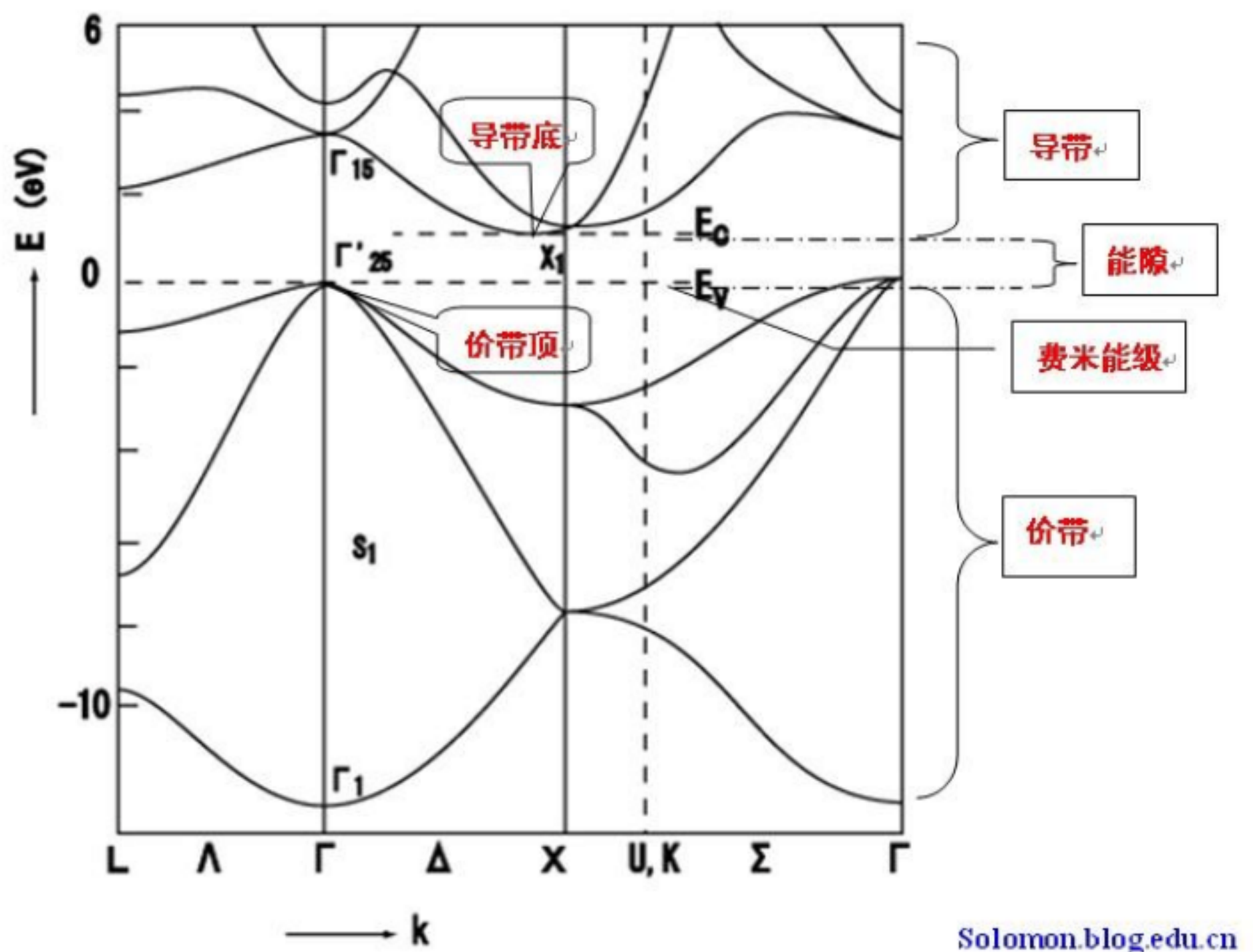


能带结构是目前采用第一性原理（从头算 abinitio）计算所得到的常用信息，可用来结合解释金属、半导体和绝缘体的区别。能带可分为价带、禁带和导带三部分，导带和价带之间的空隙称为能隙，基本概念如图 1 所示。



