课程信息

- **期中考试：**

1. **时间待定**，形式有望采取线下闭卷模式；

2. 考试范围：前七章（第六章6-1、第七章到7-3小节）

3. 考试内容：概念与物理图像（70分）+ 问答与计算题（30分）

4. 复习重点：课后作业、课堂测试、课上问题、书与讲义

5.成绩组成：10%章节测试+10%作业+10%大作业+**26%期中考试**
+44%期末考试

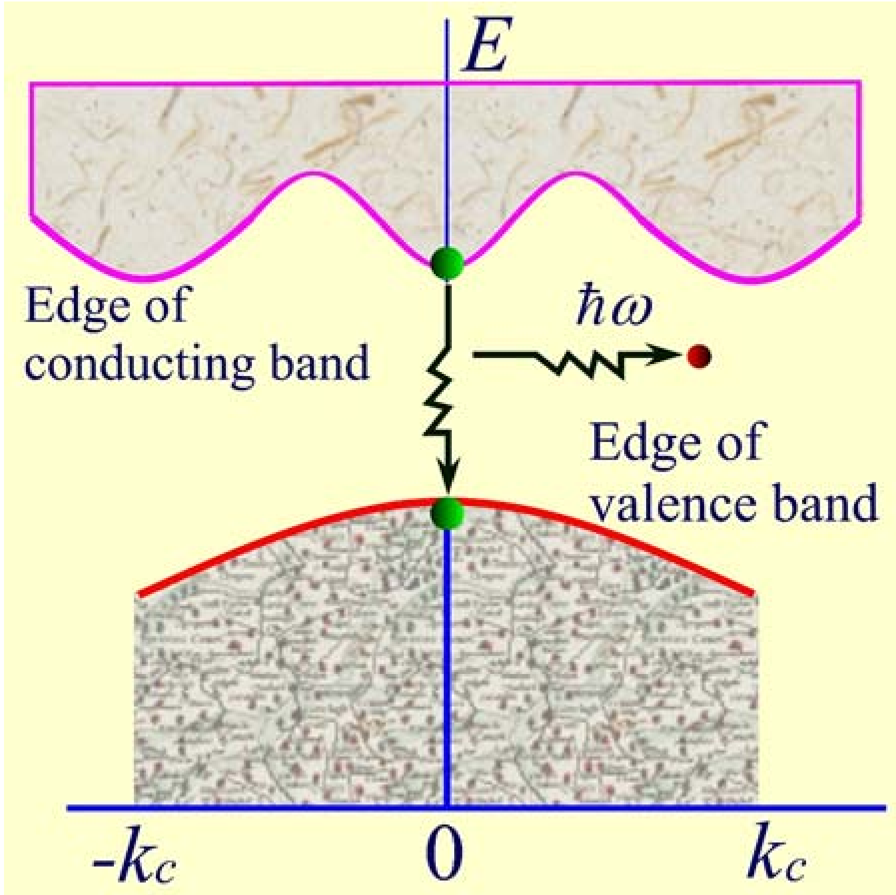
—— 半导体带隙宽度和类别可以通过本征光吸收进行测定

