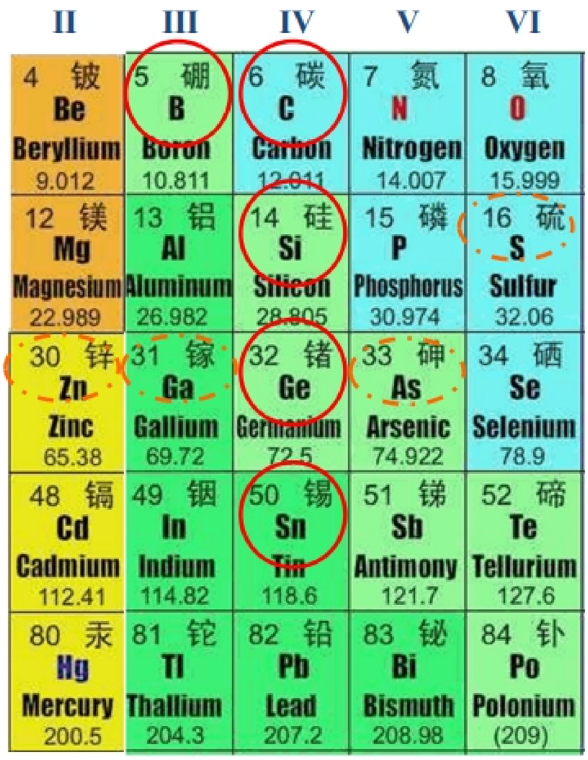
第四章

**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：




金刚石晶格：Si，Ge

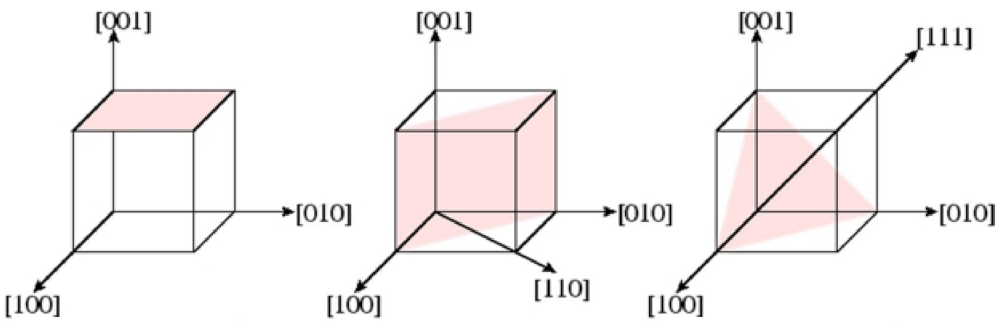
闪锌矿结构：ZnS，GaAs，SiC

六边纤锌矿结构：GaN，AlN

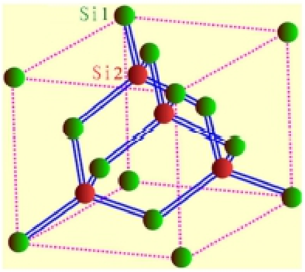
密勒指数：如（100）面有 6 个，[001]、[010]、[100]、[00-1]、[0-10]、[-100]

（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]



