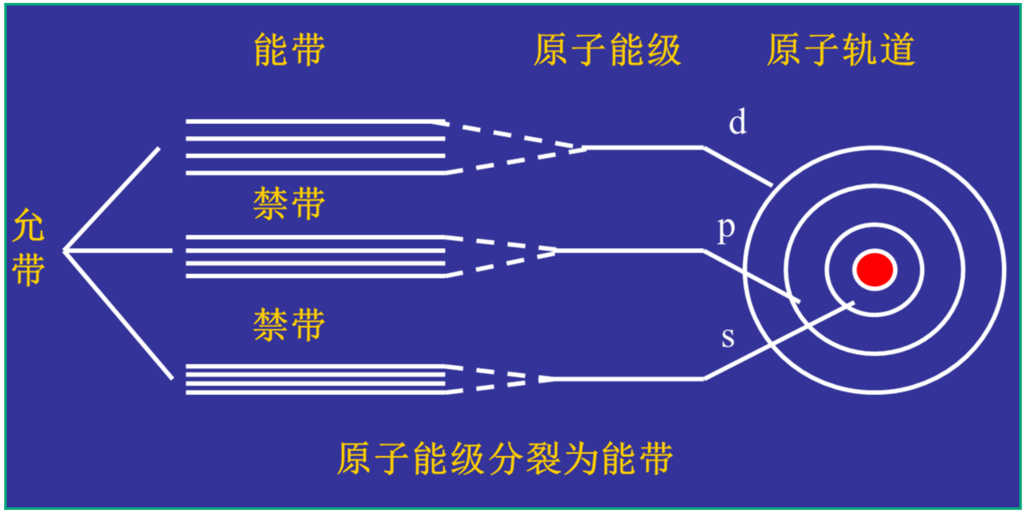
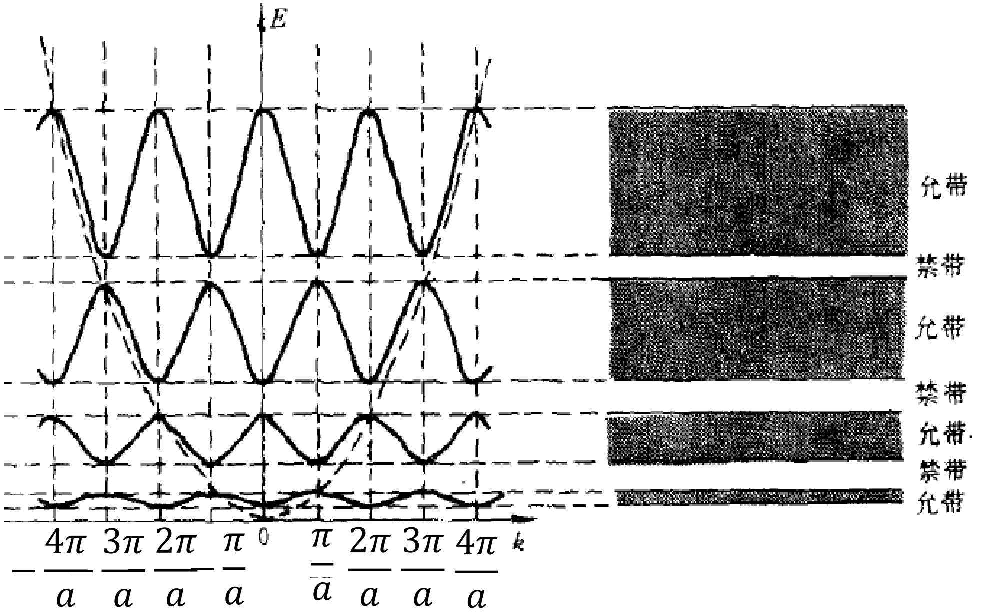
复习：布里渊区与能带

- 共有化运动
- 能带的形成
- 允带与禁带
- 导带与价带



- 半导体中电子的能量E随*k*的变化关系

- 布里渊区



第一章 半导体中电子的状态

半导体中的$E(k)$与k的关系

- 设能带底位于波数$k=0$处，将$E(k)$在$k=0$处按泰勒级数展开，取至k^2项，可得
- $E(k)=E(0)+(\frac{dE}{dk})_{k=0}k+\frac{1}{2}(\frac{d^2E}{dk^2})_{k=0}k^2+\cdots$
- 由于$k=0$时能量极小，所以一阶导数为0，有

$$E(k)-E(0)=\frac{1}{2}(\frac{d^2E}{dk^2})_{k=0}k^2$$

半导体中的$E(k)$与k的关系

- 对于给定半导体二阶导数为恒定值

$$E(k)-E(0)=\frac{1}{2}\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{k=0}k^2$$

令

$$\frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{d^2E}{dk^2}\right)_{k=0}=\frac{1}{m_n^*}$$

