第 一 章 态密度

1.1 态密度关系的推导

在间距为 Δk 的两个能态之间存在的态的个数为 $2\Delta k/\delta k$ 其中 $\delta k = 2\pi/a/N$ ，即为第一布里渊区的相邻态间距。那么单位能量间隔的态为 $\delta k = 2\pi/a/N/\Delta E$

而能量满足

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

那么有

$$\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}\sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^2(E-E_0)}}$$

对于含有 N 个原子的一维链来说 $L = Na$ ，联立，那么单位能量单位长度的态密度为

$$DOS = \frac{1}{\pi}\frac{\mathrm{d}k}{\mathrm{d}E}\sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^2(E-E_0)}}$$

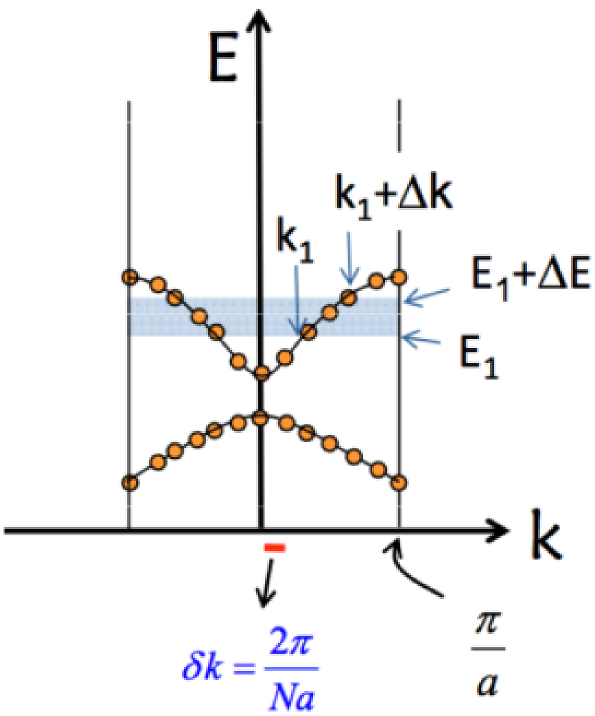

图 1.1: 一维态密度

类似的对于三维体系，在 E 处的能量间隔中态的数目为

$$\frac{\Delta V}{\delta V} = \frac{4\pi/3[(k+\mathrm{d}k)^3 - k^3]}{(2\pi/L)(2\pi/W)(2\pi/H)} = \frac{V}{2\pi^2 k^2 \mathrm{d}k}$$

同一维情况的 $E-k$ 关系带入

$$DOS = \frac{m^*}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m*(E-E_0)}$$

1.2 常见材料的导带价带

关键在于求得等效质量 m^*

$$g_i(E) = \frac{m^*}{2\pi^2\hbar^3}\sqrt{2m*(E-E_0)}, i = c \text{ or } v$$

其中有效质量为

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\mathrm{d}^2 E}{\mathrm{d}k^2}$$

由于不同材料的能带形状不一样，如椭球型，需要求得其等效质量 m^*_{eff}。
GaAs 的导带为球形，各个方向的有效质量一致。
Si 与 Ge 的导带形状为椭球形，满足：

$$E - E_C = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_l^*} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_t^*} + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_t^*}$$

其中 m_l^* 是椭球的长轴等效质量，m_t^* 是短轴的。
可以归一化为关于 k_i 的椭球面方程，

$$1 = \frac{k_1^2}{\alpha^2} + \frac{k_2^2}{\beta^2} + \frac{k_3^2}{\beta^2}$$

将第一布里渊区的有效椭球面个数记为 N_{el} ，进而定义有效半径

$$N_{el}\frac{4}{3}\pi\alpha\beta^2 = \frac{4}{3}\pi k_{eff}^3$$

化简得到有效质量

$$m^*_{eff} = N_{el}^{2/3}(m_l^* m_t^{*2})^{1/3}$$

对于 Ge $N_{el} = 4$ ，Si $N_{el} = 6$ 。
对于价带，同样由不同的有效质量如重空穴与轻空穴分别对应 $m^*_{hh} m^*_{lh}$。