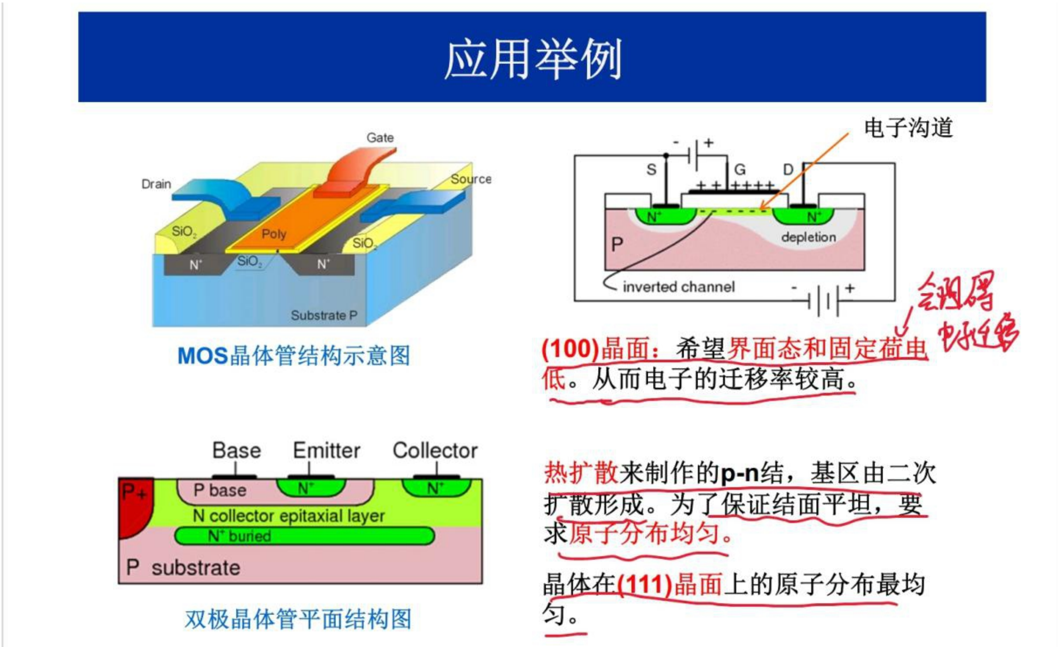

(100) 面：6个　　(110) 面：6个　　(111) 面：8个




**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**

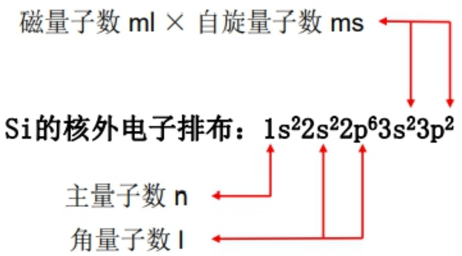



4.1 电子的分布：

4.1.1 电子分布的概念

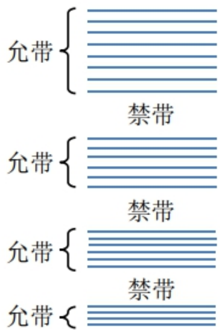
电子分布：坐标空间分布和能量空间分布

（1）电子坐标空间：




（2）能量空间分布：

**定性分析**

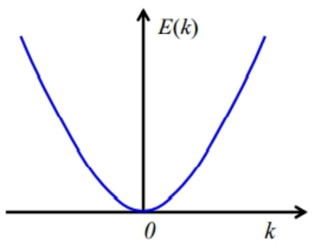



能带示意图

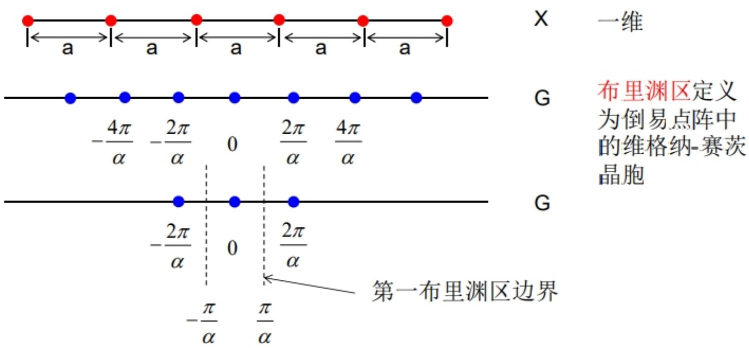
自由电子模型：

E—K 关系：

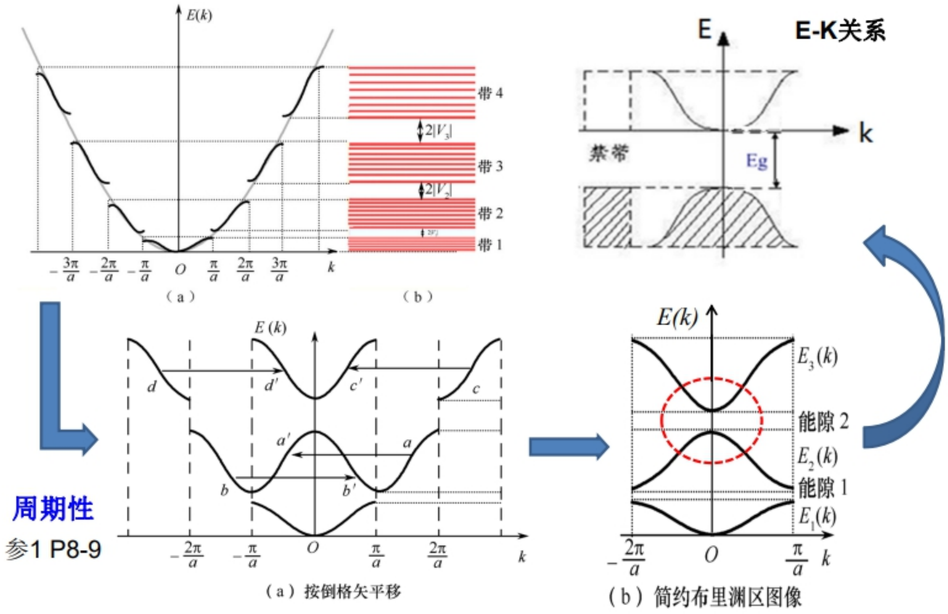
$$\boxed{E=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}}$$




