

§ 2.2 物质的能带计算

- 1. 几个基本概念
- 2. 能带的一般规律
- 3. 能带中电子的排布
- 4. 满带、导带和禁带
- 5. 导体(conductor)的能带结构
- 6. 绝缘体(insulator)的能带结构
- 7. 半导体的能级特点与导电机制
- 8. 分子模型

一 几个基本概念:

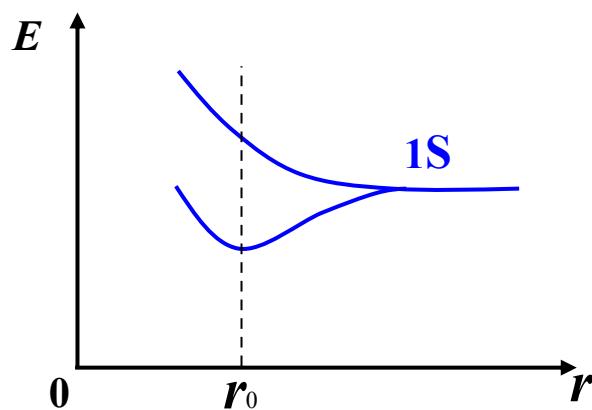
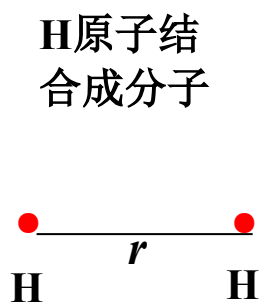
1) 能带(energy band)



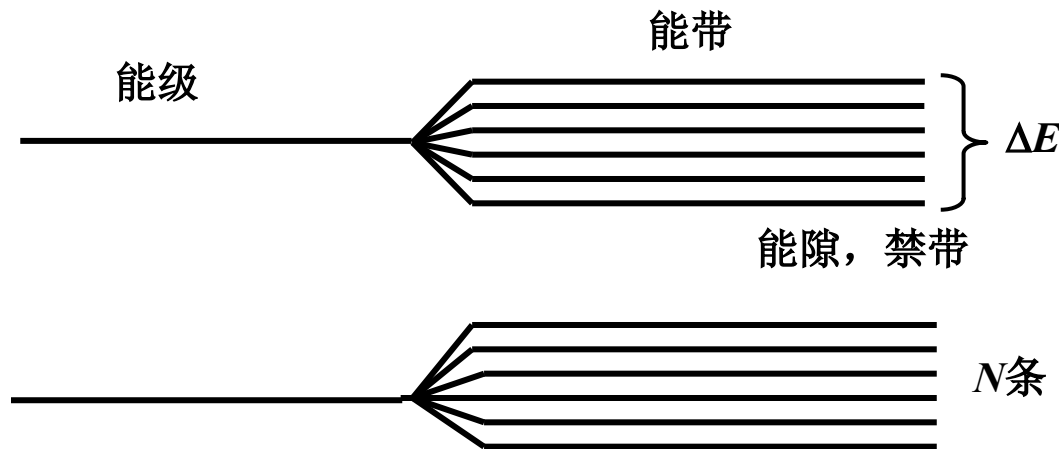
固体中的电子能级
有什么特点?

量子力学计算表明, 固体中若有 N 个原子, 由于各原子间的相互作用, 对应于原来孤立原子的每一个能级, 变成了 N 条靠得很近的能级, 称为**能带**。

例如：两个氢原子靠近结合成分子时，1S能级分裂为两条。



当 N 个原子靠近形成晶体时，由于各原子间的相互作用，对应于原来孤立原子的一个能级，就分裂成 N 条靠得很近的能级。使原来处于相同能级上的电子，不再有相同的能量，而处于 N 个很接近的新能级上。

