

# 29 固体

## 29.4 能带

## 29.5 导体、半导体和绝缘体

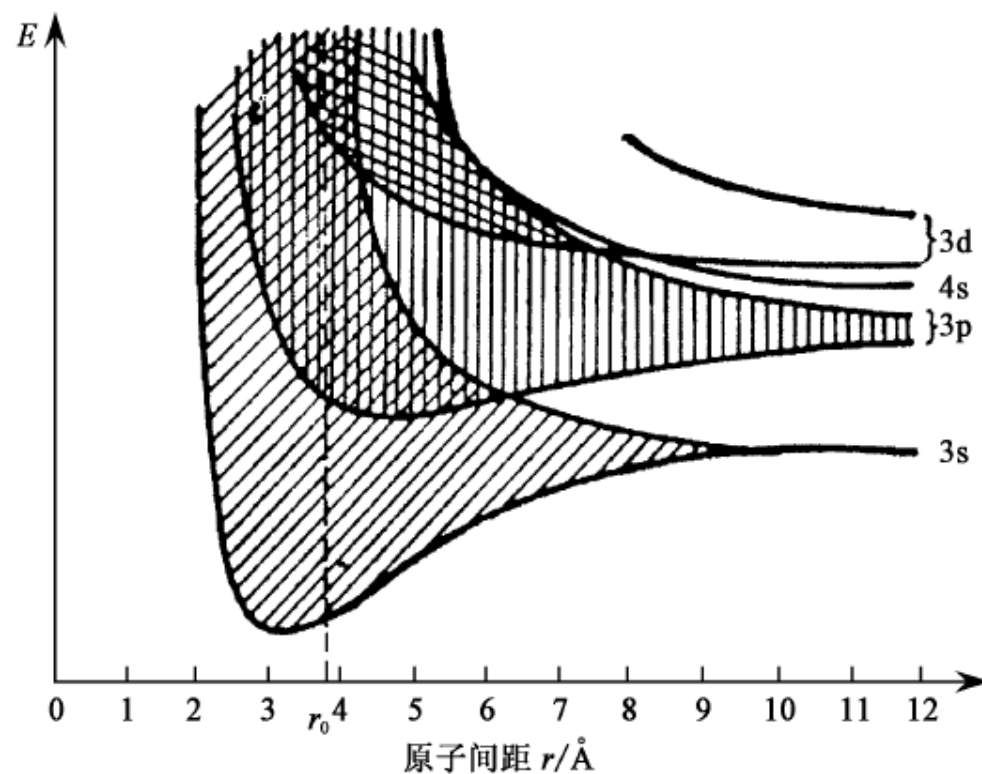
## 29.4 能带

大量原子有相互作用构成一个体系时，电子的能量状态（能级）如何？

**孤立原子的能级→固体的能带**

点阵间距越小，能带越宽

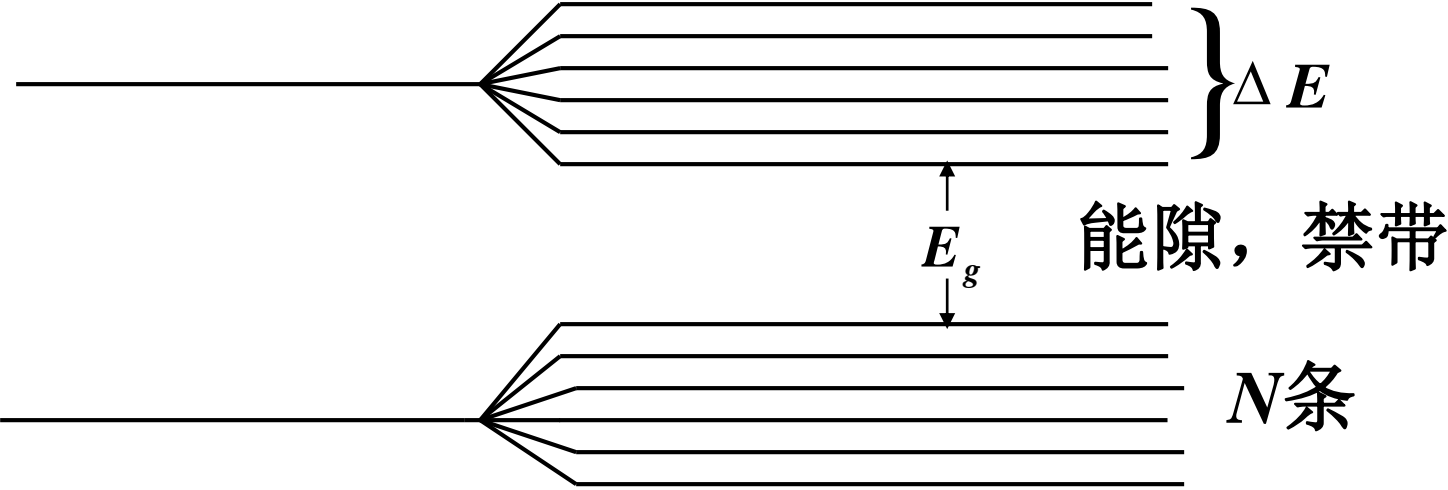
有的能带可能出现重叠的现象。



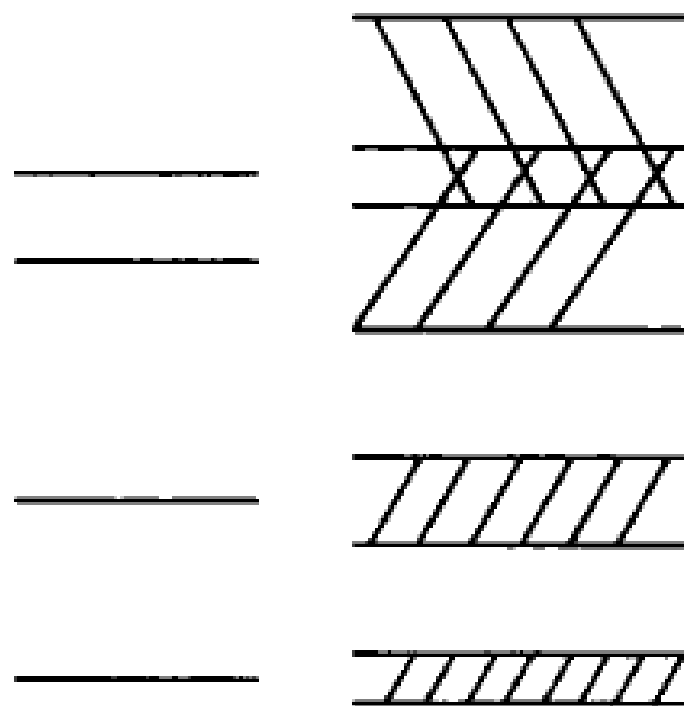
钠的能级与能带(横坐标为原子间距)

能级

能带



如原子总数为  $N$ , 原则上单一的原子能级在固体中就将分裂成  $N$  个能级。不过这  $N$  个能级彼此间距离极近, 大约在  $10^{-21} \sim 10^{-23} \text{ eV}$  数量级, 实际上形成连续一片, 故称为能带。可见在最简单的情形, 一个原子能级与固体的一个能带相对应。



