

## 本章目录

### 前言

- △ § 29.1 晶体的结构和结合 (补充)
- § 29.2 自由电子气体按能量的分布
- § 29.3 能带、导体和绝缘体
- § 29.4 物质导电性的能带论解释
- § 29.5 半导体的导电机构
- § 29.6 p-n 结
- △ § 29.7 半导体器件
- § 29.8 半导体激光器 (补充)

2

### 前言

气体 液体 固体 等离子体 液晶  
固体: 晶体、准晶体和非晶体

固体物理既是一门综合性的理论学科又和  
实际应用紧密结合 (材料、激光、半导体...)

▲ 固体物理是信息技术的物理基础

1928-29 建立能带理论并由实验证实

1947.12 发明晶体管

1962 制成集成电路

3

### △ § 29.1 晶体的结构和结合 (补充)

#### 一. 晶体和非晶体的比较

|       | 晶体       | 非晶体     |
|-------|----------|---------|
| 结 构:  | 规则排列的对称性 | 无一定规则排列 |
| 宏观性质: | 多为各向异性   | 各向同性    |
| 熔 点:  | 确定       | 逐渐软化    |

#### 二. 晶体的结构

晶体中原子规则排列形成晶格 — 具有周期性

4

点阵  
初基晶胞—晶格的最小单元

$a, b, c$ —晶格常数  
点阵间满足关系:  
 $\vec{r}' = \vec{r} + n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$

晶格有多种类型:

- ▲ 简单立方晶格(SC)  $a = b = c$
- ▲ 面心立方晶格(FCC) Au, Ag, Cu, Al...

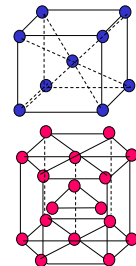
5

#### ▲ 体心立方晶格(BCC)

Li, Na, K, Fe,  
CsCl ...

#### ▲ 六角密排晶格(HCP)

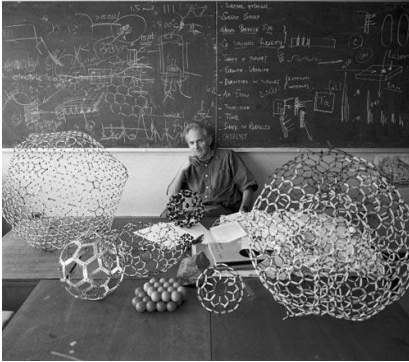
Be, Mg, Zn, Cd ...



组成晶格的原子(团)在平衡点附近作热运动  
(晶格振动)产生格波, 声子 能量  $E = (n + \frac{1}{2})h\nu$

6

## 碳富勒烯结构模型



7

## 三. 晶体的结合和类型

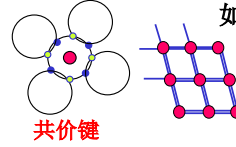
### ▲ 离子晶体 (Ionic Crystal)

正负离子交替排列形成离子键, 如NaCl 晶体

- 离子间静电力强→熔点高, 硬度好
- 无自由电子→导热导电性差

### ▲ 共价晶体 (Covalent Crystal)

如: Si, Ge, 金刚石

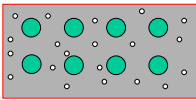


共价键

- 强度高, 坚硬, 不易变形
- 传热导电性不好

8

### ▲ 金属晶体 (Metallic Crystal)



原子贡献出价电子为整个晶体所共有  
带正电的原子实周期地排列形成晶体点阵

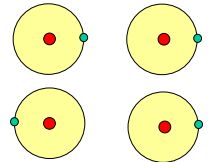
- 导热导电性好 (有自由电子)
- 电子对原子实的排列要求不严, 展延性好

9

### ▲ 分子晶体 (Molecular Crystal)

大部分有机化合物晶体是分子晶体

原子间的作用力是范德瓦尔斯力



吸引, 能量低

排斥, 能量高

- 结合力小: 熔点低, 硬度小, 易变形

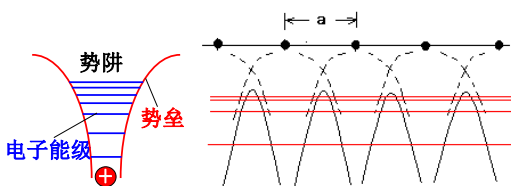
10

## § 29.2 自由电子气体按能量的分布

金属中的电子受到周期排布的晶格上离子库仑力的作用。

孤立原子

以一维晶格为例



11

解定态薛定谔方程, 可以得出两点重要结论:

