处能量完全相等
  - 自旋-轨道耦合带在 $\Gamma$ 点处能量略低 (-0.04 eV)
- $m_{ph}^* \sim 0.53m$ ,  $m_{pl}^* \sim 0.16m$ ,  $m_{p3}^* \sim 0.25m$

# 小结：硅的价带顶

- 到底哪一支是重空穴带，哪一支是轻空穴带，哪一支是自旋-轨道耦合带？

轻重空穴带  $E(\mathbf{k}) = -Ak^2 \mp \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)}$

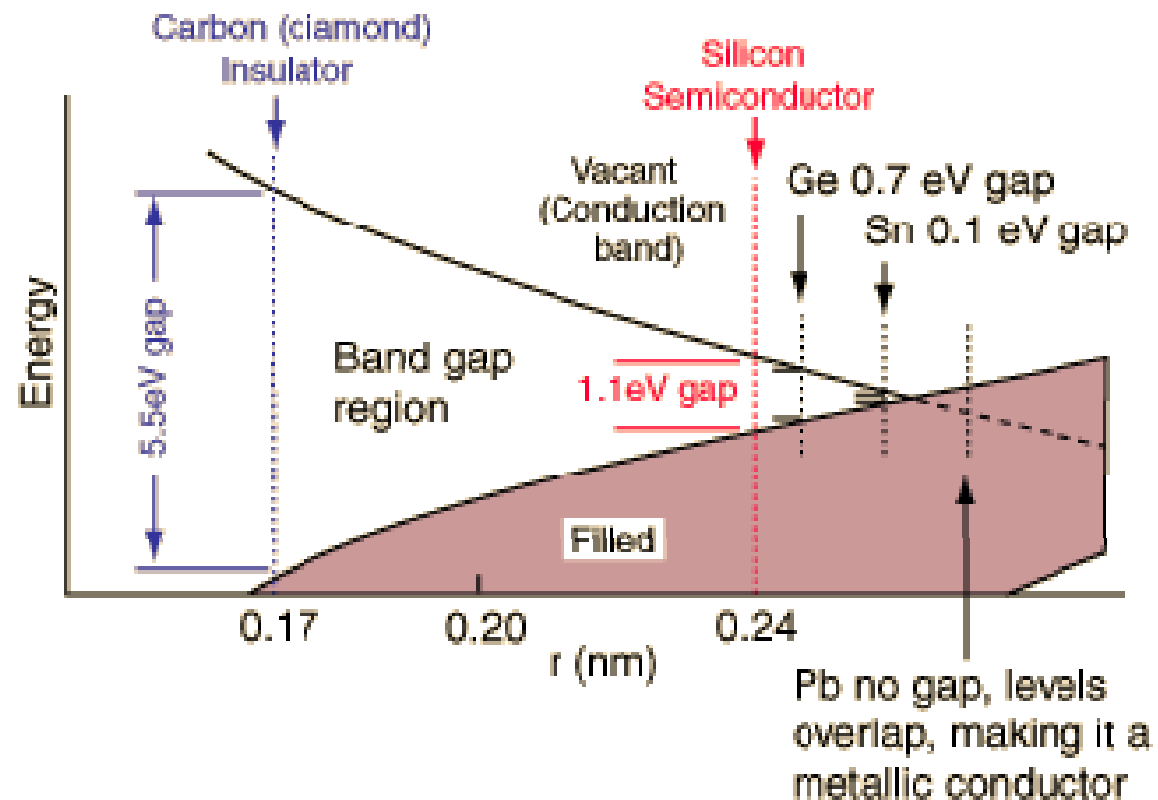


# 小结：金刚石型晶体的能带

随原子序数增加，原子轨道重叠增加，导带价带变宽，带隙逐渐闭合  
在能带相同的位置，有效质量变小

Periodic table  
environment of  
semiconductors

B	$\text{C}_{2p^2}$	N
Al	$\text{Si}_{3p^2}$	P
Ga	$\text{Ge}_{4p^2}$	As
In	$\text{Sn}_{5p^2}$	Sb
Tl	$\text{Pb}_{6p^2}$	Bi



## 第二部分：能带结构

- 晶体能带的严谨处理方法
- **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

# 半导体材料的能带结构

IV族单质：C（金刚石）、  
Si、Ge

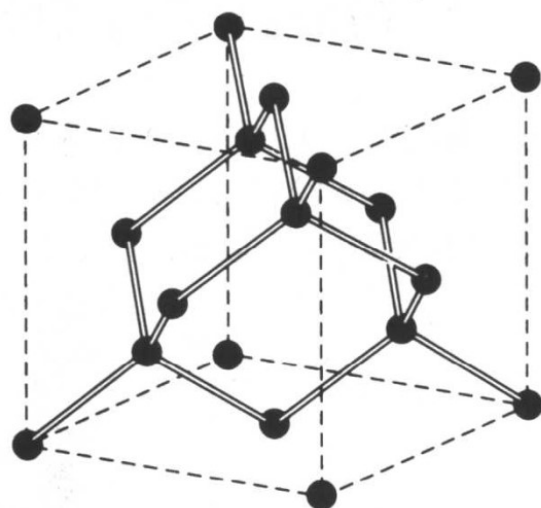


图 23 金刚石型晶体结构。图中显示了四面体键合的排列方式。

金刚石结构

IV、III-V、II-VI族化合物：  
SiC、GaAs、InSb、ZnS等

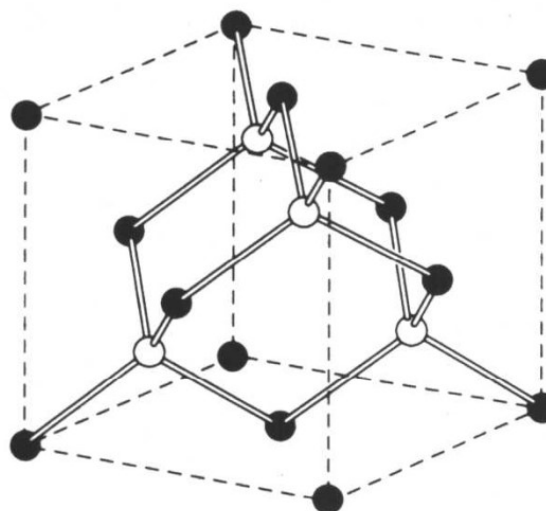


图 24 立方硫化锌的晶体结构。

立方闪锌矿结构

IV、III-V、II-VI族化合物：  
SiC、GaN、ZnO、ZnS等

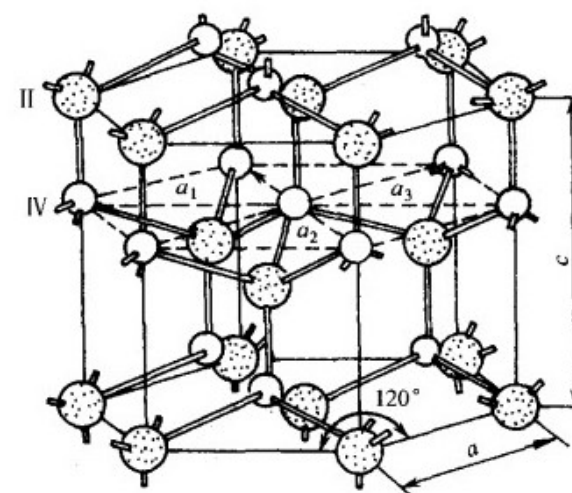


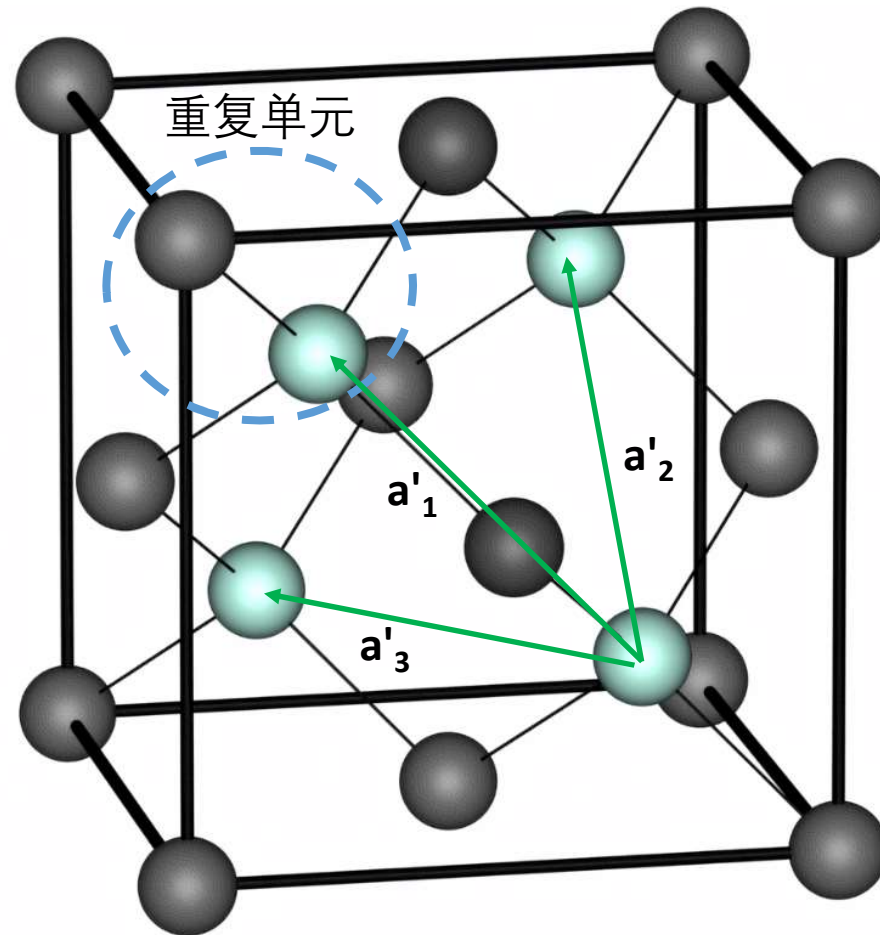
图 1-3 纤锌矿型结构

六方纤锌矿结构

已知晶体结构，如何得出能带结构？

# 硅能带：紧束缚近似

- 硅的原胞包含两个硅原子（记作 $\alpha$ 、 $\beta$ ）
- 每个硅原子有四个 $sp^3$ 原子轨道，可组合出 $8N$ （ $N$ 为原胞数）个波函数/状态
- 硅的原胞的正格矢为 $\mathbf{a}'_1$ 、 $\mathbf{a}'_2$ 、 $\mathbf{a}'_3$