- 所以有

$$E(k)-E(0)=\frac{\hbar^2k^2}{2m_n^*}$$

半导体中的E(k)与k的关系

$$E(k)-E(0)=\frac{1}{2}\frac{\hbar^2k^2}{m_n^*} \qquad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$$

- m_n^* 称为能带底电子有效质量，为**正值**；
- 若假设能带顶也位于$k=0$处，则按照与上述相同的方法可得能带顶电子有效质量，m_n^*为**负值**。

$$m_n^*=\frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}$$

半导体中电子的平均速度

- 自由电子速度
  - $\boldsymbol{v} = \hbar \boldsymbol{k} / m_0$
  - 根据 $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$，可得$dE/dk = \hbar^2 k/m_0$
  - 所以自由电子速度$v = (1/\hbar)\dfrac{dE}{dk}$

半导体中电子的平均速度

- 半导体中电子的速度
- 根据量子力学，电子的运动可以看作波包的运动，波包的群速就是电子运动的平均速度（波包中心的运动速度）。
- 设波包有许多角频率ω相近的波组成，则波包的群速为：

$$v = \frac{d\omega}{dk}$$

半导体中电子的平均速度

- 根据波粒二象性，频率为γ的波，其粒子的能量为$h\gamma$，所以

- $v=\frac{d\omega}{dk}=\frac{2\pi d\gamma}{dk}=\frac{2\pi dE}{hdk}$ $\qquad v=\frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$

半导体中电子的平均速度

- 将 $E(k)-E(0)=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m_n^*}$ 代入上式，可得

$$v=\frac{\hbar k}{m_n^*}$$

- 由于不同位置有效质量正负的不同，速度的方向也不同

半导体中电子的速度

- **半导体中电子的速度：**

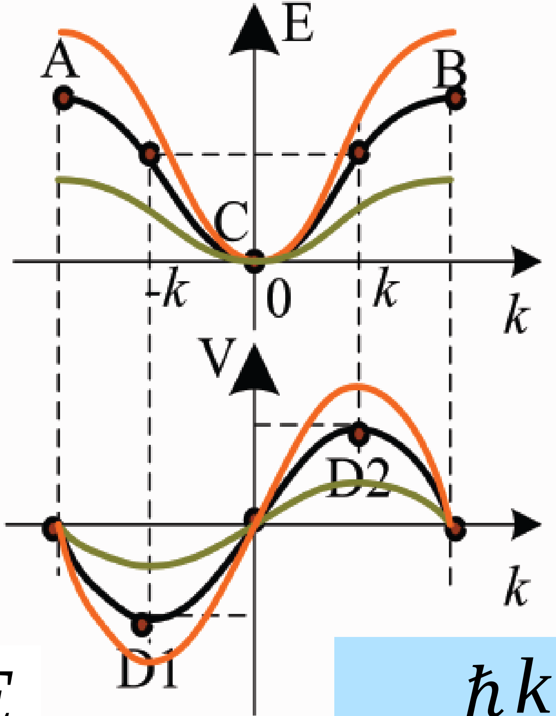
  1.在能带顶和能带底，电子的速度为零；

  2.在能带中部，速度的数值最大；

  3.处于*k*态和-*k*态的电子，能量相等；

  4. $v(k) = -v(-k)$ **；**

  5.能带越宽，*v*越大(红色曲线)。



$$v = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$$

$$v = \frac{\hbar k}{m_n^*}$$

半导体中电子的加速度

当外加电场时，半导体中电子的运动规律。

- 当有强度为$|\boldsymbol{E}|$的外电场时，电子受力

$$f = -q\,|\boldsymbol{E}|$$

- 外力对电子做功

$$dE = fds = fvdt$$

半导体中电子的加速度

$$dE = fds = fvdt$$

- 由于 $v = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}$
- 所以 $dE = \frac{f}{\hbar}\frac{dE}{dk}dt$
- 而 $dE = \frac{dE}{dk}dk$

半导体中电子的加速度

- 代入上式，可得

$$f = \hbar \frac{dk}{dt}$$

- 上式说明，在外力作用下，波矢变化率与外力成正比。

半导体中电子的加速度

- 电子的加速度

$$a=\frac{dv}{dt}=\frac{1}{\hbar}\frac{d}{dt}(\frac{dE}{dk})=\frac{1}{\hbar}\frac{d^2E}{dk^2}\frac{dk}{dt}=\frac{f}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}$$

