



第六节 金属、半导体、绝缘体

1、电导与能带的关系

电子的电流密度为：

$$\vec{dj} = [-e\vec{v}(\vec{k})]dn$$



在 \vec{k} 空间中体积元 $d\vec{k}$ 内电子数密度为:

$$dn = \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot f d\vec{k} \quad f \text{ ---- 费米分布函数}$$

总电流密度:

$$\vec{j} = \int_{B.Z.} d\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{B.Z.} \vec{v}(\vec{k}) f d\vec{k}$$

(对整个布里渊区积分)



$E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$ ----是波矢 \vec{k} 的偶函数

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} E(-\vec{k})$$

$$= -\frac{1}{\hbar} \nabla_{-\vec{k}} E(-\vec{k}) = -v(-\vec{k})$$



$E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$ -----是波矢 \vec{k} 的偶函数

$\vec{v}(\vec{k}) = -\vec{v}(-\vec{k})$ -----是波矢 \vec{k} 的奇函数

$$f = \frac{1}{e^{\frac{(E-E_F)}{k_B T}} + 1} \quad E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$$



$E(\vec{k}) = E(-\vec{k})$ ----是波矢 \vec{k} 的偶函数

$\vec{v}(\vec{k}) = -\vec{v}(-\vec{k})$ ----是波矢 \vec{k} 的奇函数

$f[E(\vec{k}), T] = f[E(-\vec{k}), T]$ ----波矢 \vec{k} 的偶函数



总电流密度:

$$\vec{j} = \int_{B.Z.} d\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{B.Z.} \vec{v}(\vec{k}) f d\vec{k}$$

(对整个布里渊区积分)

被积函数为波矢 \vec{k} 的奇函数



(1)、在无外电场作用平衡态电子的电流

总电流密度:

$$\vec{j} = \int_{B.Z.} d\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{B.Z.} \vec{v}(\vec{k}) f d\vec{k}$$

(对整个布里渊区积分)

平衡态无外场作用，积分为0---电流为0



(2)、有外场作用，平衡状态的满带电导

外电场作用下，电子的波矢按：

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \vec{F}$$

的规律变化



电子波函数在波矢空间中是周期性的:

$$\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \Psi_{\vec{k} + \vec{K}_h}(\vec{r}) \quad (\vec{K}_h \text{ 为倒格矢})$$

即: 高阶布区中的电子波函数通过
加上一个倒格矢又回到第一布里渊区。



类似于:

从第一布里渊区的一端流出的电子，
又从另一端流入第一布里渊区。

总体上看:

电子在第一布里渊区中的分布没
有变化。

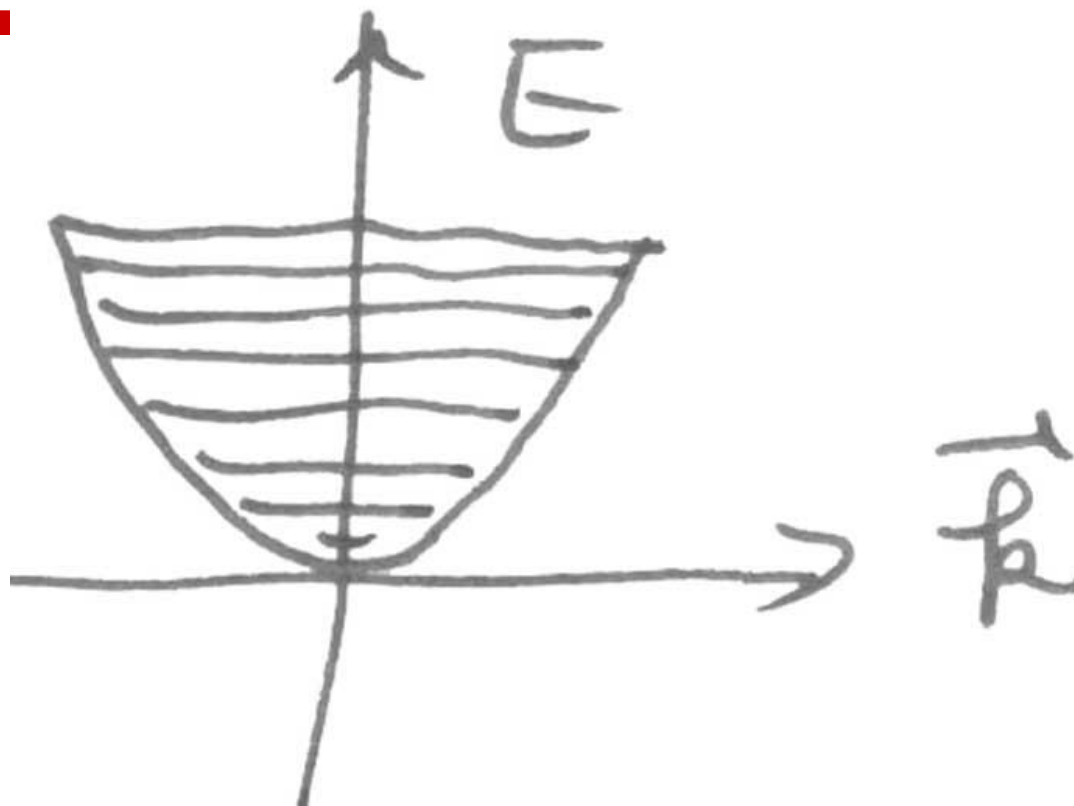


即使在外场作用下，满带电子的总电流

$$\vec{j} = \int_{B.Z.} d\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{B.Z.} \vec{v}(\vec{k}) f d\vec{k}$$

与无外场一样，被积函数仍然是波矢的

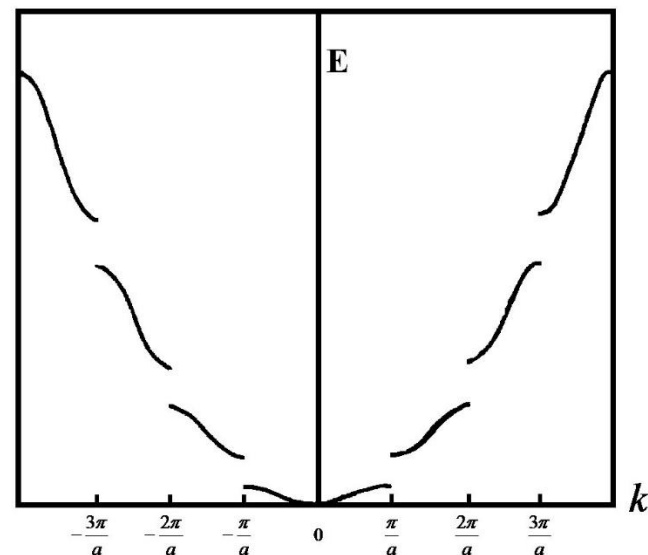
奇函数，积分仍然等于零



满带对导电无贡献



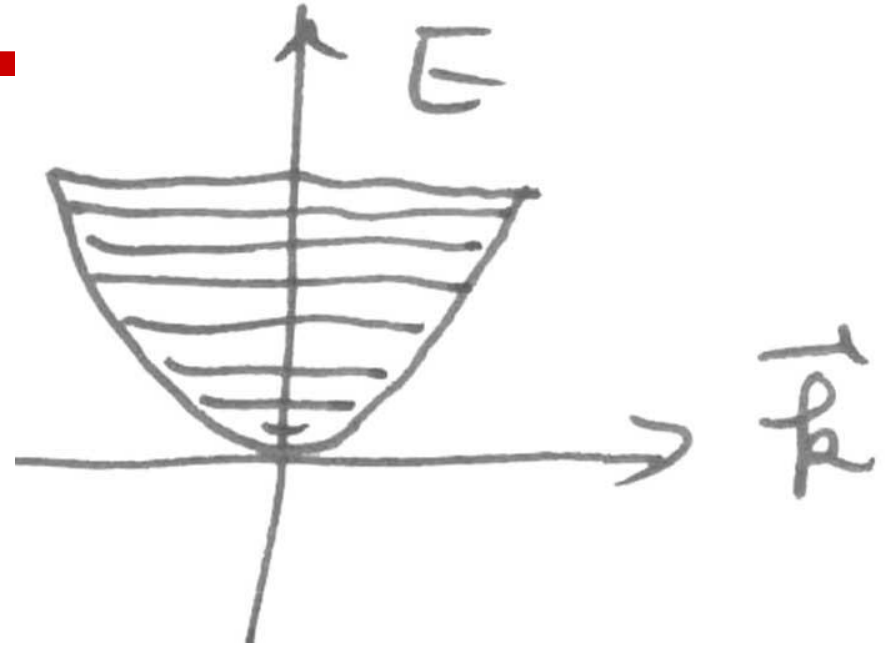
物理解释:



- (1)、通常的外电场作用下，电子不可
能产生跃迁(电子直接从能带顶部
激发到上一个能带的能带底部。



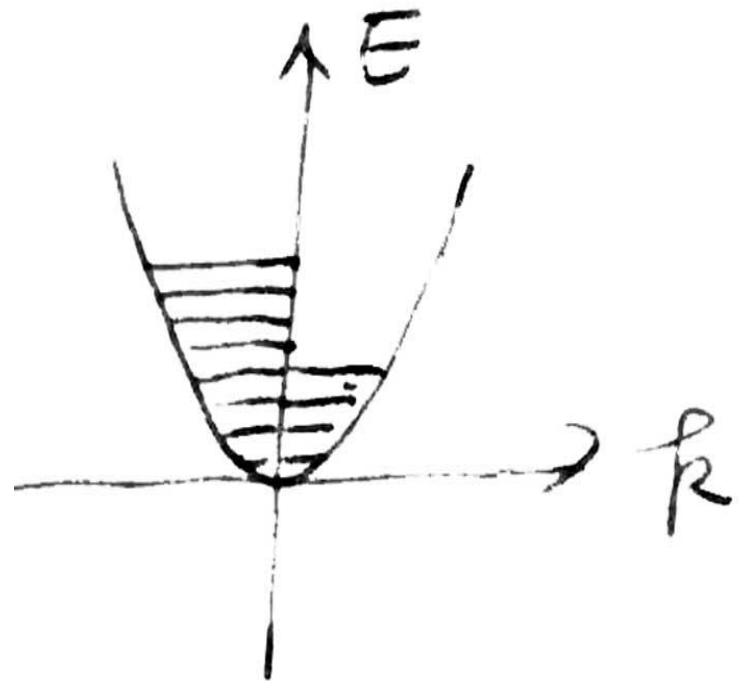
(2)、对于满带，
虽然，在外电场作用下电子会产生运动，但因所有的状态都被电子占据了，而电子又不可能被激发，因此，从宏观上看，电子的分布不随外电场的作用而变化， $j=0$ 。





