§ 5.3 导体、绝缘体和半导体的能带论解释

—— 问题的提出

—— 所有固体都包含大量的电子，但电子的导电性却相差非常大

导体的电阻率 $\rho \sim 10^{-6}\ \Omega \cdot cm$

半导体的电阻率 $\rho \sim 10^{-2} - 10^{9}\ \Omega \cdot cm$

绝缘体的电阻率 $\rho \sim 10^{14} - 10^{22}\ \Omega \cdot cm$

—— 特鲁特关于一些金属导电电子数等于原子的价电子数的假设是相当成功

—— 其它一些固体却不是这样

—— 导体、半导体和绝缘体的区别在哪里？

—— 电子的能带理论解释了导体与绝缘体

1. 满带中的电子对导电的贡献

电子能量是波矢的偶函数 $E_n(\vec{k}) = E_n(-\vec{k})$

波矢为 $\vec{k}$ 的电子的速度 $\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E = -\frac{1}{\hbar}\nabla_{-k} E$

波矢为 $-\vec{k}$ 的电子的速度 $\vec{v}(-\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_{-k} E$

$$\vec{v}(\vec{k}) = -\vec{v}(-\vec{k})$$

—— $\vec{k}$ 状态和 $-\vec{k}$ 状态中电子的速度大小相等、方向相反

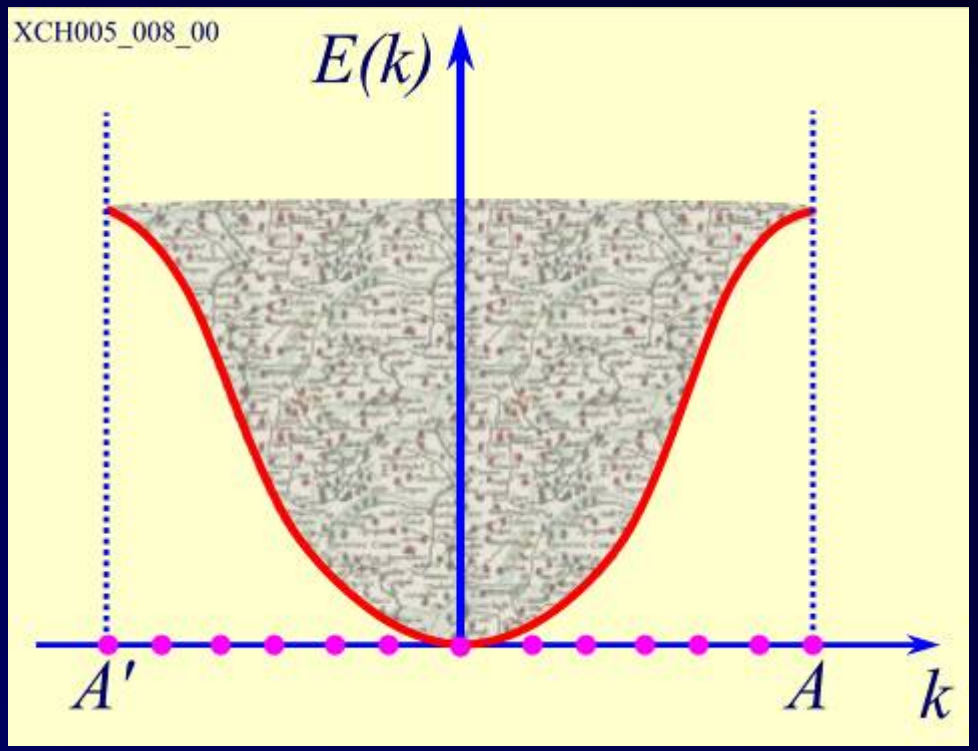
1) 在无外场时

—— $\vec{k}$ 状态和 $-\vec{k}$ 状态中电子的速度大小相等、方向相反

每个电子产生的电流 $-q\vec{v}$ —— 对电流的贡献相互抵消

热平衡状态下，电子占据波矢为 $\vec{k}$ 的状态和占据波矢为 $-\vec{k}$ 的状态的几率相等

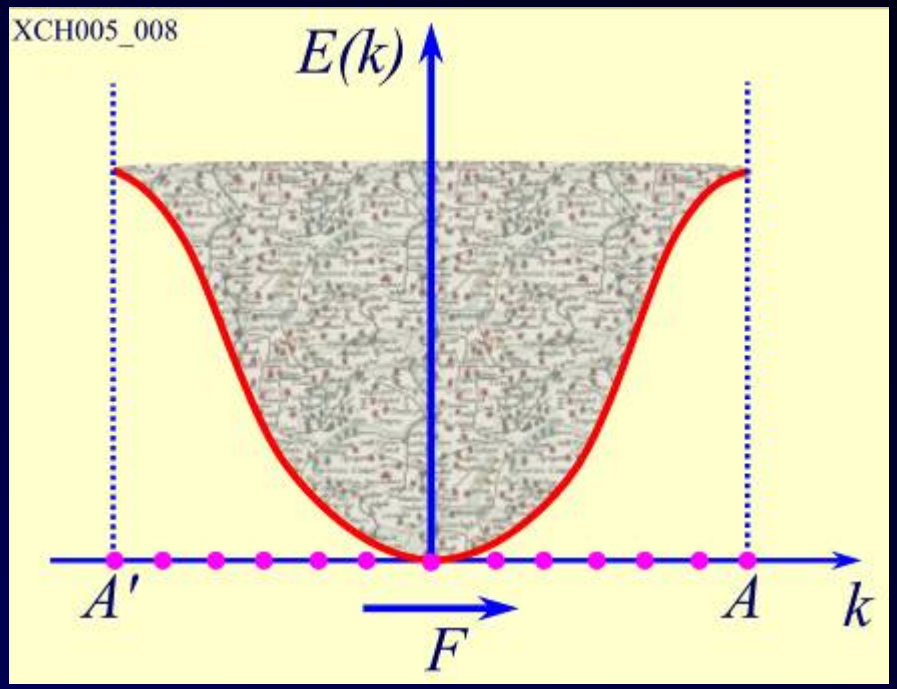
—— 晶体中的满带在无外场时，不产生电流



2) 在有外场 $\vec{E}$ 作用时

电子受到的作用力 $\vec{F} = -q\vec{E}$