1. 如果能隙很小或为 0,则固体为金属材料，在室温下电子很容易获得能量而跳跃至传导带而导电；而绝缘材料则因为能隙很大（通常大于 9 电子伏特），电子很难跳跃至传导带，所以无法导电。一般半导体材料的能隙约为 1 至 3 电子伏特，介于导体和绝缘体之间。因此只要给予适当条件的能量激发，或是改变其能隙之间距，此材料就能导电。

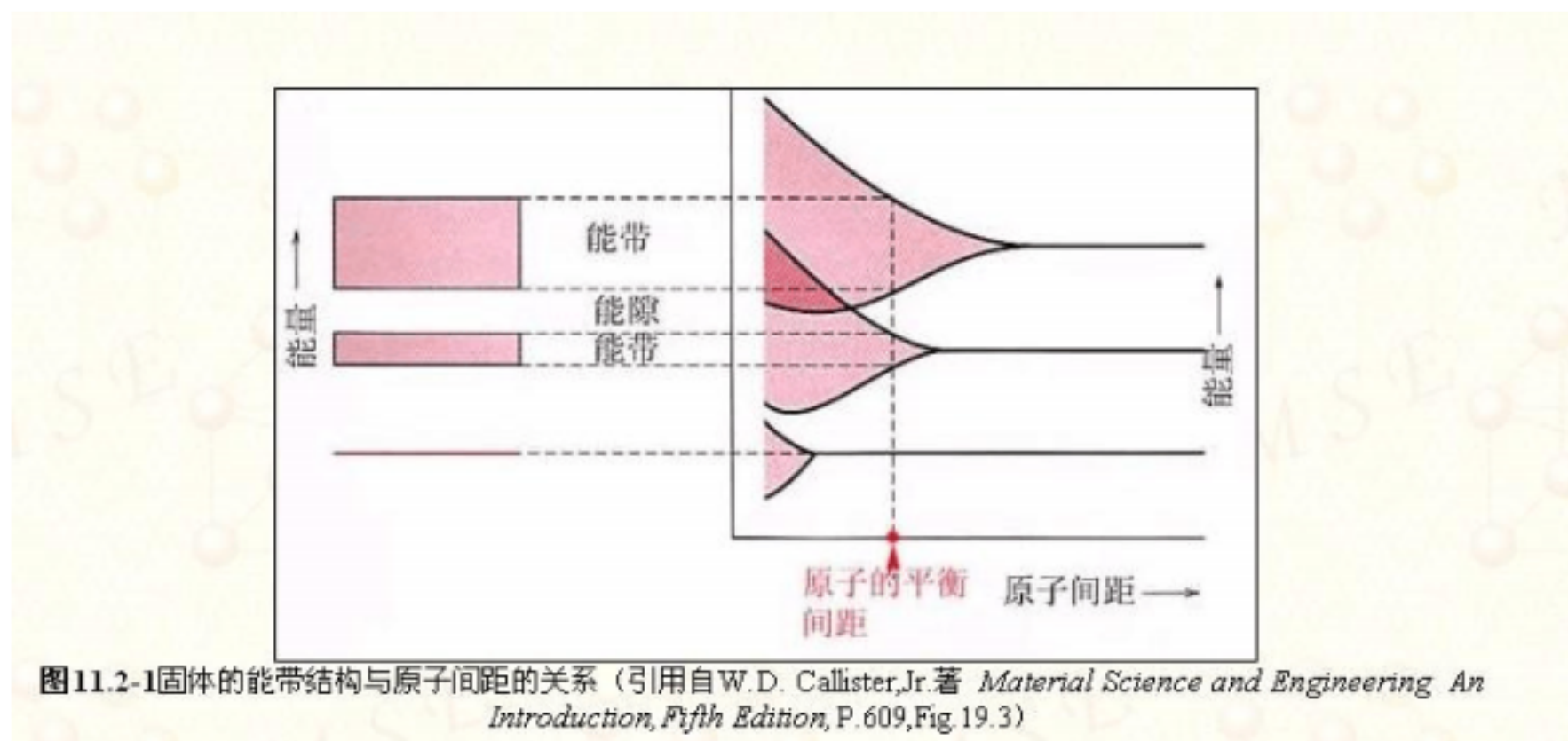
2. 能带用来定性地阐明了晶体中电子运动的普遍特点。价带 (valence band) , 或称价电带 , 通常指绝对零度时 , 固体材料里电子的最高能量。在导带 (conduction band) 中 , 电子的能量的范围高于价带 (valence band) , 而所有在传导带中的电子均可经由外在的电场加速而形成电流。对于半导体以及绝缘体而言 , 价带的上方有一个能隙 (bandgap) , 能隙上方的能带则是传导带 , 电子进入传导带后才能再固体材料内自由移动 , 形成电流。对金属而言 , 则没有能隙介于价带与传导带之间 , 因此价带是特指半导体与绝缘体的状况。