# 硅能带：紧束缚近似

- 利用原子轨道线性组合，得到波函数，近似满足薛定谔方程

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{8N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \left( \sum_{j=1}^4 \alpha_{jk} \psi_{sp^3-\alpha_j}(x - \mathbf{R}) + \sum_{j=1}^4 \beta_{jk} \psi_{sp^3-\beta_j}(x - \mathbf{R}) \right)$$

归一化系数

“波形”式线性组合

硅原子 $\alpha$ 、 $\beta$ 的4个 $sp^3$ 轨道，可定义为 $\phi_k(x - \mathbf{R})$

- 求其平均能量

波函数和自己及相邻波函数的交叠

$$\int \psi_k(x, t)^* \hat{E} \psi_k(x, t) dV \sim \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \int \phi_k(x - \mathbf{R})^* \hat{H} \phi_k(x - \mathbf{R}) dV$$

闪锌矿晶体和硅的主要区别也在于此

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 <b>H</b> Hydrogen 1.008	2 <b>He</b> Helium 4.003	3 <b>Li</b> Lithium 6.941	4 <b>Be</b> Beryllium 9.012	5 <b>B</b> Boron 10.811	6 <b>C</b> Carbon 12.011	7 <b>N</b> Nitrogen 14.007	8 <b>O</b> Oxygen 15.999	9 <b>F</b> Fluorine 18.998	10 <b>Ne</b> Neon 20.180	11 <b>Na</b> Sodium 22.990	12 <b>Mg</b> Magnesium 24.305	13 <b>Al</b> Aluminum 26.982	14 <b>Si</b> Silicon 28.086	15 <b>P</b> Phosphorus 30.974	16 <b>S</b> Sulfur 32.066	17 <b>Cl</b> Chlorine 35.453	18 <b>Ar</b> Argon 39.948
19 <b>K</b> Potassium 39.098	20 <b>Ca</b> Calcium 40.078	21 <b>Sc</b> Scandium 44.956	22 <b>Ti</b> Titanium 47.88	23 <b>V</b> Vanadium 50.942	24 <b>Cr</b> Chromium 51.996	25 <b>Mn</b> Manganese 54.938	26 <b>Fe</b> Iron 55.845	27 <b>Co</b> Cobalt 58.933	28 <b>Ni</b> Nickel 58.693	29 <b>Cu</b> Copper 63.546	30 <b>Zn</b> Zinc 65.38	31 <b>Ga</b> Gallium 69.723	32 <b>Ge</b> Germanium 72.631	33 <b>As</b> Arsenic 74.922	34 <b>Se</b> Selenium 78.971	35 <b>Br</b> Bromine 79.904	36 <b>Kr</b> Krypton 84.798
37 <b>Rb</b> Rubidium 85.468	38 <b>Sr</b> Strontium 87.62	39 <b>Y</b> Yttrium 88.906	40 <b>Zr</b> Zirconium 91.224	41 <b>Nb</b> Niobium 92.906	42 <b>Mo</b> Molybdenum 95.95	43 <b>Tc</b> Technetium 98.907	44 <b>Ru</b> Ruthenium 101.07	45 <b>Rh</b> Rhodium 102.96	46 <b>Pd</b> Palladium 106.42	47 <b>Ag</b> Silver 107.868	48 <b>Cd</b> Cadmium 112.414	49 <b>In</b> Indium 114.818	50 <b>Sn</b> Tin 118.711	51 <b>Sb</b> Antimony 121.760	52 <b>Te</b> Tellurium 127.6	53 <b>I</b> Iodine 126.904	54 <b>Xe</b> Xenon 131.294
55 <b>Cs</b> Cesium 132.905	56 <b>Ba</b> Barium 137.328	57-71 *	72 <b>Hf</b> Hafnium 178.49	73 <b>Ta</b> Tantalum 180.948	74 <b>W</b> Tungsten 183.85	75 <b>Re</b> Rhenium 186.207	76 <b>Os</b> Osmium 190.23	77 <b>Ir</b> Iridium 192.22	78 <b>Pt</b> Platinum 195.08	79 <b>Au</b> Gold 196.967	80 <b>Hg</b> Mercury 200.59	81 <b>Tl</b> Thallium 204.383	82 <b>Pb</b> Lead 207.2	83 <b>Bi</b> Bismuth 208.980	84 <b>Po</b> Polonium [208.982]	85 <b>At</b> Astatine 209.987	86 <b>Rn</b> Radon 222.018
87 <b>Fr</b> Francium 223.020	88 <b>Ra</b> Radium 226.025	89-103 **	104 <b>Rf</b> Rutherfordium [261]	105 <b>Db</b> Dubnium [262]	106 <b>Sg</b> Seaborgium [266]	107 <b>Bh</b> Bohrium [264]	108 <b>Hs</b> Hassium [269]	109 Unknown Meitnerium [278]	110 Unknown Darmstadtium [281]	111 Unknown Roentgenium [280]	112 <b>Cn</b> Copernicium [285]	113 Unknown Nihonium [286]	114 Unknown Flerovium [289]	115 Unknown Moscovium [289]	116 Unknown Livermorium [293]	117 Unknown Tennessine [294]	118 Unknown Oganesson [294]
Lanthanide Series *			57 <b>La</b> Lanthanum 138.905	58 <b>Ce</b> Cerium 140.116	59 <b>Pr</b> Praseodymium 140.908	60 <b>Nd</b> Neodymium 144.243	61 <b>Pm</b> Promethium 144.913	62 <b>Sm</b> Samarium 150.36	63 <b>Eu</b> Europium 151.964	64 <b>Gd</b> Gadolinium 157.25	65 <b>Tb</b> Terbium 158.925	66 <b>Dy</b> Dysprosium 162.500	67 <b>Ho</b> Holmium 164.930	68 <b>Er</b> Erbium 167.259	69 <b>Tm</b> Thulium 168.934	70 <b>Yb</b> Ytterbium 173.055	71 <b>Lu</b> Lutetium 174.967
Actinide Series **			89 <b>Ac</b> Actinium 227.028	90 <b>Th</b> Thorium 232.038	91 <b>Pa</b> Protactinium 231.036	92 <b>U</b> Uranium 238.029	93 <b>Np</b> Neptunium 237.048	94 <b>Pu</b> Plutonium 244.064	95 <b>Am</b> Americium 243.061	96 <b>Cm</b> Curium 247.070	97 <b>Bk</b> Berkelium 247.070	98 <b>Cf</b> Californium 251.080	99 <b>Es</b> Einsteinium [254]	100 <b>Fm</b> Fermium 257.095	101 <b>Md</b> Mendelevium 258.1	102 <b>No</b> Nobelium 259.101	103 <b>Lr</b> Lawrencium [262]

# 化学键极性增加→劈裂减少

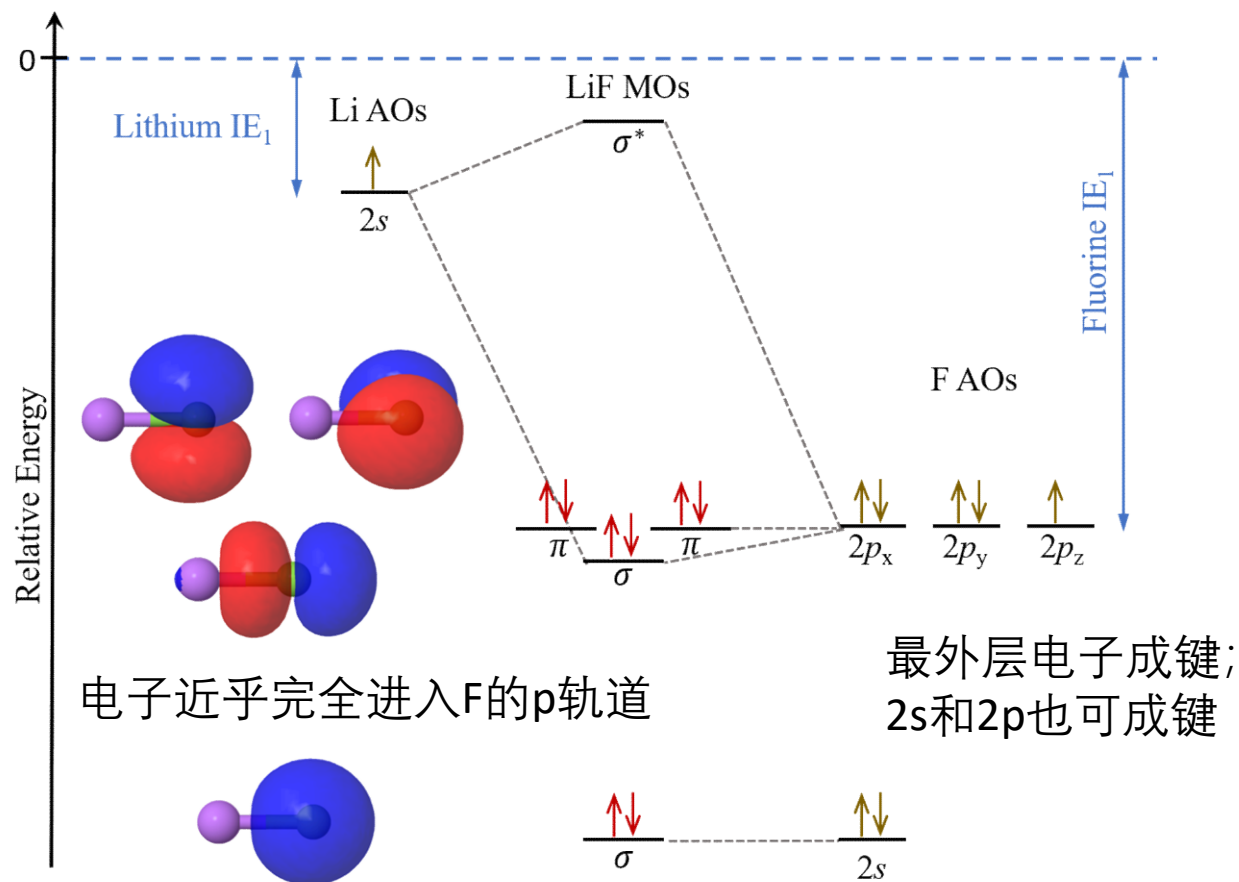
LiF的分子轨道

LiF的电负性差值约为3，基本属于离子键（超强极性共价键）

“共用电子对”造成的能量降低基本等于电子完全转移造成的能量降低，共价键键能很低，劈裂小

成键能级基本就是F的原子轨道能级

两原子吸引主要靠库仑力



<https://wisc.pb.unizin.org/chem109fall2021ver02/chapter/mos-for-heteronuclear-diatomic-molecules/>