电子动量的变化 $\dfrac{d(\hbar\vec{k})}{dt} = \vec{F}$



—— 所有电子状态以相同的速度沿着电场的反方向运动

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{1}{\hbar}q\vec{E}$$

—— 满带的情形中，电子的运动不改变布里渊区中电子的分布, 满带中的电子不产生宏观的电流

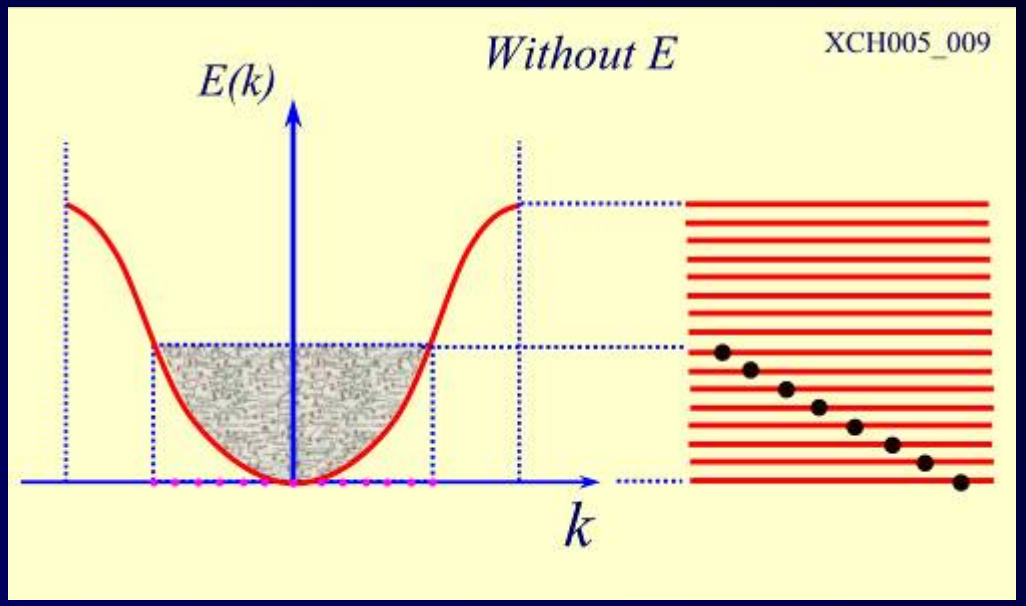
2. 导带中的电子对导电的贡献

1) 无外场存在时

—— 虽然只有部分状态被电子填充，但波矢为 $\vec{k}$ 的状态和波矢为 $-\vec{k}$ 的状态中电子的速度大小相等、方向相反，对电流的贡献相互抵消

—— 热平衡状态下，电子占据两个状态的几率相等

—— 晶体中的导带在无外场作用时，不产生电流

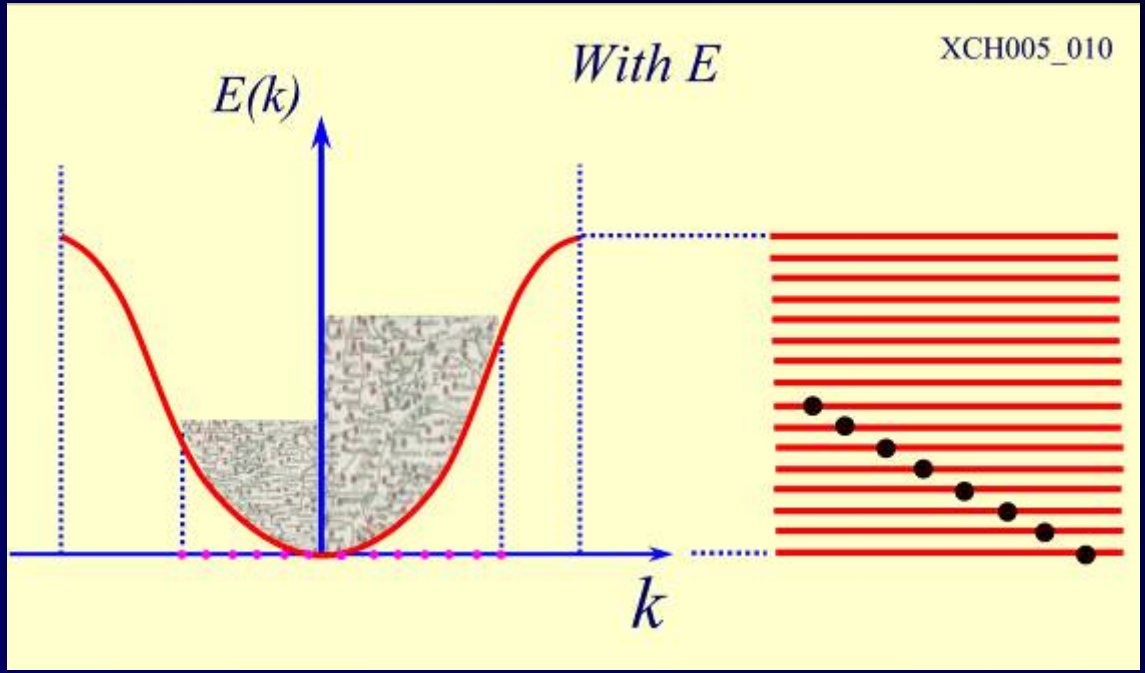


2) 在有外场作用时

—— 导带中只有部分状态被电子填充，外场的作用会使布里渊区的状态分布发生变化

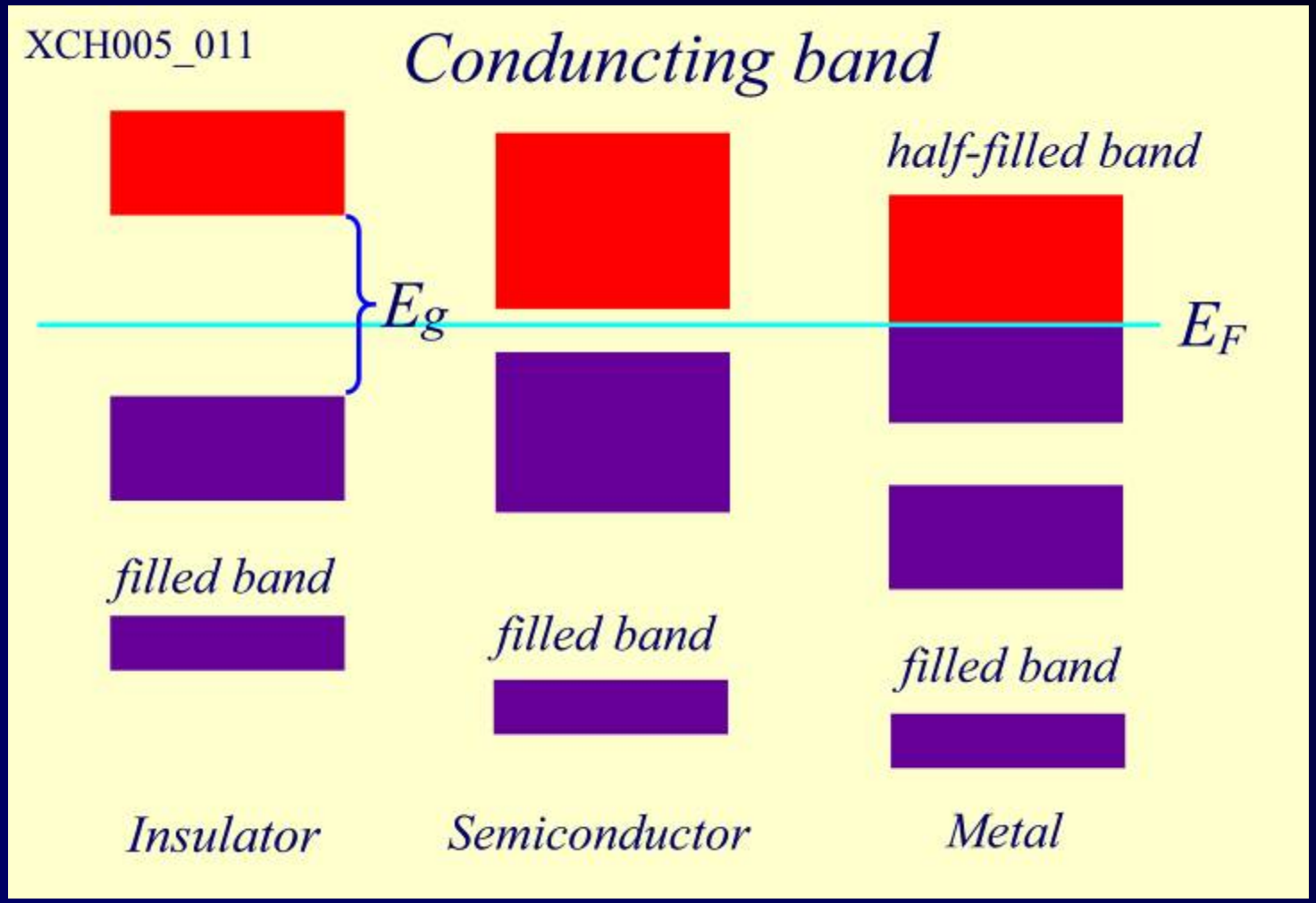
—— 所有的电子状态以相同的速度沿着电场的反方向运动，但由于能带是不满带，逆电场方向上运动的电子较多

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{1}{\hbar} q\vec{E}$$



—— 在外场作用下，导带中的电子产生电流

导体、半导体、绝缘体模型


XCH005_011
Conducting band
half-filled band
E_g
E_F
filled band
filled band
filled band
Insulator
Semiconductor
Metal

绝缘体 —— 原子中的电子是满壳层分布的，价电子刚好填满了许可的能带，形成满带，导带和价带之间存在一个很宽的禁带，在一般情况下，价带之上的能带没有电子

—— 在电场的作用下没有电流产生

导体 —— 在一系列能带中除了电子填充满的能带以外，还有部分被电子填充的能带 — 导带，后者起着导电作用