能带的宽度与相邻原子波函数的交叠有关, 交叠越甚则展开越宽。因此内层原子能级展宽成的能带较窄, 而外层原子能级展成的能带较宽, 价电子的能带最宽。以至由不同外层电子的原子能级展宽成的能带可能在能量上重叠在一起而成一更宽的能带, 如图的上部所示。

原子能级间能量上的差距为电子伏数量级。能级分裂展宽成能带的宽度也在电子伏数量级。因此不同的能带之间在能量上可能彼此分开而无彼此交叠的部分, 如图下部所示。

**原子能级展宽成固体能带示意**

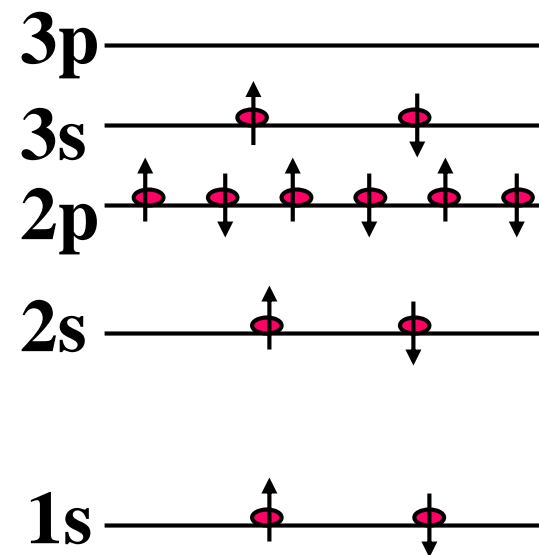
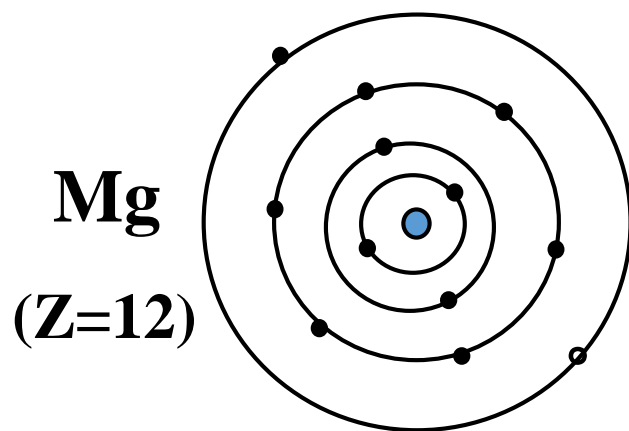
像原子中的电子只能处于能级上一样,固体中的电子也只能处于能带内。换言之固体电子只能具有能带中的能量,而不能有能带之间的能量。因此,能带又称为许可带,即图中的阴影区所在。能带之间的能量范围称为禁带,理想固体中任何电子的能量均不能处于禁带之中。由此可将固体中的电子能量归结为一幅能带图,能带图由一系列许可带组成,相邻许可带之间为禁带所隔开。晶体中的所有电子便根据能量的高低由下向上逐一填充许可带。许可带中的每一能级都代表一电子的轨道运动,可为自旋向上向下的两个电子所占据。于是在一般情形,内层电子所处的能带中的能级均为电子所占据。即较低的能带往往是满带。

# 电子在晶体中的排布

电子是费米子，它的排布原则有以下两条：

- (1) 服从泡利不相容原理
- (2) 服从能量最小原理

◆ 按照泡里不相容原理，对于孤立原子的一个能级  $E_{nl}$  最多能容纳  $2(2l+1)$  个电子。例：



对于晶体，每一能级“分裂”成由  $N$  条能级组成的能带，按照泡里不相容原理，每条能带最多能容纳的电子数为  $2N(2l+1)$  个。

例如，对孤立原子的  $1S$ 、 $2S$  能级，在形成晶体后相应地成为两个能带。它们最多能容纳的电子数为  $2N$  个。

对孤立原子的  $2P$ 、 $3P$  能级，在形成晶体后也相应地成为两个能带。它们最多能容纳的电子数为  $6N$  个。



◆按照能量最小原理，电子排布时从最低的能级排起。

- 孤立原子的内层电子能级一般都是填满的，  
在形成晶体时，其相应的能带也填满了电子。

- 孤立原子的外层电子能级可能填满了电子  
也可能未填满电子。

若原来是填满电子的，  
在形成晶体时，其相应的能带也填满了电子。

若原来未填满电子的，  
在形成晶体时，其相应的能带也未填满电子。

- 孤立原子中较高的电子能级上没有电子，  
在形成晶体时，其相应的能带上也没有电子。

## 29.5 导体、半导体和绝缘体

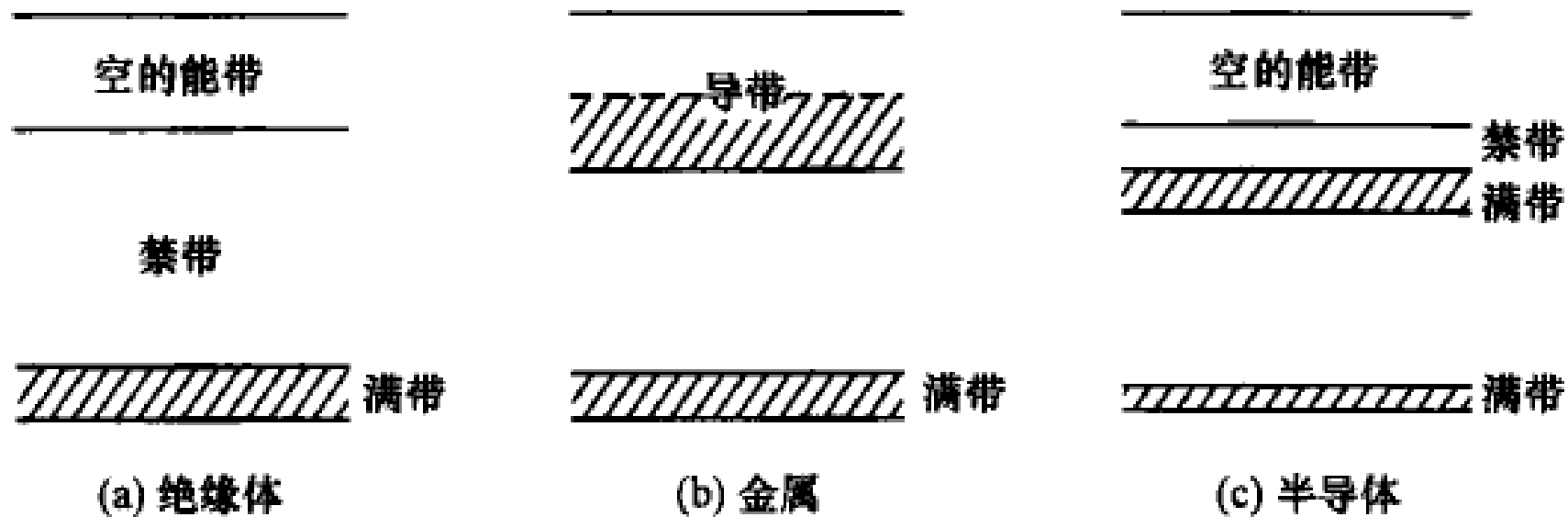
**导体**      **电阻率**  $\rho < 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$

