课程信息

• 第六次作业:

- 1. 阅读黄昆《固体物理》第六章6-1小节、第七章7-1至7-3小结,胡老师讲义3-3,3-4,4-1至4-4小节,并解释以下重要概念:回旋共振,空穴,直接(间接)带隙半导体,本征光吸收,吸收边,带边有效质量,施主,受主,n型半导体,p型半导体;
- 2. **理想晶体中**,当无外场时,晶体中的电子在实空间与k空间分别做怎样的运动?
- 3. 理想晶体中,存在恒定外场时,晶体中的电子在实空间与k空间分别做怎样的运动?
- 4. 画出直接带隙半导体与间接带隙半导体的光吸收过程示意图;

5. 某种一维理想晶体的电子能量E与波矢k间的函数关系可表示为:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2} \left(\frac{3}{4} - \cos ka + \frac{1}{4}\cos 2ka\right)$$

试求:

- 1) 电子速度的表达式;
- 2) 电子在能量极小处的有效质量

3. 自由电子情况的量子理论(不作要求)

无磁场时自由电子哈密顿量
$$\mathcal{H} = \frac{\bar{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

有磁场时
$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} (\vec{p} + q\vec{A})^2$$

$$\hat{p}_{x} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \ \hat{p}_{y} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \ \hat{p}_{z} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} [(\hat{p}_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2]$$

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} [(\hat{p}_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2]$$

因为哈密顿量不含x, z $\begin{cases} [\mathcal{H} \ \hat{p}_x] = 0 \\ [\mathcal{H} \ \hat{p}_z] = 0 \end{cases}$

选波函数为 (\hat{p}_x, \hat{p}_z) 本征态 $\begin{cases} \hat{p}_x \psi = \hbar k_x \psi \\ \hat{p}_z \psi = \hbar k_z \psi \end{cases}$

波函数
$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} \phi(y)$$

$$\frac{1}{2m}[(\hat{p}_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2]\psi = E\psi$$

得到
$$\frac{1}{2m}[(\hbar k_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hbar^2 k_z^2]\phi(y) = E\phi(y)$$

$$\hat{p}_{y} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \longrightarrow \hat{p}_{y}^{2} = -\hbar^{2} \frac{\partial^{2}}{\partial y^{2}}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m}{2} (\frac{qB}{m})^2 (\frac{\hbar}{qB} k_x - y)^2 \right] \phi(y) = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \phi(y)$$

$$\Rightarrow \omega_0 = \frac{qB}{m}, \quad y_0 = \frac{\hbar}{qB} k_x, \quad \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m}{2}\omega_0^2(y - y_0)^2\right]\phi(y) = \varepsilon\phi(y)$$

——简谐振子方程

简谐振子波函数
$$\phi(y-y_0) \cong e^{-\frac{1}{2}\omega_0(y-y_0)^2} H_n[\omega_0(y-y_0)]$$

能量本征值
$$\varepsilon_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$$

在磁场中自由电子的波函数

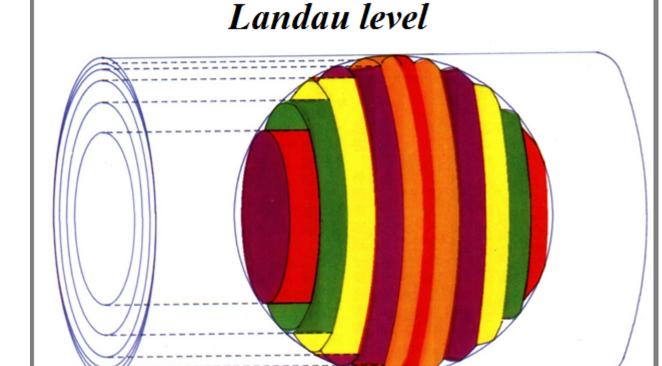
$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-\frac{1}{2}\omega_0(y - y_0)^2} H_n[\omega_0(y - y_0)]$$

