

第四章

4.1.1 电子分布的概念:

半导体：常温下导电能力介于导体与绝缘体之间的材料

半导体材料的最大优势：导电能力可控性（掺杂，温度，光照，电磁场等因素）
一些元素及其符号：

II	III	IV	V	VI
4 铍 Be Beryllium 9.012	5 硼 B Boron 10.811	6 碳 C Carbon 12.011	7 氮 N Nitrogen 14.007	8 氧 O Oxygen 15.999
12 镁 Mg Magnesium 22.989	13 铝 Al Aluminum 26.982	14 硅 Si Silicon 28.085	15 磷 P Phosphorus 30.974	16 硫 S Sulfur 32.06
30 锌 Zn Zinc 65.38	31 镓 Ga Gallium 69.72	32 锗 Ge Germanium 72.5	33 砷 As Arsenic 74.922	34 硒 Se Selenium 78.9
48 镉 Cd Cadmium 112.41	49 铟 In Indium 114.82	50 锡 Sn Tin 118.6	51 锑 Sb Antimony 121.7	52 碲 Te Tellurium 127.6
80 汞 Hg Mercury 200.5	81 铊 Tl Thallium 204.3	82 铅 Pb Lead 207.2	83 铋 Bi Bismuth 208.98	84 钋 Po Polonium (209)

金刚石晶格：Si, Ge

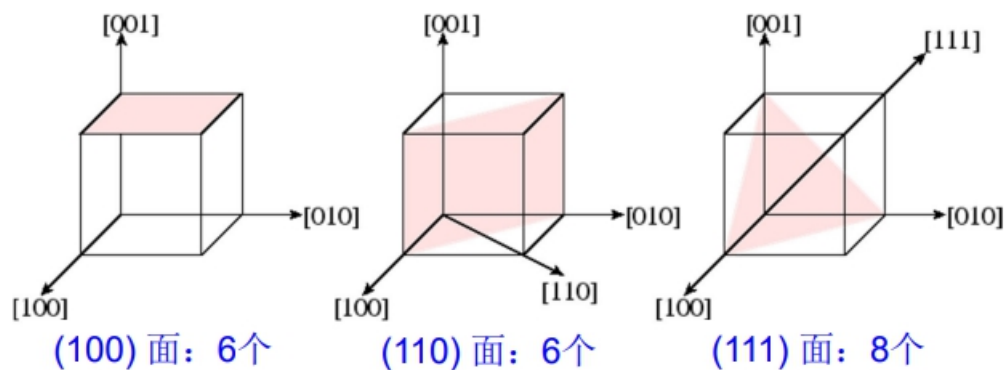
闪锌矿结构：ZnS, GaAs, SiC

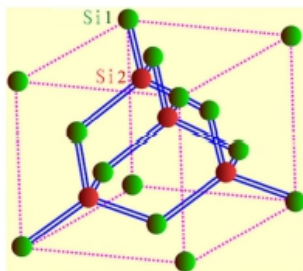
六边纤锌矿结构：GaN, AlN

密勒指数：如 (100) 面有 6 个，[001]、[010]、[100]、[00-1]、[0-10]、[-100]

(110) 面有 6 个，[110]、[101]、[011]、[1-10]、[10-1]、[01-1]

(111) 面有 8 个，[111]、[-111]、[-1-11]、[1-11]、[11-1]、[-11-1]、[-1-1-1]、[1-1-1]



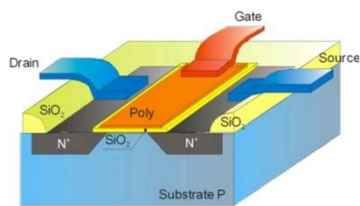


对于Si:

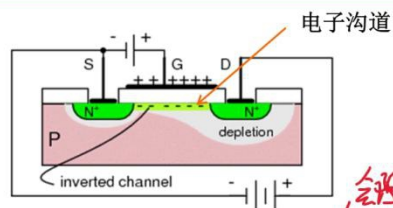
(100)面原子面密度最小，相应的界面态和固定电荷 (100)面最低

晶体在(111)晶面上的原子分布最均匀

应用举例

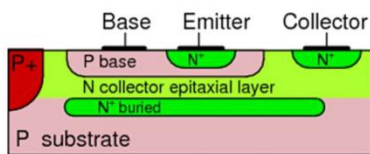


MOS晶体管结构示意图



(100)晶面: 希望界面态和固定电荷低。从而电子的迁移率较高。

会阻碍电子迁移



双极晶体管平面结构图

热扩散来制作的p-n结，基区由二次扩散形成。为了保证结面平坦，要求原子分布均匀。

晶体在(111)晶面上的原子分布最均匀。

4.1 电子的分布:

4.1.1 电子分布的概念

电子分布: 坐标空间分布和能量空间分布

(1) 电子坐标空间:

磁量子数 m_l \times 自旋量子数 m_s

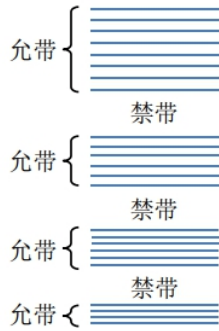
Si的核外电子排布: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

主量子数 n

角量子数 l

(2) 能量空间分布:

定性分析

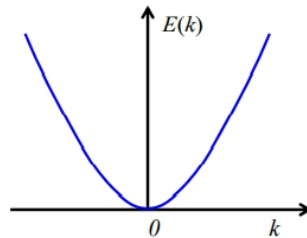


能带示意图

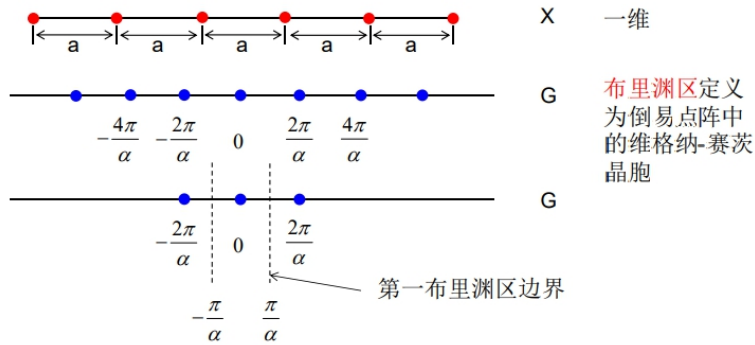
自由电子模型:

E—K 关系:

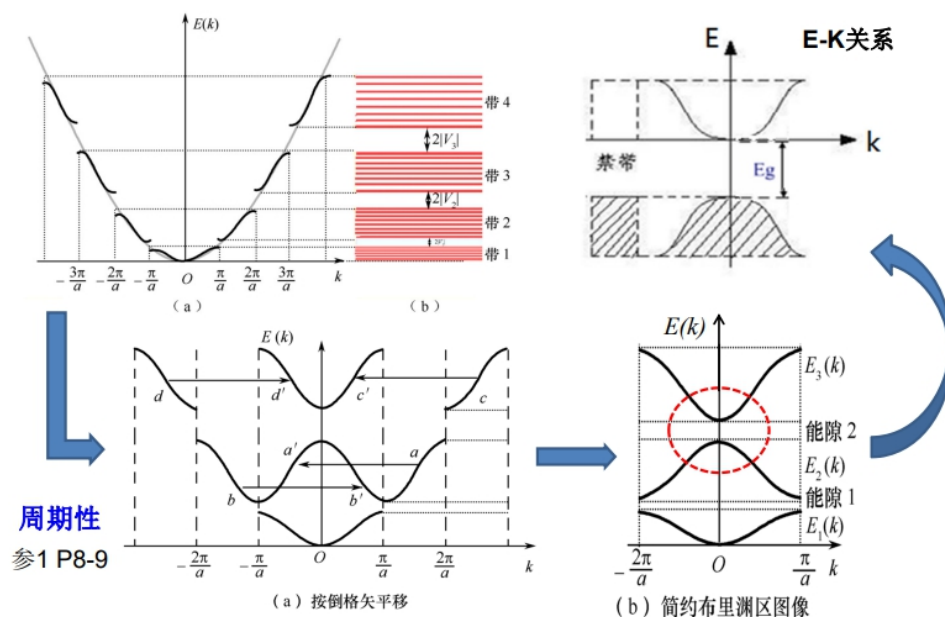
$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