- 利用电子有效质量定义 $m_n^*=\frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}$

半导体中电子的加速度

- 可得

$$a = \frac{f}{m_n^*}$$

上式与牛顿第二定律类似

有效质量的意义

- 有效质量概括了半导体内部势场的作用。
- 有效质量可以通过实验直接测得。

$$a=\frac{f}{m_n^*}$$

有效质量的性质

①有效质量m_n^*只是一个等效意义的参量；

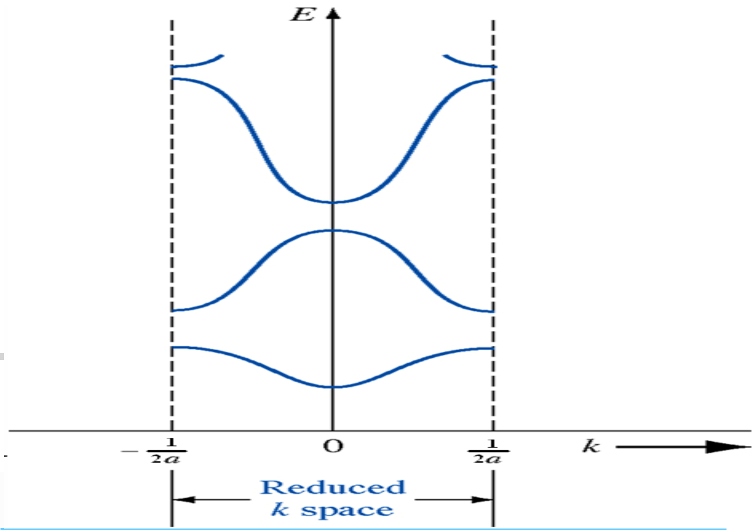
②有效质量m_n^*不是常数，在带顶和带底附近近似为常数；

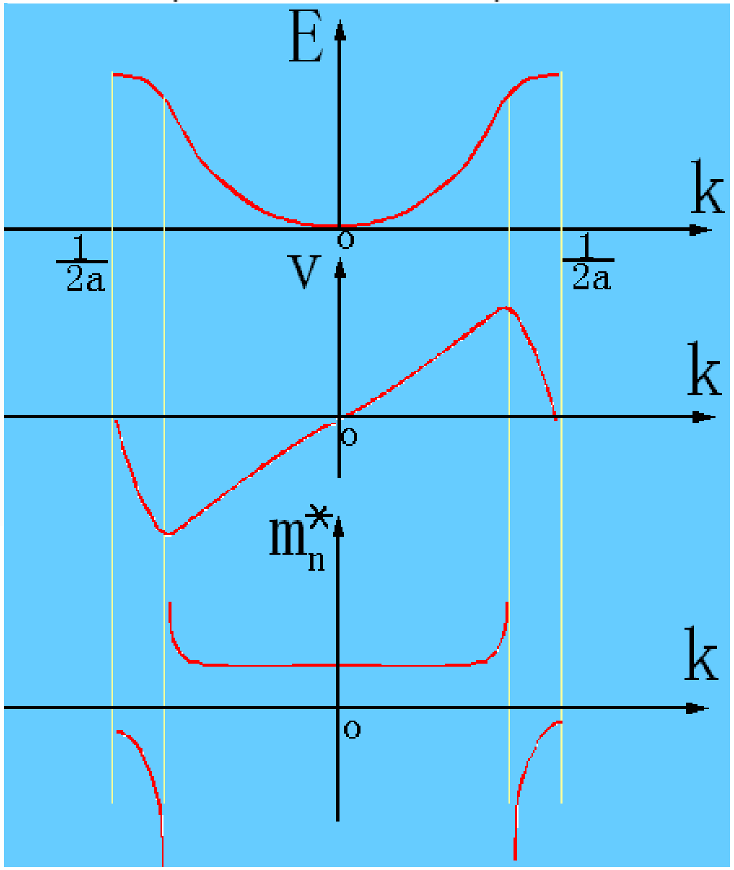
③m_n^*可以取正值，也可以取负值，在转折点处，$m_n^*=\pm\infty$；