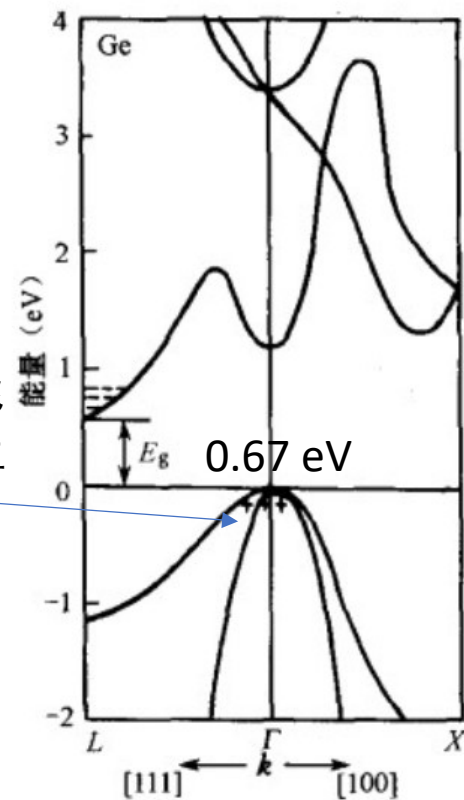
# 预测GaAs的能带结构

- GaAs和Ge相比：
  - 共价键极性（离子性）更强，因此能级劈裂更小
  - 能带展宽更小
  - 能隙提高
  - 在相同k处有效质量更大
- 价带中As 4s4p的成分居多，导带中Ga 4s4p的成分居多
  - 因为电负性高的原子轨道能量低；见上页

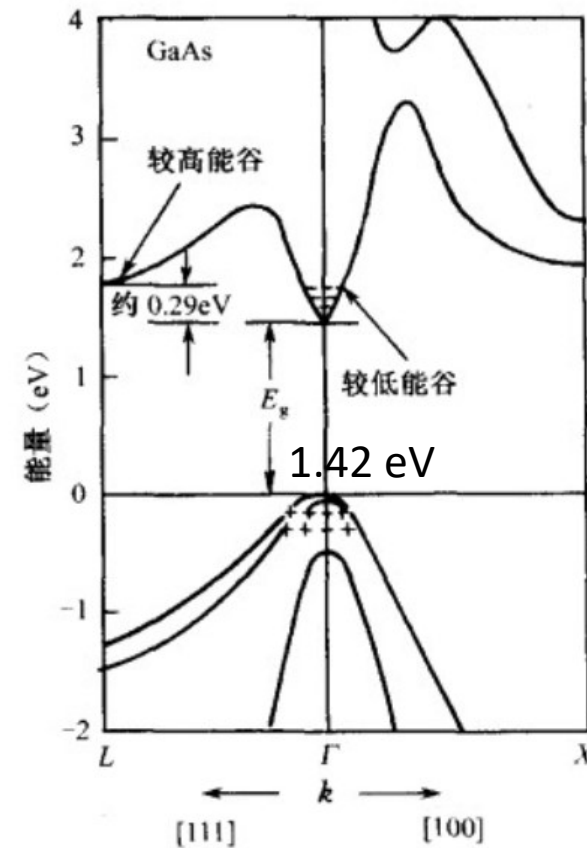
# III-V族能带结构: GaAs

砷化镓比锗能隙略宽；导带底位置也有所不同

注意：锗自旋-轨道耦合分裂能为0.29 eV，书上的图有问题



锗：L点低于Γ点能量



砷化镓：Γ点低于L点能量

# GaAs的能带结构和有效质量

- 导带底
  - $k=0$ 处 ( $\Gamma$ 点), 等能面是球面,  $m_n^* \sim 0.063m$
- 价带顶
  - $k=0$ 处 ( $\Gamma$ 点), 等能面在 $k$ 比较小时基本是球面; 比较大时是扭曲面
  - 重空穴带 ( $m_p^* \sim 0.50m$ )、轻空穴带 ( $0.076m$ )、由于自旋-轨道耦合而形成的第三个带
  - 注意: 第三个带的顶点比价带顶低较多 ( $0.34 \text{ eV}$ ), 通常不会填充, 不需关心其有效质量
- 室温下  $E_g = 1.42 \text{ eV}$

# GaAs和Ge比较

- 极性共价键-非极性共价键
- 带离子键成分，展宽小
- 因此，GaAs比起Ge
  - 带隙宽 ( $1.42 \text{ eV} - 0.67 \text{ eV}$ )
  - 有效质量大 (例如：轻空穴  $0.076m - 0.044m$ ，重空穴  $0.50m - 0.28m$ )
- 导带能谷难以简单预测：L点和 $\Gamma$ 点相对高低不同
  - 导带底电子有效质量无法直接比较



# 闪锌矿能带结构: InSb

## The Periodic Table of Elements

1	2											13	14	15	16	17	18
1 H Hydrogen 1.008 -1,+1												5 B Boron 10.811 +3	6 C Carbon 12.011 +4,+3,+2,+1 -4,-3 -2,-1	7 N Nitrogen 14.007 +5,+3,-3	8 O Oxygen 15.999 -2	9 F Fluorine 18.998 -1	10 Ne Neon 20.180 0
3 Li Lithium 6.941 +1	4 Be Beryllium 9.012 +2											13 Al Aluminium 26.982 +3	14 Si Silicon 28.086 +4,-4	15 P Phosphorus 30.974 +5,+3,-3	16 S Sulfur 32.066 +6,+4,+2,-2	17 Cl Chlorine 35.453 +7,+5,+3,+1	18 Ar Argon 39.948 0
11 Na Sodium 22.990 +1	12 Mg Magnesium 24.305 +2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	31 Ga Gallium 69.723 +3	32 Ge Germanium 72.631 +4,+2,-4	33 As Arsenic 74.922 +5,+3,-3	34 Se Selenium 78.971 +6,+4,+2,-2	35 Br Bromine 79.904 +5,+3,+1,-1	36 Kr Krypton 83.904 +2,0
19 K Potassium 39.098 +1	20 Ca Calcium 40.078 +2	21 Sc Scandium 44.956 +3	22 Ti Titanium 47.88 +4	23 V Vanadium 50.942 +5	24 Cr Chromium 51.996 +6,+3,+2	25 Mn Manganese 54.938 +7,+4,+2	26 Fe Iron 55.845 +6,+3,+2	27 Co Cobalt 58.933 +3,+2	28 Ni Nickel 58.693 +2	29 Cu Copper 63.546 +2	30 Zn Zinc 65.38 +2	49 In Indium 114.818 +3	50 Sn Tin 118.711 +4,+2,-4	51 Sb Antimony 121.760 +5,+3,-3	52 Te Tellurium 127.6 +6,+4,+2,-2	53 I Iodine 126.904 +5,+3,+1,-1	54 Xe Xenon 131.294 +6,+4,+2,0
37 Rb Rubidium 85.468 +1	38 Sr Strontium 87.62 +2	39 Y Yttrium 88.906 +3	40 Zr Zirconium 91.224 +4	41 Nb Niobium 92.906 +5	42 Mo Molybdenum 95.95 +6,+4	43 Tc Technetium 98.907 +7,+4	44 Ru Ruthenium 101.07 +4,+3	45 Rh Rhodium 102.906 +3	46 Pd Palladium 106.42 +4,+2	47 Ag Silver 107.868 +1	48 Cd Cadmium 112.414 +2	81 Tl Thallium 204.383 +3,+1	82 Pb Lead 207.2 +4,+2	83 Bi Bismuth 208.980 +3	84 Po Polonium [208.982] +4,+2,-2	85 At Astatine 209.987 +5,+3,+1,-1	86 Rn Radon 222.018 +2,0
55 Cs Cesium 132.905 +1	56 Ba Barium 137.328 +2	57-71 *	72 Hf Hafnium 178.49 +4	73 Ta Tantalum 180.948 +5	74 W Tungsten 183.85 +6,+4	75 Re Rhenium 186.207 +4	76 Os Osmium 190.23 +4	77 Ir Iridium 192.22 +4,+3	78 Pt Platinum 195.08 +4,+2	79 Au Gold 196.967 +3	80 Hg Mercury 200.59 +2,+1	113 Nh Nihonium [286] +3,+1	114 Fl Flerovium [289] +4,+2	115 Mc Moscovium [289] +3	116 Lv Livermorium [293] +4,+2,-2	117 Ts Tennessine [294] +5,+3,+1,-1	118 Og Oganesson [294] +2,0
87 Fr Francium 223.020 +1	88 Ra Radium 226.025 +2	89-103 **	104 Rf Rutherfordium [261] +4	105 Db Dubnium [262] +5	106 Sg Seaborgium [266] +6	107 Bh Bohrium [264] +7	108 Hs Hassium [269] +8	109 Mt Meitnerium [278] Unknown	110 Ds Darmstadtium [281] Unknown	111 Rg Roentgenium [280] Unknown	112 Cn Copernicium [285] +2	113 Nh Nihonium [286] +3,+1	114 Fl Flerovium [289] +4,+2	115 Mc Moscovium [289] +3	116 Lv Livermorium [293] +4,+2,-2	117 Ts Tennessine [294] +5,+3,+1,-1	118 Og Oganesson [294] +2,0
Lanthanide Series *			57 La Lanthanum 138.905 +3	58 Ce Cerium 140.116 +4,+3	59 Pr Praseodymium 140.908 +3	60 Nd Neodymium 144.243 +3	61 Pm Promethium 144.913 +3	62 Sm Samarium 150.36 +3	63 Eu Europium 151.964 +3,+2	64 Gd Gadolinium 157.25 +3	65 Tb Terbium 158.925 +3	66 Dy Dysprosium 162.500 +3	67 Ho Holmium 164.930 +3	68 Er Erbium 167.259 +3	69 Tm Thulium 168.934 +3	70 Yb Ytterbium 173.055 +3	71 Lu Lutetium 174.967 +3
Actinide Series **			89 Ac Actinium 227.028 +3	90 Th Thorium 232.038 +4	91 Pa Protactinium 231.036 +5	92 U Uranium 238.029 +6	93 Np Neptunium 237.048 +5	94 Pu Plutonium 244.064 +4	95 Am Americium 243.061 +3	96 Cm Curium 247.070 +3	97 Bk Berkelium 247.070 +3	98 Cf Californium 251.080 +3	99 Es Einsteinium [254] +3	100 Fm Fermium 257.095 +3	101 Md Mendelevium 258.1 +3	102 No Nobelium 259.101 +2	103 Lr Lawrencium [262] +3



# 定性预测InSb的能带结构

- 带隙多少？已知： GaAs 1.42 eV , Sn <0.1 eV
- 导带底在 $\Gamma$ 点
- 有效质量多少？已知： GaAs电子0.063 $m$ 、轻空穴0.076 $m$ 、重空穴0.50 $m$
- 自旋-轨道耦合带分裂能？ 已知GaAs 0.34 eV

