第三课：半导体中的电子状态

Monday, September 2, 2019 5:30 AM

1. 半导体的物理性质与半导体中的电子状态，特别是与电子的能量谱值有密切关系；
2. 孤立原子中的电子：只受原子核和该原子其它电子的势场作用，其能量是分立能级；
3. 自由电子(完全自由的)：由于不受任何外力的作用，在恒定为零的势场中运动，能量是连续的；
4. 晶体中的电子：在周期性势场中运动，能量为一系列密集能级组成的能带，能带与能带之间为禁带；
5. 能带理论：采用单电子近似来确定半导体中电子状态的理论，得出的电子的能量谱值组成能带；
6. 电子的共有化运动(重要)：当原子和原子相互接近形成晶体时，不同原子的内外各层轨道将发生程度不同的交叠。由于电子轨道的重叠，原来属于某一原子的电子不再局限于这个原子，它可以转移到相邻的原子上去，电子在相邻的原子之间转移，这表明电子可以在整个晶体中运动，晶体中电子的这种运动称为电子的共有化运动；
7. 电子共有化运动的特点：
   a. 外层电子轨道重叠大，共有化运动显著；
   b. 无外力作用时，电子只能在能量相同的轨道内运动；
8. 晶体中电子共有化运动时的能量：能量是简并的；
9. 简并：如果对应于魔偶一个本征值的本征函数不止一个(不考虑相位因素造成的区别)，我们就说该算符对于这个本征值时简并的；同理认为，对应于某一能量为E的能级，存在不同的波函数(不同的电子)，则称体系在这一能级上简并；
10. 能带的形成：原子相互靠近时，由于之间的相互作用使简并解除，原来具有相同能量的能级分裂成具有不同能量的一些能级组成的带(准连续)，成为能带。原子之间的距离愈小它们之间的相互作用愈强，能带的宽度也愈大；
11. 定性理论(物理概念)：晶体中原子之间的相互作用，使能级分裂形成能带；
12. 定量理论(量子力学计算)：电子在周期场中运动，其能量不连续形成能带；
13. 能带(Energy Band)：允带和禁带；
14. 允带(Allowed Band)：允许电子能量存在的能量范围；
    a. 空带：未被电子占据的允带；
    b. 满带：允带中的能量状态(能级)均被电子占据；
    c. 导带：电子未占满的允带(有部分电子)；
    d. 价带：被价电子占据的允带(低温下通常被价电子占满)；
15. 禁带：不允许电子能量存在的能量范围；
16. 形成能带后电子态数目保持不变，每个电子态不再属于个别原子，而是延展于整个晶体；
17. 布洛赫定理(重要)：在周期性势场中运动的电子，若势函数V(x)具有晶格的周期性，即：$V(x+na)=V(x)$，则晶体中电子的波函数ψ；(需要补充)
18. 布里渊区；