- **有效质量的正负与位置有关。**

  能带底部附近，有效质量为正

  能带顶部附近，有效质量为负。

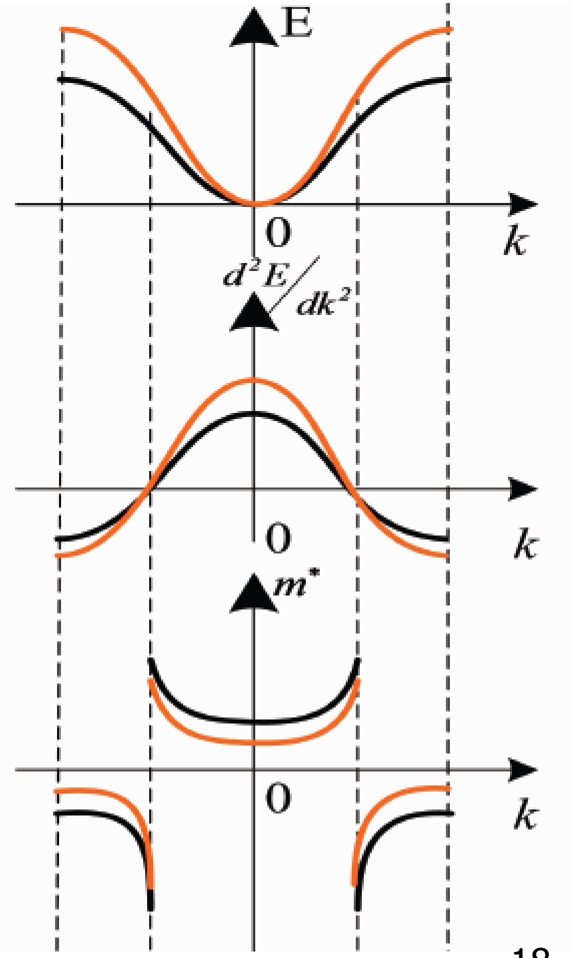




有效质量的特点

- **有效质量的大小由共有化运动的强弱有关。**
  - 能带越窄，二次微商越小，有效质量越大（内层电子的有效质量大）；
  - 能带越宽，二次微商越大；有效质量越小（外层电子的有效质量小）。