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 Vg 为

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

即：

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

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：

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

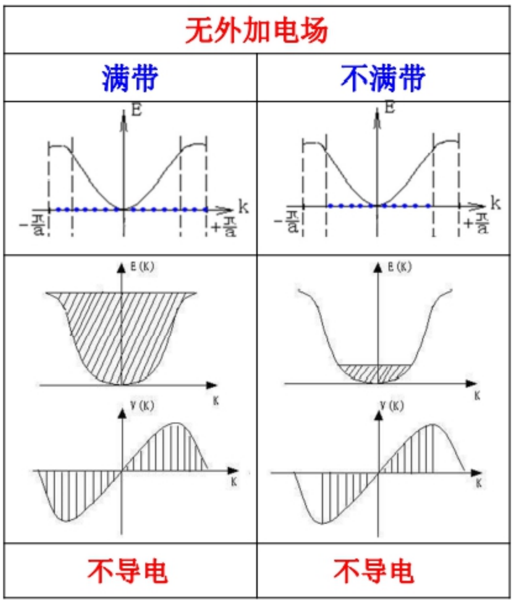
有效质量： $m_n^* = \left(\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}\bigg|_{k=0}\right)^{-1}$

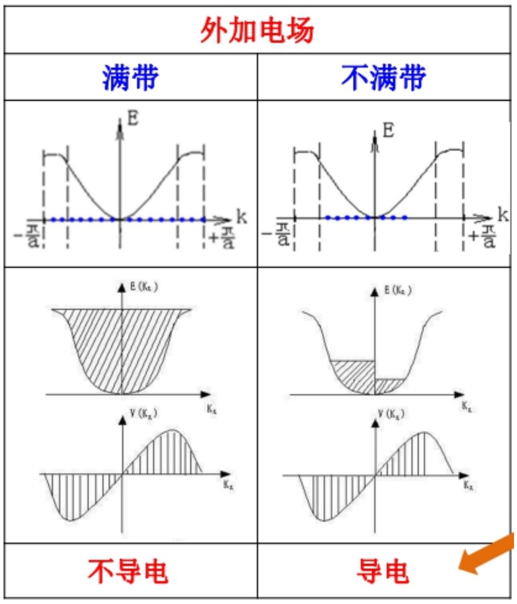
有效质量概括了半导体内部势场的作用，使电子外场作用下和自由电子相似

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

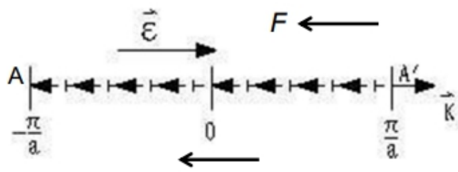



无外加电场

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 $J$

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

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

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

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

**$+k$ 和 $-k$** 状态的电子对于电流的贡献相互抵消

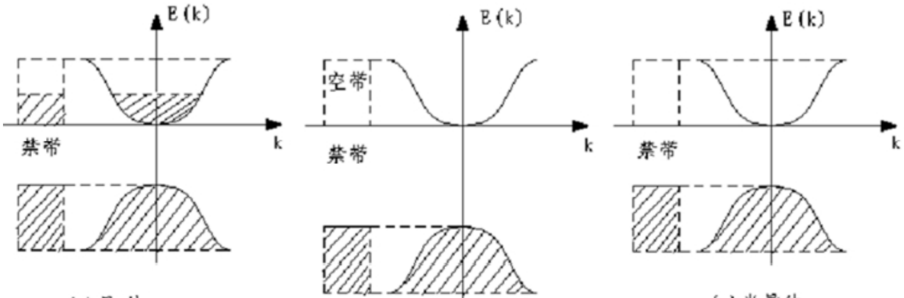