准自由电子模型:



4.1.1 (2) 电子能量空间分布:



4.1.1 (3) 准经典粒子

电子在周期性势场中的运动，用平均速度（群速度）来描述；
 布洛赫定理说明电子的运动可以看作是很多行波的叠加，它们可以叠加为波包；
 而波包中心的速度，即：群速就是电子的平均速度。
 设波包由许多角频率 ω 相差不多的波组成，则波包群速 v_g 为

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad \left(\text{此外 E-K 关系为: } E(k) - E(0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_w^*} \right)$$

即：

$$v_g = \frac{\hbar k}{m_n^*} \quad \left(\text{有效质量为: } m_n^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \bigg|_{k=0} \right)^{-1} \right)$$

外加电场时，电子在周期性势场中和外电场中运动。
 考虑 dt 时间内外电场 E 对电子的做功：

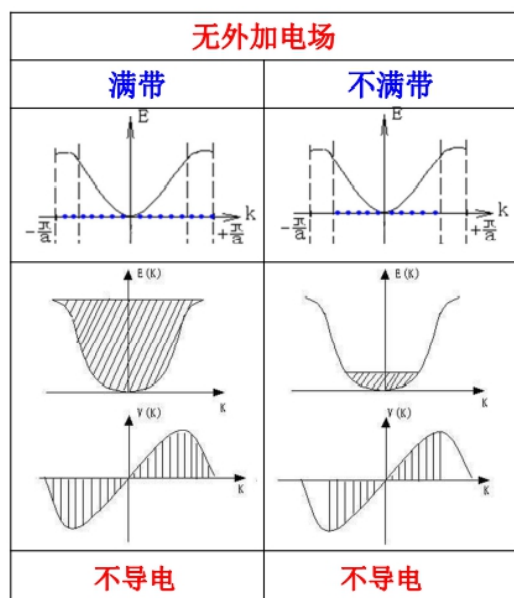
$$F = F_{\text{外}} + F_{\text{内}} = m_n a \longrightarrow F_{\text{外}} = m_n^* a$$

$$\text{有效质量: } m_n^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \bigg|_{k=0} \right)^{-1}$$

有效质量概括了半导体内部势场的作用，使电子外场作用下和自由电子相似
 有效质量可以直接测量

4.1.2 半导体的能带特点

(1) 电子对能带的填充情况



无外加电场

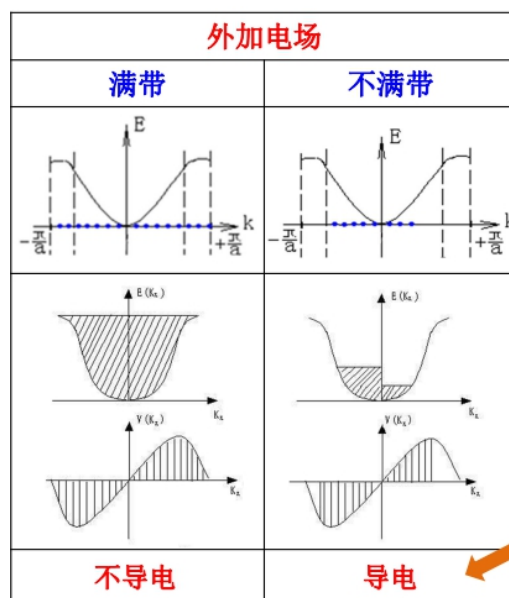
$$\begin{cases} E(k) = E(-k) \\ v_g(k) = -v_g(-k) \end{cases}$$