$$m_n^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}}$$



第一章 半导体中电子的状态

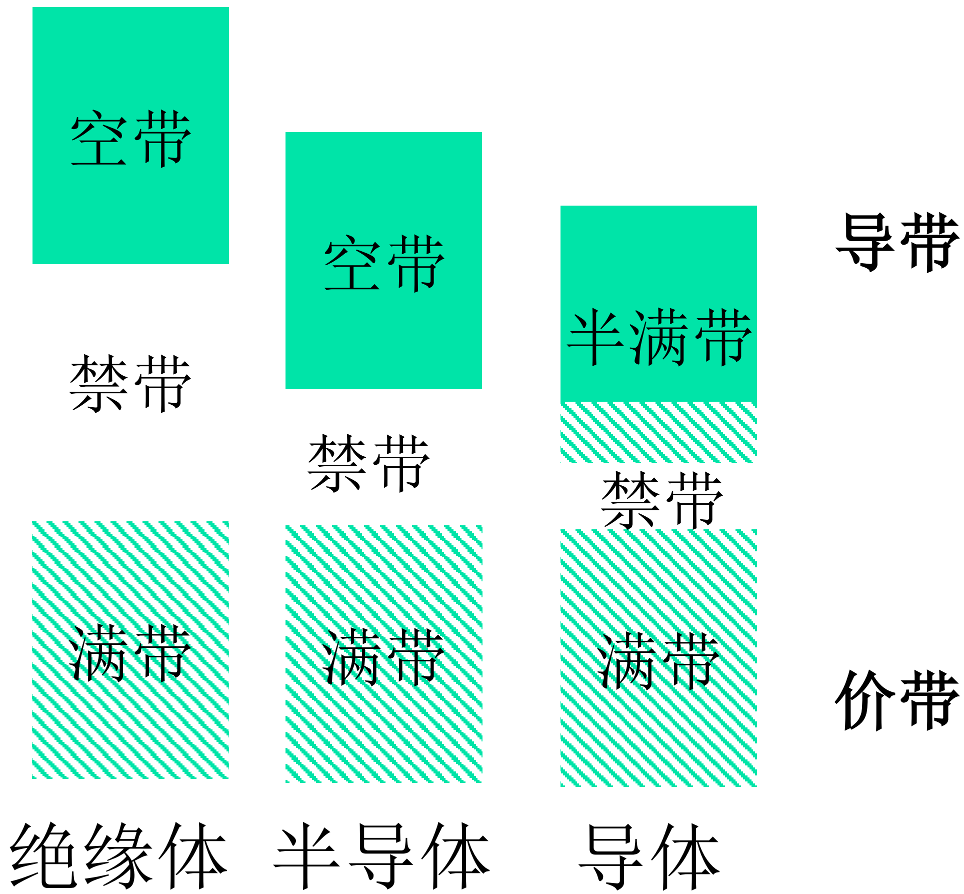
1.1 半导体的晶体结构

1.2 半导体中电子的状态

1.3 半导体中电子的运动 有效质量

1.4 本征半导体的导电机构 空穴

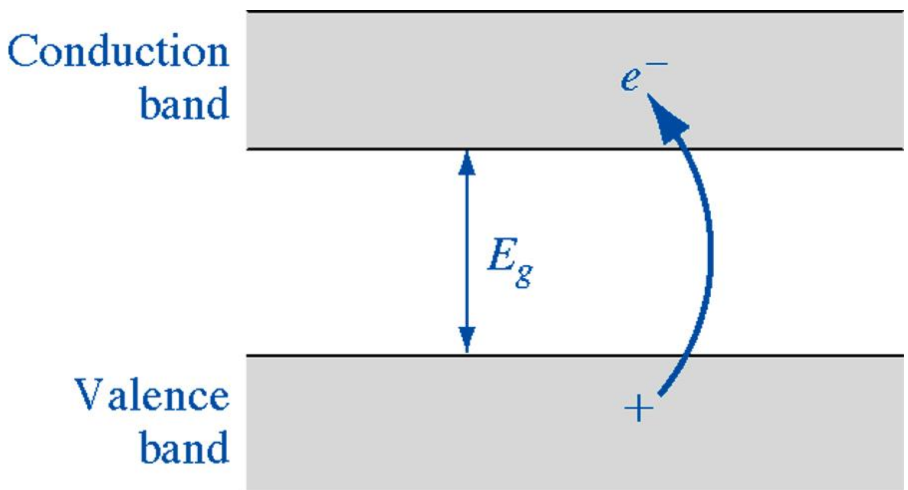
导体、半导体、绝缘体的能带



三者的主要区别：

- 禁带宽度和导带填充程度
  - 金属导带半满
  - 半导体禁带宽度在1eV左右
  - 绝缘体禁带宽且导带空

本征激发

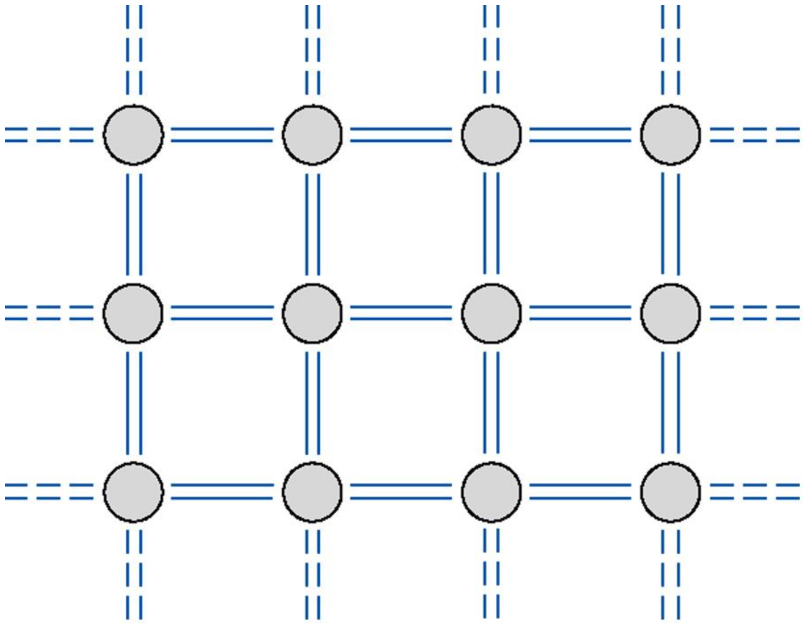


- 外力：温度升高、光照
- 最低能量
- 常用禁带宽度
  - 硅：1.12eV
  - 锗：0.67eV
  - 砷化镓：1.43eV
  - 金刚石：6~7eV

