第二十三章.固体的能带结构

到本章我们就开始实现物理学有史以来最为伟大的梦想，那就是希望用最少的微观基本理论来理解复杂的宏观现象。

请同学们仔细体会一下，物理学的一个基本精神，就是对任何现象的理解总是要基于比对象具有更小尺度的物质层次，以那个物质层次的相互作用来作为我们所观察到的现象的原因。本章的讨论就体现了这种精神。

一方面我们希望从基本原理开始彻底地理解复杂现象，另一方面，我们还受到数学计算能力的局限，因此在对凝聚态的研究中，至关重要的是通过恰当的近似来提取事物变化发展中的主要矛盾，忽略次要矛盾，这也是我们需要在学习中紧紧把握的一点。

晶态固体的基本性质。

我们讨论的是自然界最简单的凝聚态—晶态固体。

从微观结构决定宏观性质的观点来看，晶体最本质的特征是结构的周期性，也就是所谓长程有序性。这样我们就能对晶体的一些宏观特征得到直接的理解，例如晶体具有对称性的外形，各种物理性质的各向异性等等，这些都可以直接从微观结构周期性来得到理解。

晶体的另外一些性质，如具有一个确定的熔点，以及存在解理面等等，也是从此出发所得到的更为具体的理论所能加以解释的。

从宏观几何属性的角度来看，晶体分成单晶体和多晶体两种。

从微观的粒子之间的相互作用力的不同，晶体可以分成四种：离子晶体，共价晶体，分子晶体，金属晶体。这种微观分类可以通过很多物理属性表现出来，不过这些分类也并非是绝对分明的，因为实际的晶体常常是同时具有几种相互作用性质的。

晶体中的电子状态。

所谓晶体中的电子，并不是指晶体结构中的所有电子，对于离子实中的电子一般并不参与寻常我们需要研究的物质性质，所以我们不需要考虑它们，因此晶体中的电子首先只是指受到核束缚很弱的外壳电子。不过这时我们需要考虑的电子仍然还是数目庞大，导致每个电子都是处在所有点阵离子实和其它外壳电子所叠加而组成的电场中，而这个电场仍然难以处理，因此我们进一步给出一种近似方法，就是把每个离子实都看成是固定在点阵位置，这样就可以认为，对于任何的单独的一个电子，是在位置固定的离子实和其它所有电子所形成的静态平均势场中运动，这就使得问题简化为单电子的运动问题，这种近似思想被称为单电子近似。

再考虑到各个点阵离子实都是周期排列，因此可以得到更细致的静态周期场。

同学们在这里可以体会到，我们通过不断的加以近似，来得到足够刻划主要的宏观特征的主要微观因素。

能带结构。

应用单电子近似的结果，就是晶体里的每一个电子不再是处于一个具有确定数值的能级里，而是和其它所有原子里具有相同轨道的电子共同处在一个具有一定宽度的能量范围里，形成所谓能带，能带之间则是任何电子都不能稳定存在的能量区域，称为禁带。

能带产生的根本原因还是在于泡利不相容原理。由于组成晶体的大量原子的相同轨道的电子被共有化后，只有把同一个能级分裂为相互之间具有微小差异的极其细致的能级，这些能级数目巨大，而且堆积在一个一定宽度的能量范围内，以至于可以看成是在这个能量范围内，电子的能量状态是连续分布的。

晶体里的价电子从它们在单原子里的能级分裂为价带，激发态能级则分裂为导带，一般晶体中每条能带的宽度只与晶体中原子之间的结合状况有关，与晶体中的原子数目无关，宽度一般为几个电子伏特。而一条确定的能带里的电子数目可以依据晶体里的原子数目估计出来，一般由N个原子组成的晶体，相同量子数l的一条能带里的最多可以容纳的电子数目是2（2l+1）N个。

电子在能带中的填充和运动。

如果一条能带的所有能态都被电子填满，则这条能带称为满带。

满带中的电子没有导电作用。

如果一条能带的所有能态并没有被电子填满，则可以表现出具有导电的作用，因此称为导带。

与各原子的激发能级相应的能带，如果在没有被激发时没有填充电子，则被称为空带。由于空带也可以表现出导电作用，因此也可以称为导带。

应用能带理论可以依据导电性质对材料进行分类。

如果价带已经被填满为满带，而满带与其最低的空带之间的禁带宽度比较大，在一般条件下满带中的电子很少能被激发到空带中，因此在外电场作用下没有电子参与导电，这种晶体就称为绝缘体。

导体的能带电子填充情况分为三种：

（1） 价带只填充了部分电子，不构成满带；

（2） 价带已经填满，但同时与相邻空带相接或部分重叠，则共同形成一条导带。

（3） 价带没有填满，同时还与其它空带重叠，同样形成导带。

如果最高的满带（价带）与最低的空带（激发带）之间的禁带宽度比较窄，在一定条件下，用少量的激发能量就可以使得价带里的电子激发到空带中，同时价带顶部就剩下空的能态，即空穴，空穴与激发电子都能参与导电，这种晶体称为半导体。

本征半导体和杂质半导体。

利用导带中的电子和满带中的空穴来参与导电作用的半导体称为本征半导体。

参与导电的电子与空穴称为本征载流子。这种导电性称为本征导电性。

在纯净半导体晶体点阵中间应用扩散的方法掺入少量其它元素的原子，构成杂质，这种半导体称为杂质半导体。

杂质半导体按照导电机制分为两种：

（1） n型半导体。

n型半导体是通过杂质中的多余电子激发后跃迁到导带而参与导电作用。

（2） p型半导体。

p型半导体是通过满带中的由杂质带来的空穴参与导电作用。

P-n结以及半导体器件。

把一片本征半导体的一面掺入施主型杂质，在另一面掺入受主型杂质，分别得到p型半导体与n型半导体，这两种半导体在接触处由于空穴和电子的相互扩散，而形成一个电偶层，同时产生抵消扩散作用的反向电场。达到平衡后，形成接触电势差。这种结构就是p-n结。

由接触电势差所构成的势垒区或称为阻挡层，使得附近的能带出现弯曲，这样在p-n结的两端加上不同方向的电压时，就会表现出不同的导电性。这使得p-n结这种特殊的结构获得了极其重要的应用价值。

利用半导体的其它特性，还能得到多种多样的半导体器件。

例如利用半导体的电阻温度系数为负值的特性，可以制造热敏电阻。利用一些半导体对光的敏感性，可以制造光敏电阻，等等，半导体技术构成了我们生活中影响极为深刻的因素。