3. 费米能级 (Fermi level) 是绝对零度下电子的最高能级。根据泡利不相容原理 , 一个量子态不能容纳两个或两个以上的费米子 (电子) , 所以在绝对零度下 , 电子将从低到高依次填充各能级 , 除最高能级外均被填满 , 形成电子能态的 “费米海” 。“费米海” 中每个电子的平均能量为 (绝对零度下) 为费米能级的 $3/5$ 。海平面即是费米能级。一般来说 , 费米能级对应态密度为 0 的地方 , 但对于绝缘体而言 , 费米能级就位于价带顶。成为优良电子导体的先决条件是费米能级与一个或更多的 能带相交。

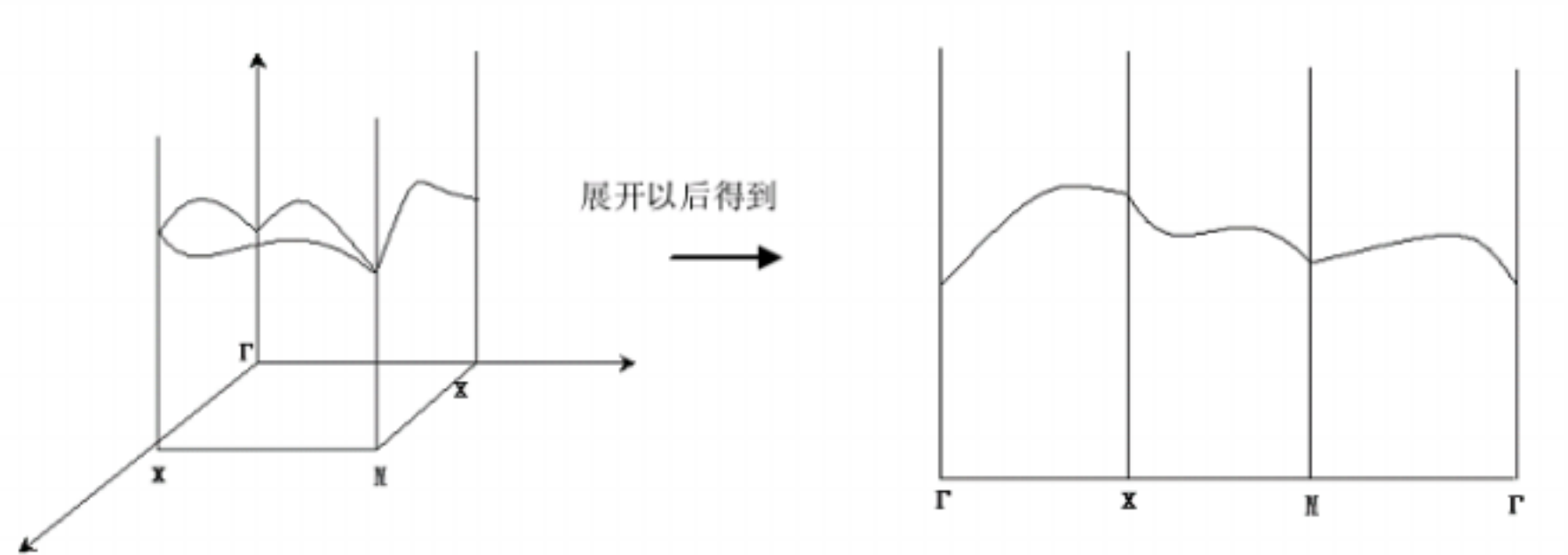
4. 能量色散 (dispersion of energy) 。同一个能带内之所以会有不同能量的量子态 , 原因是能带的电子具有不同波向量 (wave vector) , 或是 k-向量。在量子力学中 , k-向量即为粒子的动量 , 不同的材料会有不同的能量 -动量关系 (E-k relationship) 。能量色散决定了半导体