1. 电子的能量是量子化的;
2. 电子的运动有隧道效应。

原子的外层电子 (在高级能级) 势垒穿透概率较大, 电子可以在整个固体中运动, 称为共有化电子。

原子的内层电子与原子核结合较紧, 一般不是共有化电子。

12

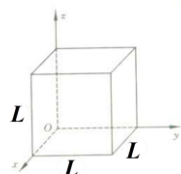
## 金属自由电子气体模型

平均场近似下，金属原子的价电子是在均匀的势场中运动，金属表面对电子可近似看作无限高势垒。（功函数远大于电子动能），这些价电子称为自由电子

$$U = \begin{cases} 0 & \text{内部} \\ \infty & \text{外部} \end{cases}$$

如果考虑立方体形状，N个自由电子好像是装在三维盒子的气体。

13



每个电子都要满足驻波条件

$$L = n_x \frac{\lambda_x}{2} \quad L = n_y \frac{\lambda_y}{2} \quad L = n_z \frac{\lambda_z}{2}$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3 \dots$$

$$p_x = \frac{h}{\lambda_x} = n_x \frac{h\pi}{L} \quad p_y = n_y \frac{h\pi}{L} \quad p_z = n_z \frac{h\pi}{L}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$k_x = \frac{2\pi}{\lambda_x} = n_x \frac{\pi}{L} \quad k_y = n_y \frac{\pi}{L} \quad k_z = n_z \frac{\pi}{L}$$

14

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$$

$$p_x = \hbar k_x = n_x \frac{h\pi}{L} \quad p_y = \hbar k_y = n_y \frac{h\pi}{L} \quad p_z = \hbar k_z = n_z \frac{h\pi}{L}$$

### 自由电子气体，量子化

能量、动量、波矢

### (n<sub>x</sub>, n<sub>y</sub>, n<sub>z</sub>) 量子数表示电子状态

### 相同的能量对应许多不同的状态(简并态)

(2,1,1) (1,2,1) (1,1,2)

15

## 自由电子气体的能量分布

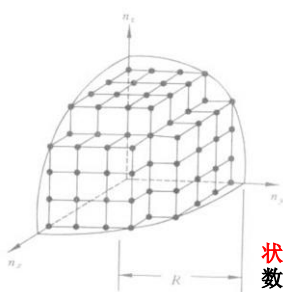
### 能量最低原则

### 泡利不相容原理

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 = \frac{2m_e L^2}{\hbar^2 \pi^2} E = R^2$$

在量子数空间，(n<sub>x</sub>, n<sub>y</sub>, n<sub>z</sub>) > 0 第一象限内从原点附近开始，一个球面接着一个向外填

16



在量子数空间

一个整数坐标点对应一个状态

整数坐标点的个数等于体积数

状态空间内整数坐标点的个数对应其体积，所以状态空间内体积就是状态数目。

17

考虑自旋以后，小于能量E的状态数目

$$N_E = 2 \times \frac{1}{8} \times \frac{4}{3} \pi R^3 = \frac{1}{3} (2m_e)^{3/2} \frac{L^3 E^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}$$

所有自由电子按能量从低到高占据可能的状态，最高能量达到E<sub>F</sub>——费米能级 费米面

$$N = \frac{1}{3} (2m_e)^{3/2} \frac{L^3 E_F^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \quad n = \frac{N}{V} = \frac{N}{L^3} \quad \text{自由电子数密度}$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}}{2m_e} \left( \frac{N}{L^3} \right)^{2/3} = \frac{\hbar^2 (3\pi^2)^{2/3}}{2m_e} n^{2/3}$$

铜电子数密度n: 8.49 × 10<sup>28</sup> / m<sup>3</sup>  $E_F \sim 7 \text{ eV}$   
v<sub>F</sub> = 1.6 × 10<sup>6</sup> m / s