- 本征激发：价带上的电子激发成为导带电子的过程。
- 半导体的导电载流子是电子和带正电的空量子态（空穴）。
- 金属导电载流子是自由电子；

导电机理

- 绝对零度时，半导体中的情况



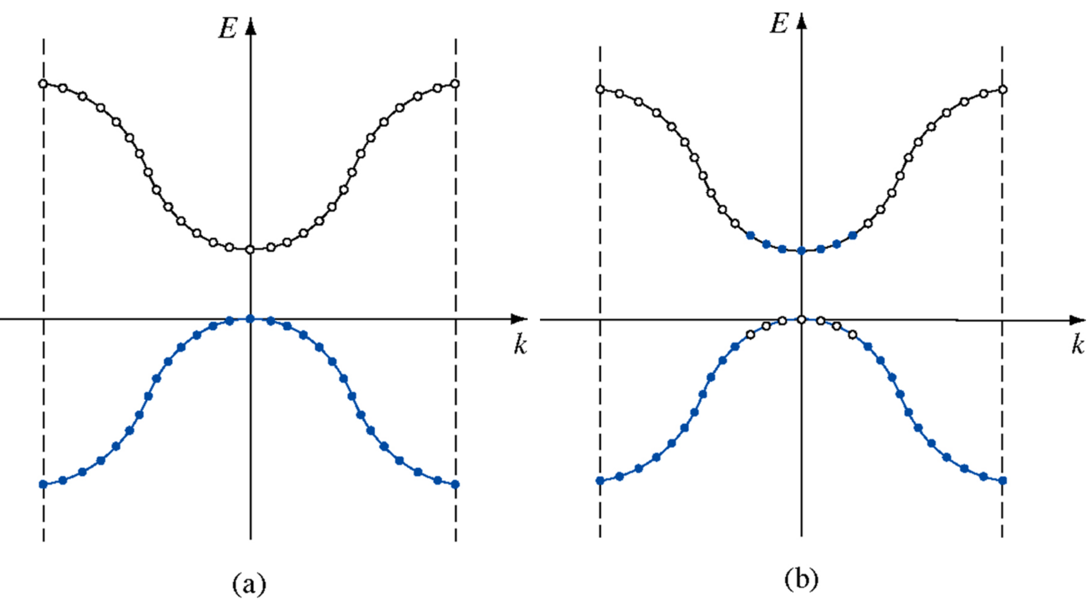
•整体和局部都呈现电中性；

•没有可自由移动的电子；

•价带全满，导带为空

导电机理

- 室温下，半导体中的电子与空穴



•电子被激发到更高的能级；

•局部的电中性被破坏；

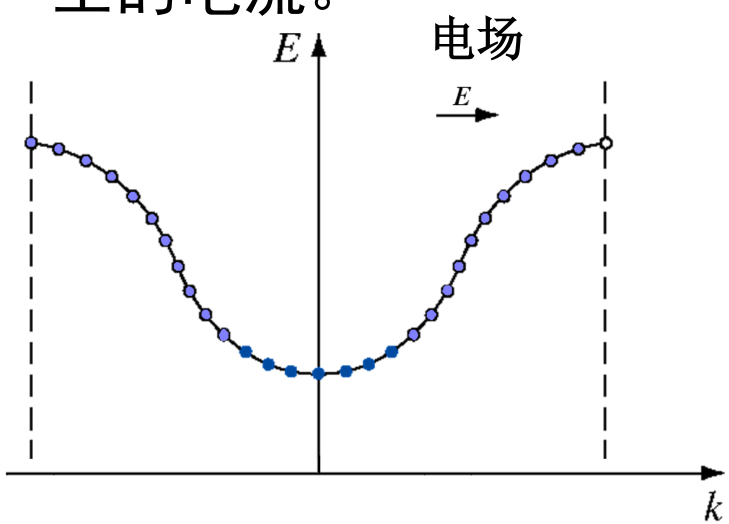
•空的量子态呈正电性。

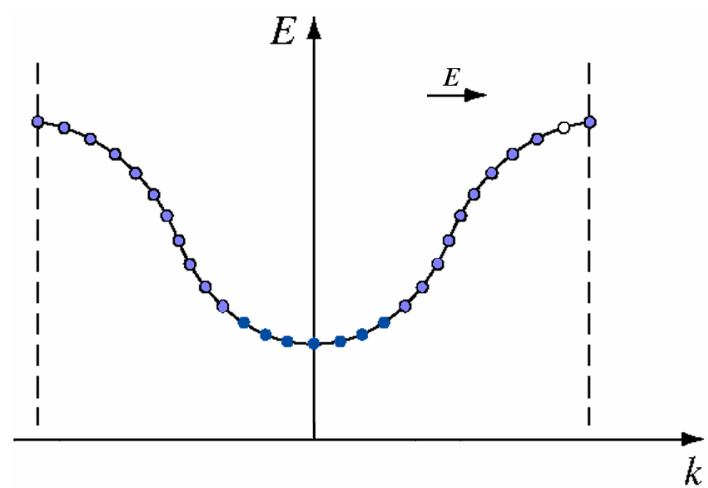
➢ 电子被激发到导带参与导电；

➢ 空的量子态被电子填充也参与导电

空穴

- 在外电场作用下，电子朝电场反方向运动；
- 所有电子的运动可以看作是空的状态沿电场反方向的运动。
- 如果价带有个空状态，在外电场作用下，价带的电流相当于一个带正电的粒子以电子的速度$V(k)$运动时，所产生的电流。





空穴

- 空穴：价带中空的量子态假想为带正电的粒子，简称空穴。
- ✓ 空穴具有正的有效质量
- 在电场作用下，电子与空穴有相同的运动速率

$$\frac{dk}{dt} = -q|E|/\hbar$$

- 价带顶部附近电子的加速度

$$a = \frac{dv(k)}{dt} = \frac{f}{m_n^*} = -\frac{q|E|}{m_n^*} > \mathbf{0}$$

空穴

将空穴的有效质量记为 m_p^*

空穴的加速度 $a=\dfrac{dv(k)}{dt}=\dfrac{f}{m_p^*}=\dfrac{q|E|}{m_p^*}>\mathbf{0}$

空穴的有效质量为正值，且 $m_p^*=-m_n^*$

空穴

- 把价带中大量电子对电流的贡献用少量的空穴表达出来。
- 半导体中有电子和空穴两种载流子，而金属中只有电子一种载流子。
- 本征半导体的导电机构：导带的电子和价带的空穴同时参与导电。