—— 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

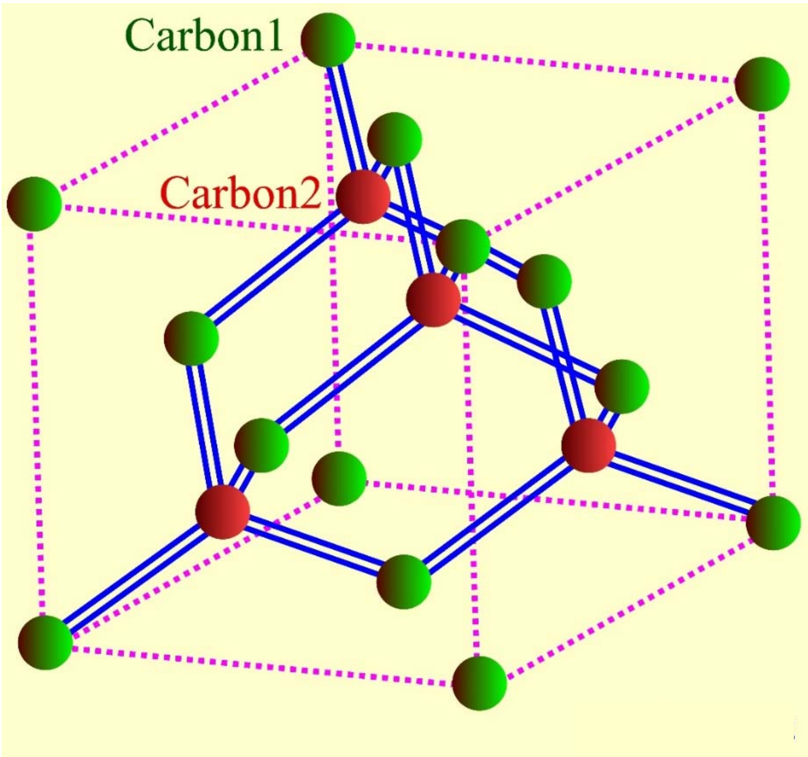
—— 导带底部的电子跃迁到价带顶部的空能级，发出能量约为带隙宽度的光子

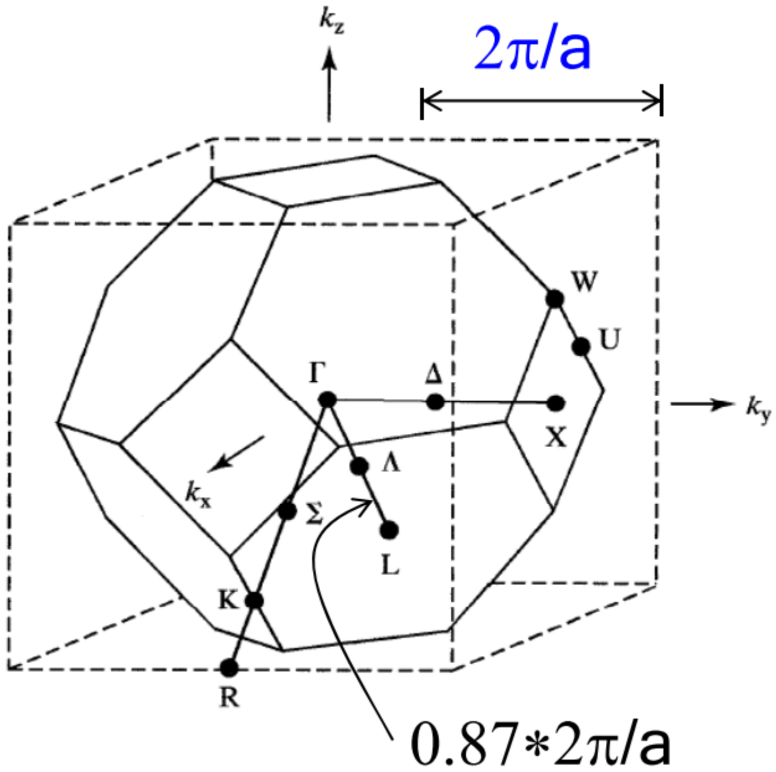


真实半导体的能带

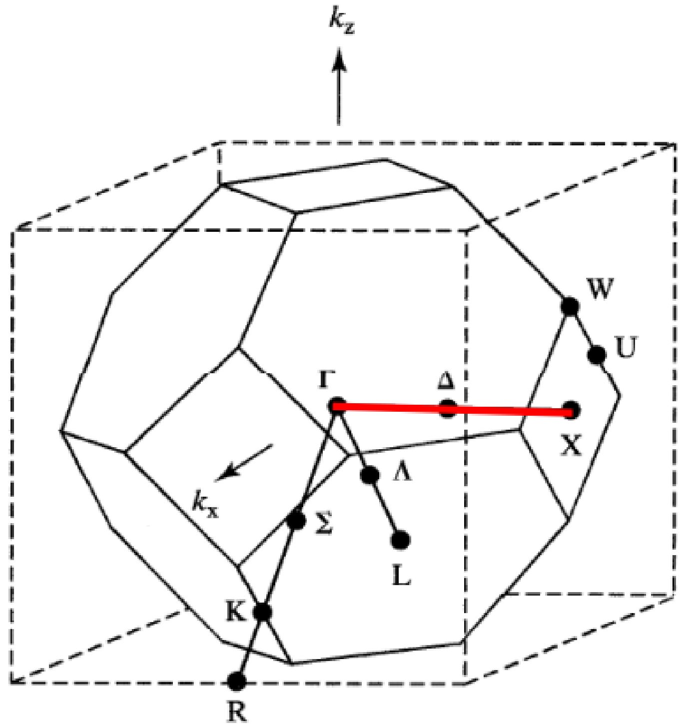
实空间晶格：**FCC**
(Si, Ge, GaAs)