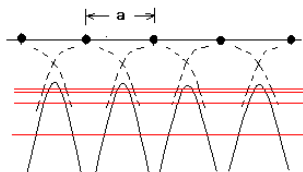
$$E_F = \frac{p_F^2}{2m_e} = \frac{1}{2} m_e v_F^2 \quad p_F, v_F \text{ 费米动量和费米速率}$$

18

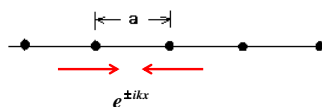
## § 29.3 能带、导体和绝缘体

### 一、能带

自由电子近似过于简单 要考虑与晶格散射



19



布拉格衍射极大条件  $2d \sin \theta = n\lambda$   $n$  整数

对于一维  $\theta = \pi/2$   $2d = n\lambda$

$$\lambda = \frac{2a}{n} \quad k = \frac{2\pi}{\lambda} = n \frac{\pi}{a}$$

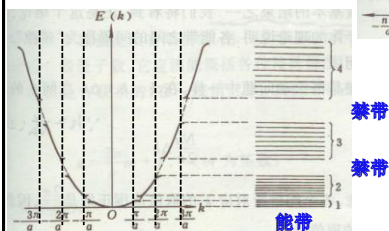
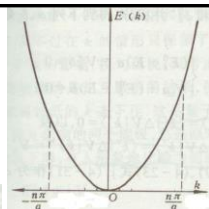
$$\text{对应的能量} \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{a}\right)^2 n^2$$

这种能量的电子不能自由传播

20

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad L = n \frac{\lambda}{2}$$

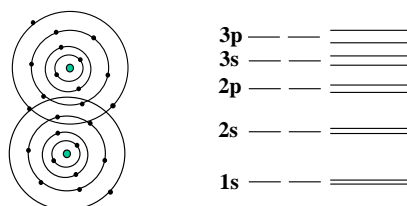
$$k = n \frac{\pi}{L} \quad \Delta k = \frac{\pi}{L} \ll \frac{\pi}{a}$$



21

### 相互作用使原子能级发生分裂（简并解除）

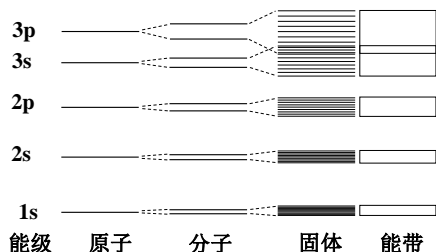
两个原子（分子）的情况



泡利不相容原理，原来的一条能级分裂为两条。

22

### 相互作用使原子能级发生分裂（简并解除） 从原子能级到固体能带（N个原子情况）



23

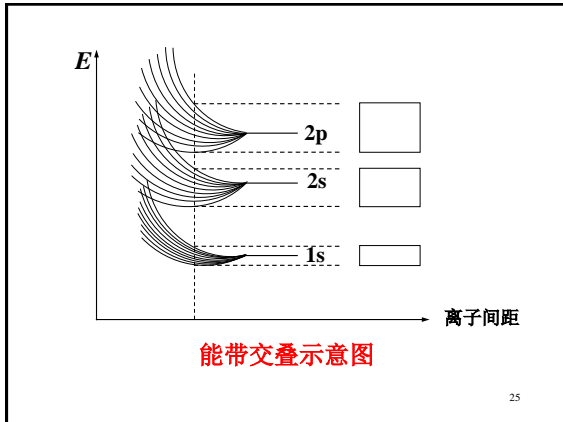
原子之间的相互作用使孤立原子的能级分裂（简并解除）。设有  $N$  个原子，形成固体后，原来孤立原子的 1 个能级，分裂成  $N$  条靠得很近的能级，称为**能带**。

能带宽度  $\Delta E \sim \text{eV}$ ，带内能级间距  $\sim \Delta E / N$

一般规律：

- 越是外层电子，带宽  $\Delta E$  越大
- 点阵间距越小，带宽  $\Delta E$  越大
- 能带之间有可能交叠

24



25

## 二、能带中电子的排布

固体中的一个电子只能处在某个能带中的某一能级上 排布原则（与单原子相同）：

(1) 服从泡利不相容原理 (费米子)