外力作用使得电子获得了能量和净动量，电子可以移动到空状态中

**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。

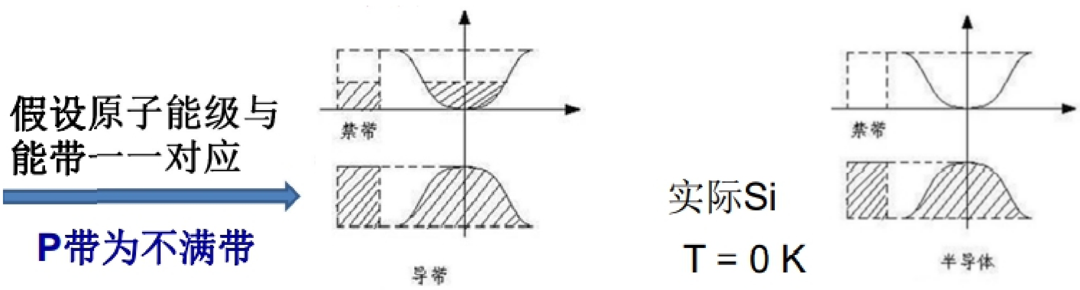
**绝缘体：**能带中只有满带和空带，禁带宽度通常在3.5-6eV。




(a) 导体　(b) 绝缘体　(c) 半导体

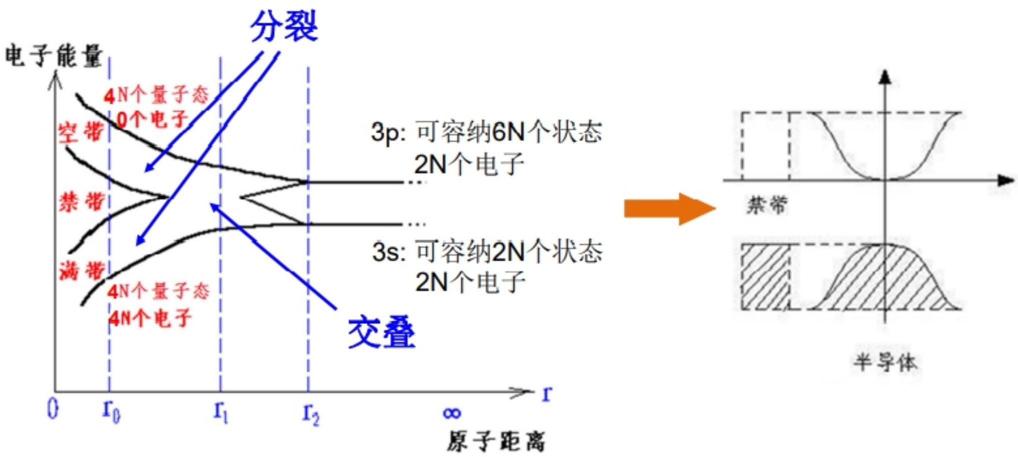
举例：

Si的核外电子排布：$1s^2 2s^2 2p^6 \boxed{3s^2 3p^2}$,



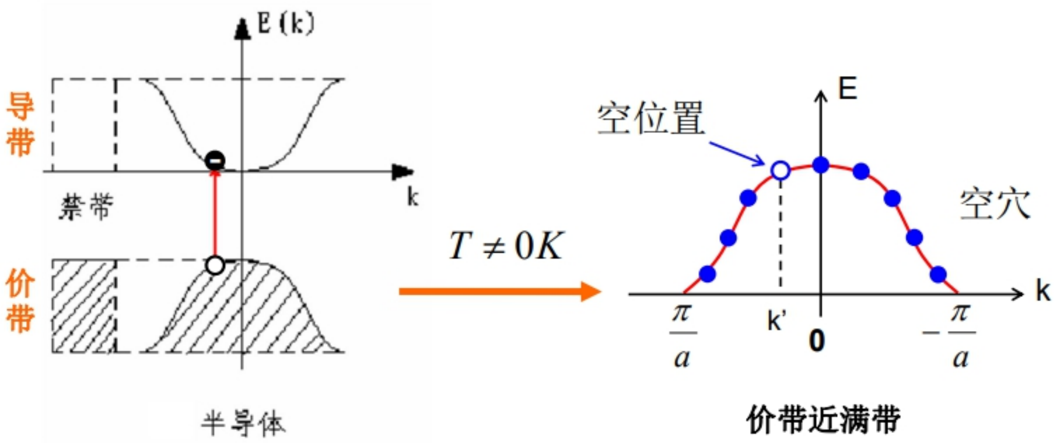

3s: 2N个电子对应2N个状态

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’）

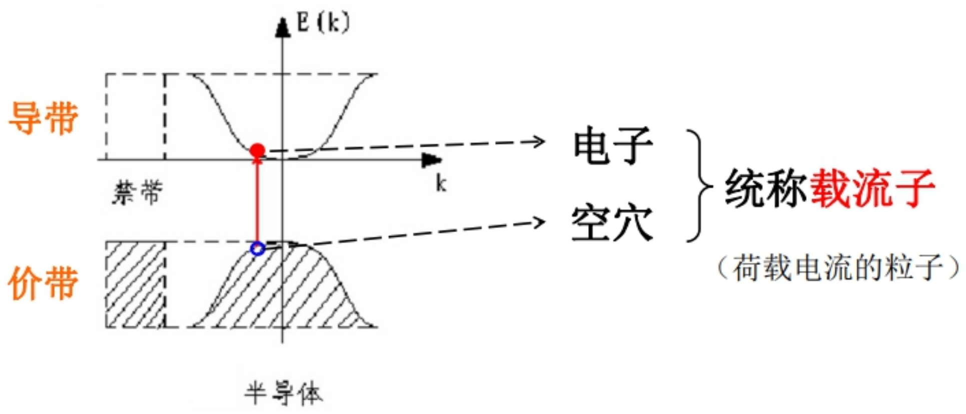
所以不满带的电流为 qv（k’），即一个带正电荷 q 的粒子（空穴）

空穴的特点：

空穴的有效质量为正

$$\boxed{m_p^* = -m_n^*}$$

价带顶附近，$m_n^* < 0$，所以 $\boxed{m_p^* > 0}$ （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于导电。**

（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 K 的方向，E-K 关系也不同）

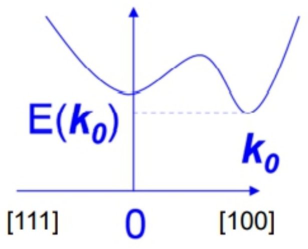
需要利用实验来确定半导体中的电子能态

等能面：E（k）为某一定值时，对应不同的 k，将这些 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 k=0 处

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