能量本征值

$$E = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

- —— 在(x,y)平面内的圆周运动对应一种简谐振荡,能量是量子化的
 - —— 这些量子化的能级称为朗道能级

能量本征值
$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$



朗道能级

- 4. 晶体中电子的有效质量近似
- —— 晶体中电子在磁场中的运动时,其哈密顿量

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} + q\vec{A})^2 + V(\vec{r})$$

- ——将周期性势场的影响概括为有效质量的变化
- ——有效质量近似方法

哈密顿量
$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} + q\vec{A})^2$$

- —— 半导体中能带底和能带顶附近采用有效质量近似处理
- —— 碱金属也可以采用有效质量近似

—— 采用有效质量近似后,晶体中电子在磁场中的运动变为自由电子在磁场中的运动,前面的结果中将电子的质量m用有效质量m*代替

磁场中自由电子的波函数

$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-\frac{1}{2}\omega_0(y - y_0)^2} H_n[\omega_0(y - y_0)]$$

能量本征值
$$E = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

回转频率
$$\omega_0 = \frac{qB}{m^*}$$

§ 5.5 回旋共振

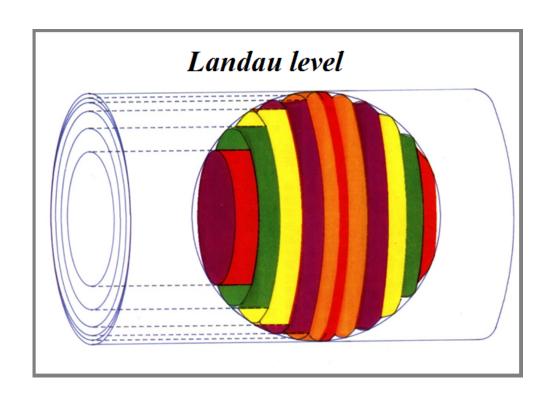
—— 晶体中电子在磁场中的运动时,采用有效质量近似后电子做螺旋运动

—— 回转频率
$$\omega_0 = \frac{qB}{m^*}$$

—— 能量本征值

$$E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$$

—— 朗道能级



—— 在垂直于磁场的方向施加一个交变电场,当

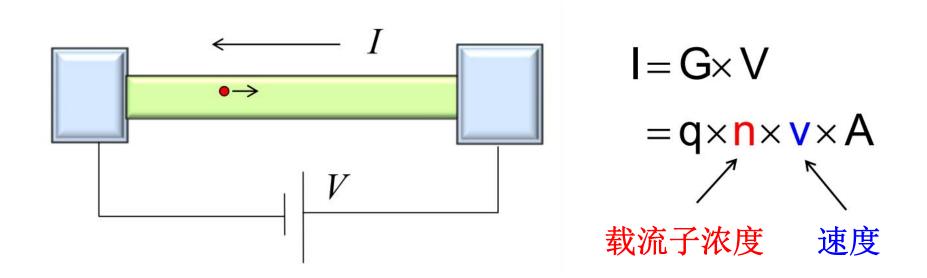
$$\omega = \omega_0 = \frac{qB}{m^*}$$
 电子将吸收交变电场的能量

- —— 电子发生共振吸收,称为回旋共振
- —— 电子吸收电场的能量,电子实现了从一个朗道能级跃 迁到更高能量的朗道能级上
- —— 半导体材料中能带底和能带顶附近,电子的有效质量不同,具有不同的回旋共振频率
- —— 通过测量回旋共振频率,可以确定电子的有效质量