(2) 服从能量最小原理

设孤立原子的一个能级 $E_n$ ，最多能容纳 $2(2l+1)$ 的电子，这一能级分裂成由 $N$ 条能级( $N$ 个原子)组成的能带，最多能容纳 $2N(2l+1)$ 个电子。

例如

1s, 2s能带，最多容纳 $2N$ 个电子。

2p, 3p能带，最多容纳 $6N$ 个电子。

26

## 基本概念

**满带、不满带：**填满或未填满电子的能带

**空带：**未填电子的能带

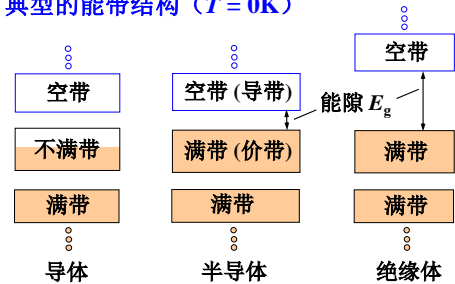
**禁带：**不允许填充电子的能量区

**价带：**和价电子能级相应的能带，即最高的填有电子的能带  
(半导体的价带通常是满带)

**导带：**往上紧邻价带的未排电子的能带

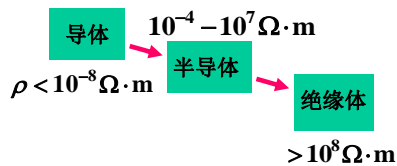
27

## 典型的能带结构 ( $T = 0K$ )



28

固体按导电性能的高低可以分为



它们的导电性能不同，是因为它们的能带结构不同。

29

## § 29.4 物质导电性的能带论解释

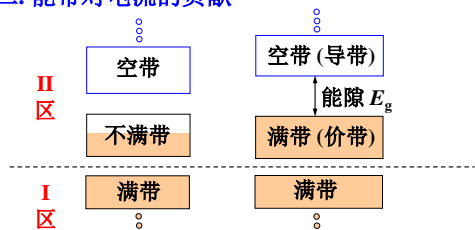
### 一. 电流形成

**经典解释：**在电场作用下，电子获得能量作集体的定向运动，形成电流。

**量子解释：**在电场作用下，电子发生带内或带间量子跃迁，使能带填充非对称化，带内电子对电流贡献不能抵消，导致电流形成。

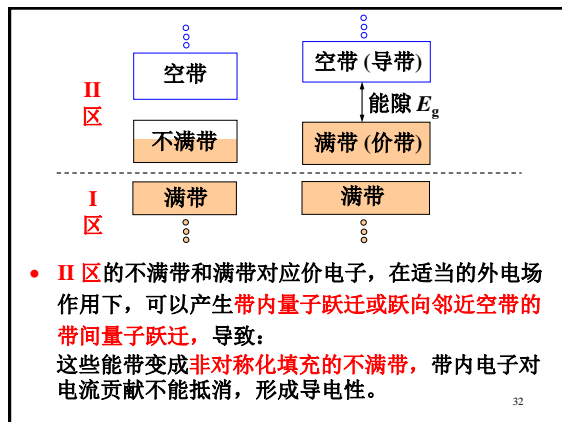
30

## 二. 能带对电流的贡献



- I 区的满带在电场作用下仍保持满带以及对称化填充，带内不同态的电子对电流的贡献相互抵消，故满带不导电。

31



- II 区的不满带和满带对应价电子，在适当的外电场作用下，可以产生带内量子跃迁或跃向邻近空带的带间量子跃迁，导致：这些能带变成非对称化填充的不满带，带内电子对电流贡献不能抵消，形成导电性。

32

## 三. 导体、半导体、绝缘体

导体：

存在不满带，带内的能级近似连续，所以不用很强的外电场，就可产生大量带内量子跃迁，造成非对称化填充的不满带，形成导电性。

半导体：

存在较小的能隙  $E_g$  (纯净半导体约  $0.1 \sim 2\text{eV}$ )，施加一定强度的外电场，就可产生价带到导带的量子跃迁，造成非对称化填充的不满带，形成导电性。