导带底电子 $E(k)-E(0)=\frac{1}{2}\frac{\hbar^2k^2}{m_n^*}$

价带顶空穴 $E(k)-E(0)=-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2k^2}{m_p^*}$

$$E(k)\sim k$$

第一章 半导体中电子的状态

1.1 半导体的晶体结构

1.2 半导体中电子的状态

1.3 半导体中电子的运动 有效质量

1.4 导电机构

1.5 回旋共振

1.6 硅和锗的能带结构

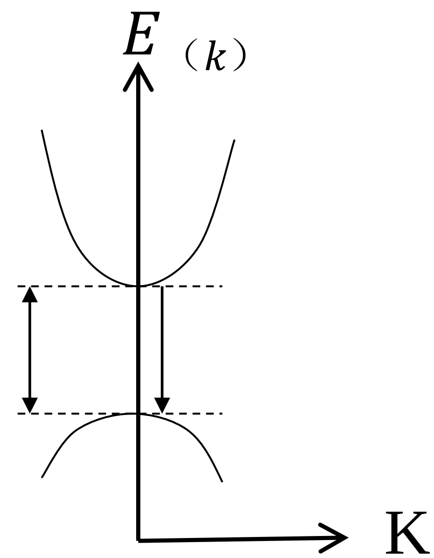
第一章 半导体中电子的状态

一维、能带极值位于**k=0**处时：

- $E（k）\sim k$

$$E(k)-E(0)=\frac{1}{2}\frac{\hbar^2k^2}{m_n^*}$$

$$E(k)-E(0)=-\frac{1}{2}\frac{\hbar^2k^2}{m_p^*}$$



直接带隙半导体能带

求：三维晶体的**E(k)**表达式、电子的有效质量

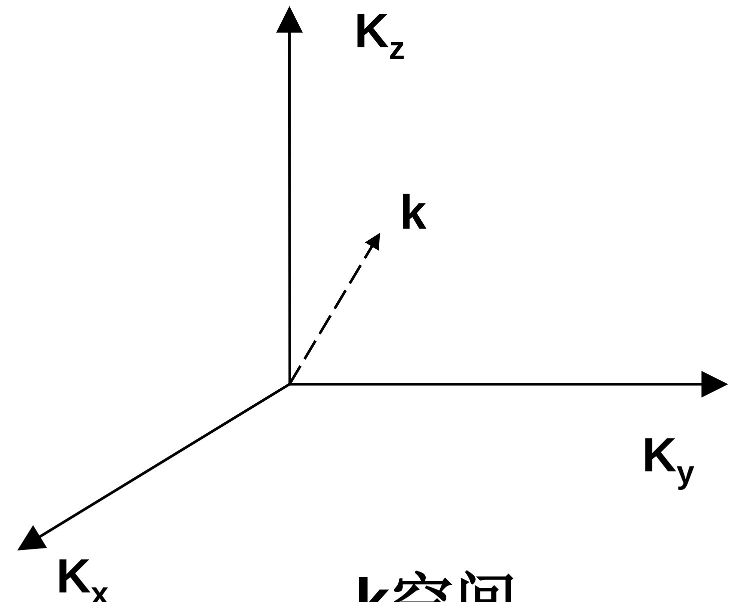
k空间等能面

$$k^2=k_x^2+k_y^2+k_z^2$$

设能带极值位于K=0处

$$E(k)-E(0)=\frac{1}{2}\frac{\hbar^2k^2}{m_n^*}=\frac{1}{2}\frac{\hbar^2}{m_n^*}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)$$

$$k_x^2+k_y^2+k_z^2=\frac{2m_n^*\left[E(k)-E(0)\right]}{\hbar^2}$$



k空间

当E(k)为一定值时，许多组（k_x,k_y,k_z）构成一个封闭面，称为等能面。

晶体的k空间等能面

① 晶体各向异性，不同方向晶体性质不同，E(k)~k关系不同，说明沿不同k方向电子的有效质量可能不同。

② 设导带底位于波矢$k=k_0$，在导带底附近将E(k)用泰勒级数在极值k_0附近展开,略去高次方项，得

$$\boldsymbol{E(k)=E(k_0)+\frac{1}{2}[(\frac{\partial^2E}{\partial k_x^2})_{k_0}(k_x-k_{0x})+(\frac{\partial^2E}{\partial k_y^2})_{k_0}(k_y-k_{0y})+(\frac{\partial^2E}{\partial k_z^2})_{k_0}(k_z-k_{0z})}$$

$$\boldsymbol{E(k) = E(k_0) + \frac{1}{2}[(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2})_{k_0}(k_x - k_{0x}) + (\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2})_{k_0}(k_y - k_{0y}) + (\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2})_{k_0}(k_z - k_{0z})}$$

$$\frac{1}{m_x^*} = \frac{1}{\hbar^2}(\frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2})_{k_0}$$

$$\frac{1}{m_y^*} = \frac{1}{\hbar^2}(\frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2})_{k_0}$$

$$\frac{1}{m_z^*} = \frac{1}{\hbar^2}(\frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2})_{k_0}$$