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




晶体往往是各项异性的，使得沿不同波矢$k$的方向，E-$k$关系也不同

不同方向上的电子有效质量也往往不同

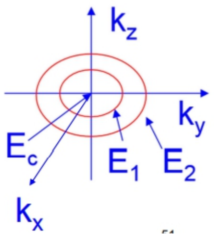
能带极值也不一定在$k$ = 0处

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

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

$$E(\vec{k}) = E(\vec{k_0}) + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right]$$

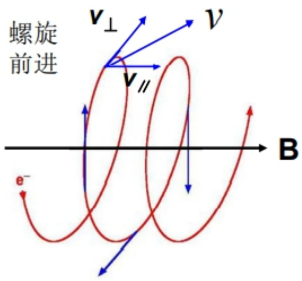



$$\frac{k_x^2}{\frac{2m_x^*(E - E_c)}{\hbar^2}} + \frac{k_y^2}{\frac{2m_y^*(E - E_c)}{\hbar^2}} + \frac{k_z^2}{\frac{2m_z^*(E - E_c)}{\hbar^2}} = 1$$

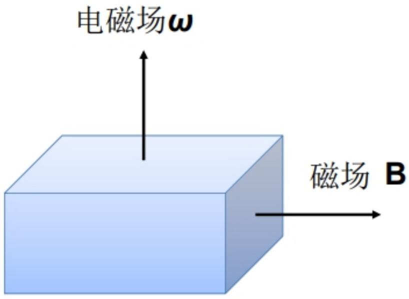
半径问题转化为求有效质量的问题
这个等能面是椭球面

回旋共振实验

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

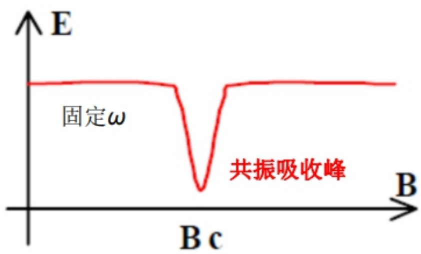



B*q*v=m*w*v（m*v^2/r）
W=B*q/m




由共振吸收谱确定$\omega_c$

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




**两种调制方法:**

1. 固定$\omega$，连续改变B

2. 固定B，连续改变 $\omega$