绝缘体：

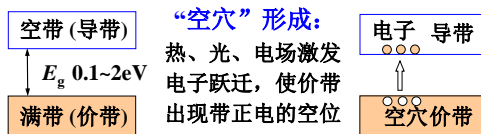
存在较大的能隙 ( $3 \sim 6\text{eV}$ )，施加一般强度的外电场无法产生满带到空带的量子跃迁，很难形成导电性。

33

## § 29.5 半导体的导电机构

### 一. 本征半导体

本征半导体是无杂质的纯净半导体。

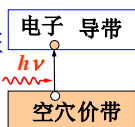


电子和空穴叫本征载流子，总是成对出现，形成半导体的本征导电性。

34

## 本征光电导

光照  $h\nu > E_g$  时，可发生本征吸收，产生本征光电导。



【例】半导体 CdS 能隙  $2.42\text{eV}$ ，要产生本征光电导，激发电子的光的波长最大值多少？

解：  $h\nu > E_g \Rightarrow \lambda < hc/E_g$

$$\lambda_{\max} = \frac{hc}{E_g} = \frac{6.63 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{2.42 \times 1.6 \times 10^{-19}} = 514\text{nm}$$

35

## 半导体的两种导电机制

- 电子导电 — 主要载流子是电子
- 空穴导电 — 主要载流子是空穴

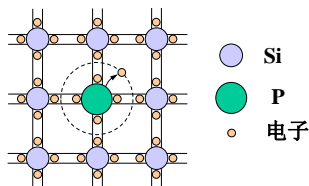
【思考】为何导体电阻随温度升高而升高，半导体电阻却随温度升高而降低？

36

## 二. 杂质半导体

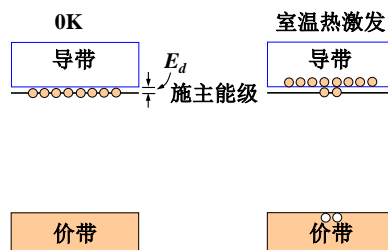
### 1. n型半导体

本征半导体（4价 Si、Ge等）掺入少量 5 价杂质元素（P、As等，称为施主），可形成以电子导电为主的半导体 — n 型半导体。



37

能带特点：禁带内紧靠导带处出现**施主能级**，距离  $E_d \sim 10^{-2}\text{eV}$ ，极易形成电子导电。



38

Si浓度 $\sim 10^{28}\text{m}^{-3}$ ，P浓度 $\sim 10^{24}\text{m}^{-3}$ ，Si / P $\sim 10^4$

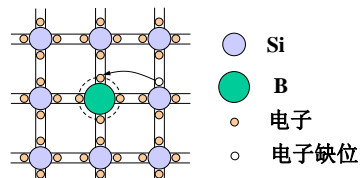
| 室温下<br>载流子浓度     | 本征激发                        | 杂质激发                        | 总计                          |
|------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 价带空穴<br>浓度 $n_p$ | $\sim 10^{16}\text{m}^{-3}$ |                             |                             |
| 导带电子<br>浓度 $n_n$ | $\sim 10^{16}\text{m}^{-3}$ | $\sim 10^{24}\text{m}^{-3}$ | $\sim 10^{24}\text{m}^{-3}$ |

对 n 型半导体：电子浓度  $n_n \approx$  施主浓度  $n_d$ ，电子是多数载流子，空穴是少数载流子。

39

### 2. p型半导体

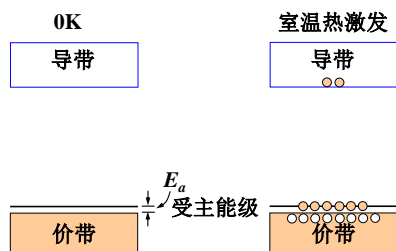
本征半导体（4价 Si、Ge等）掺入少量 3 价杂质元素（B、Ga等，称为受主），可形成以空穴导电为主的半导体 — p 型半导体。