第六章

半导体电子论

研究半导体的目标



载流子浓度: 大量电子(或空穴)系统的统计分布

速度: 随外加电场的漂移 + 声子及杂质的散射

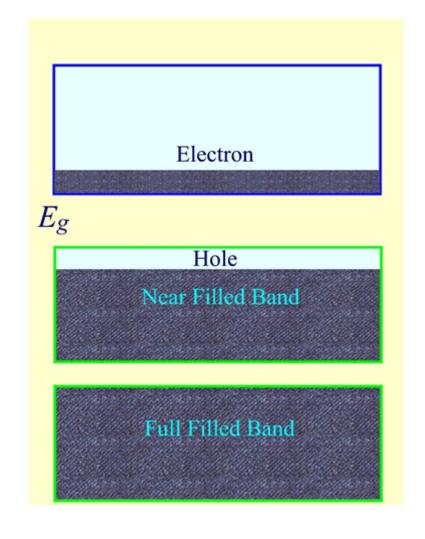
半导体的导电性受杂质、光照、温度等多种因素影响

§ 6.1 半导体的基本能带结构

—— 一般温度下,由于热 激发价带顶部有少量的<mark>空穴</mark>, 导带底部有少量的电子

—— 电子和空穴是半导体中的<mark>载流子</mark>,决定了半导体的导电能力

半导体的能带



1. 半导体的带隙

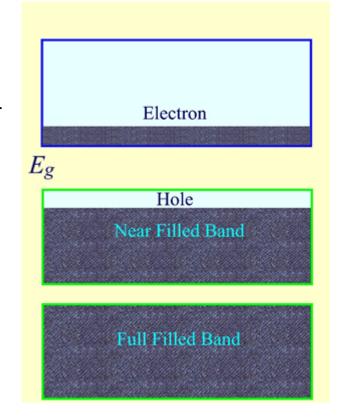
本征光吸收 —— 光照将价带中的电子激发到导带中

形成电子 — 空穴对

光子的能量满足
$$\hbar\omega \geq E_g$$
 $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$

$$\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} \ge E_g$$

长波极限
$$\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar c}{E_g}$$



—— 本征吸收边,发生本征光吸收的最大光的波长

本征边附近光的跃迁

1) 竖直跃迁 —— 直接带隙半导体

k空间电子吸收光子从价带顶部 \bar{k} 跃迁到导带底部 \bar{k} 状态

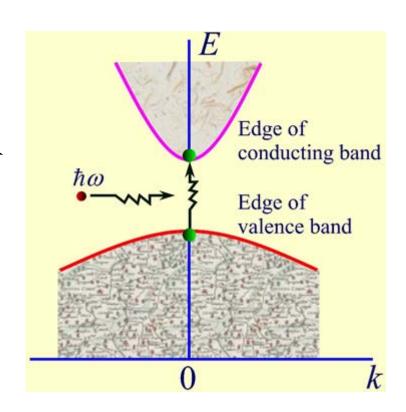
满足能量守恒 $\hbar\omega = E_g$

满足准动量守恒的选择定则

$$\hbar \vec{k}$$
' – $\hbar \vec{k} = \vec{p}_{photon}$ $\hbar \vec{k}$ ' $\approx \hbar \vec{k}$