# 定性预测InSb的能带结构

- 带隙多少？已知： GaAs 1.42 eV , Sn <0.1 eV
  - InSb 0.18 eV
- 导带底在 $\Gamma$ 点
- 有效质量多少？已知： GaAs电子0.063m、轻空穴0.076m、重空穴0.50m
  - InSb电子0.0118m、轻空穴0.016m、重空穴~0.4m
- 自旋-轨道耦合带分裂能？已知GaAs 0.34 eV
  - InSb 0.9 eV

# InSb的能带结构

- 窄带隙0.18 eV
- 超低电子有效质量
- 较低空穴有效质量
- 独特的“锥形”导带结构
  - (课外知识) 导带-价带相互作用构成了“狄拉克锥” (Dirac cone)
- 独特的重空穴带结构

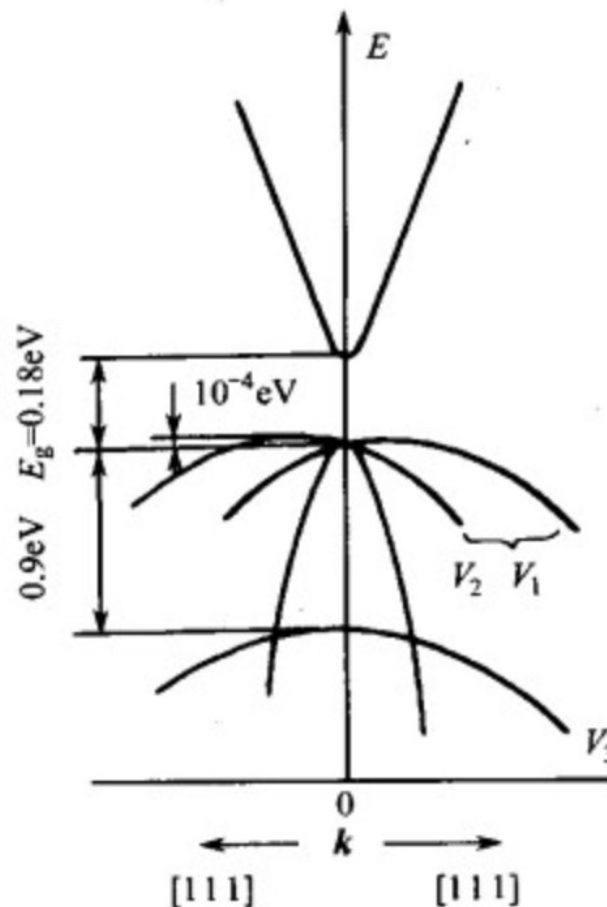


图 1-27 铟化锡能带结构示意图

# 极性晶体的特殊之处

- 在极性半导体中，由于自旋-轨道耦合，不同自旋的重空穴带分为两支，导致价带顶稍微偏离 $\Gamma$ 点
- 图中 $V_1$ 是重空穴带， $V_2$ 是轻空穴带， $V_3$ 是自旋-轨道耦合带
- （课外知识）自旋-轨道耦合有三个效应：  
Rashba, Dresselhaus, Zeeman

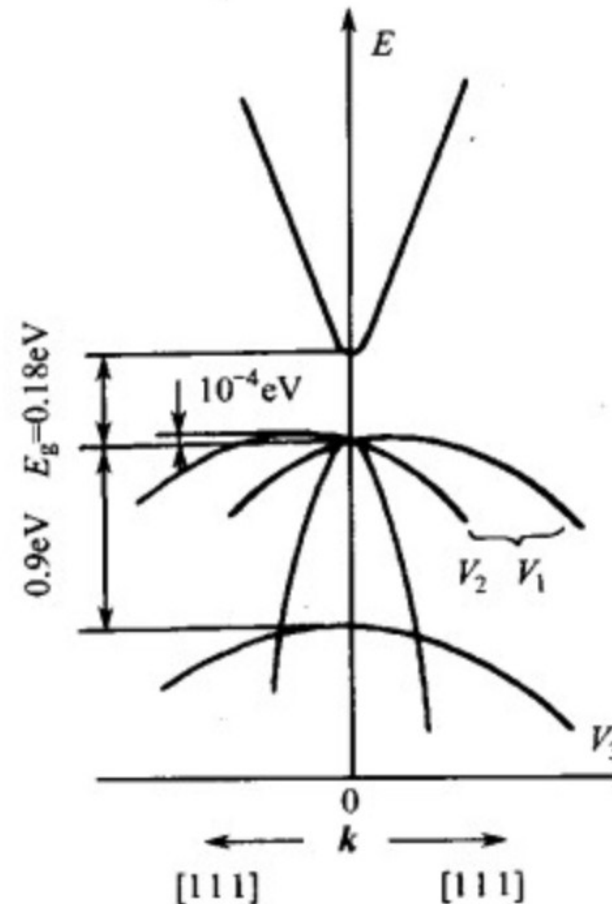


图 1-27 锑化铟能带结构示意图

J Phys Chem Solids 1, 249 (1957).

## 第二部分：能带结构

- 晶体能带的严谨处理方法
- **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

# 半导体材料的能带结构

IV族单质：C（金刚石）、  
Si、Ge

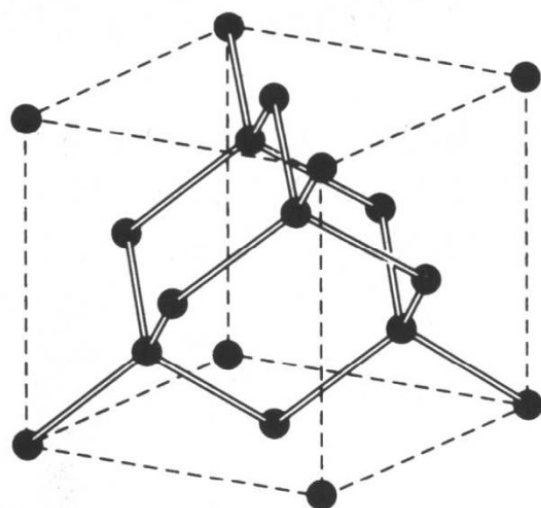


图 23 金刚石型晶体结构。图中显示了四面体键合的排列方式。

金刚石结构

IV、III-V、II-VI族化合物：  
SiC、GaAs、InSb、ZnS等

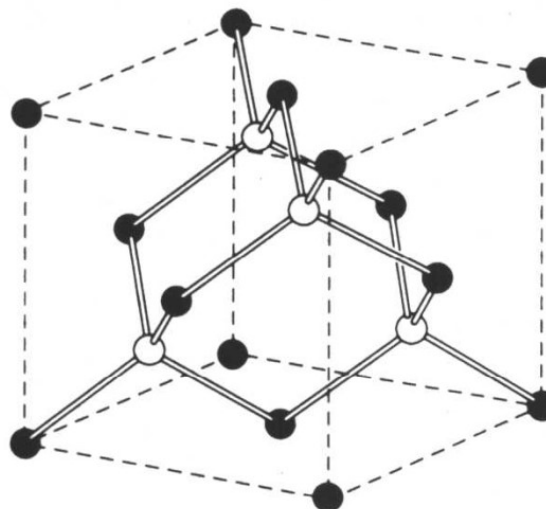


图 24 立方硫化锌的晶体结构。

立方闪锌矿结构

IV、III-V、II-VI族化合物：  
SiC、GaN、ZnO、ZnS等

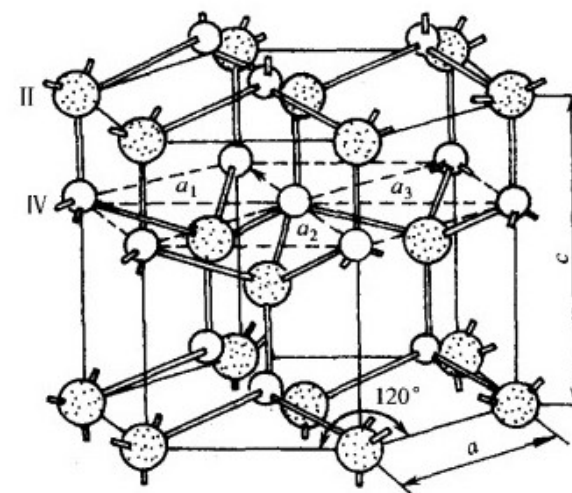


图 1-3 纤锌矿型结构

六方纤锌矿结构

已知晶体结构，如何得出能带结构？

# 纤锌矿能带结构: GaN

## The Periodic Table of Elements

1	2											13	14	15	16	17	18
1 H Hydrogen 1.008												5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.998	10 Ne Neon 20.180
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012											13 Al Aluminium 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948
11 Na Sodium 22.990	12 Mg Magnesium 24.305											13 Al Aluminium 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.098	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.956	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.942	24 Cr Chromium 51.996	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.693	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.631	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.971	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 84.798
37 Rb Rubidium 85.468	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.95	43 Tc Technetium 98.907	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.906	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.868	48 Cd Cadmium 112.414	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.711	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.904	54 Xe Xenon 131.294
55 Cs Cesium 132.905	56 Ba Barium 137.328	57-71 *	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.948	74 W Tungsten 183.85	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinum 195.08	79 Au Gold 196.967	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.383	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980	84 Po Polonium [208.982]	85 At Astatine 209.987	86 Rn Radon 222.018
87 Fr Francium 223.020	88 Ra Radium 226.025	89-103 **	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [269]	109 Mt Meitnerium [278]	110 Ds Darmstadtium [281]	111 Rg Roentgenium [280]	112 Cn Copernicium [285]	113 Nh Nihonium [286]	114 Fl Flerovium [289]	115 Mc Moscovium [289]	116 Lv Livermorium [293]	117 Ts Tennessine [294]	118 Og Oganesson [294]
Lanthanide Series *		57 La Lanthanum 138.905	58 Ce Cerium 140.116	59 Pr Praseodymium 140.908	60 Nd Neodymium 144.243	61 Pm Promethium 144.913	62 Sm Samarium 150.36	63 Eu Europium 151.964	64 Gd Gadolinium 157.25	65 Tb Terbium 158.925	66 Dy Dysprosium 162.500	67 Ho Holmium 164.930	68 Er Erbium 167.259	69 Tm Thulium 168.934	70 Yb Ytterbium 173.055	71 Lu Lutetium 174.967	
Actinide Series **		89 Ac Actinium 227.028	90 Th Thorium 232.038	91 Pa Protactinium 231.036	92 U Uranium 238.029	93 Np Neptunium 237.048	94 Pu Plutonium 244.064	95 Am Americium 243.061	96 Cm Curium 247.070	97 Bk Berkelium 247.070	98 Cf Californium 251.080	99 Es Einsteinium [254]	100 Fm Fermium 257.095	101 Md Mendelevium 258.1	102 No Nobelium 259.101	103 Lr Lawrencium [262]	

