



# 半导体物理与器件基础

张 帅

常州大学材料科学与工程学院

# 第一章 半导体中的电子状态

- 1.1 半导体的晶格结构和结合性质
- 1.2 半导体中的电子状态和能带
- 1.3 半导体中电子的运动、有效质量
- 1.4 本征半导体的导电机构 空穴
- 1.5 回旋共振
- **1.6 半导体的能带结构**

## 慕课视频片段

视频名称：1.6 半导体的能带结构 MP4.mp4



温馨提示：此视频框在点击“上传手机课件”时会进行转换，用手机进行观看时则会变为可点击的视频。此视频框可被拖动移位和修改大小

## 1.6.1 硅和锗的导带结构

改变磁场方向只能观察到一个吸收峰：球面等能面

Si的回旋共振结果

- 1)若B沿[111]方向，1个吸收峰
- 2)若B沿[110]方向，2个吸收峰
- 3)若B沿[100]方向，2个吸收峰
- 4)若B沿任意方向，3个吸收峰

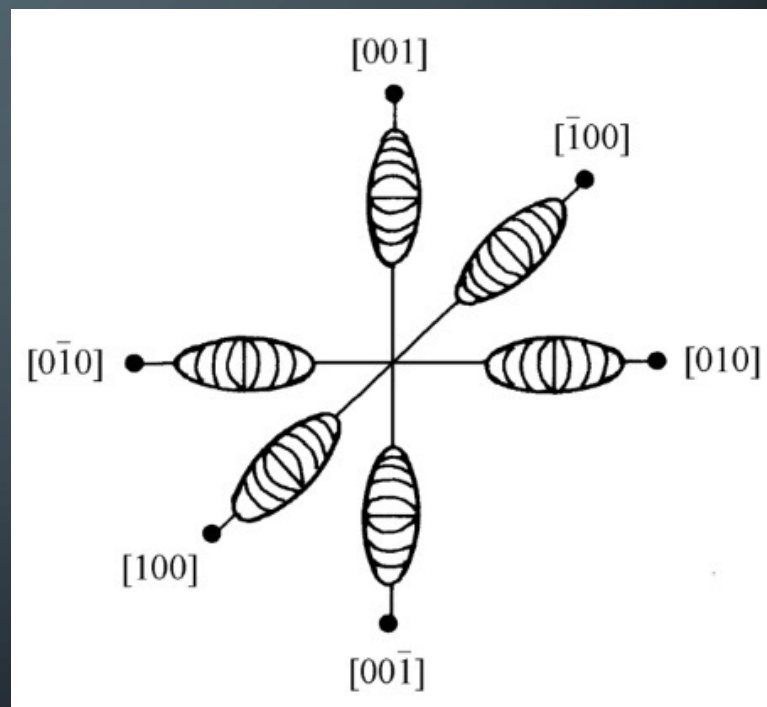


球面等能面不能解释

## 1.6.1 硅和锗的导带结构

### 硅导带等能面模型：

- 1) 导带最小值不在k空间原点, 在 $[100]$ 方向上, 即是沿 $[100]$ 方向的旋转椭球面
- 2) 根据硅晶体立方对称性的要求, 也必有同样的能量在 $[\bar{1}00]$ ,  $[010]$ ,  $[0\bar{1}0]$ ,  $[001]$ ,  $[00\bar{1}]$ 方向上
- 3) 如右图所示, 共有六个旋转椭球等能面, 电子主要分布在这些极值附近



## 1.6.1 硅和锗的导带结构

### 硅导带椭球等能面方程：

设第s个极值对应的波矢为  $\mathbf{k}_0^s$ ，对应能值为  $E_c$ ，有6个极值极值附近的能量  $E^s(\mathbf{k})$  为：

$$E^s(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x - k_{0x}^s)^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y}^s)^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z}^s)^2}{m_z^*} \right] \quad (1-56)$$

以  $E_c$  为能量零点，以  $\mathbf{k}_0^s$  为坐标原点， $k_1$ 、 $k_2$ 、 $k_3$  为三个直角坐标轴，分别与椭球主轴重合， $k_3$  沿  $\langle 100 \rangle$  方向，也是椭球长轴。等能面绕  $k_3$  轴旋转，**即该椭球的  $k_1$  和  $k_2$  方向主轴长度相等，即沿这两轴方向的有效质量相等。**

[001]方向旋转椭球面方程：
$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{k_1^2 + k_2^2}{m_t} + \frac{k_3^2}{m_l} \right]$$
 $m_l$ :  $k_3$  方向  
 $m_t$ :  $k_1$  和  $k_2$  方向