电子缺位对应价带中的空穴

40

能带特点：禁带内紧靠价带处出现**受主能级**，距离  $E_a < 10^{-1}\text{eV}$ ，极易形成空穴导电。



41

Si浓度 $\sim 10^{28}\text{m}^{-3}$ ，B浓度 $\sim 10^{24}\text{m}^{-3}$ ，Si / B $\sim 10^4$

| 室温下<br>载流子浓度     | 本征激发                        | 杂质激发                        | 总计                          |
|------------------|-----------------------------|-----------------------------|-----------------------------|
| 价带空穴<br>浓度 $n_p$ | $\sim 10^{16}\text{m}^{-3}$ | $\sim 10^{24}\text{m}^{-3}$ | $\sim 10^{24}\text{m}^{-3}$ |
| 导带电子<br>浓度 $n_n$ | $\sim 10^{16}\text{m}^{-3}$ |                             |                             |

对 p 型半导体：空穴浓度  $n_p \approx$  受主浓度  $n_a$ ，空穴是多数载流子，电子是少数载流子。

42

### 3. 化合物半导体

- 半导体GaAs中掺Te，6价的Te替代5价的As产生施主能级，成为n型杂质半导体。
- 半导体GaAs中掺Zn，2价的Zn替代3价的Ga产生受主能级，成为p型杂质半导体。

43

### 三. 杂质的补偿作用

实际半导体中，既有施主杂质（浓度 $n_d$ ），又有受主杂质（浓度 $n_a$ ），两种杂质产生补偿作用：

若  $n_d > n_a$  — 为n型（施主）

若  $n_d < n_a$  — 为p型（受主）

利用杂质的补偿作用可制成 p-n 结。

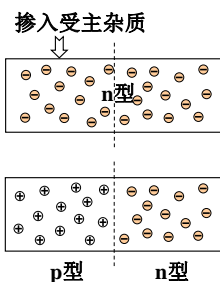
44

## § 29.6 p-n 结

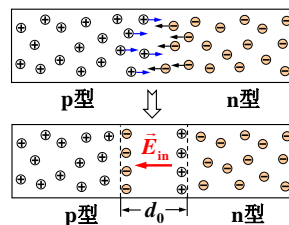
### 一. p-n 结的形成

n 型半导体一侧掺入较高浓度的受主杂质

由于杂质的补偿作用，该区成为 p 型半导体



45

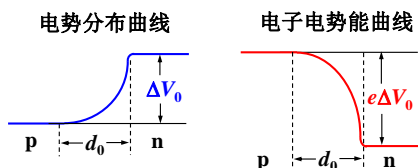


界面附近，多数载流子扩散，产生内建电场 $E_{in}$ ， $E_{in}$ 增大并阻止多数载流子进一步扩散，帮助少数载流子反向漂移，扩散和漂移平衡后形成 p-n 结（耗尽层），厚度 $d_0 \sim 0.1\mu m$ 。