# 硅能带：紧束缚近似

- 利用原子轨道线性组合，得到波函数，近似满足薛定谔方程

$$\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{8N}} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \left( \sum_{j=1}^4 \alpha_{jk} \psi_{sp^3-\alpha}(x - \mathbf{R}) + \sum_{j=1}^4 \beta_{jk} \psi_{sp^3-\beta_j}(x - \mathbf{R}) \right)$$

归一化系数

“波形”式线性组合

硅原子 $\alpha$ 、 $\beta$ 的4个 $sp^3$ 轨道，可定义为 $\phi_k(x - \mathbf{R})$

- 求其平均能量

波函数和自己及相邻波函数的交叠

$$\int \psi_k(x, t)^* \hat{E} \psi_k(x, t) dV \sim \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \int \phi_k(x - \mathbf{R})^* \hat{H} \phi_k(x - \mathbf{R}) dV$$

纤锌矿晶体怎么处理？



# 闪锌矿和纤锌矿的不同

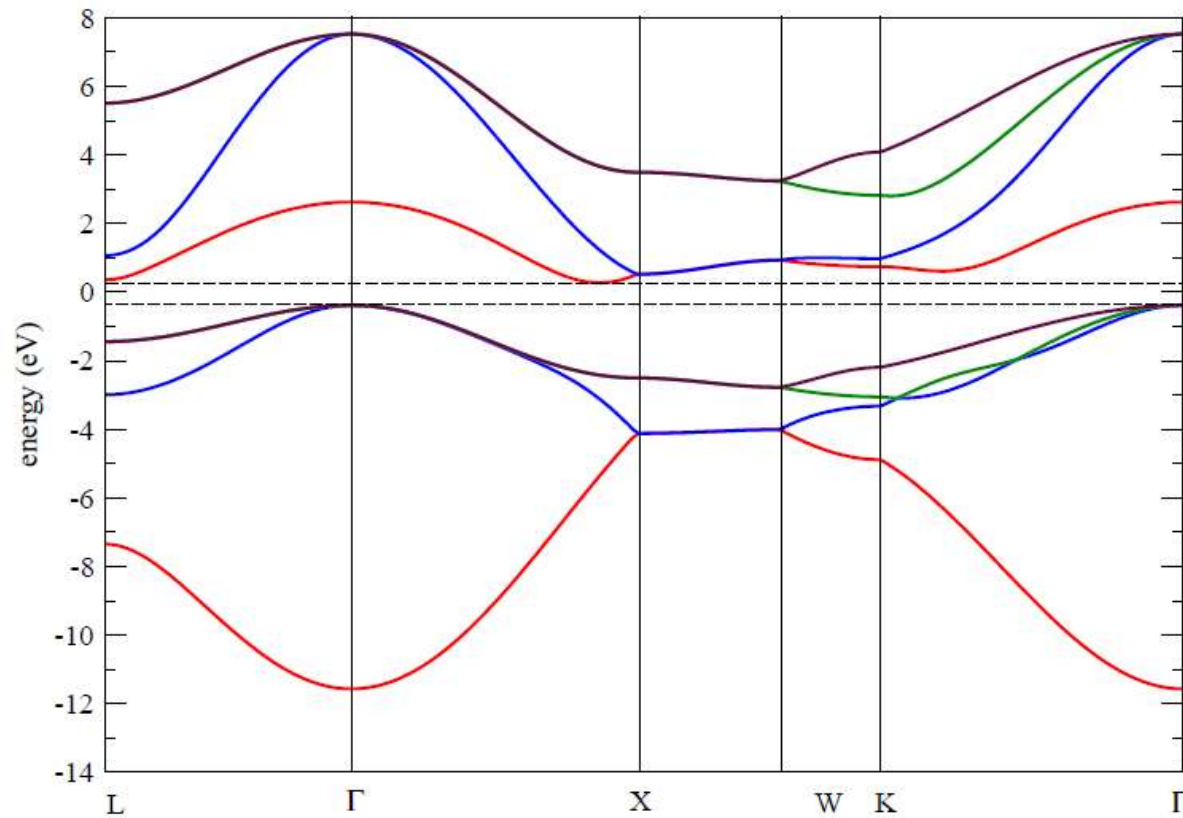
**Do all III-V compounds have the zinc-blende or wurtzite ground state structure?**

The traditional view of the structural stability of III-V compounds is based on the competition between the well-known zinc-blende (ZB) and wurtzite (W) phases. Theoretical and experimental works have revealed that the ZB and the W phases are the most common crystal structures of III-V compounds.<sup>1-5</sup> they differ structurally only in their third-nearest-neighbor atomic arrangement. Even the difference in total energy between these two phases is very small, giving strong evidence that both of them can be prepared experimentally.

M. Ferhat et al., Appl. Phys. Lett. 88, 161902 (2006).

# 硅能带：紧束缚近似

仅考虑硅原子、最近邻和次近邻的波函数交叠



能带已经和实验相符了

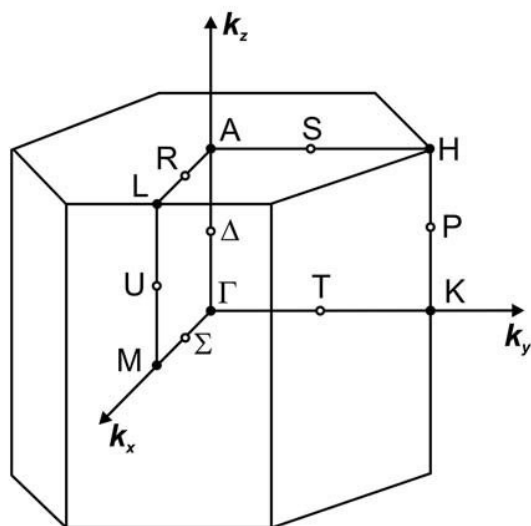
因此，纤锌矿能带和闪锌矿大致类似（细节有一定差异）

Figure 2.5: silicon bands cutting of on 2nd neighbors

<http://materia.fisica.unimi.it/manini/theses/cinquanta.pdf>

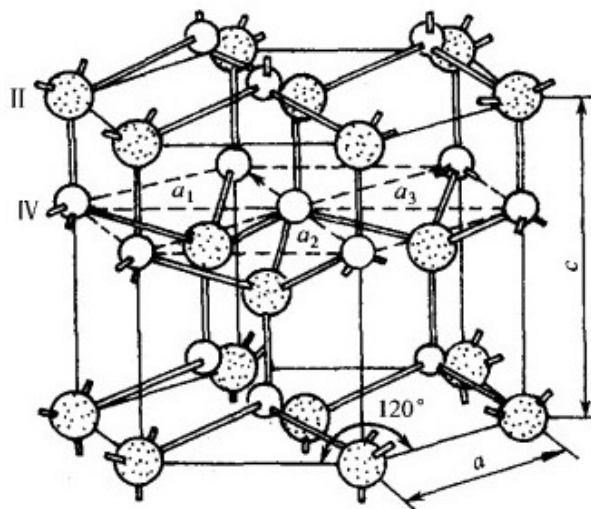
# 纤锌矿的布里渊区

纤锌矿布里渊区是怎样的？

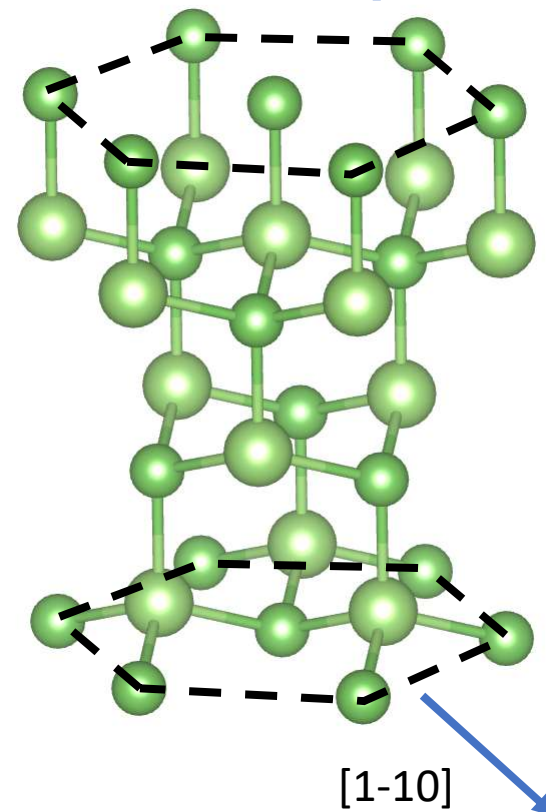


$\Gamma$ : 布里渊区中心  
 M: 侧面面心  
 K: 侧棱棱心  
 A: 顶面面心

GaN[001] ↑



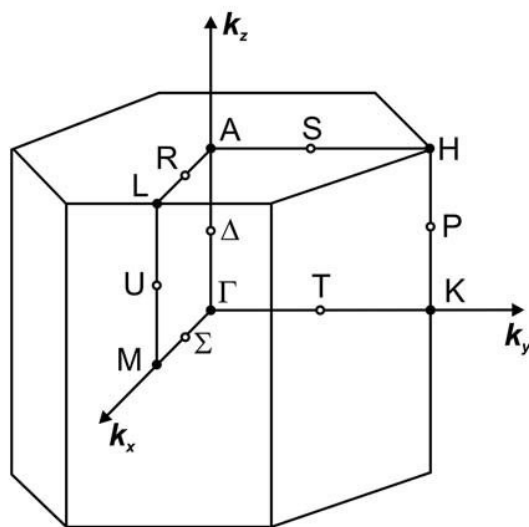
GaAs[111] ↑



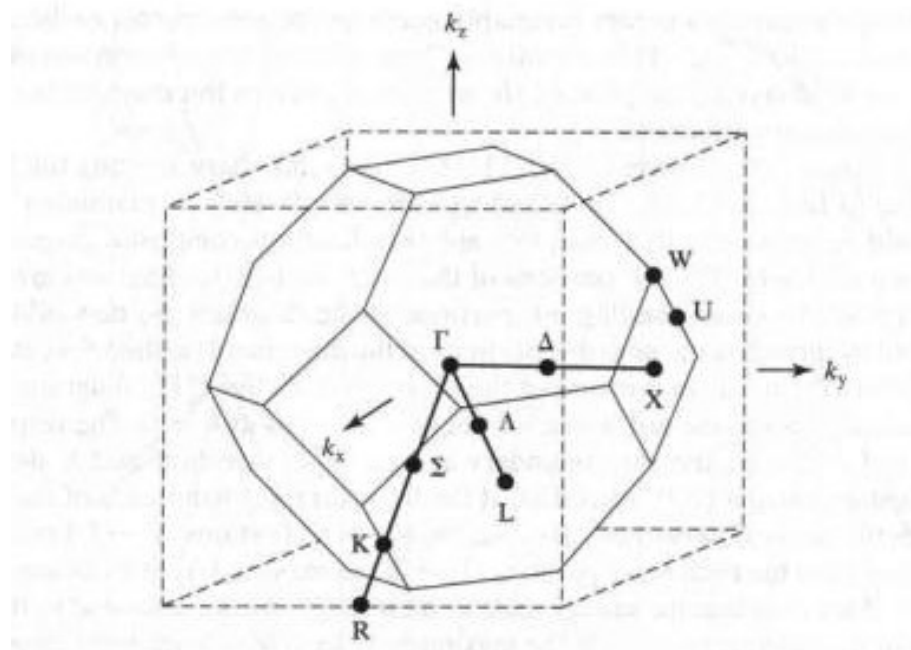
# 纤锌矿和闪锌矿的布里渊区

纤锌矿布里渊区如何和闪锌矿结构对应？

$\Gamma=\Gamma$ ,  $\Gamma A \sim \Gamma L$  ( $[111]$ 六方对称性),  $\Gamma M/\Gamma K \sim \Gamma K$  ( $[-110]$ 和 $[111]$ 垂直)