其余5个等价方向上的旋转椭球面方程类似。

## 1.6.1 硅和锗的导带结构

### 硅导带的回旋共振实验结果的解释：

选取恰当的 $k_1$ 、 $k_2$ 轴，使 $\mathbf{B}$ 位于 $k_1$ 和 $k_3$ 轴构成的平面内（如下图），仍以 $[001]$ 方向为例。

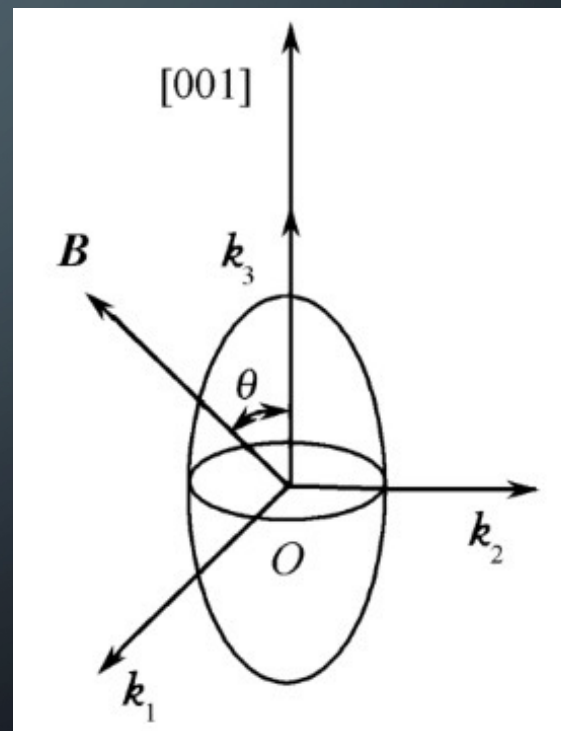
$\mathbf{B}$ 沿 $k_1$ 、 $k_2$ 、 $k_3$ 轴的方向余弦 $\alpha$ 、 $\beta$ 、 $\gamma$   
 $\alpha = \sin\theta$ ， $\beta = 0$ ， $\gamma = \cos\theta$

根据

$$\frac{1}{m_n^*} = \sqrt{\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*}}$$

可得

$$m_n^* = m_t \sqrt{\frac{m_l}{m_t \sin^2 \theta + m_l \cos^2 \theta}}$$



## 1.6.1 硅和锗的导带结构

### 硅导带的回旋共振实验结果的解释：

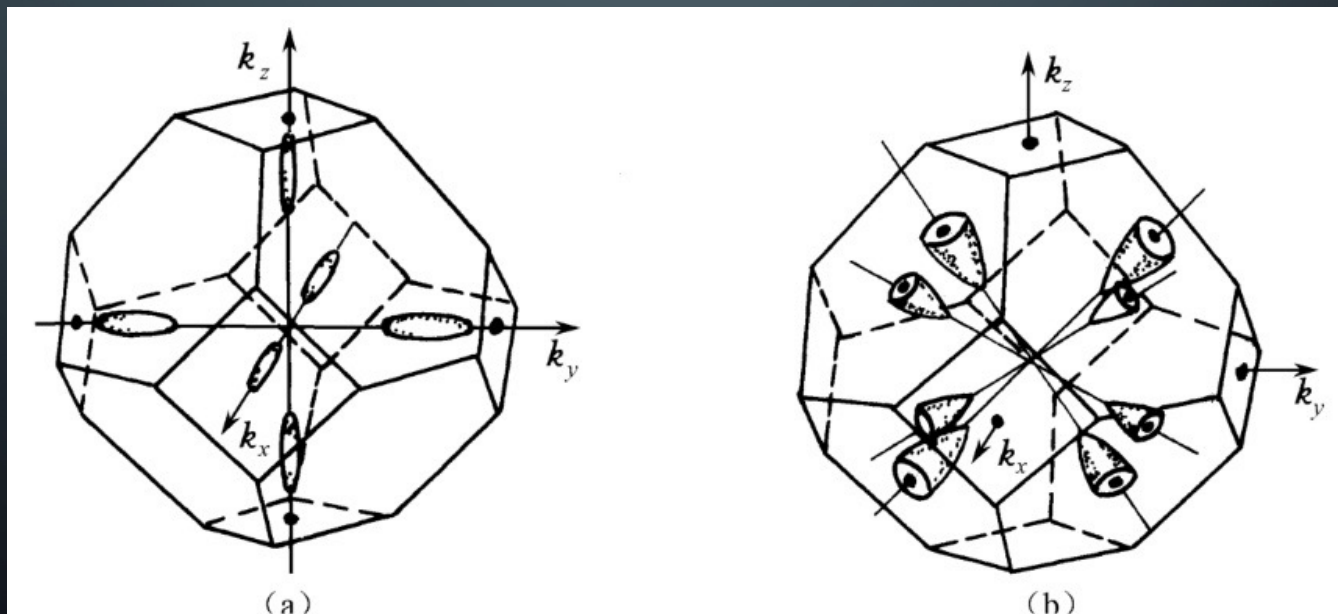
- ◆  $B$ 沿 $[111]$ 方向：对6个 $\langle 100 \rangle$ 方向的椭球面均使 $\cos^2\theta = 1/3$
- ◆  $B$ 沿 $[110]$ 方向： $[100]$   $[\bar{1}00]$   $[010]$   $[0\bar{1}0]$ 方向的椭球面使 $\cos^2\theta = 1/2$ ； $[001]$   $[00\bar{1}]$ 方向的椭球面使 $\cos^2\theta = 0$ 。
- ◆  $B$ 沿 $[100]$ 方向： $[100]$   $[\bar{1}00]$ 方向的椭球面使 $\cos^2\theta = 1$ ； $[010]$   $[0\bar{1}0]$   $[001]$   $[00\bar{1}]$ 方向的椭球面使 $\cos^2\theta = 0$ 。
- ◆  $B$ 沿任意方向：可使 $\cos^2\theta$ 取三个不同的值。