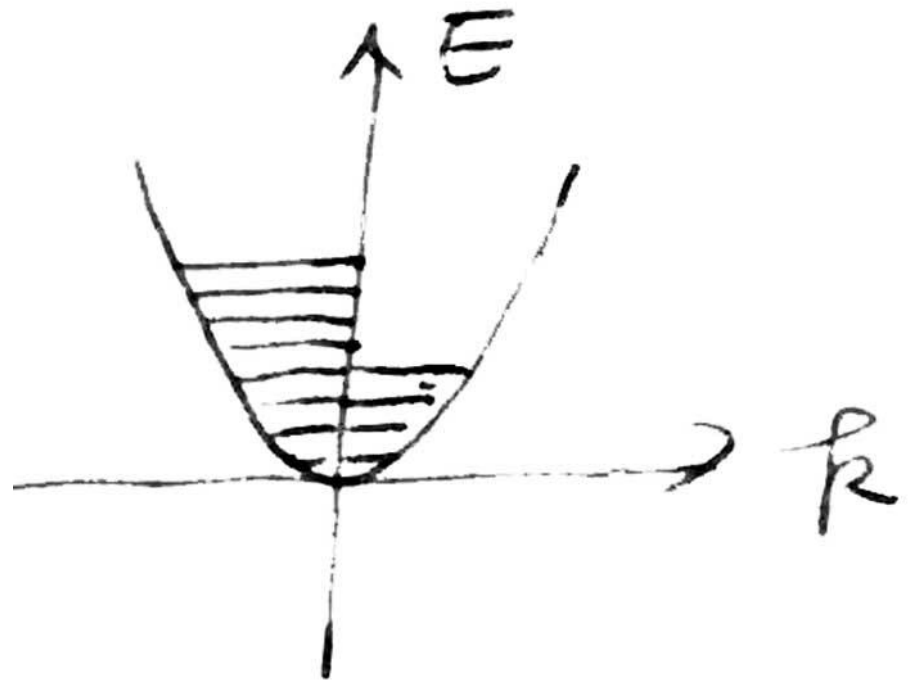
(3). 外场作用下平衡状态的不满带电导

在外电场作用下，由于电子波矢随时间的变化而变化，最终导致了平衡状态下，电子在能带中的分布发生变化。





与无外电场的
情况相比，电
子在第一布里
渊区的分布不
再对称。





总电流密度:

$$\vec{j} = \int_{B.Z.} d\vec{j} = -\frac{e}{4\pi^3} \int_{B.Z.} \vec{v}(\vec{k}) f d\vec{k}$$

(对整个布里渊区积分)

不等于零

不满带对电导有贡献!



总结

满带对电导没有贡献，只有不满

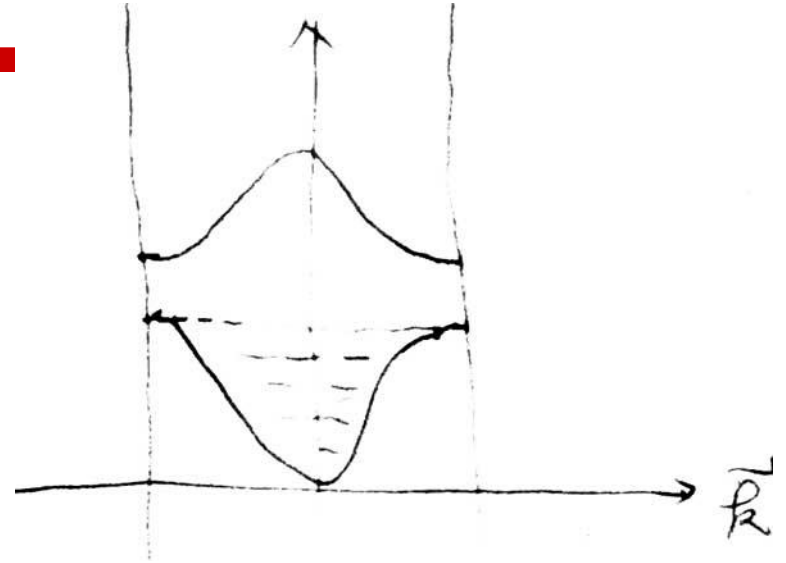
带才对电导有贡献。



2、空穴

如果满带带顶
有一个电子被激发
到空带的带底，则

在满带顶部留下一个未被电子占据的状态，从而使这个能带变成了不满带。习惯上，称在满带带顶的这个未被电子占据的状态为空穴。空穴带正电。





3、导体、绝缘体、半导体

(1)、满带对电导没有贡献，只有不满带才对电导有贡献。

(2)、在导体的能带结构中，最高能带为不满带，表现出良好导电性。



(3)、在绝缘体的能带结构中，最高能带为满带，其上一能带为空带，而且，满带与空带之间的禁带宽度较大，电子无法靠热激发从满带顶部激发到空带底部，因此，不导电。



(4)、在半导体的能带结构中，最高能带也为满带，其上一能带也为空带，但满带与空带之间的禁带宽度较小，在常温下，电子可以靠热激发从满带顶部激发到空带底部，从而，在满带顶部留下带正电的空穴，使空带和满带都变成了不满带，因此，表现出一定的导电性。