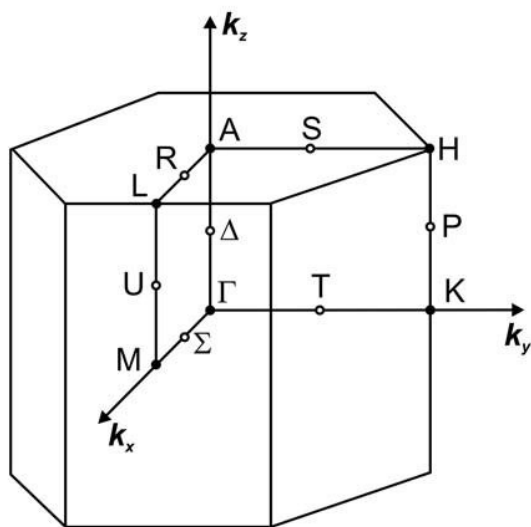
$\Gamma$ : 布里渊区中心  
 $M$ : 侧面面心  
 $K$ : 侧棱棱心  
 $A$ : 顶面面心



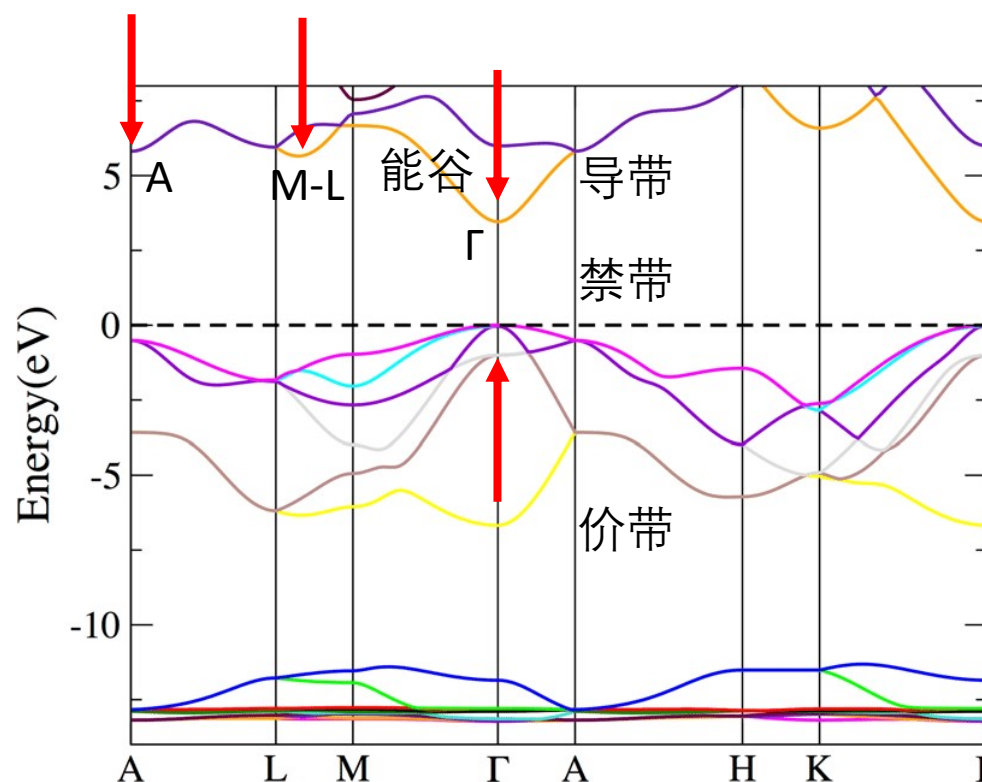
$\Gamma$ : 布里渊区中心  
 $\Gamma X$ :  $[100]$ 方向  
 $\Gamma K$ :  $[110]$ 方向  
 $\Gamma L$ :  $[111]$ 方向

# GaN的能带结构

同样有导带、价带和禁带；导带三种能谷，价带三个能带



$\Gamma$ : 布里渊区中心  
 M: 侧面面心  
 K: 侧棱棱心  
 A: 顶面面心



布里渊区如何和闪锌矿结构对应？

$\Gamma = \Gamma$ ,  $\Gamma A \sim \Gamma L$  ( $[111]$ 六方对称性),  $\Gamma M / \Gamma K \sim \Gamma K$  ( $[-110]$ 和 $[111]$ 垂直)

# GaN的能带结构和有效质量

- 导带底
  - $k=0$ 处 ( $\Gamma$ 点), 等能面是球面,  $m_n^* \sim 0.20m$
- 价带顶
  - $k=0$ 处 ( $\Gamma$ 点), 等能面在 $k$ 比较小时基本是球面; 比较大时是扭曲面
  - 重空穴带 ( $m_p^* \sim 1.4m$ )、轻空穴带 ( $0.3m$ )、由于自旋-轨道耦合而形成的第三个带 ( $0.6m$ )
- 室温下  $E_g = 3.39 \text{ eV}$

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1 H Hydrogen 1.008	2 He Helium 4.003	3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012	5 B Boron 10.811	6 C Carbon 12.011	7 N Nitrogen 14.007	8 O Oxygen 15.999	9 F Fluorine 18.998	10 Ne Neon 20.180	11 Na Sodium 22.990	12 Mg Magnesium 24.305	13 Al Aluminum 26.982	14 Si Silicon 28.086	15 P Phosphorus 30.974	16 S Sulfur 32.066	17 Cl Chlorine 35.453	18 Ar Argon 39.948
19 K Potassium 39.098	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.956	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.942	24 Cr Chromium 51.996	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.693	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.631	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.971	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 83.798
37 Rb Rubidium 85.468	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.95	43 Tc Technetium 98.907	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.906	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.868	48 Cd Cadmium 112.414	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.711	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.904	54 Xe Xenon 131.294
55 Cs Cesium 132.905	56 Ba Barium 137.328	57-71 *	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.948	74 W Tungsten 183.85	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinum 195.08	79 Au Gold 196.967	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.383	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980	84 Po Polonium [209]	85 At Astatine 209.987	86 Rn Radon 222.018
87 Fr Francium 223.020	88 Ra Radium 226.025	89-103 **	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [269]	109 Mt Meitnerium [278]	110 Ds Darmstadtium [281]	111 Rg Roentgenium [280]	112 Cn Copernicium [285]	113 Nh Nihonium [286]	114 Fl Flerovium [289]	115 Mc Moscovium [289]	116 Lv Livermorium [293]	117 Ts Tennessine [294]	118 Og Oganesson [294]

57 <b>La</b> Lanthanum 138.905	58 <b>Ce</b> Cerium 140.116	59 <b>Pr</b> Praseodymium 140.908	60 <b>Nd</b> Neodymium 144.243	61 <b>Pm</b> Promethium 144.913	62 <b>Sm</b> Samarium 150.36	63 <b>Eu</b> Europium 151.964	64 <b>Gd</b> Gadolinium 157.25	65 <b>Tb</b> Terbium 158.925	66 <b>Dy</b> Dysprosium 162.500	67 <b>Ho</b> Holmium 164.930	68 <b>Er</b> Erbium 167.259	69 <b>Tm</b> Thulium 168.934	70 <b>Yb</b> Ytterbium 173.055	71 <b>Lu</b> Lutetium 174.967
89 <b>Ac</b> Actinium 227.028	90 <b>Th</b> Thorium 232.038	91 <b>Pa</b> Protactinium 231.036	92 <b>U</b> Uranium 238.029	93 <b>Np</b> Neptunium 237.048	94 <b>Pu</b> Plutonium 244.064	95 <b>Am</b> Americium 243.061	96 <b>Cm</b> Curium 247.070	97 <b>Bk</b> Berkelium 247.070	98 <b>Cf</b> Californium 251.080	99 <b>Es</b> Einsteinium (254)	100 <b>Fm</b> Fermium 257.095	101 <b>Md</b> Mendelevium 258.1	102 <b>No</b> Nobelium 259.101	103 <b>Lr</b> Lawrencium 262

89 <sup>+3</sup> <b>Ac</b> Actinium 227.028	90 <sup>+4</sup> <b>Th</b> Thorium 232.038	91 <sup>+5</sup> <b>Pa</b> Protactinium 231.036	92 <sup>+6</sup> <b>U</b> Uranium 238.029	93 <sup>+5</sup> <b>Np</b> Neptunium 237.048	94 <sup>+4</sup> <b>Pu</b> Plutonium 244.064	95 <sup>+3</sup> <b>Am</b> Americium 243.061	96 <sup>+3</sup> <b>Cm</b> Curium 247.070	97 <sup>+3</sup> <b>Bk</b> Berkelium 247.070	98 <sup>+3</sup> <b>Cf</b> Californium 251.080	99 <sup>+3</sup> <b>Es</b> Einsteinium (254)	100 <sup>+3</sup> <b>Fm</b> Fermium 257.095	101 <sup>+3</sup> <b>Md</b> Mendelevium 258.1	102 <sup>+2</sup> <b>No</b> Nobelium 259.101	103 <sup>+1</sup> <b>Lr</b> Lawrencium 262
--	---	--	--	---	---	---	--	---	---	--	--	--	---	---



# GaN和Si比较

- 极性共价键-非极性共价键
- 离子键成分较大，展宽小
- 因此， GaN比起Si:
- 带隙宽 ( $3.39 \text{ eV} - 1.12 \text{ eV}$ )
  - 有效质量大 (例如: 轻空穴 $0.3m - 0.16m$ , 重空穴 $1.4m - 0.53m$ )
- 导带难以简单预测:  $\Gamma$ X轴上某处和 $\Gamma$ 点相对高低不同
  - 导带底电子有效质量无法直接比较



# GaN中的电子和空穴比较

- 导带底
  - $k=0$ 处 ( $\Gamma$ 点), 等能面是球面,  $0.20m$
- 价带顶
  - $k=0$ 处 ( $\Gamma$ 点), 等能面是球面
  - 重空穴带 ( $1.4m$ )、轻空穴带 ( $0.3m$ ) 、由于自旋-轨道耦合而形成的第三个带 ( $0.6m$ )
- 空穴比电子重很多的原因?
  - 价带、导带分别以什么原子轨道的组合为主?
  - 哪一种重叠多, 展宽大, 有效质量小?