—— N个原胞构成的晶体，每一条能带能容纳的电子数为$2N$

—— 为原胞数目的二倍

原胞中只有一个价电子的固体

Li(3)、*Na*(11)、*K*(19)、*Cu*(29)、*Ag*(47)

它们只填充半条能带 —— 导体

原胞中含有偶数个价电子，可以填满一个能带

—— 绝缘体

二价金属：*Be*(4)、*Mg*(12)、*Zn*(30)，原胞中有2个价电子

—— 绝缘体？？？

—— 它们却是导体

—— 能带存在交迭

半导体(Si：14、Ge：32)：禁带宽度较窄，约~2 eV以下

—— 依靠热激发即可以将满带中的电子激发到导带中，因而具有导电能力

—— 热激发到导带中的电子数目随温度按指数规律变化，半导体的电导率随温度的升高按指数形式增大

半金属

V族元素Bi、Sb、As: 三角晶格结构，原胞有偶数个电子

—— 金属的导电性，能带的交叠

—— 导电能力远小于金属，能带交叠较小，对导电有贡献的载流子数远远小于普通的金属

3. 近满带和空穴

近满带 —— 满带中的少数电子受热或光激发从满带跃迁到空带中去，使原来的满带变为近满带

空穴 —— 描述近满带的导电性

设想近满带中只有一个 $\vec{k}$ 态没有电子

在电场的作用下，近满带产生的电流为近满带中所有电子对电流的贡献，总电流 $I(\vec{k})$

如果在空的 $\vec{k}$ 中放入一个电子，近满带变为满带，总的电流为零

$$I(\vec{k})+[-q\vec{v}(\vec{k})]=0$$

$$I(\vec{k}) = q\vec{v}(\vec{k})$$

近满带的总电流相当于一个带正电q的粒子，以空状态 $\vec{k}$ 中电子的速度 $\vec{v}(\vec{k})$ 所引起的

在电磁场作用下，满带不产生电流 $I(\vec{k}) + [-q\vec{v}(\vec{k})] = 0$

两边对时间微分得到 $$\frac{dI(\vec{k})}{dt} = q\frac{d}{dt}\vec{v}(\vec{k})$$

作用于空状态中电子的电磁场力 $-q\{\vec{E} + [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]\}$