**半导体**    **电阻率**  $\rho \approx 10^{-4} - 10^7 \Omega \cdot \text{m}$

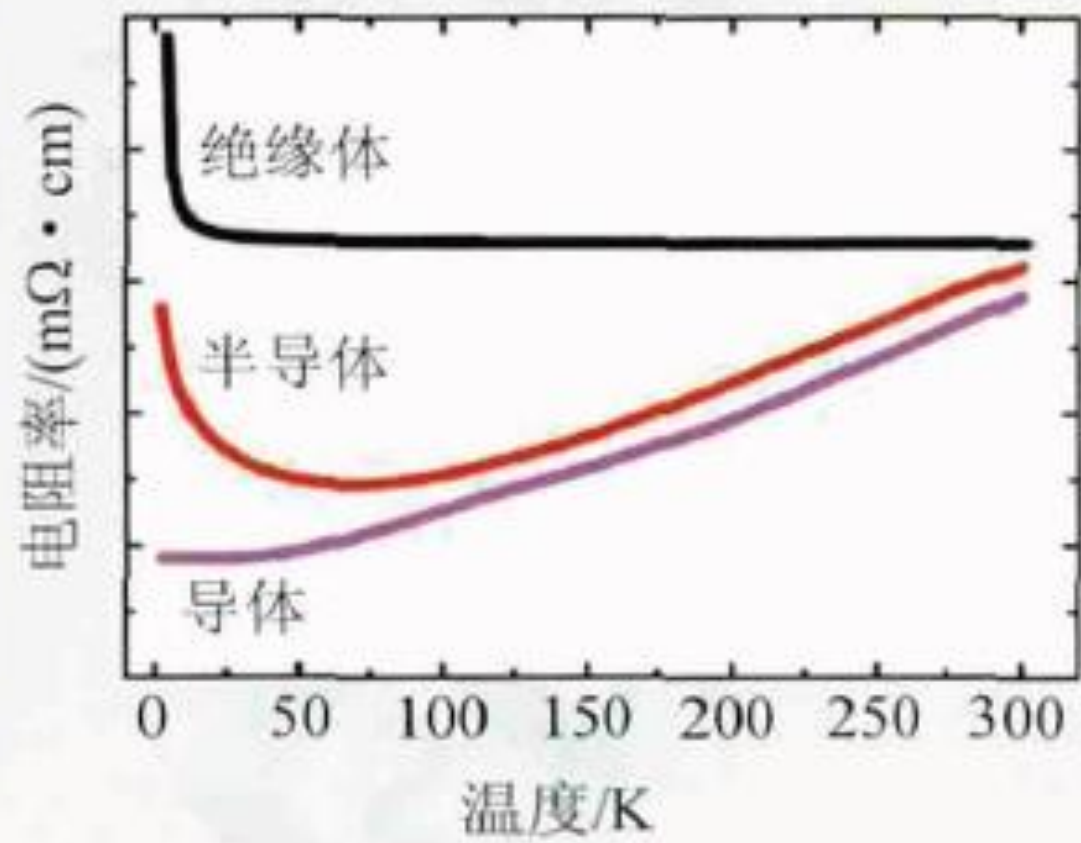
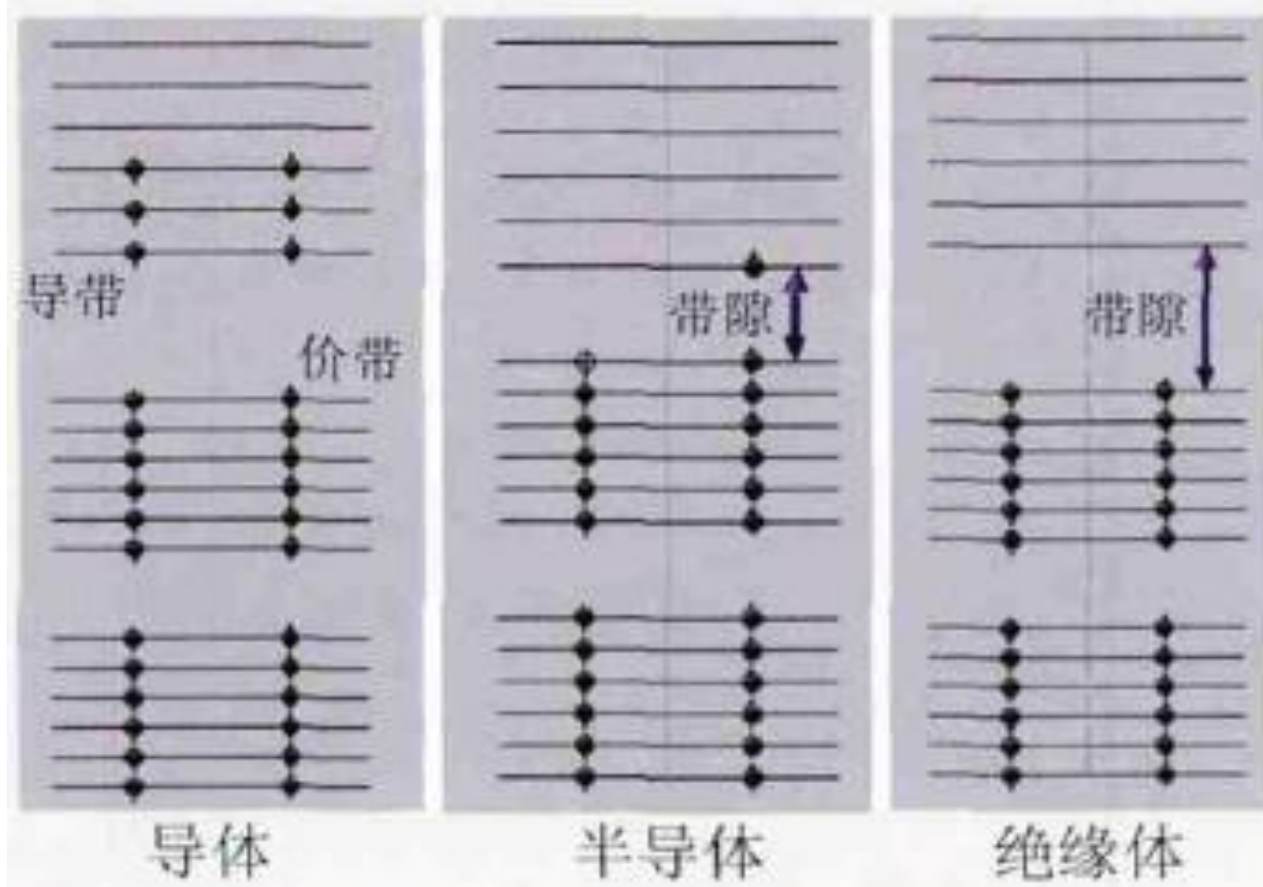
**绝缘体**    **电阻率**  $\rho \approx 10^{12} - 10^{20} \Omega \cdot \text{m}$