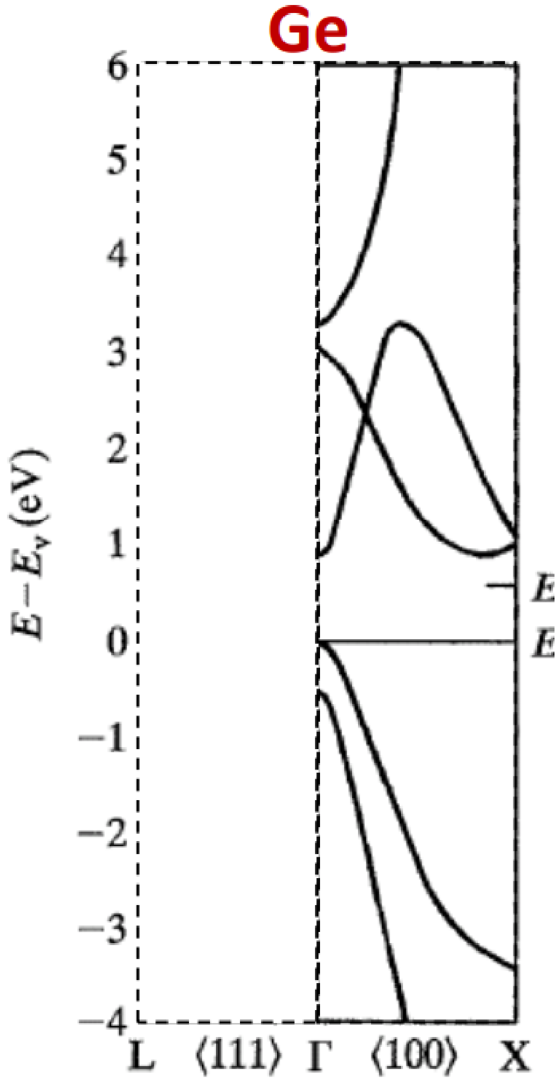
倒空间晶格：**BCC**
第一布里渊区：**14**面体



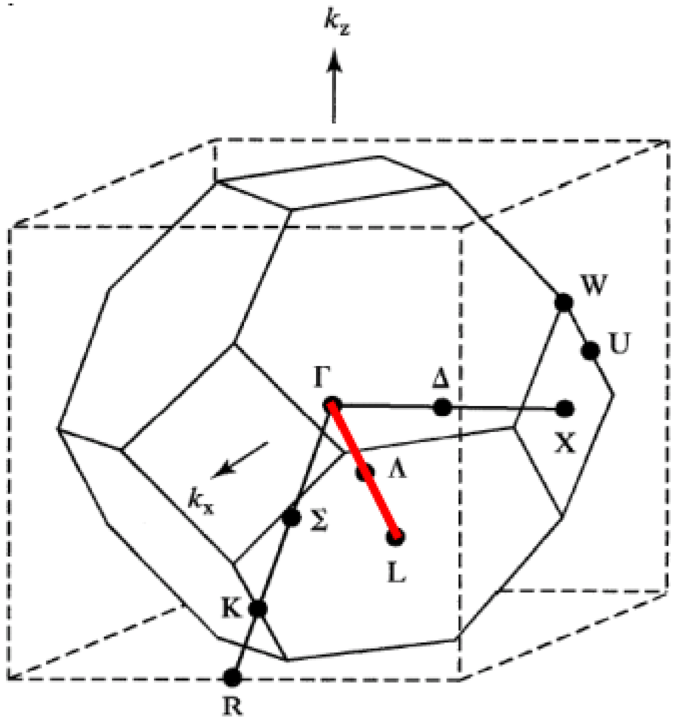


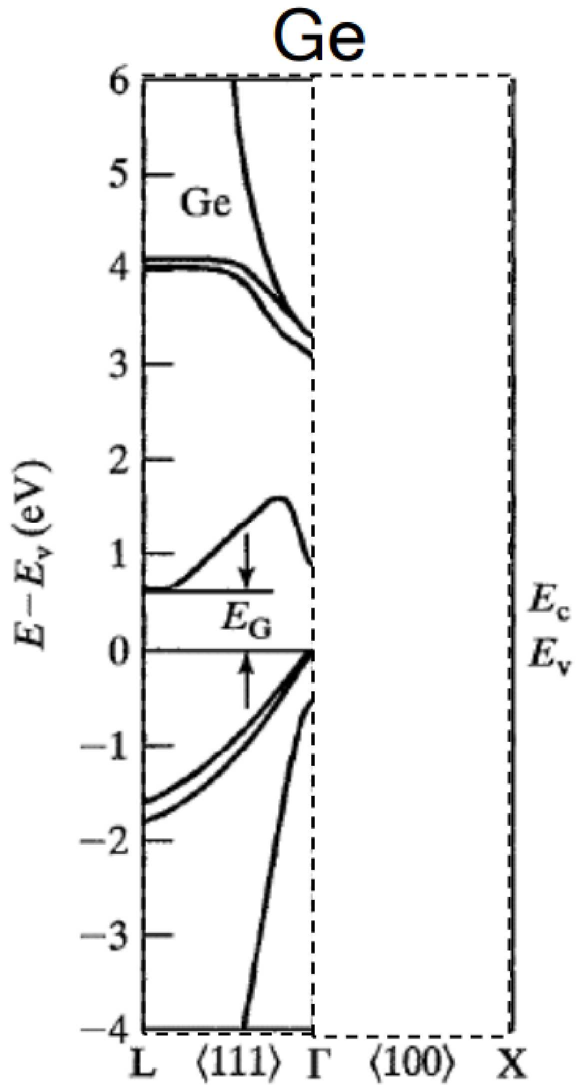
沿Γ-X轴的E-k关系



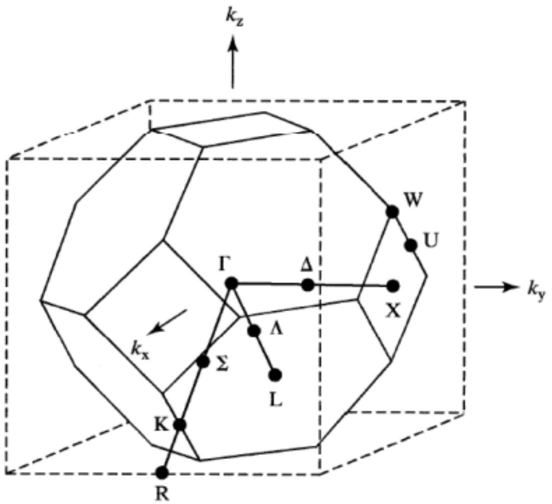


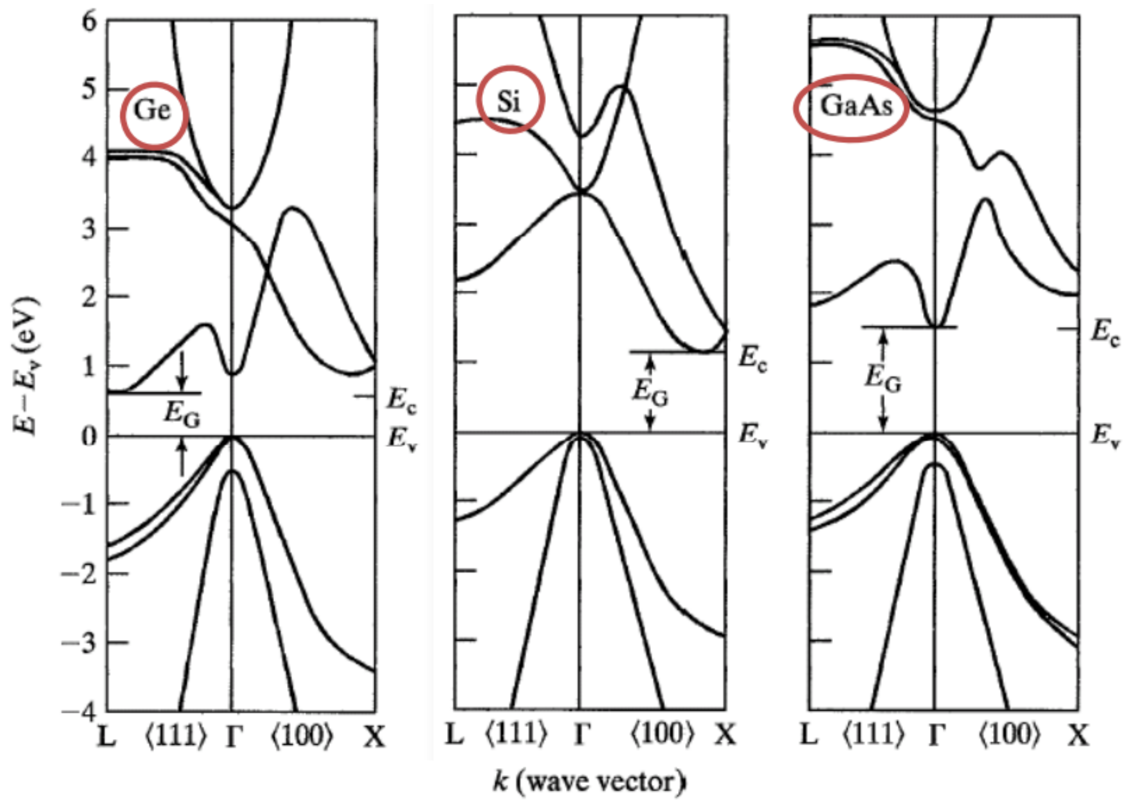
沿Γ-L轴的E-k关系





常见半导体的能带图





价带顶存在能量简并

Si，Ge为间接带隙半导体，GaAs为直接带隙半导体

导带底的能谷数：Ge: 8 L valleys, Si: 6 X valleys, and GaAs: 1 Γ valleys

2. 带边有效质量

半导体基本参数之一

—— 导带底附近电子的有效质量和价带顶附近空穴有效质量

将电子能量 $E(\vec{k})$ 按极值波矢 $\vec{k}_0$ 展开

$$E(\vec{k}) \approx E(\vec{k}_0) + \boxed{[\nabla_k E(\vec{k})]_{\vec{k}_0}(\vec{k}-\vec{k}_0)}$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}[\nabla^2{}_{k_i} E(\vec{k})]_{\vec{k}_{0i}}(\vec{k}_i-\vec{k}_{0i})^2$$