电子加速度 $$m^*\frac{d}{dt}\vec{v}(\vec{k}) = -q\{\vec{E} + [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]\}$$ $m^* < 0$

$$\frac{dI(\vec{k})}{dt} = -\frac{q^2}{m^*}\{\vec{E} + [\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]\}$$

$$\frac{dI(\vec{k})}{dt} = -\frac{q}{m^*}\{q\vec{E} + [q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]\} \qquad m^* < 0$$

$$\frac{dI(\vec{k})}{dt} = \frac{q}{|m^*|}\{q\vec{E} + [q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]\}$$

$q\vec{E} + [q\vec{v}(\vec{k}) \times \vec{B}]$ —— 正电荷**q**在电磁场中受到的力

—— 外电磁场中，近满带电流的变化等同于一个带正电**q**，具有正质量|**m***|的粒子

结论

当满带顶附近有空状态 $\vec{k}$ 时，整个能带中的电流以及电流在外电磁场中的变化相当于一个带正电q，具有正质量|m*|、速度($\vec{k}$)

的粒子，这样一个假想的粒子 —— 空穴

固体中导带底部少量电子引起的导电 —— 电子导电性

固体中满带顶部缺少一些电子引起的导电 —— 空穴导电性

—— 满带中的少量电子激发到导带中，产生的本征导电是由相同数目的电子和空穴构成的 —— 混合导电性

§ 5.4 在恒定磁场中电子的运动

1. 恒定磁场中的准经典运动

恒定磁场中电子运动的基本方程

$$\begin{cases} \vec{v}(\vec{k}) = \dfrac{1}{\hbar}\nabla_k E(\vec{k}) \\ \hbar\dfrac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k})\times\vec{B} \end{cases}$$

1）沿磁场方向 $\vec{k}$ 的分量不发生变化

2）洛伦兹力不做功，能量 $E(\vec{k})$ 不随时间变化，电子在k空间的等能面上运动

—— 电子在k空间的运动轨迹是垂直于磁场的平面与等能面的交线

2. 自由电子的准经典运动

自由电子的能量 $E(\vec{k}) = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$

—— k 空间电子的运动

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar}\nabla_k E(\vec{k}) \longrightarrow \vec{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}}{m}$$

$$\hbar\frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{v}(\vec{k})\times\vec{B} \longrightarrow \frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{q}{m}(\vec{k}\times\vec{B})$$

$$\vec{B} = (0, 0, B)$$

$$\frac{dk_x}{dt} = -\frac{qB}{m}k_y, \quad \frac{dk_y}{dt} = \frac{qB}{m}k_x, \quad \frac{dk_z}{dt} = 0$$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2k_x}{dt^2} = -(\dfrac{qB}{m})^2 k_x \\ \dfrac{d^2k_y}{dt^2} = -(\dfrac{qB}{m})^2 k_y \end{cases} \qquad \begin{cases} \dfrac{d^2k_x}{dt^2} + (\dfrac{qB}{m})^2 k_x = 0 \\ \dfrac{d^2k_y}{dt^2} + (\dfrac{qB}{m})^2 k_y = 0 \end{cases}$$

回转频率 $\omega_0 = \dfrac{qB}{m}$

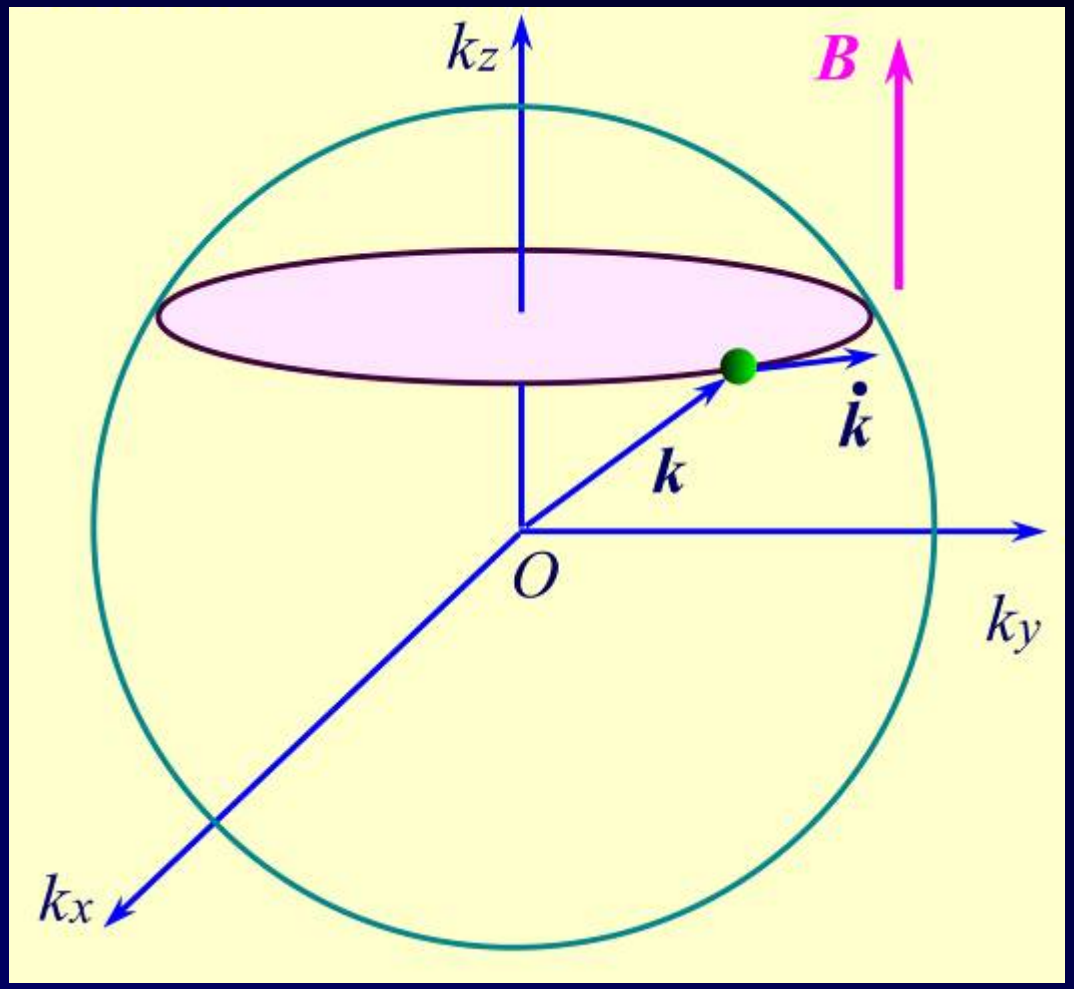
—— ***k***空间电子在 (k_x, k_y)面上做圆周运动

—— *k*空间电子在 (k_x, k_y) 面上做圆周运动

$$\frac{dk_x}{dt} = -\frac{qB}{m}k_y$$

$$\frac{dk_y}{dt} = \frac{qB}{m}k_x$$

$$\frac{dk_z}{dt} = 0$$



—— 实空间电子的运动

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{\hbar\vec{k}}{m} \longrightarrow \frac{d\vec{v}(\vec{k})}{dt} = \frac{\hbar}{m}\frac{d\vec{k}}{dt}$$