电子漂移电流密度 J

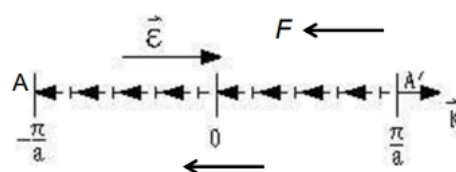
$$J = \sum_{i=1}^N -q v_g = -q \sum_{i=1}^N v_g$$

$$\downarrow \sum_{i=1}^N v_g = 0$$

$+k$ 和 $-k$ 状态的电子对于电流的贡献相互抵消



外加电场



$$F_{\text{外}} = -q |\vec{\varepsilon}| \quad F_{\text{外}} = \hbar \frac{dk}{dt}$$



$$\boxed{\frac{dk}{dt} = \frac{-q |\vec{\varepsilon}|}{\hbar}} \quad J = -q \sum_{i=1}^N v_g$$

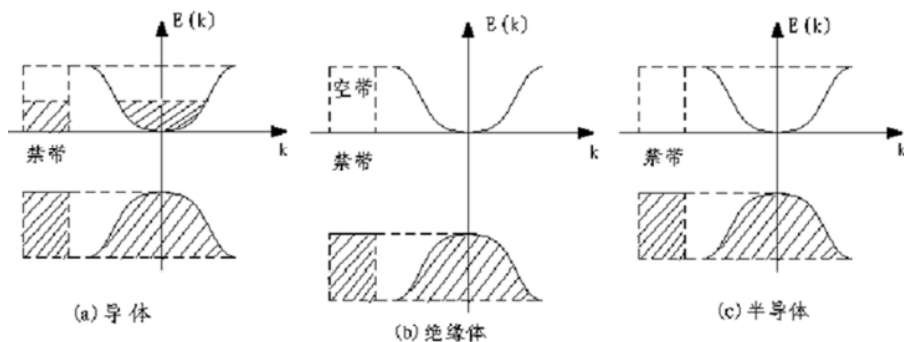
外力作用使得电子获得了能量和净动量，电子可以移动到空状态中

电子对能带填充情况不同，使得不同晶体导电性不同