## 1.6.1 硅和锗的导带结构

### 硅导带的极值位置和锗的情况：

硅导带的极值位于 $\langle 100 \rangle$ 方向的第一布里渊区中心到边界的0.85倍处  
锗的导带极值位于 $\langle 111 \rangle$ 方向上的第一布里渊区的边界处，也为旋转椭球面



## 1.6.2 硅和锗的价带结构

硅价带的能量表示形式:

$$E(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \{ Ak^2 \pm [B^2 k^4 + C^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)]^{1/2} \}$$

四度简并状态

两个能带，极大值重合在 $\mathbf{k} = 0$ 处，两种空穴有效质量： $(m_p)_h$ 、 $(m_p)_l$

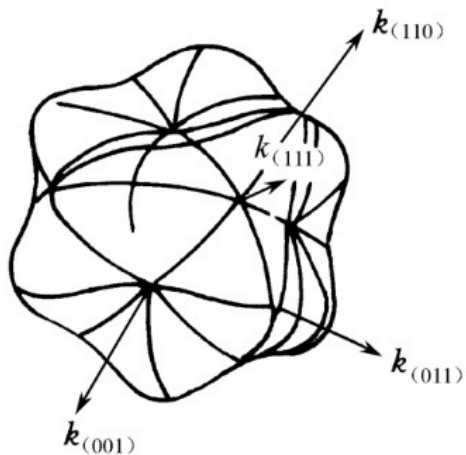
$$E(\mathbf{k}) = -\Delta - \frac{\hbar^2}{2m_0} Ak^2$$

二度简并状态

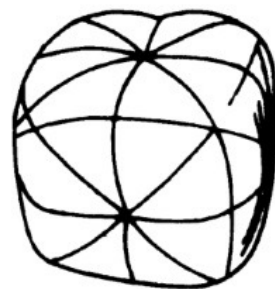
极大值降低了 $\Delta$ ，不在 $\mathbf{k} = 0$ 处， $(m_p)_3$

## 1.6.2 硅和锗的价带结构

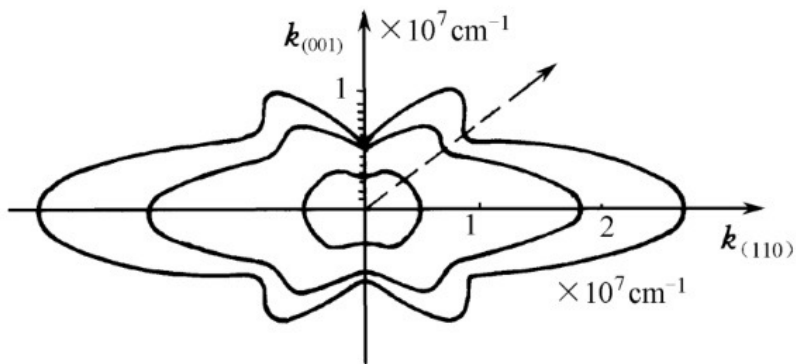
轻重空穴 $k$ 空间等能面：



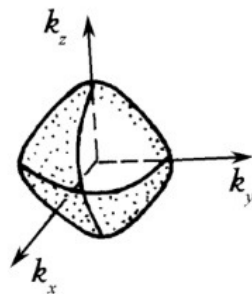
(a) 重空穴能值较高的情况



(b) 重空穴能值较低的情况



(c) (110) 平面等能面截面图



(d) 轻空穴等能面

## 1.6.2 硅和锗的价带结构

硅和锗在特定方向上的能带：