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

- 上式可改写为

$$\frac{(k_x-k_{0x})^2}{\frac{2m_x^*(E-E_c)}{\hbar^2}}+\frac{(k_y-k_{0y})^2}{\frac{2m_y^*(E-E_c)}{\hbar^2}}+\frac{(k_z-k_{0z})^2}{\frac{2m_z^*(E-E_c)}{\hbar^2}}=1$$

- K空间等能面是**环绕$\mathbf{k_0}$**的一系列椭球面

$$k_x^2+k_y^2+k_z^2=\frac{2m_n^*\left[E(k)-E(0)\right]}{\hbar^2}$$

- ✓ 测量出载流子的有效质量并推断出半导体的能带结构
- ✓ 回旋共振

回旋共振

- 将一块半导体样品置于均匀恒定的磁场中
  - 磁感应强度为$\boldsymbol{B}$
  - 半导体中电子初速度为$\boldsymbol{v}$
  - $\boldsymbol{v}$与$\boldsymbol{B}$间夹角为θ
- 则电子受到的磁场力$\boldsymbol{f}$为

$$f = -qv \times B$$

- 力的大小为

$$\left| f \right| = qvB\sin\theta = qv_{\perp}B$$

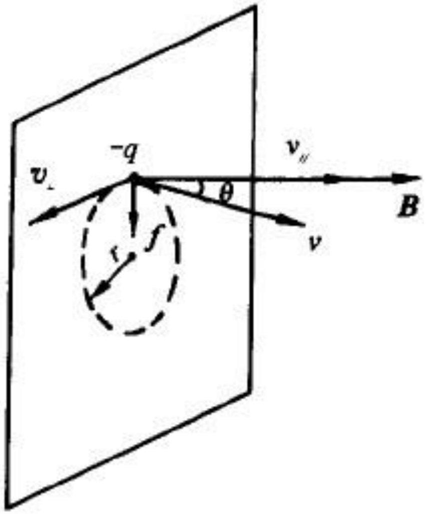


图 1-21　电子在恒定磁场中的运动

- 磁场力垂直于速度v和磁场B
  - 在垂直于磁场的平面内作匀速圆周运动，速度

$$v_{\perp} = v\sin\theta$$

  - 沿磁场方向做匀速运动，速度

$$v_{\parallel} = v\cos\theta$$

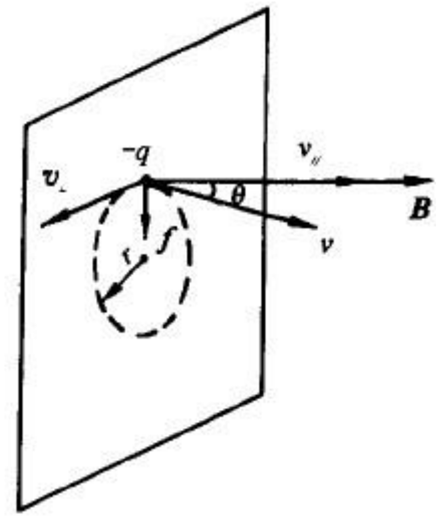


图 1-21　电子在恒定磁场中的运动

- 运动轨迹为一螺旋线。回旋频率为ω_c

则 $$a = v_{\perp}^{2} / r$$

$$v_{\perp} = r\omega_c$$

- 若等能面为球面，根据$a = \dfrac{f}{m_n^*}$，可得

$$\omega_c = \frac{qB}{m_n^*}$$

- 再以电磁波通过半导体，交变磁场频率与回旋频率相等时，发生共振。
- 记录所测得的共振吸收时电磁波频率和测感应强度，即可以求出有效质量。

- 若等能面为椭球面，则有效质量为各向异性的，沿 k_x, k_y, k_z轴方向分别为

$$m_x^*, m_y^*, m_z^*$$

- 设**B**沿 k_x, k_y, k_z的方向余弦分别是

$$\alpha, \beta, \gamma$$

- 可求得 $\omega_c = \dfrac{qB}{m_n^*}$

$$\frac{1}{m_n^*} = \sqrt{\frac{m_x^*\alpha^2 + m_y^*\beta^2 + m_z^*\gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*}}$$

本节小结

- 有效质量（意义、内外层电子的大小、正负）
- 从能带的角度分析导体、半导体、绝缘体的导电性
- 本征激发
- 空穴
- 半导体的导电机构
- 回旋共振实验