材料的能隙是直接能隙还是间接能隙。如导带最低点与价带最高点的 K 值相同，则为直接能隙，否则为间接能隙。

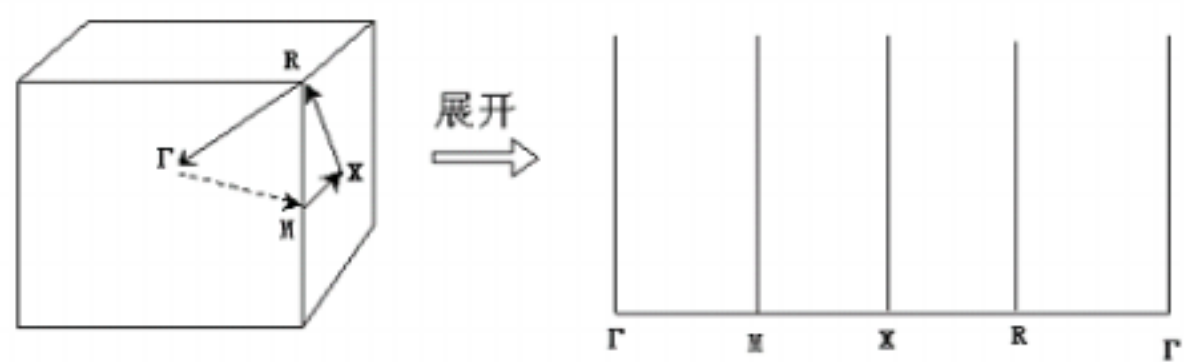
5. 能带的宽度。能带的宽度或散度，即能带最高和最低能级之间的能量差，是一个非常重要的特征，它是由相互作用的轨道之间的重叠来决定的，因而反应出轨道之间的重叠情况，相邻的轨道之间重叠越大，带宽就越大。



6.如果是二维能带，有 4 个高对称点，如果是三维的能带，有 5 个高对称点？？？（详见 carlon 的《能带结构和态密度图的绘制及初步分析》）。



三维的能带展开见下图：



我简单说一下我对费米能级的理解：

若固体中有 N 个电子，他们的基态是按泡利原理由低到高填充能量尽可能低的 N 个量子态。有两类填充情况：

一、电子恰好填满最低的一系列能带，再高的各带全部是空的，最高的满带称为价带，最低的空带称为导带。价带最高能级（价带顶）与导带最低能级（导带底）之间的能量范围称为带隙。这种情况对应绝缘体和半导体。半导体实际上是带隙宽度小的绝缘体。

二、除去完全被电子充满的一系列能带外，还有只是部分的被电子填充的能带（常被称为导带）。这时最高占据能级为费米能级 E_F ，它位于一个或几个能带的能量范围之内。这就是金属。

知道上述两种情况，就很好理解费米能级了。

再说白了，固体内的电子因泡利不相容原理，不能每一个电子都在最低的能级，便一个一个依序往从低能级往高能级填，直到最后一个填进的那个能级便是所谓的费米能级。

如果你明白了费米能级，就知道它可以是任何数值。有的文献中，为了讨论方便。就定义了费米能级为零点（估计你的概念就是从这里得出的）。

不同的费米能级有不同的物理意义

从你的计算数只看，你计算的物体应该是个半导体，因为半导体的费米能级 E_F 总为负值。

最后补充一点，一般我们讨论的都是电子是费米子。至于中子、质子等其他费米子另当别论。