在极值 $\vec{k}_0$ 处，能量具有极值 $[\nabla_k E(\vec{k})]_{\vec{k}_0}=0$

$$E(\vec{k}) \approx E(\vec{k}_0) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{3}[\nabla^2{}_{k_i} E(\vec{k})]_{\vec{k}_{0i}} (\vec{k}_i - \vec{k}_{0i})^2$$

$$\sum_{i=1}^{3}[\nabla^2{}_{k_i} E(\vec{k})]_{\vec{k}_{0i}} (\vec{k}_i - \vec{k}_{0i})^2 = (\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2})_{k_{0x}} (k_x - k_{0x})^2$$

$$+(\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2})_{k_{0y}} (k_y - k_{0y})^2 + (\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2})_{k_{0z}} (k_z - k_{0z})^2$$

电子能量 $E(\vec{k}) \approx E(\vec{k}_0) + \frac{1}{2}[(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2})_{k_{0x}} (k_x - k_{0x})^2$

$$+(\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2})_{k_{0y}} (k_y - k_{0y})^2 + (\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2})_{k_{0z}} (k_z - k_{0z})^2]$$

$$E(\vec{k}) \approx E(\vec{k}_0) +$$

$$\frac{1}{2}[(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2})_{k_{0x}}(k_x - k_{0x})^2 + (\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2})_{k_{0y}}(k_y - k_{0y})^2 + (\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2})_{k_{0z}}(k_z - k_{0z})^2]$$