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\frac{q}{m}(\vec{k}\times\vec{B})$$

$$\frac{d\vec{v}(\vec{k})}{dt} = \frac{1}{m}[-q\vec{v}(\vec{k})\times\vec{B}] \longrightarrow \begin{cases} \dfrac{dv_x}{dt} = -\dfrac{qB}{m}v_y \\ \dfrac{dv_y}{dt} = \dfrac{qB}{m}v_x \\ \dfrac{dv_z}{dt} = 0 \end{cases}$$

$$\frac{dv_{\parallel}^2}{dt} = \frac{d}{dt}\left(v_x^2 + v_y^2\right) = 2\left(v_x\frac{dv_x}{dt} + v_y\frac{dv_y}{dt}\right) = 0$$

$$\begin{cases} \dfrac{dv_x}{dt} = -\dfrac{qB}{m} v_y \\ \dfrac{dv_y}{dt} = \dfrac{qB}{m} v_x \end{cases} \xrightarrow{\text{对时间求导}} \begin{cases} \dfrac{d^2 v_x}{dt^2} = -\dfrac{qB}{m}\dfrac{dv_y}{dt} \\ \dfrac{d^2 v_y}{dt^2} = \dfrac{qB}{m}\dfrac{dv_x}{dt} \end{cases}$$

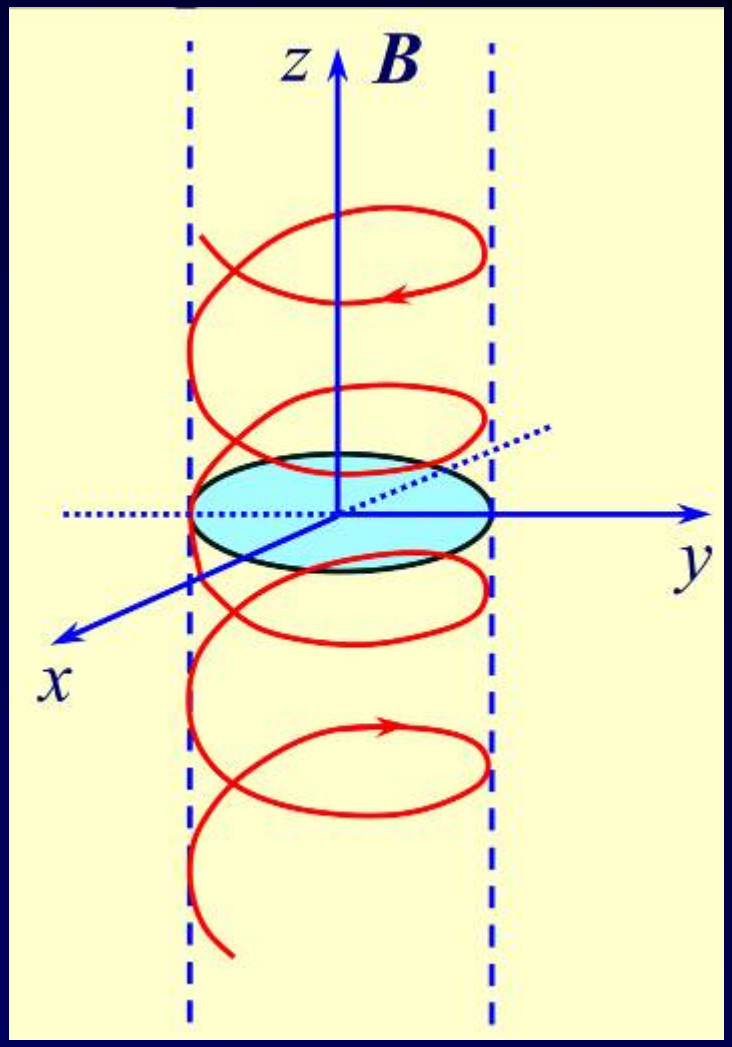
$$\begin{cases} \dfrac{d^2 v_x}{dt^2} + (\dfrac{qB}{m})^2 v_x = 0 \\ \dfrac{d^2 v_y}{dt^2} + (\dfrac{qB}{m})^2 v_y = 0 \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} \dfrac{d^2 x}{dt^2} + (\dfrac{qB}{m})^2 x = C_x \\ \dfrac{d^2 y}{dt^2} + (\dfrac{qB}{m})^2 y = C_y \end{cases}$$

—— 在(*x*, *y*)平面做匀速圆周运动　回转频率 $\omega_0 = \dfrac{qB}{m}$

—— 电子在z方向做匀速运动，在(x, y)平面做匀速圆周运动

$$\begin{cases} \dfrac{dv_x}{dt} = -\dfrac{qB}{m} v_y \\ \dfrac{dv_y}{dt} = \dfrac{qB}{m} v_x \\ \dfrac{dv_z}{dt} = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2x}{dt^2} + (\dfrac{qB}{m})^2 x = C_x \\ \dfrac{d^2y}{dt^2} + (\dfrac{qB}{m})^2 y = C_y \end{cases}$$



3. 自由电子情况的量子理论

无磁场时自由电子哈密顿量 $\hat{H} = \frac{\vec{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$

有磁场时 $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} + q\vec{A})^2$

磁场沿z轴 $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ $\vec{A} = (-By, 0, 0)$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}[(\hat{p}_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2]$$

$$H=\frac{1}{2m}[(\hat{p}_x-qBy)^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2]$$

因为哈密顿量不含 x, z

$$\begin{cases}[H,\hat{p}_x]=0\\ [H,\hat{p}_z]=0\end{cases}$$

选波函数为 $(\hat{p}_x, \hat{p}_z)$ 本征态

$$\begin{cases}\hat{p}_x\psi=\hbar k_x\psi\\ \hat{p}_z\psi=\hbar k_z\psi\end{cases}$$