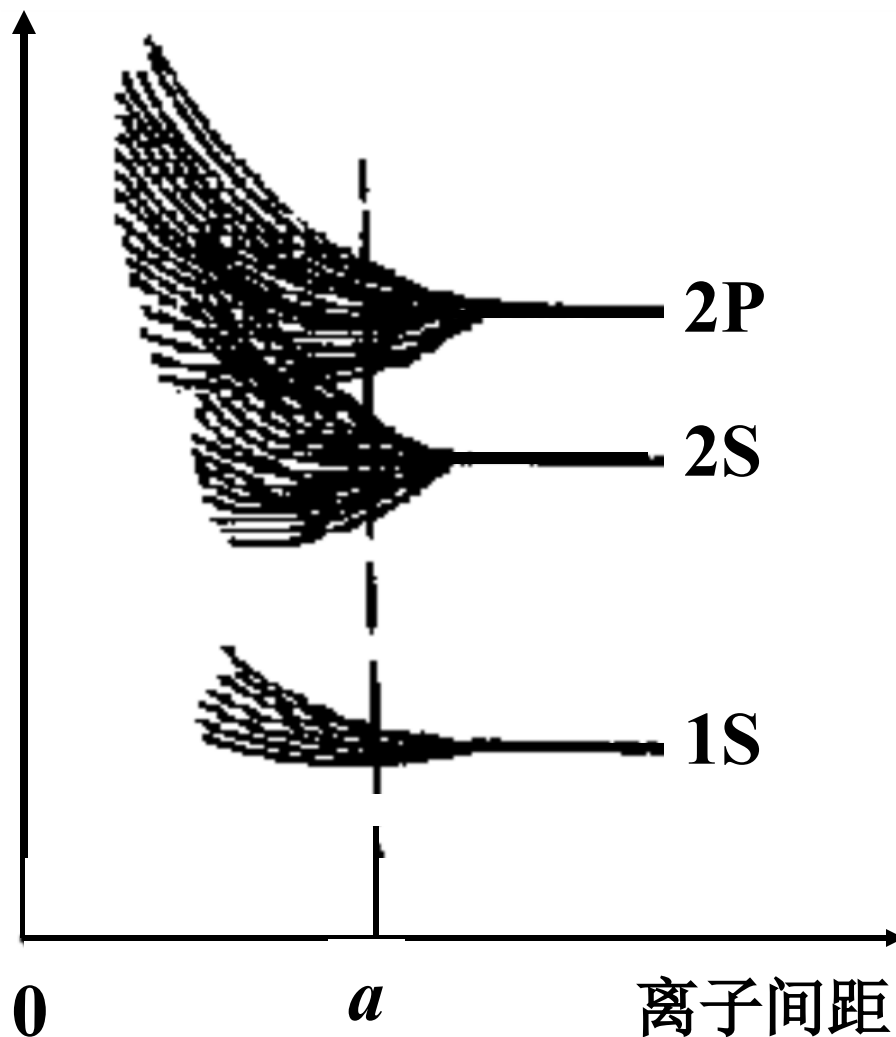


能带宽度: $\Delta E \sim \text{eV}$

能带中相邻能级的能差: $\sim 10^{-22} \text{eV}$

2. 能带的一般规律 E

- 1) 外层电子共有化程度显著，能带较宽 (ΔE 较大)；内层电子相应的能带很窄。
- 2) 点阵间距越小，能带越宽， ΔE 越大。
- 3) 两能带有可能重叠。



能带重叠示意图

3. 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：

1. 服从泡里不相容原理（费米子）
2. 服从能量最小原理

设孤立原子的一个能级 E_{nl} ，它最多能容纳 $2(2l+1)$ 个电子。

这一能级分裂成由 N 条能级组成的能带后，能带最多能容纳 $2N(2l+1)$ 个电子。

$$2N(2l+1)$$

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。

电子排布时，应从最低的能级排起。

有关能带被占据情况的几个名词：

1. 满带（排满电子）
2. 空带（未排电子）
3. 价带（最高的满带）
4. 导带（最低的未满载或空带）
5. 禁带（不能排电子）

4、满带、导带和禁带

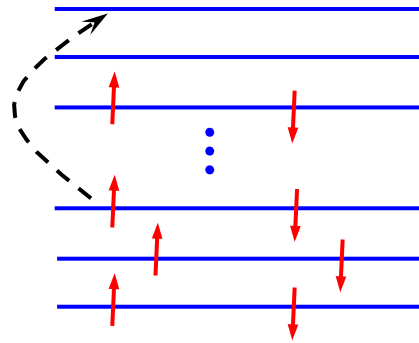
1. **满带**：能带中各能级都被电子填满。

满带中的电子不能起导电作用

- 晶体加外电场时，电子只能在带内不同能级间交换，不能改变电子在能带中的总体分布。
- 满带中的电子由原占据的能级向带内任一能级转移时，必有电子沿相反方向转换，因此，不会产生定向电流，不能起导电作用。