有效质量

$$\begin{pmatrix} m_x^* & 0 & 0 \\ 0 & m_y^* & 0 \\ 0 & 0 & m_z^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} & 0 & 0 \\ 0 & \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} & 0 \\ 0 & 0 & \hbar^2 / \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \end{pmatrix}$$

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2m_x^*}(k_x - k_{0x})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^*}(k_y - k_{0y})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z^*}(k_z - k_{0z})^2$$

有效质量的计算 —— $\vec{k}\cdot\vec{p}$ 微扰法

晶体中电子的波函数可以写成布洛赫波 $\psi_{nk}=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{nk}(\vec{r})$

电子的布洛赫波满足

$$[\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{r})]e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{nk}(\vec{r})=E_n(\vec{k})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{nk}(\vec{r})$$

动量算符 $\vec{p}=-i\hbar\nabla$ 作用于布洛赫函数

$$\vec{p}\psi_{nk}=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}(\vec{p}+\hbar\vec{k})u_{nk}(\vec{r})$$

$$\vec{p}^2\psi_{nk}=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}(\vec{p}^2+2\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}+\hbar^2\vec{k}^2)u_{nk}(\vec{r})$$

整理得到

$$(\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m})u_{nk}(\vec{r})=[E_n(\vec{k})-\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}]u_{nk}(\vec{r})$$

—— 方程的解为晶格周期性函数

求解方程 & 利用周期性函数解的条件

得到电子的全部能量 $\Longrightarrow$ $E_n(\vec{k})$

$\vec{k}\cdot\vec{p}$ 微扰法的中心思想：如果已知 $\vec{k}_0$ 处的解 $u_{n\vec{k}_0}$

布里渊区其它任一点 $\vec{k}$ 的解可以用 $u_{n\vec{k}_0}$ 来表示

$$[\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m}]u_{nk}(\vec{r})=[E_n(\vec{k})-\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}]u_{nk}(\vec{r})$$

布里渊区中心 $\vec{k}_0=0$ 的情况

已知晶体中电子在 $\vec{k}_0=0$ 的所有状态

$$\psi_{n0}=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{nk}(\vec{r})=u_{n0}(\vec{r}) \quad 和 \quad E_n(0)$$

满足的方程 $[\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{r})]u_{n0}(\vec{r})=E_n(0)u_{n0}(\vec{r})$

用微扰法求 $\vec{k}_0=0$ 附近的 $E_n(\vec{k})$

$$[\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m}]u_{nk}(\vec{r})=[E_n(\vec{k})-\frac{\hbar^2\vec{k}^{\,2}}{2m}]u_{nk}(\vec{r})$$

—— 周期性场中电子的哈密顿函数和波函数

$$\hat{H}_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\vec{r}) \qquad \psi_{nk}=e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}u_{nk}(\vec{r})$$

$$\hat{H}_0u_n(0,\vec{r})=E_n(0)u_n(0,\vec{r}) \qquad \psi_{n0}=u_{n0}(\vec{r})$$

零级波函数 $\psi_{n0}=u_{n0}(\vec{r})$

$\frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m}$ —— 微扰项 $\quad u_{n0}(\vec{r})$ 标记为 $|n0\rangle$

假设能带是非简并情况

$$[\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m}]u_{nk}(\vec{r})=[E_n(\vec{k})-\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}]u_{nk}(\vec{r})$$

能量一级修正 $\Delta E_n^{(1)}(\vec{k})=\langle n0|\frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m}|n0\rangle$

因为

$$E(\vec{k})=E(\vec{k}_0)+\frac{\hbar^2}{2m_x^*}(k_x-k_{0x})^2+\frac{\hbar^2}{2m_y^*}(k_y-k_{0y})^2+\frac{\hbar^2}{2m_z^*}(k_z-k_{0z})^2$$

$$\Delta E_n^{(1)}(\vec{k})=\frac{\hbar\vec{k}}{m}\cdot\langle n0|\vec{p}|n0\rangle$$ —— 为$\vec{k}$ 的一次项

$$=0$$

$$[\frac{\vec{p}^2}{2m}+V(\vec{r})+\frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m}]u_{nk}(\vec{r})=[E_n(\vec{k})-\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}]u_{nk}(\vec{r})$$