各种晶体都有大量电子，为什么导电性有很大的差别？

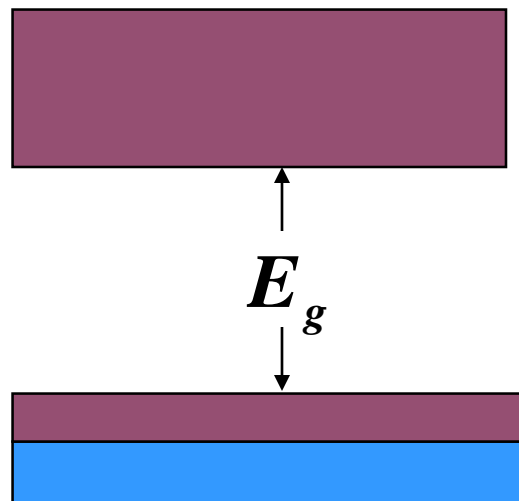
这要用能带理论来说明。



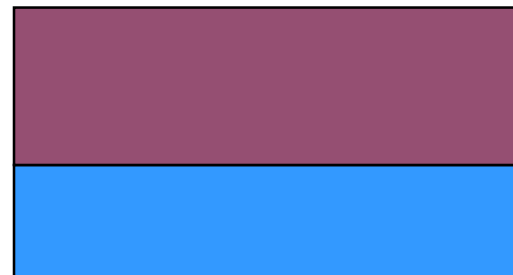
绝缘体、金属和半导体的能带图



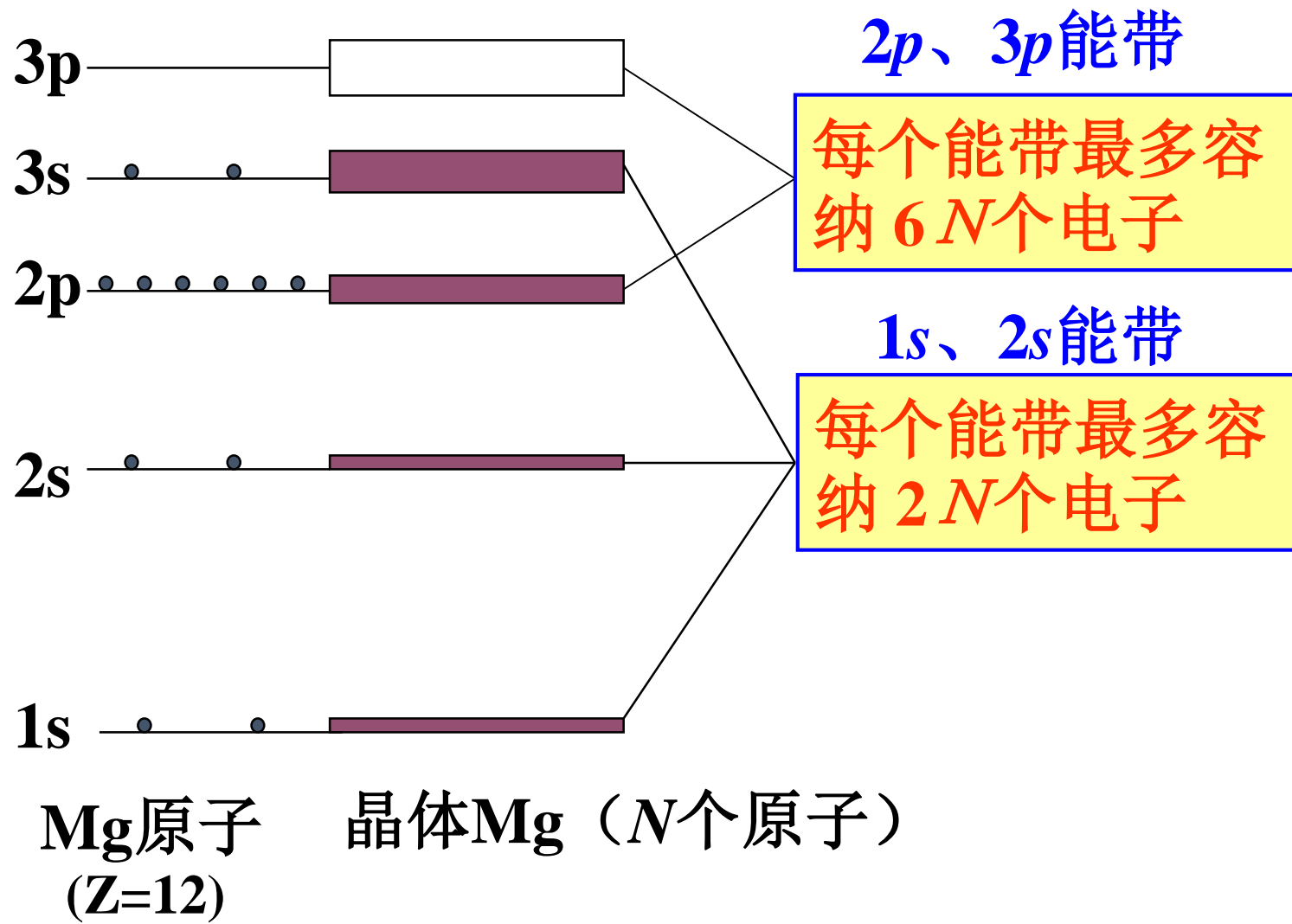
导体:



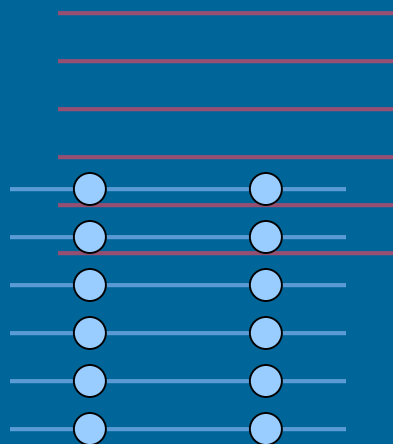
某些一价金属，  
如：Li ...



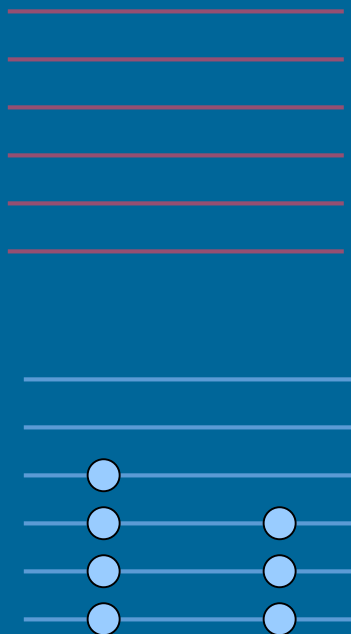
某些二价金属，  
如：Be, Ca, Mg,  
Zn, Ba ...