## 第二部分：能带结构

- 晶体能带的严谨处理方法
- 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

# 半导体能带结构比较

纵向比较：从上到下原子序数增大，近邻原子波函数交叠更多，能带展宽更大

此时，带隙变小，相同k值附近有效质量降低                      远离：价带顶

	导带底	价带顶	带隙	电子纵	电子横	重空穴	轻空穴	3号带
金刚石								
Si	$\Gamma$ X某处	$\Gamma$	1.12	0.92	0.19	0.53	0.16	0.245
Ge	L	$\Gamma$	0.6	1.64	0.082	0.28	0.044	0.077
闪锌矿								
GaP	$\Gamma$ X某处	$\Gamma$	2.27	0.91	0.25	0.67	0.17	远离
InP	$\Gamma$	$\Gamma$	1.34	0.073		0.45	0.12	远离
GaAs	$\Gamma$	$\Gamma$	1.42	0.063		0.50	0.076	远离
InSb	$\Gamma$	$\Gamma$	0.18	0.0118		~0.4	0.016	远离
纤锌矿								
AlN	$\Gamma$	$\Gamma$	6.2	0.4		3.5-10	0.2-3.5	0.2-3.8
GaN	$\Gamma$	$\Gamma$	3.39	0.20		1.4	0.3	0.6

# 半导体能带结构比较

横向比较：从上到下键的极性增大

远离：价带顶

	导带底	价带顶	带隙	电子纵	电子横	重空穴	轻空穴	3号带
三周期								
Si	$\Gamma$ X某处	$\Gamma$	1.12	0.92	0.19	0.53	0.16	0.245
AlP	$\Gamma$ X某处	$\Gamma$	2.52	3.67	0.212	0.71	0.19	0.30
GaN	$\Gamma$	$\Gamma$	3.39	0.20		1.4	0.3	0.6
四周期								
Ge	L	$\Gamma$	0.6	1.64	0.082	0.28	0.044	0.077
GaAs	$\Gamma$	$\Gamma$	1.42	0.063		0.50	0.076	远离
ZnSe	$\Gamma$	$\Gamma$	2.60	0.2		>0.6	?	远离

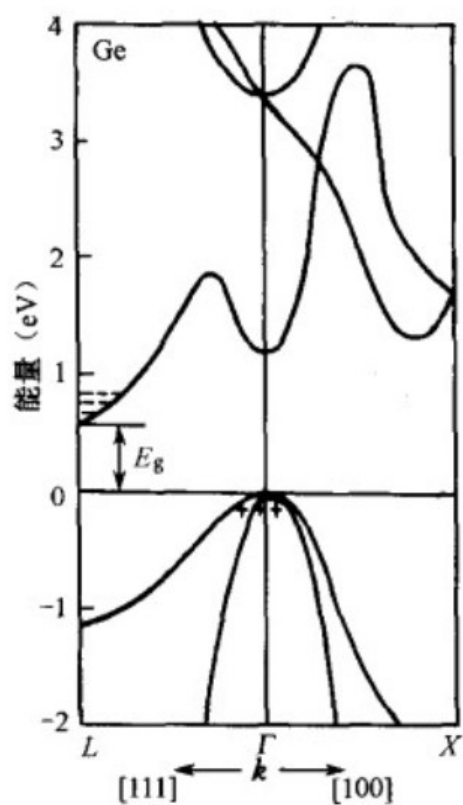
J. Appl. Phys. **89**, 5815 (2001).