能量二级修正 $H'=\frac{\hbar\vec{k}\cdot\vec{p}}{m}$ $\qquad i,\ j=1,2,3$

$$\Delta E_n^{(2)}(\vec{k})=\frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{ij}\sum_{n'}\frac{\langle n0|p_i|n'0\rangle\langle n'0|p_j|n0\rangle}{E_n(0)-E_{n'}(0)}k_ik_j$$

$$E_n(\vec{k})=E_n(0)+\frac{\hbar^2\vec{k}^2}{2m}+\frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{ij}\sum_{n'}\frac{\langle n0|p_i|n'0\rangle\langle n'0|p_j|n0\rangle}{E_n(0)-E_{n'}(0)}k_ik_j$$

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{ij}\sum_{n'}\frac{\langle n0|p_i|n'0\rangle\langle n'0|p_j|n0\rangle}{E_n(0)-E_{n'}(0)}k_i k_j$$

选择 k_x，k_y，k_z为主轴方向

$$E_n(\vec{k}) = E_n(0) + \boxed{\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2}\sum_{i}\sum_{n'}\frac{\langle n0|p_i|n'0\rangle\langle n'0|p_i|n0\rangle}{E_n(0)-E_{n'}(0)}k_i^2}$$

比较 $E(\vec{k}) = E(0) + \boxed{\frac{\hbar^2}{2m_x^*}k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y^*}k_y^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z^*}k_z^2}$

有效质量 $\dfrac{1}{m_i^*} = \dfrac{1}{m} + \dfrac{2}{m^2}\sum_{n'}\dfrac{\langle n0|p_i|n'0\rangle\langle n'0|p_i|n0\rangle}{E_n(0)-E_{n'}(0)}$

有效质量 $$\frac{1}{m_i^*}=\frac{1}{m}+\frac{2}{m^2}\sum_{n'}\frac{\langle n0|p_i|n'0\rangle\langle n'0|p_i|n0\rangle}{E_n(0)-E_{n'}(0)}$$

诸多的 $|n'0\rangle$ 中如果存在一个态

$\langle n'0|p_i|n0\rangle$ —— 不为零

$E_n(0)-E_{n'}(0)$ —— 很小　该项将起主要作用

—— 导带Γ（布里渊区中心）点附近的有效质量

—— 主要作用是价带 ____ 导带底与价带顶能量差最小

—— 只保留起主要作用的一项，分母能量差是带隙宽度

—— 带隙宽度越小，有效质量越小

几种半导体材料的带隙宽度与有效质量

Material	$E_g\ (T = 0\ K)$	m^*	$(m / m^*)E_g$
GaAs	**1.5 eV**	**0.07 m**	**21**
InP	**1.3 eV**	**0.07 m**	**19**
GaSb	**0.8 eV**	**0.04 m**	**17**
InAs	**0.46 eV**	**0.02 m**	**23**
InSb	**0.26 eV**	**0.013 m**	**20**

$\vec{k}_0 \neq 0$ 的情况　使 $\vec{k}_0$总是沿着对称轴的方向（**111**等）

$$\frac{1}{m_i^*} = \frac{1}{m} + \frac{2}{m^2}\sum_{n'}\frac{\langle n\vec{k}_0 | p_i | n'\vec{k}_0 \rangle \langle n'\vec{k}_0 | p_i | n\vec{k}_0 \rangle}{E_n(\vec{k}_0) - E_{n'}(\vec{k}_0)}$$

—— 有效质量往往是各向异性的

—— 沿着对称轴方向的有效质量称为纵有效质量 m_l

—— 垂直于对称轴方向的有效质量称为横向有效质量 m_t

—— 在纵向和横向方向上有贡献的**n’**能带不同，纵向有效质量和横向有效质量是不同的

利用回旋共振方法测得的 ***Ge*, *Si*** 导带的有效质量

	m_l / m_0	m_t / m_0
$Ge<111>$	**1.64**	**0.082**
$Si<111>$	**0.98**	**0.19**