波函数 $\psi=e^{i(k_x x+k_z z)}\varphi(y)$

$$\frac{1}{2m}[(\hat{p}_x-qBy)^2+\hat{p}_y^2+\hat{p}_z^2]\psi=E\psi$$

得到 $$\frac{1}{2m}[(\hbar k_x - qBy)^2 + \hat{p}_y^2 + \hbar^2 k_z^2]\varphi(y) = E\varphi(y)$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \longrightarrow \hat{p}_y^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m}{2}(\frac{qB}{m})^2(\frac{\hbar}{qB}k_x - y)^2]\varphi(y) = (E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m})\varphi(y)$$

令 $$\omega_0 = \frac{qB}{m},\ y_0 = \frac{\hbar}{qB}k_x,\ \varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{m}{2}\omega_0^2(y-y_0)^2]\varphi(y)=\varepsilon\varphi(y)$$

—— 简谐振子方程

简谐振子波函数

$$\varphi(y-y_0)\cong e^{-\frac{1}{2}\omega_0(y-y_0)^2}H_n[\omega_0(y-y_0)]$$

能量本征值

$$\varepsilon_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_0$$

在磁场中自由电子的波函数

$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-\frac{1}{2}\omega_0 (y-y_0)^2} H_n[\omega_0 (y - y_0)]$$