键的极性增大，近邻原子波函数交叠造成的能带展宽更小

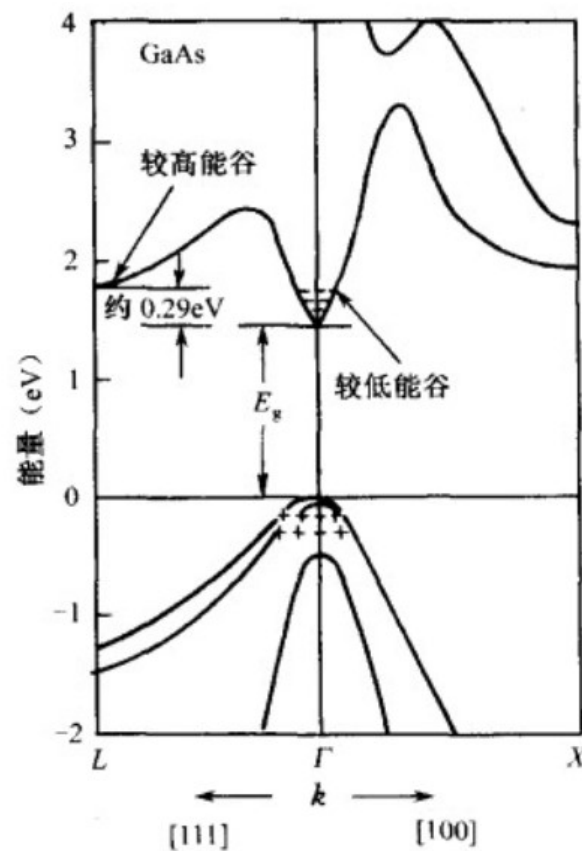
此时，带隙变大，相同k值附近有效质量提高

# 导带底、价带顶的相对位置

砷化镓：均在 $\Gamma$ 点； 锗：一个在L点一个在 $\Gamma$ 点



锗：L点低于 $\Gamma$ 点能量

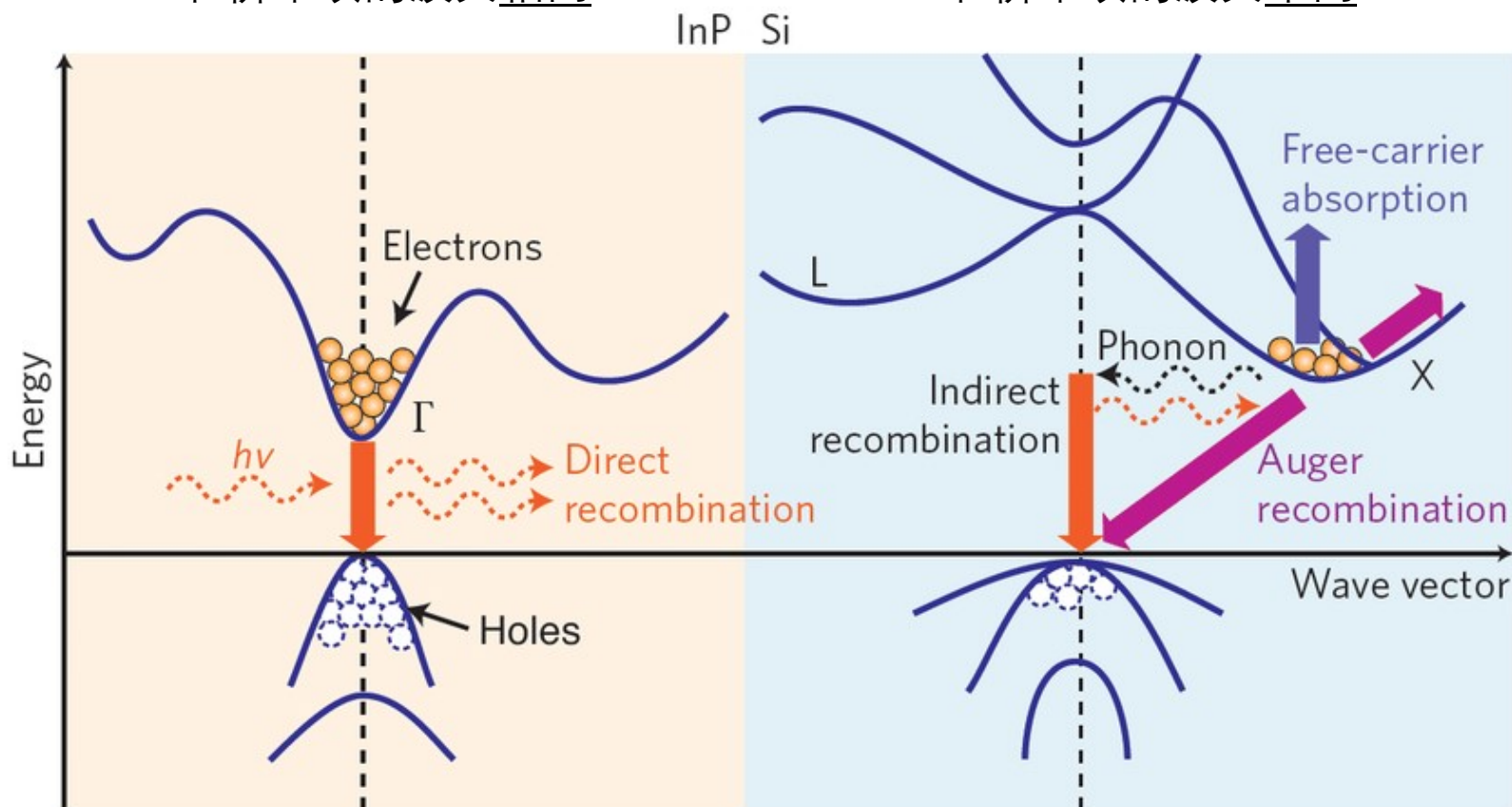


砷化镓： $\Gamma$ 点低于L点能量

# 直接带隙与间接带隙

直接带隙半导体：导带底  
和价带顶的波矢相同

间接带隙半导体：导带底  
和价带顶的波矢不同



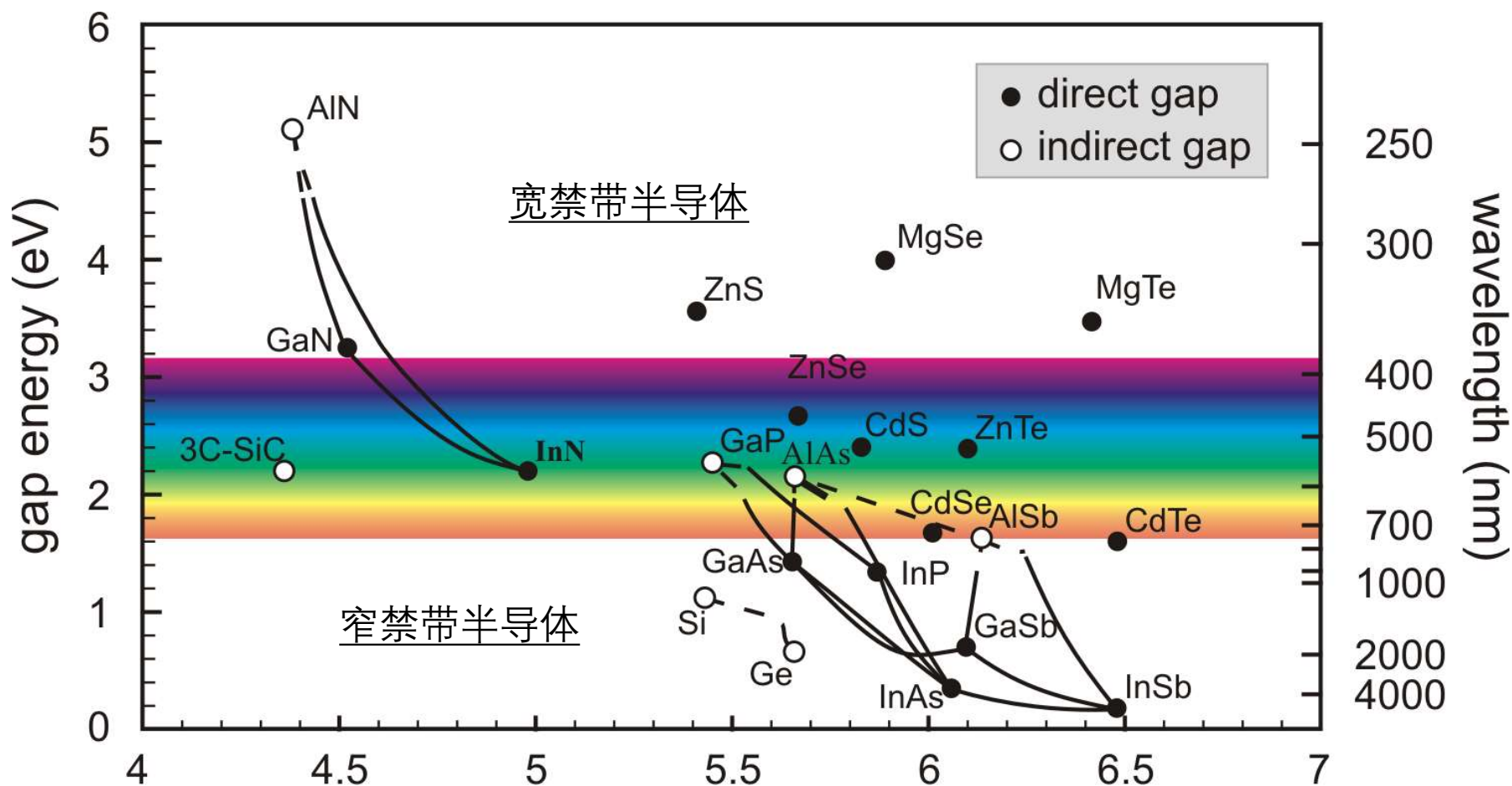
电子-空穴复合能发射光子

电子-空穴复合不能发射光子

# 常见半导体能带结构的规律

- 原子序数越大，化学键共价性越强，带隙越小
  - 此时，在相同波矢处有效质量越低
- 常见半导体的价带顶通常都位于 $\Gamma$ 点附近，导带底则不确定
  - IV族半导体通常为间接带隙
  - III-V族半导体除AlX和GaP为间接带隙以外，其它通常为直接带隙
  - II-VI族半导体通常为直接带隙
- 常见半导体的价带顶通常包含重空穴带、轻空穴带、自旋轨道耦合带，导带底通常只有一个带

# 半导体能带参数



晶格常数 lattice constant (Å)

Simone Montanari PhD 2005.

基本上可理解为波函数重叠的程度，或原子序数



The Periodic Table of Elements																	
1	2	<div> <div>Atomic Number</div> <div>Valence</div> <div>Symbol</div> <div>Element Name</div> <div>Atomic Mass (u)</div> </div>								<div>Alkali metals</div> <div>Alkaline earth metals</div> <div>Transition metals</div> <div>Post-transition metals</div> <div>Metalloid</div>							

Lanthanides

Actinides

Nonmetals

Halogens

Noble gases

$ns^2np^2$  $ns^2np^4$  $ns^2np^1$  $ns^2np^3$										18		1 H Hydrogen 1.008	2 He Helium 4.003																				
3 Li Lithium 6.941	4 Be Beryllium 9.012																																
11 Na Sodium 22.990	12 Mg Magnesium 24.305																																
19 K Potassium 39.098	20 Ca Calcium 40.078	21 Sc Scandium 44.956	22 Ti Titanium 47.88	23 V Vanadium 50.942	24 Cr Chromium 51.996	25 Mn Manganese 54.938	26 Fe Iron 55.845	27 Co Cobalt 58.933	28 Ni Nickel 58.693	29 Cu Copper 63.546	30 Zn Zinc 65.38	31 Ga Gallium 69.723	32 Ge Germanium 72.631	33 As Arsenic 74.922	34 Se Selenium 78.971	35 Br Bromine 79.904	36 Kr Krypton 84.998																
37 Rb Rubidium 85.468	38 Sr Strontium 87.62	39 Y Yttrium 88.906	40 Zr Zirconium 91.224	41 Nb Niobium 92.906	42 Mo Molybdenum 95.95	43 Tc Technetium 98.907	44 Ru Ruthenium 101.07	45 Rh Rhodium 102.906	46 Pd Palladium 106.42	47 Ag Silver 107.868	48 Cd Cadmium 112.414	49 In Indium 114.818	50 Sn Tin 118.711	51 Sb Antimony 121.760	52 Te Tellurium 127.6	53 I Iodine 126.904	54 Xe Xenon 131.294																
55 Cs Cesium 132.905	56 Ba Barium 137.328	57-71 \* Lanthanides	72 Hf Hafnium 178.49	73 Ta Tantalum 180.948	74 W Tungsten 183.85	75 Re Rhenium 186.207	76 Os Osmium 190.23	77 Ir Iridium 192.22	78 Pt Platinum 195.08	79 Au Gold 196.967	80 Hg Mercury 200.59	81 Tl Thallium 204.383	82 Pb Lead 207.2	83 Bi Bismuth 208.980	84 Po Polonium [208.982]	85 At Astatine 209.987	86 Rn Radon 222.018																
87 Fr Francium 223.020	88 Ra Radium 226.025	89-103 \*\* Actinides	104 Rf Rutherfordium [261]	105 Db Dubnium [262]	106 Sg Seaborgium [266]	107 Bh Bohrium [264]	108 Hs Hassium [269]	109 Mt Meitnerium [278]	110 Ds Darmstadtium [281]	111 Rg Roentgenium [280]	112 Cn Copernicium [285]	113 Nh Nihonium [286]	114 Fl Flerovium [289]	115 Mc Moscovium [289]	116 Lv Livermorium [293]	117 Ts Tennessine [294]	118 Og Oganesson [294]																

57 <sup>+3</sup> <b>La</b> Lanthanum 138.905	58 <sup>+4,+3</sup> <b>Ce</b> Cerium 140.116	59 <sup>+3</sup> <b>Pr</b> Praseodymium 140.908	60 <sup>+3</sup> <b>Nd</b> Neodymium 144.243	61 <sup>+3</sup> <b>Pm</b> Promethium 144.913	62 <sup>+3</sup> <b>Sm</b> Samarium 150.36	63 <sup>+3,+2</sup> <b>Eu</b> Europium 151.964	64 <sup>+3</sup> <b>Gd</b> Gadolinium 157.25	65 <sup>+3</sup> <b>Tb</b> Terbium 158.925	66 <sup>+3</sup> <b>Dy</b> Dysprosium 162.500	67 <sup>+3</sup> <b>Ho</b> Holmium 164.930	68 <sup>+3</sup> <b>Er</b> Erbium 167.259	69 <sup>+3</sup> <b>Tm</b> Thulium 168.934	70 <sup>+3</sup> <b>Yb</b> Ytterbium 173.055	71 <sup>+3</sup> <b>Lu</b> Lutetium 174.967
---	---	--	---	--	---	---	---	---	--	---	--	---	---	--

89 <sup>+3</sup> <b>Ac</b> Actinium 227.028	90 <sup>+4</sup> <b>Th</b> Thorium 232.038	91 <sup>+5</sup> <b>Pa</b> Protactinium 231.036	92 <sup>+6</sup> <b>U</b> Uranium 238.029	93 <sup>+5</sup> <b>Np</b> Neptunium 237.044	94 <sup>+4</sup> <b>Pu</b> Plutonium 244.064	95 <sup>+3</sup> <b>Am</b> Americium 243.061	96 <sup>+3</sup> <b>Cm</b> Curium 247.070	97 <sup>+3</sup> <b>Bk</b> Berkelium 247.070	98 <sup>+3</sup> <b>Cf</b> Californium 251.080	99 <sup>+3</sup> <b>Es</b> Einsteinium (254)	100 <sup>+3</sup> <b>Fm</b> Fermium 257.095	101 <sup>+3</sup> <b>Md</b> Mendelevium 258.1	102 <sup>+2</sup> <b>No</b> Nobelium 259.101	103 <sup>+1</sup> <b>Lr</b> Lawrencium 262
--	---	--	--	---	---	---	--	---	---	---	--	--	---	---

# 电负性表

Group (vertical)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period (horizontal)																		
1	H 2.20																	He
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
5	Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60
6	Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2
7	Fr 0.7	Ra 0.9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lanthanides	*	La 1.1	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.2	Tb 1.1	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1	Lu 1.27		
Actinides	**	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.13	Cm 1.28	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3	Lr 1.291		

Periodic table of electronegativity using the Pauling scale

# 为什么NaCl不是半导体？

- 一个主要原因：
- I-VII族电负性差值特别大，为离子晶体
- 离子晶体：离子键（库仑力）
- 化学键强极性
- 能带没有展宽（或展宽不明显）
- 有效质量特别高
- 电子/空穴载流能力极低

# 导体、半导体、绝缘体的区别

都是物质里的电子，为什么有的容易运动有些不容易运动？

1.能带填充有区别； 2.有效质量不同

为什么有些纯半导体那么绝缘？