导体：能带中一定有**不满带**

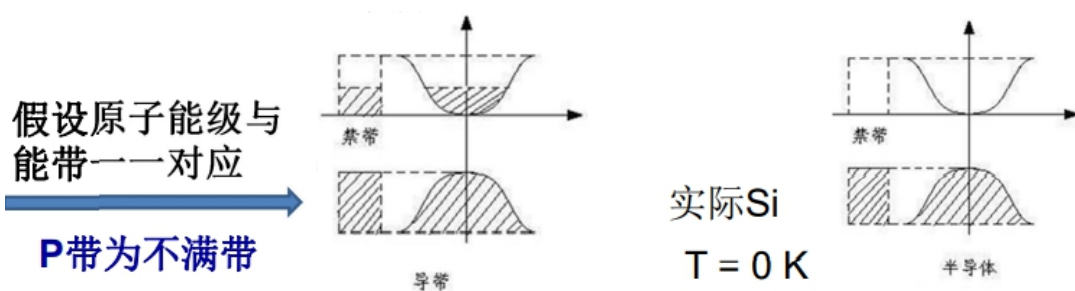
半导体：能带中只有满带和空带，禁带宽度较窄，一般小于2eV。

绝缘体：能带中只有满带和空带，禁带宽度通常在3.5-6eV。

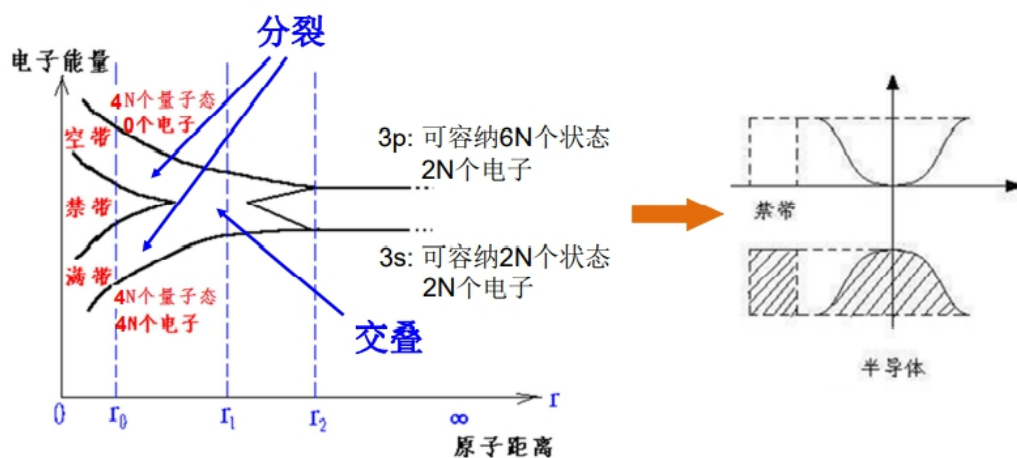


举例：

Si的核外电子排布：1s²2s²2p⁶3s²3p²

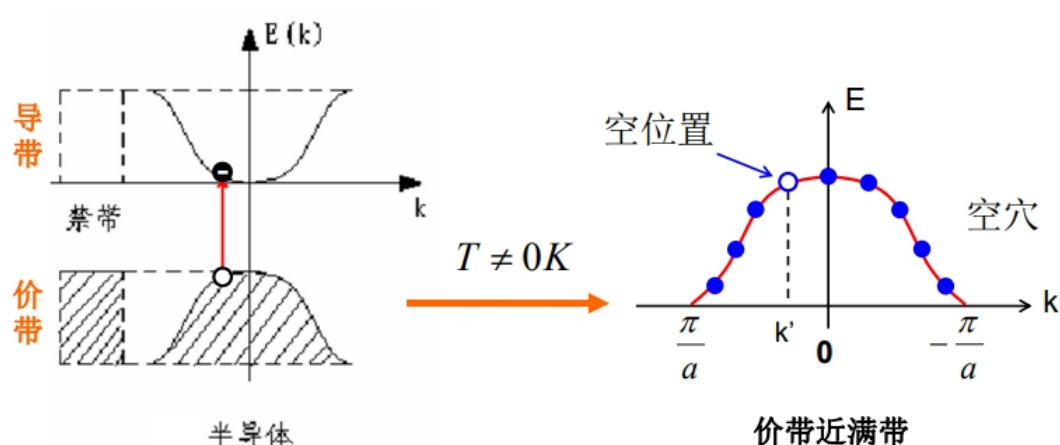


3s: 2N个电子对应2N个状态
3p: 2N个电子对应6N个状态



随着原子间距的减小，3s和3p态产生交叠，并最终分裂成允带和禁带，4N个量子态处较低能带，4N个量子态处于较高能带。

(2) 近满带与空穴



引入空穴：空穴带正电荷

假如在空的 k 状态放入一个电子，这个电子的电流为 $-qv(k')$

设近满带的电流为 $J(k)$ ，则

$J(k) + [-qv(k')] = 0$ (加入电子后满带，电流为 0)