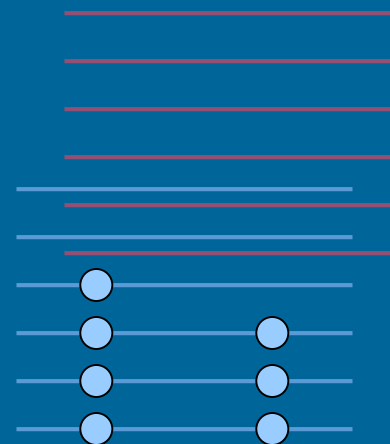
# 导体（三种情况）



镁



锂

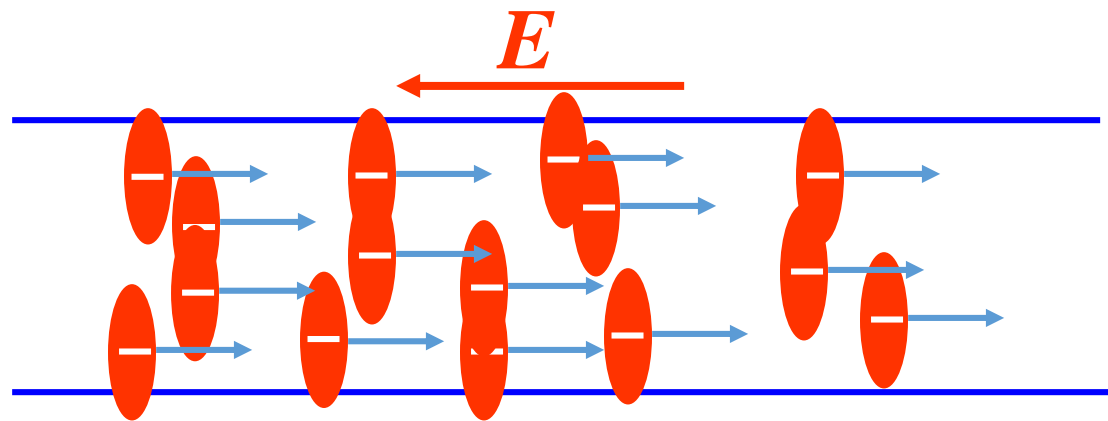


铜 铝 银

满带对导电无贡献。

只有不满带中的电子才能导电

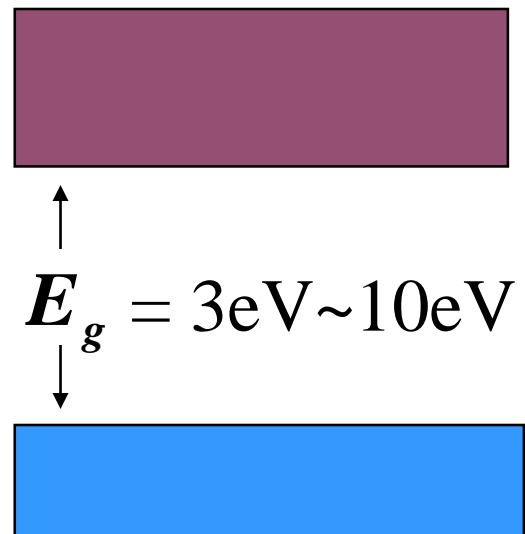
导电 — 大量共有化电子在电场作用下作定向运动





绝缘体： 能隙宽

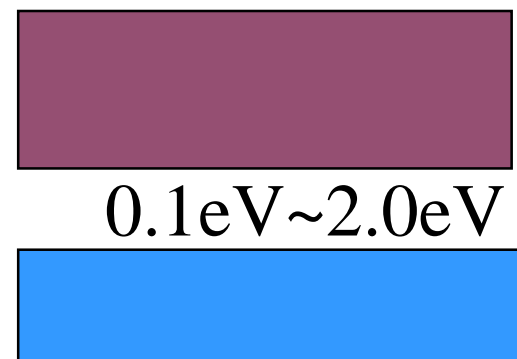
在外电场的作用下，  
共有化电子很难接受外  
电场的能量，形不成电  
流。