2. 导带: 被电子部分填充的能带。

- 在外电场作用下，电子可向带内未被填充的高能级转移，但无相反的电子转换，因而可形成电流。



价带: 价电子能级分裂后形成的能带。

有的晶体的价带是导带；

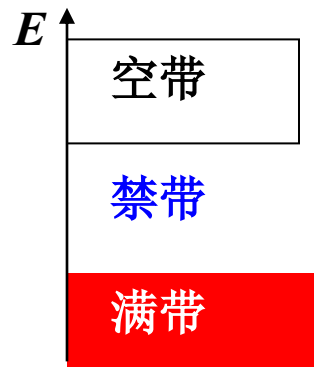
有的晶体的价带也可能是满带。

3.空带：所有能级均未被电子填充的能带。

- 由原子的激发态能级分裂而成，正常情况下空着；
- 当有激发因素(热激发、光激发)时，价带中的电子可被激发进入空带；
- 在外电场作用下，这些电子的转移可形成电流。所以，空带也是导带

4. 禁带：在能带之间的能量间隙区，电子不能填充。

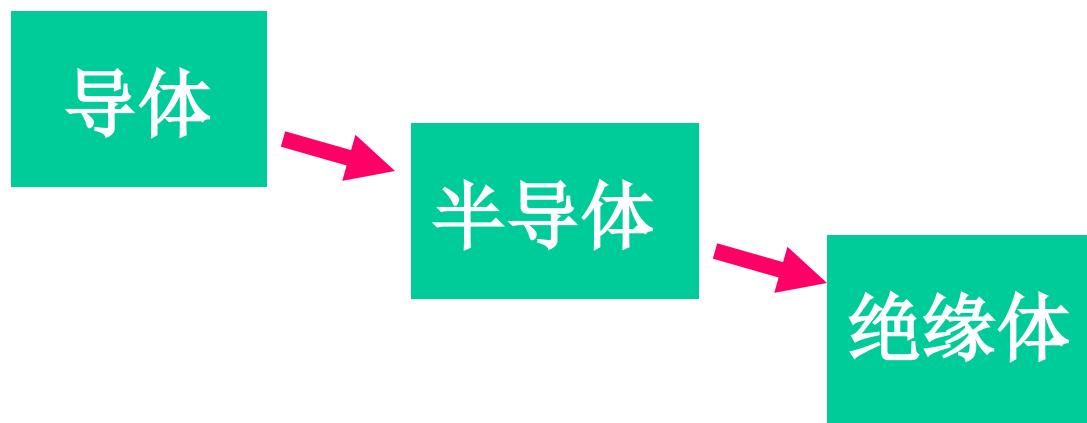
- 禁带的宽度对晶体的导电性有重要的作用。
- 若上下能带重叠，其间禁带就不存在。



导体和绝缘体

(conductor . insulator)

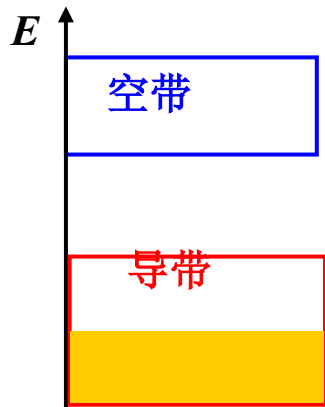
固体按导电性能的高低可以分为



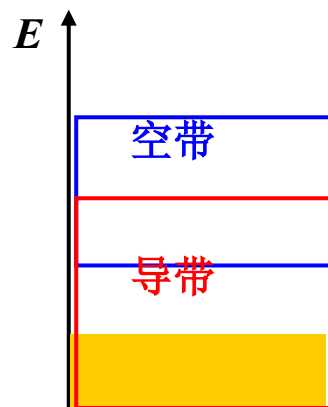
它们的导电性能不同，
是因为它们的能带结构不同。

5. 导体(conductor)的能带结构

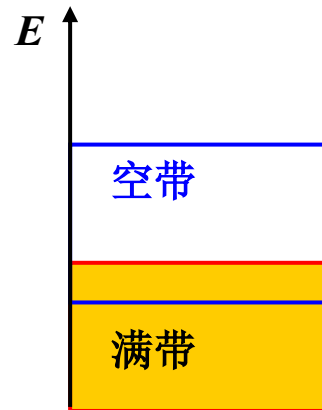
• 能带结构



某些一价金属，
如：Li ...



如：Na, K, Cu,
Al, Ag ...



某些二价金属，
如：Be, Ca, Mg,
Zn, Ba ...

(1) 没有满带

导带和空带不重叠 (如Li, ...)

导带和空带重叠 (如Na, K, Cu, Al, Ag)

(2) 有满带，但满带和空带(或导带)重叠 (如某些二价元素Be, Ca, Mg, Zn, Ba)

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/835210303012011304>