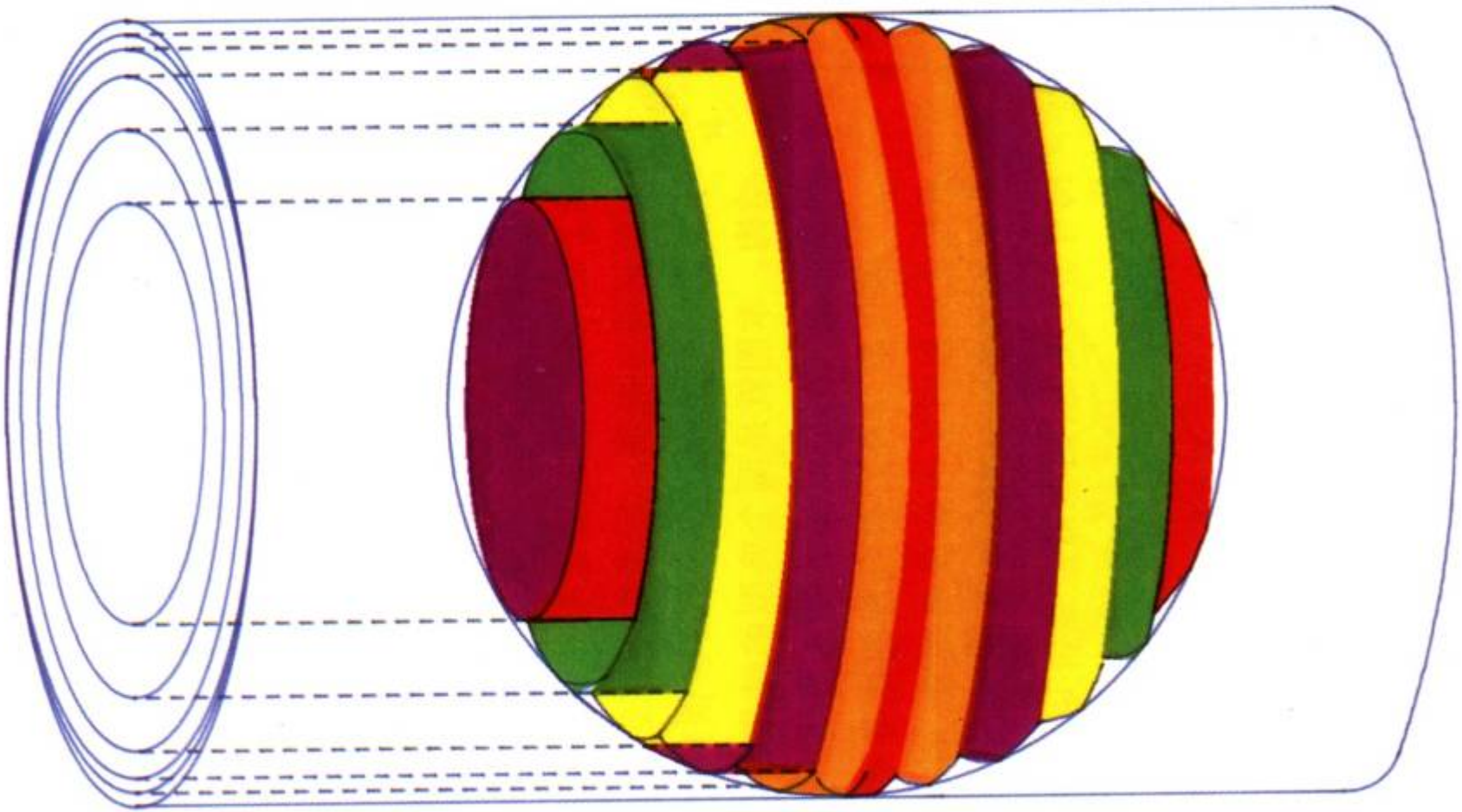
能量本征值

$$E = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$$

—— 在(x, y)平面内的圆周运动对应一种简谐振荡，能量是量子化的

—— 这些量子化的能级称为朗道能级

Landau level



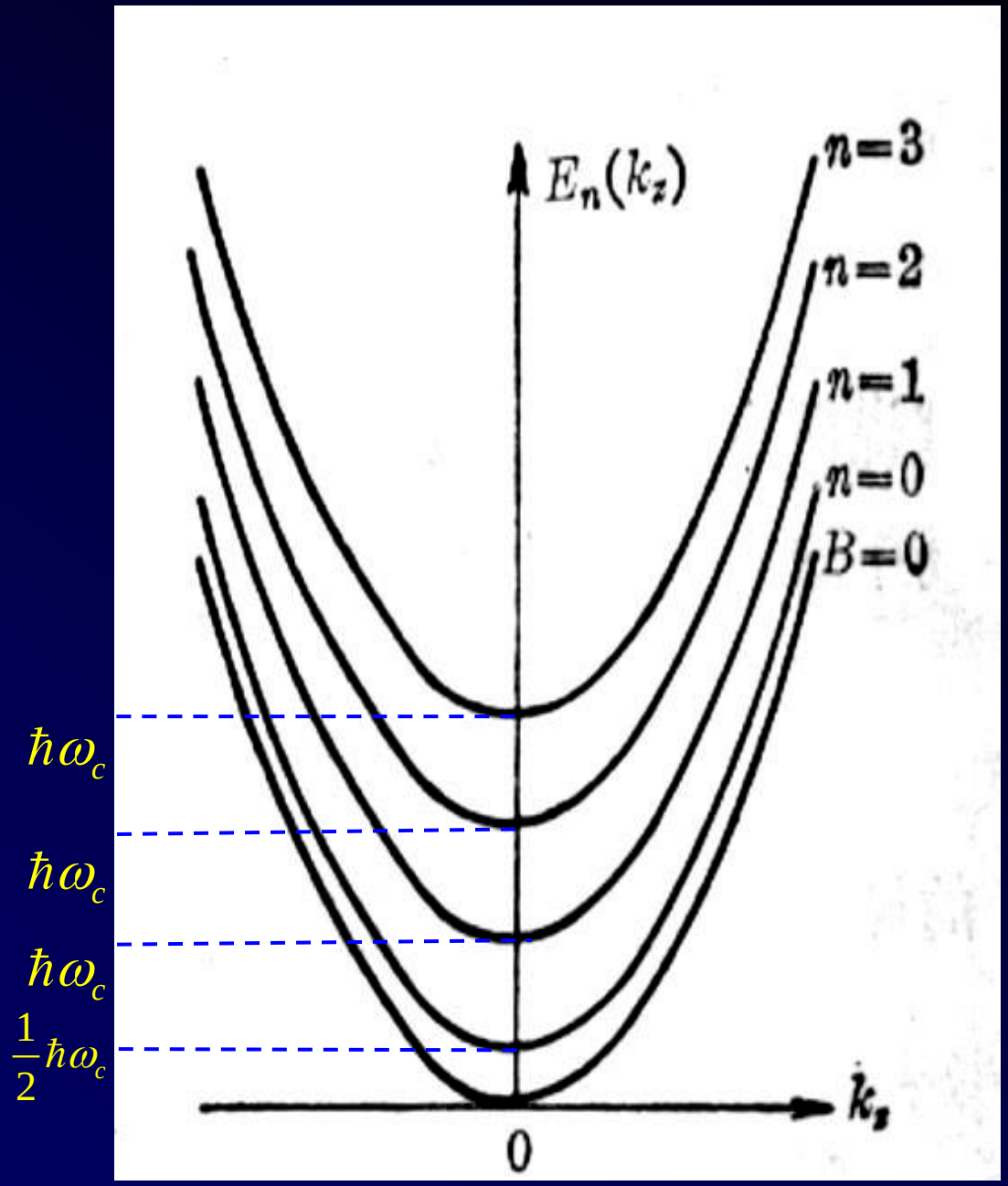
沿磁场方向电子保持自由运动，在垂直磁场的*x-y*平面上，电子运动是量子化的，从准连续的