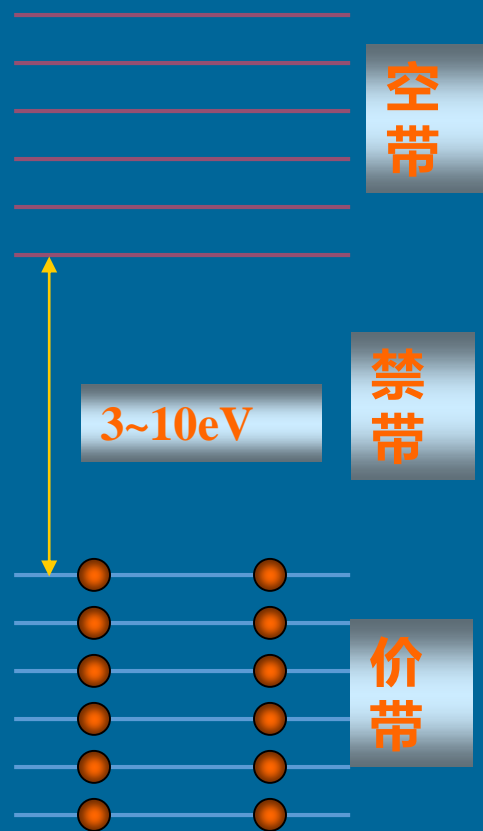
半导体：在  $T=0\text{K}$  时，为绝缘体

但能隙较窄，温度升高时，一  
部分电子从价带跃迁到导带  
，形成不满带。

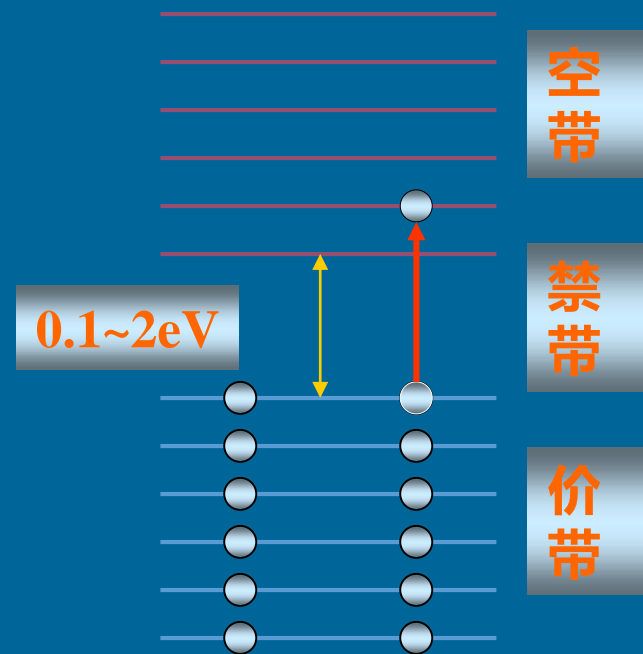
具有一定的导电性。



## 绝缘体



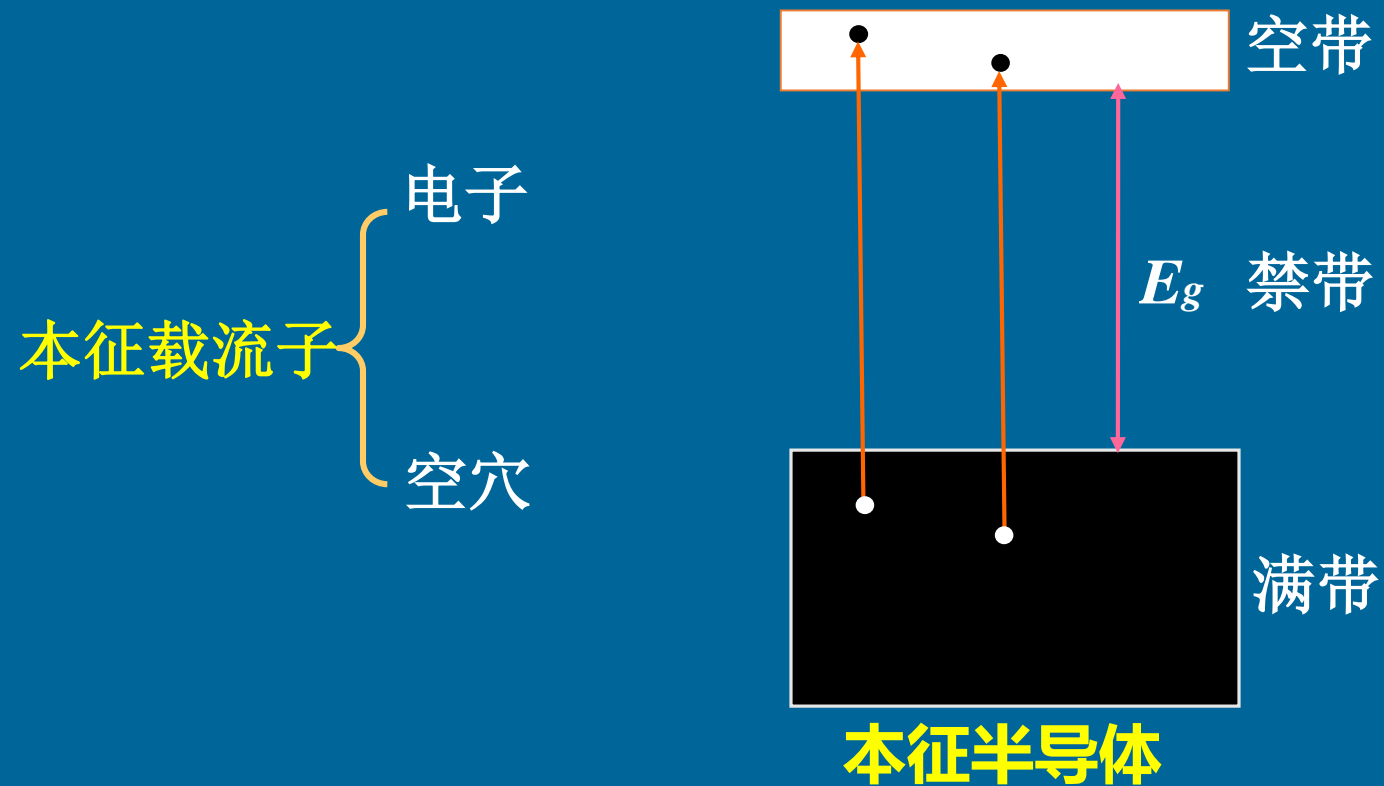
## 半导体



# 本征半导体和杂质半导体

## 半导体类型

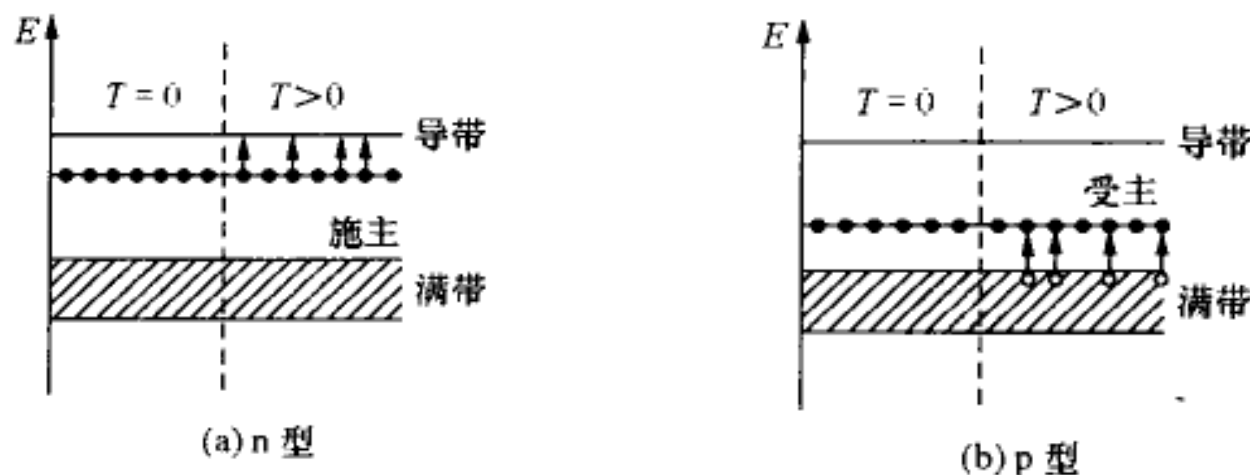
类型		掺有杂质	主要载流子	导电性能
本征半导体		无	电子、空穴	差
杂质 半导体	n 型	五价元素(砷或磷)	电子	提高
	p 型	三价元素(硼或镓)	空穴	提高



导带中电子与满带中的空穴都参与导电，这类半导体称为本征半导体。

一般只有高纯度的半导体在较高温度时，才具有本征导电性。

满带中的一个电子激发入导带后同时产生了一对导电载流子——导带电子与满带中的空穴。不过由于大多数半导体的禁带宽度均大于  $0.5\text{ eV}$ , 室温下导带电子与价带空穴的数密度都很低, 与导体相比导电率不高, 故称半导体。然而半导体的电学性质的意义并不在其电导率的数值高低, 而在于电导率对外加因素的敏感性。升温、光照、掺杂都能明显改变半导体的导电性。例如, 只要掺入百万分之一或千万分之一的杂质就能使半导体的导电本领有数量级上的提高。而且, 掺杂还能控制半导体中导电载流子的类型。例如硅中掺入 V 族元素杂质, 如磷、砷, 结果形成大量的导带中的电子, 使得常温下电子数密度远超过空穴, 故称为电子型或 n 型半导体。如掺以 III 族元素硼、镓等则形成大量价带中的空穴, 使空穴数密度远超过电子, 遂称之为空穴型或 p 型半导体。