价带顶部电子的波矢 $\frac{2\pi}{a} \sim 10^8 \text{ cm}^{-1}$

光子的波矢 $\frac{2\pi}{\lambda} \sim 10^4 \text{ cm}^{-1}$



准动量守恒的选择定则 $h\vec{k}' \approx h\vec{k}$

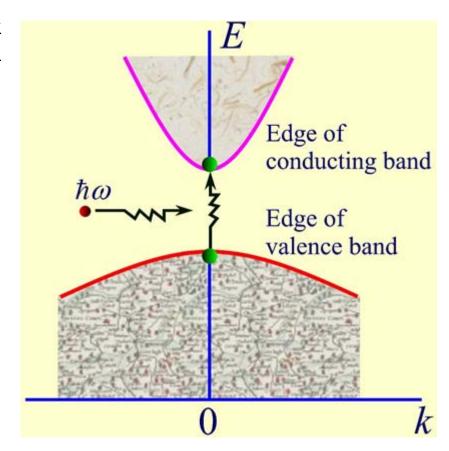
—— 跃迁的过程中,电子的波矢可以看作是不变的

在能带的图示上,初态和末态 几乎在一条竖直线上,价带顶 和导带底处于k空间的同一点

- —— 称为竖直跃迁
- —— 直接带隙半导体

直接带隙半导体

GaAs, InSb



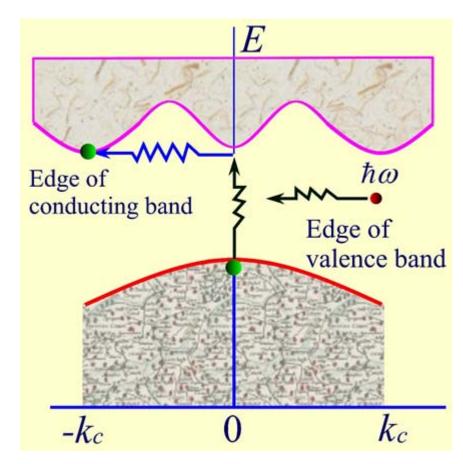
2) 非竖直跃迁 —— 间接带隙半导体

k空间电子吸收光子从价带顶部 \vec{k} 跃迁到导带底部 \vec{k} 状态

且
$$|\vec{k}'| \neq |\vec{k}|$$
过程满足能量守恒

—— 单纯吸收光子不能使电子由价带顶跃迁到导带底, 电子在吸收光子的同时伴随 着吸收或者发出一个声子

能量守恒 $\Delta E_{k} = \hbar \omega \pm \hbar \Omega$



声子的能量 $\hbar\Omega \sim k_B \Theta_T \sim 10^{-2} \ eV$ —— 可忽略不计

能量守恒 $\Delta E_k = \hbar \omega \pm \hbar \Omega$

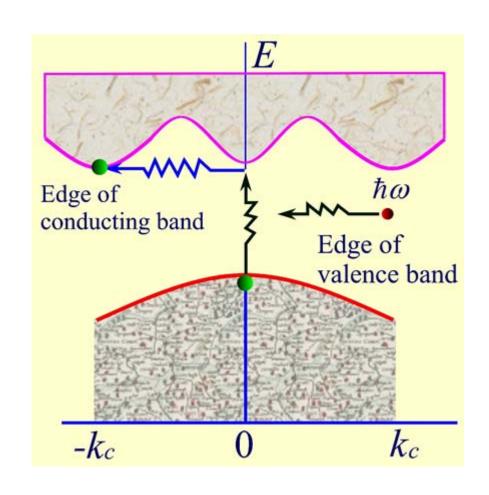
 $\Delta E_{k} \approx \hbar \omega$

准动量守恒的选择定则

$$\hbar \vec{k} \; '\!\!-\! \hbar \vec{k} = \vec{p}_{\it photon} \pm \hbar \vec{q}$$

—— 声子的准动量 *ħq*和电子的准动量数量相仿,不计光子的动量

$$\hbar \vec{k} - \hbar \vec{k} = \pm \hbar \vec{q}$$



—— 非竖直跃迁过程中,光子提供电子跃迁所需的能量, 声子提供跃迁所需的动量

$$\Delta E_k \approx \hbar \omega$$
 $\hbar \vec{k} - \hbar \vec{k} = \pm \hbar \vec{q}$

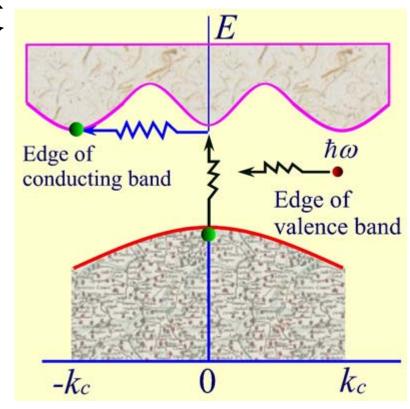
非竖直跃迁是一个二级过程,发生几率比起竖直跃迁小得多

—— 间接带隙半导体

间接带隙半导体 Ge, Si

零带隙半导体 $\alpha-Sn$

—— 带隙宽度为零



- —— 半导体带隙宽度和类别可以通过本征光吸收进行测定
- —— 用电导率随温度的变化来测定

电子一空穴对复合发光

本征光吸收的逆过程

—— 导带底部的电子跃迁 到价带顶部的空能级,发出 能量约为带隙宽度的光子