$J(k) = qv(k')$

所以不满带的电流为 $qv(k')$ ，即一个带正电荷 q 的粒子（空穴）

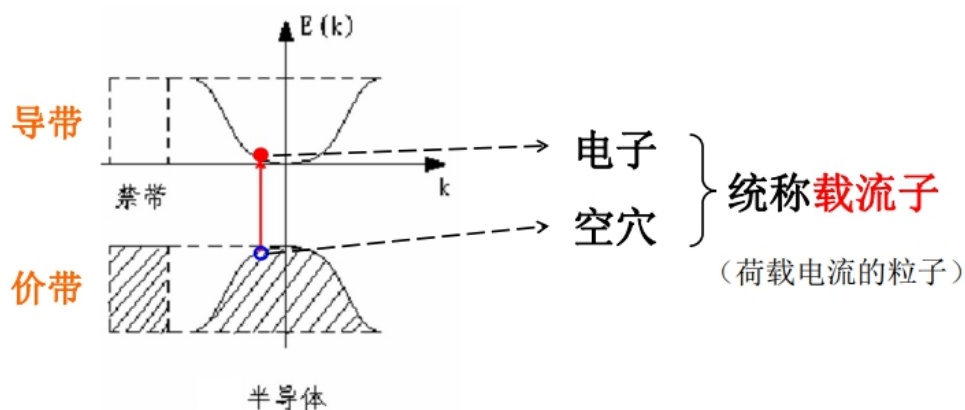
空穴的特点：

空穴的有效质量为正

$$m_p^* = -m_n^*$$

价带顶附近， $m_n^* < 0$ ，所以 $m_p^* > 0$

（根据等量的价带电子的有效质量求得价带空穴的有效质量）



半导体是**两种载流子**参与导电。

(3) 等能面与回旋共振实验

半导体材料的能带结构不同，往往是各向异性（沿不同的波矢 \mathbf{k} 的方向， $E-\mathbf{k}$ 关系也不同）

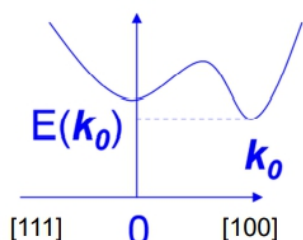
需要利用实验来确定半导体中的电子能态

等能面： $E(\mathbf{k})$ 为某一定值时，对应不同的 \mathbf{k} ，将这些 \mathbf{k} 连成一个封闭面，这个面上的 E 是相等的，这个面称为等能面。

三维晶体：假设各向同性，各个方向的有效质量相同，能带底位于 $\mathbf{k}=0$ 处

$$\begin{cases} k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \\ m_x^* = m_y^* = m_z^* = m_n^* \\ E(\mathbf{k}) - E(0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \end{cases} \quad E(\vec{k}) - E(0) = \frac{\hbar^2}{2m_n^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

能带底的等能面为环绕原点的球面/椭球面，半径 $\sqrt{\frac{2m_n^*}{\hbar^2} [E(\vec{k}) - E(0)]}$



晶体往往是各项异性的，使得沿不同波矢 \mathbf{k} 的方向， $E-\mathbf{k}$ 关系也**不同**

不同方向上的**电子有效质量也往往不同**

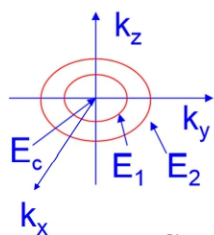
能带极值也**不一定在 $\mathbf{k}=0$ 处**

导带底： $\vec{k}_0, E(\vec{k}_0)$ 选择适当的坐标轴： k_x, k_y, k_z

定义 m_x^*, m_y^*, m_z^* 为相应方向的导带底电子有效质量

$$m_x^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \bigg|_{\vec{k}_0} \right)^{-1} \quad m_y^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \bigg|_{\vec{k}_0} \right)^{-1} \quad m_z^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \bigg|_{\vec{k}_0} \right)^{-1}$$

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right]$$

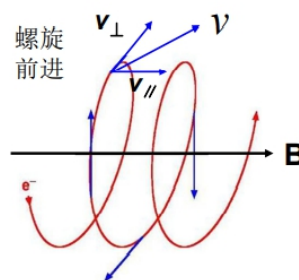


$$\frac{k_x^2}{2m_x^*(E - E_c)\hbar^2} + \frac{k_y^2}{2m_y^*(E - E_c)\hbar^2} + \frac{k_z^2}{2m_z^*(E - E_c)\hbar^2} = 1$$

半径问题转化为求有效质量的问题
这个等能面是椭球面

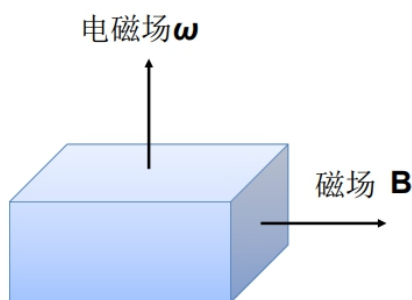
回旋共振实验

半导体中电子的初速度 \mathbf{v} , 在恒定磁场 \mathbf{B} 中运动, 电子的有效质量为 m_n^* , 求回旋频率。



$$B^*q^*v = m^*w^*v \quad (m^*v^2/r)$$

$$W = B^*q/m$$



两种调制方法:

1. 固定 ω , 连续改变 B
2. 固定 B , 连续改变 ω

由共振吸收谱确定 ω_c

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