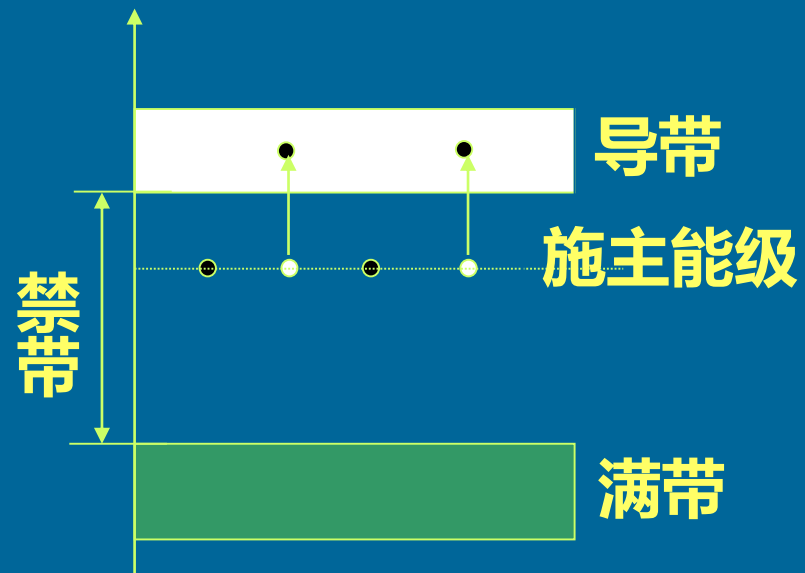
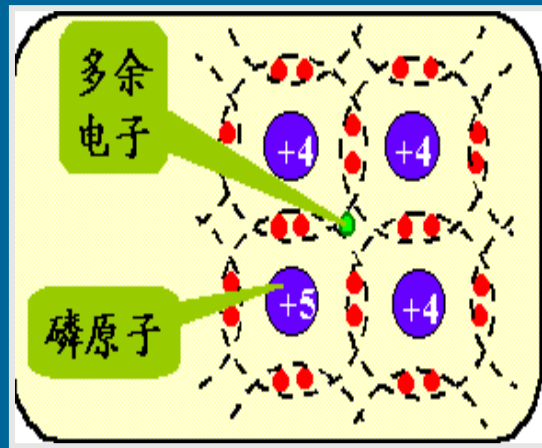


掺杂半导体能级

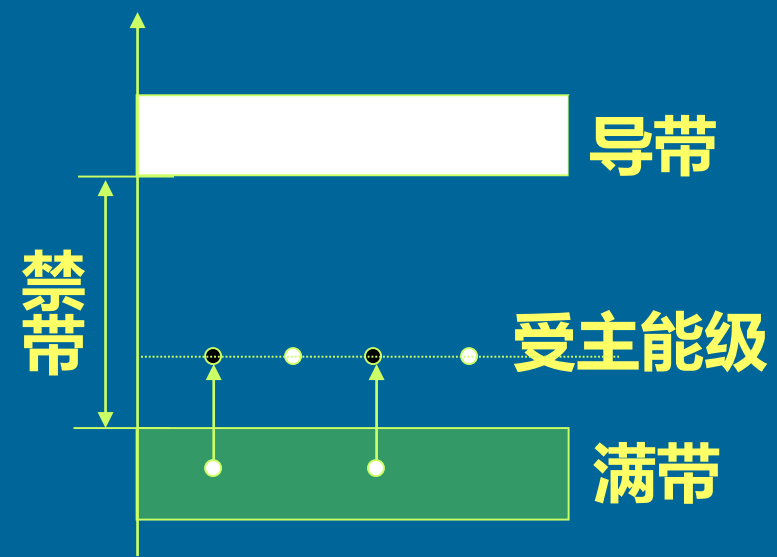
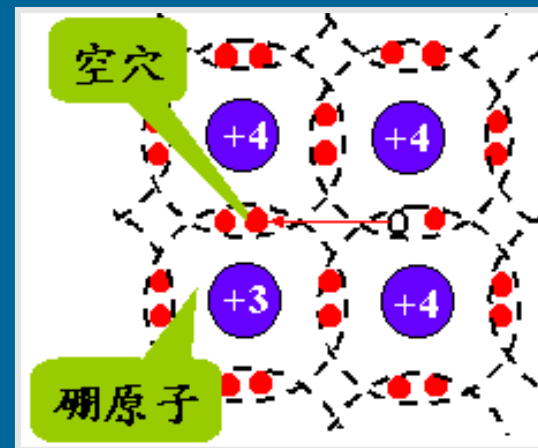
硅原子有 4 个最近邻。相邻硅原子间以共用电子对的共价键结合。硅原子有 4 个价电子,与 4 个最近邻恰形成 4 根共价键,每个价键上均有一对共有电子,从而使每个硅原子的价电子看上去都有 8 个而成为稳定的满壳层。满壳层中的电子难以挣脱原子核的束缚,这就是半导体中导电电子甚少的原因。但如以一 V 族元素,设为磷取代一个硅原子的位置,则由于磷有 5 个价电子,与 4 个最近邻硅原子形成共价键后尚多余一价电子。此价电子虽受  $P^+$  的束缚,但这一库仑束缚力受硅晶体的介电屏蔽而大为减少,从而使其很容易受热激发而挣脱  $P^+$  的束缚成为可在整个晶体中运动的电子,即导带电子。这就使掺 V 族杂质的硅成为 n 型半导体。反之,如以硼原子取代硅原子,则由于硼只有 3 个价电子,与 4 个近邻硅原子形成稳定的满壳层共价键尚缺一个电子。在此情形,附近硅—硅共价键上的电子可以很容易因热激发而过来提供此一缺少的电子而使硅原子共价键上形成电子的缺失,这就相当于产生一价带中的空穴。因此,硅中掺硼等 III 族杂质即成为 p 型半导体。