46

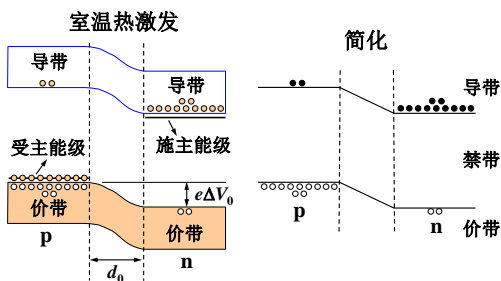
### 二. 能带弯曲

与内建电场相应，p-n结处存在电势差 $\Delta V_0$ ，形成势垒区，对电子产生附加势能。



47

当存在p-n结时，电子的能量需要考虑势垒带来的附加势能，结果是电子能带弯曲：



48

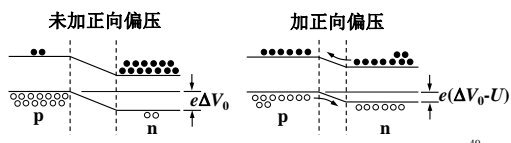


### 三. p-n结的伏安特性

#### 1. 正向偏压

p型接正极，n型接负极

正向偏压使耗尽层势垒降低变窄，有利于电子向p区运动，空穴向n区运动，形成正向电流（mA量级）。



49

#### 2. 反向偏压

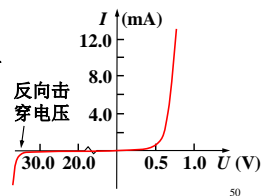
p型接负极，n型接正极

反向偏压使耗尽层势垒增高变宽，不利于电子向p区及空穴向n区运动，但少数载流子可形成很弱的反向漏电流（μA量级）。

#### 3. 伏安特性曲线

单向导电，正偏压下

呈非线性伏安特性



50

### △ § 29.7 半导体器件（自学）

1947年12月23日，美国贝尔实验室诞生世界上第一只具有放大作用的晶体三极管。

1956年三位成员获诺贝尔物理学奖



巴丁  
J.Bardeen



布拉顿  
W.H.Brattain



肖克利  
W.Shockley

51

### § 29.8 半导体激光器（补充）

半导体激光器分两类：

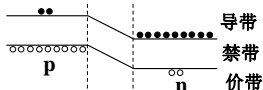
同质结激光器 — 由同种材料制成的p-n结

异质结激光器 — 由两种不同材料制成的p-I-n结（I为本征半导体）

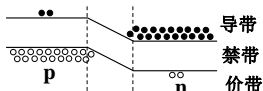
52

#### 一. 同质结激光器

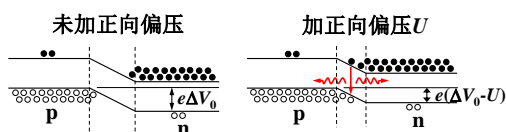
普通掺杂



重掺杂



53

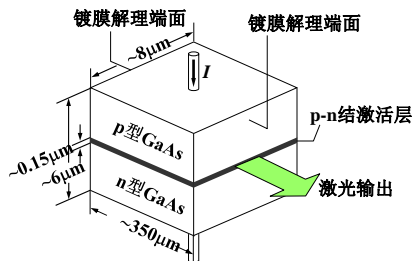


加正向偏压引起粒子数反转，在结区电子空穴复合发光，由自发辐射引起受激辐射。

同质结缺点是需要重掺杂，且光损耗大。

54

## GaAs同质结半导体激光器

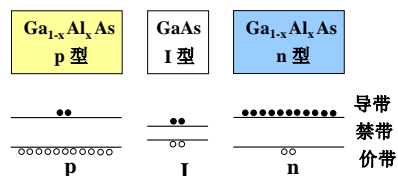


两镀膜解理端面构成光学谐振腔。  
激励能源是外接电源。

55

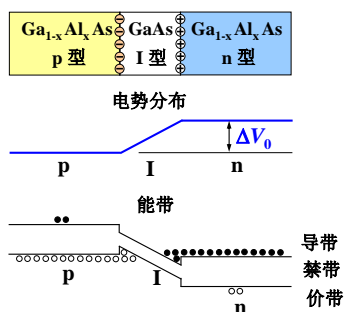
## 二. 异质结激光器

材料: GaAs、 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ , 二者晶格匹配,  
但能隙不同。



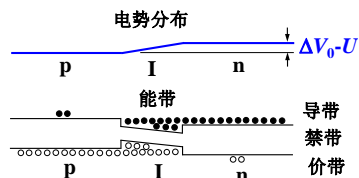
56

## p-I-n 结能带



57

## 加正向偏压U的 p-I-n 结



- I 是激活区, 加正向偏压很容易实现粒子数反转, 无须重掺杂。
- 阈值电流密度低, 可在室温下连续工作。

实际使用的都是异质结激光器。

58

## 半导体激光器的特点

- 体积小 极易与光纤接合
- 所需电压低 对GaAs只需1.5V
- 效率高 电能直接变成光能
- 功率可达  $10^3\text{mW}$
- 寿命长 可达百万小时
- 制造方便成本低

59

## 中英文名称对照表

- 能带 — energy band
- 能隙 — energy gap
- 价带、导带 — valence band、conduction band
- 导体 — conductor
- 半导体 — semiconductor
- 绝缘体 — insulator
- 空穴 — hole
- 杂质 — impurity
- 施主、受主 — donor、acceptor



第二十九章结束

60