$$\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+k_y^2\right)$$

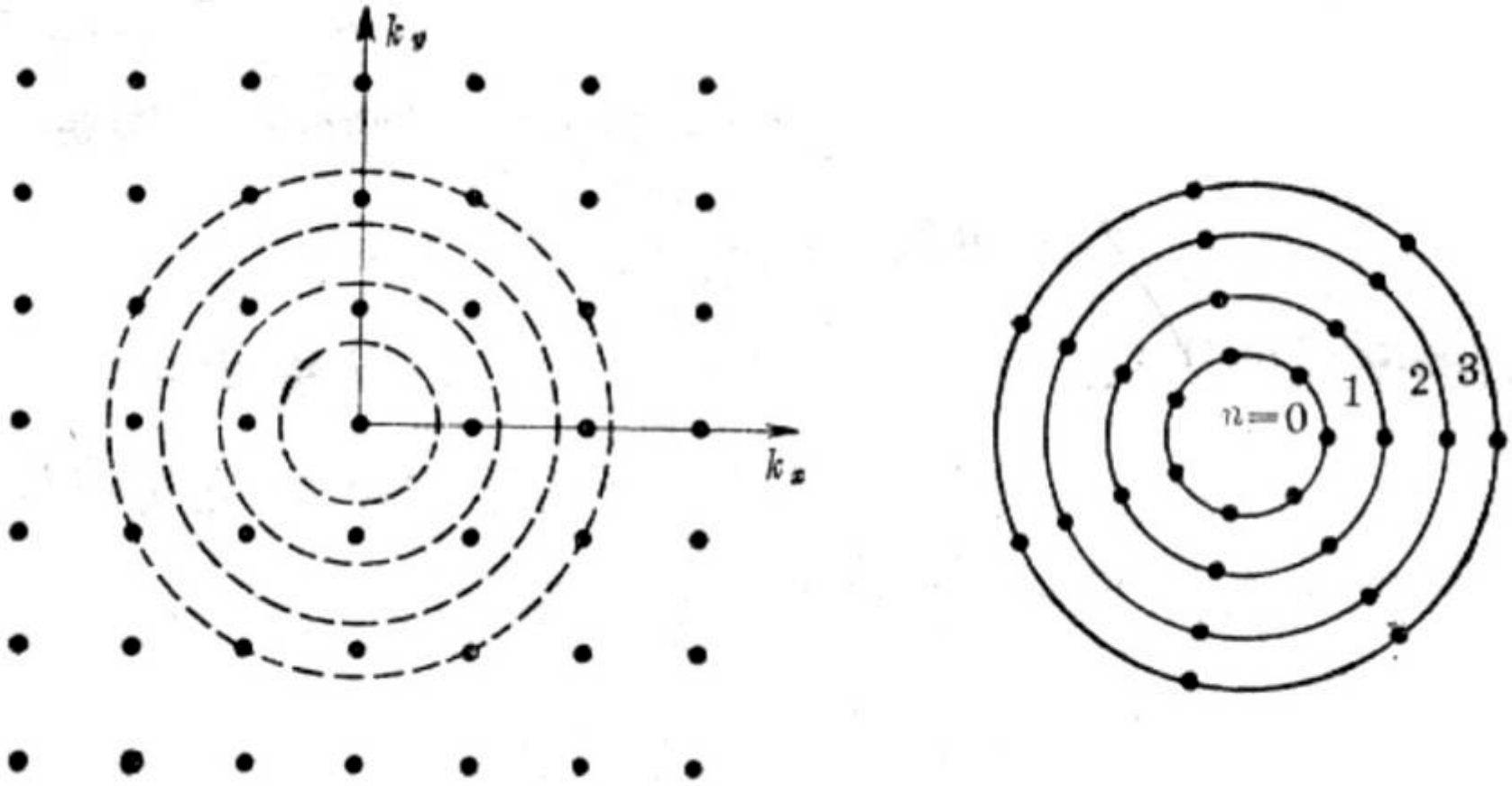
变为：

$$\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

在这种情况下，电子的能量由准连续的能谱变成一维的分立的磁次能带，每条次能带都成抛物线形状

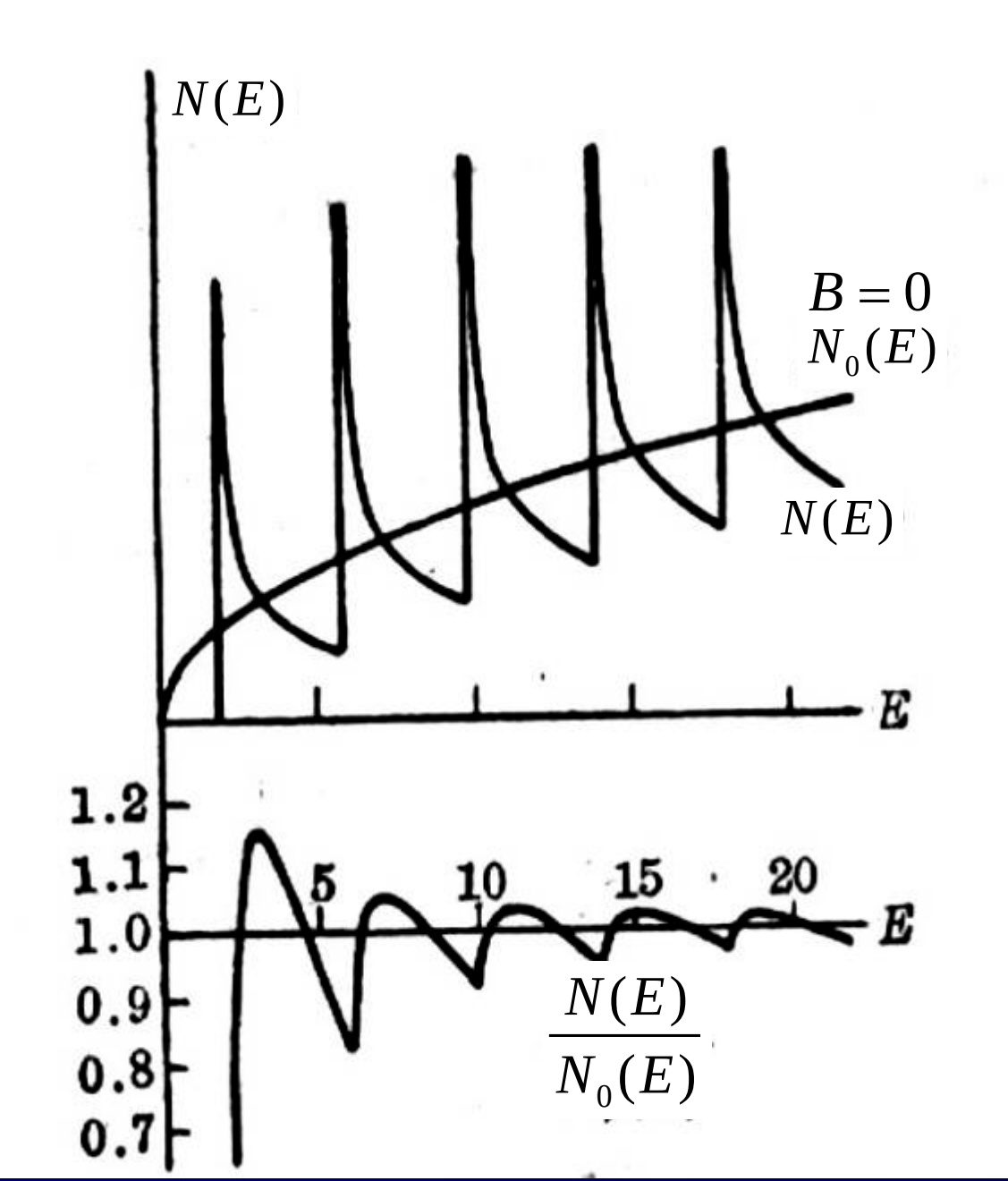


由于能量-波矢关系的改变，波矢空间描写状态的代表点的分布也发生变化，集聚在一系列的圆周上



(a)无外磁场　　(b)有外磁场

于是，磁场中的能态密度曲线和磁场为零时的能态密度曲线相比发生了巨大变化，形成了一系列的峰值，相邻两峰之间的能量差是 $\hbar\omega_c$ 。能态密度变化的这种特点深刻地影响了晶体的物理性质。



有效质量近似

—— 晶体中电子在磁场中的运动时，其哈密顿量

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\vec{p} + q\vec{A})^2 + V(\vec{r})$$

—— 将周期性势场的影响概括为有效质量的变化

—— 有效质量近似方法

哈密顿量 $$\hat{H} = \frac{1}{2m^*}(\vec{p} + q\vec{A})^2$$

—— 半导体中能带底和能带顶附近采用有效质量近似处理

—— 碱金属也可以采用有效质量近似

—— 采用有效质量近似后，晶体中电子在磁场中的运动变为自由电子在磁场中的运动，前面的结果中将电子的质量***m***用有效质量***m****代替

磁场中自由电子的波函数

$$\psi = e^{i(k_x x + k_z z)} e^{-\frac{1}{2}\omega_0 (y - y_0)^2} H_n[\omega_0 (y - y_0)]$$

能量本征值 $E = \varepsilon_n + \dfrac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = (n + \dfrac{1}{2})\hbar\omega_0 + \dfrac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}$

回转频率 $\omega_0 = \dfrac{qB}{m^*}$