# 杂质半导体

n型（电子型）

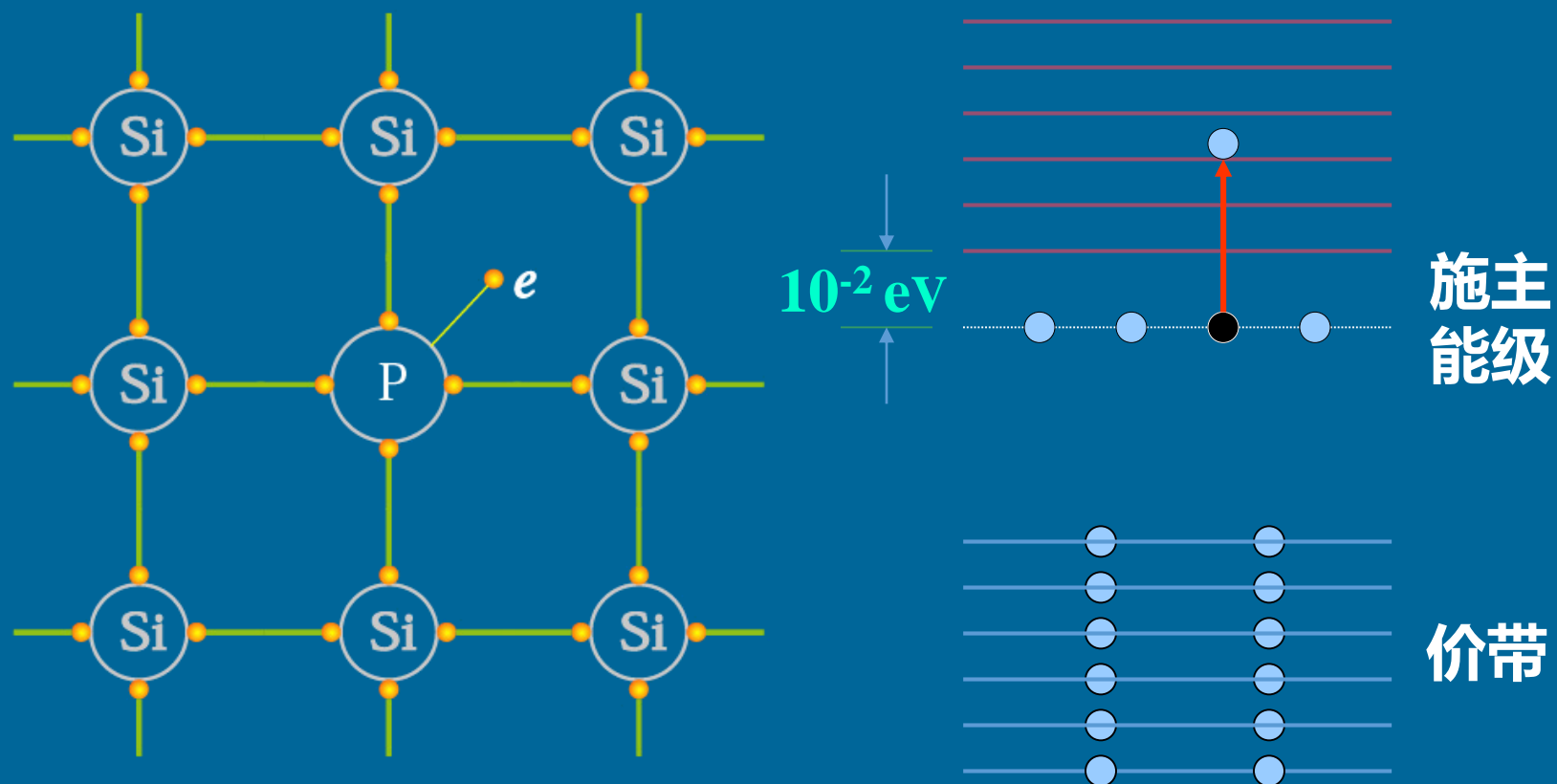


p型（空穴型）



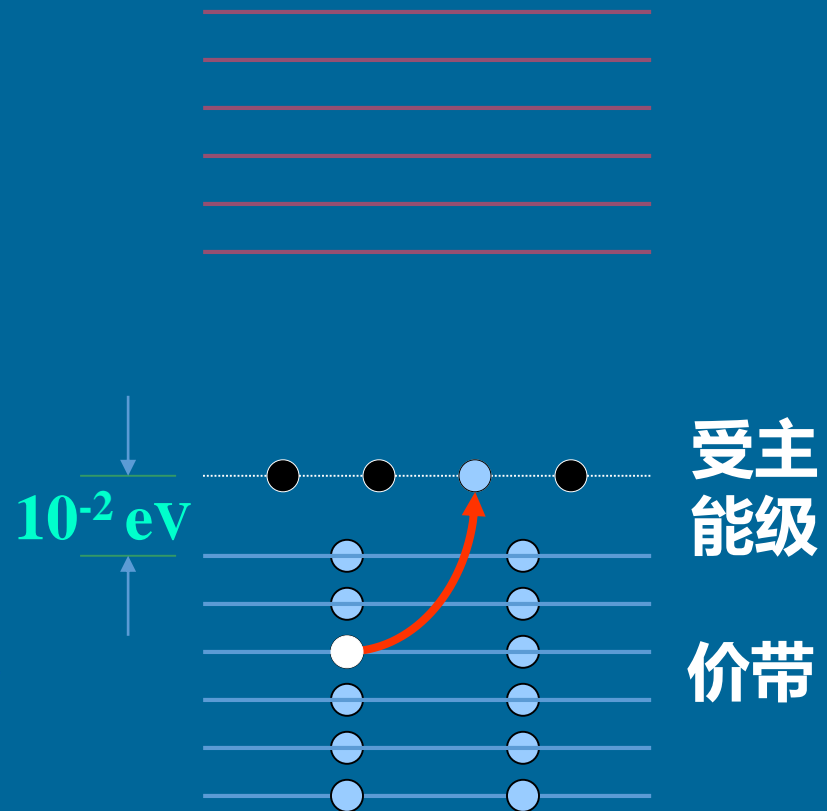
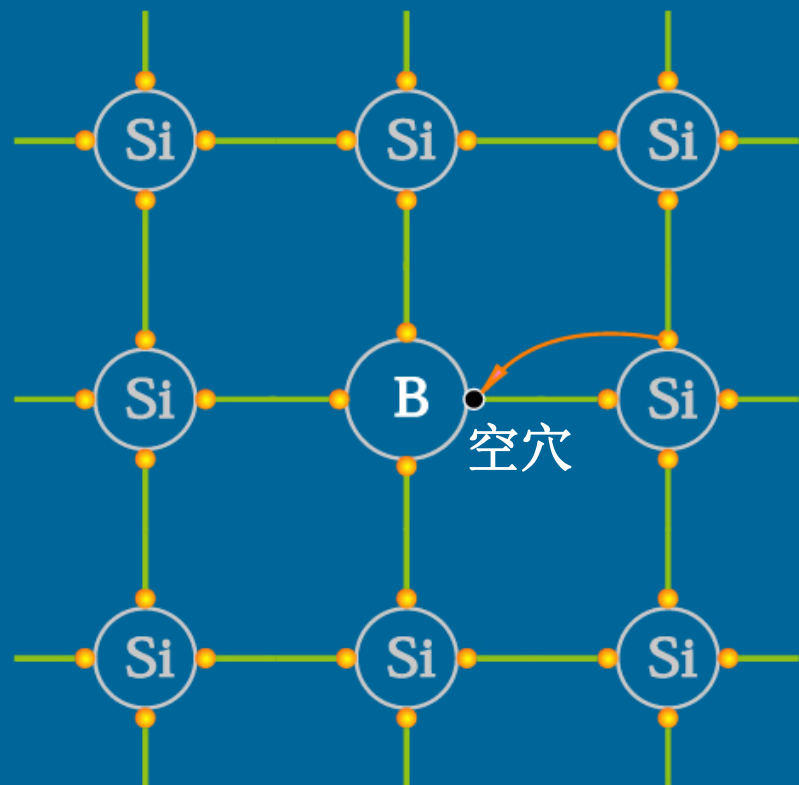
# 杂质半导体导电机理

## n 型半导体





## P 型半导体





**A semi-conductor**  
**(一个半吊子乐队指挥)**

第29章结束