1.3 费米-狄拉克分布

费米能级为 E_F

$$f_0(E) = \frac{1}{1 + e^{\beta(E-E_F)}}$$

其中 $\beta = 1/(k_B T)$

1.4 载流子分布

电子的单位体积个数 (浓度) 可以考虑成导带电子态密度以及电子占据情况下分布函数的加权

$$n = \int_{E_c}^{E_{top}} g_c(E) f(E) dE$$

空穴的单位体积个数 (浓度) 可以考虑成价带空穴态密度以及电子**不**占据情况下分布函数的加权

$$p = \int_{E_bottom}^{E_v} g_v(E)(1 - f(E)) dE$$

1.5 玻尔兹曼分布

在导带或者价带能量与费米能级相差 $3k_BT$ 及以上时，费米-狄拉克分布可以弱化为玻尔兹曼分布，并且可以称为简并半导体。

$$n = N_C e^{-\beta(E_c - E_F)}$$

$$p = N_V e^{\beta(E_v - E_F)}$$

其中，N_C 、N_V 分别是导带价带的有效态密度。

$$N_C = 2\left(\frac{2\pi m_n^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$
$$N_V = 2\left(\frac{2\pi m_p^* k_B T}{h^2}\right)^{3/2}$$

1.6 本征费米能级

由上一节知

$$np = N_C N_V e^{-\beta(E_c - E_v)} = N_C N_V e^{-\beta(E_g)}$$

当 $n = p = n_i$ 时，定义 $E_F = E_i$ 可以解出本征载流子浓度与费米能级

$$n_i = \sqrt{N_C N_V} e^{-E_0/2k_BT}$$

$$E_i = \frac{E_G}{2} + \frac{1}{2\beta} \ln \frac{N_V}{N_C}$$

并且存在关系

$$n_i = N_C e^{(E_i - E_c)/kT}$$

$$n_i = N_V e^{(E_v - E_i)/kT}$$

$$n = n_i e^{(E_F - E_i)/kT}$$

$$p = n_i e^{(E_i - E_F)/kT}$$

1.7 能带图与能量

以一个电子的能量分布为例，空穴类似。

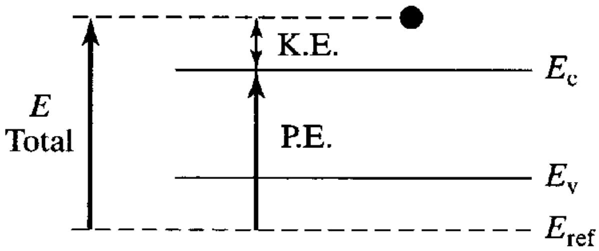

图 1.2: 电子的能量分布

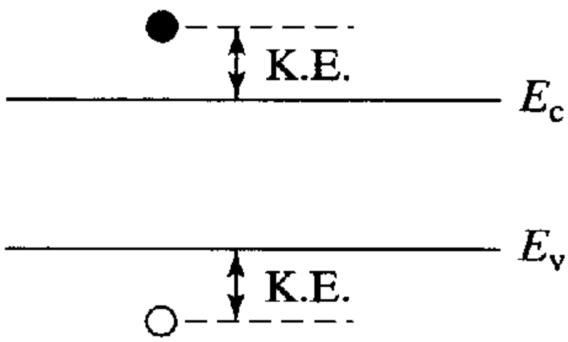

图 1.3: 电子与空穴的对比

可以得到势能满足

$$P.E = E_c - E_{ref} = -qV(x)$$

那么

$$V = -\frac{1}{q}(E_c - E_{ref})$$

电场满足

$$\mathscr{E} = -\nabla V = \frac{1}{q}\frac{\mathrm{d}E_c}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{q}\frac{\mathrm{d}E_v}{\mathrm{d}x}$$