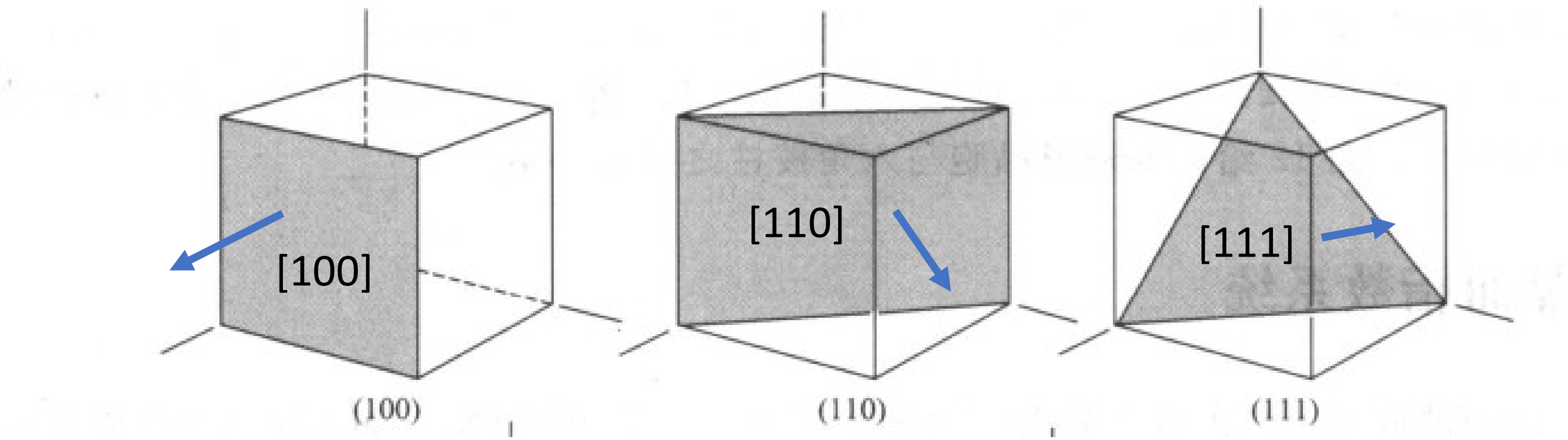
小结：晶面和晶向

- 晶面和晶胞的三个轴的截距的倒数，（可约分到最小整数，）称为密勒指数(hkl)或直接称晶面(hkl)
  - 在不约分时，原点和晶面的距离称为晶面间距
- 任意一个方向按照晶胞的三个正格矢分解，约分到最小整数，称为晶向[hkl]
  - 晶向方向为$h\mathbf{a}_1+k\mathbf{a}_2+l\mathbf{a}_3$
- ()、[]、{}、<>

小结：晶面和晶向

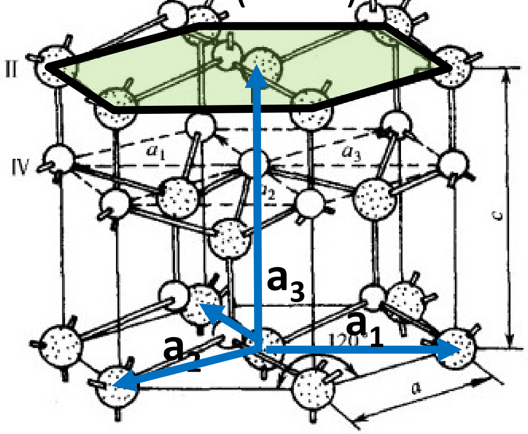
- 硅和其它立方晶体的晶面和晶向的表示方法
  - 立方晶体中，相应晶面和晶向垂直



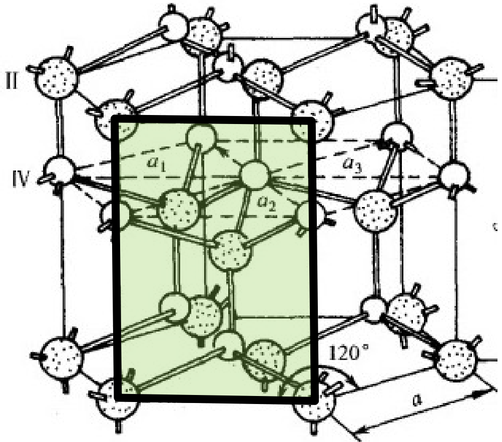
小结：晶面和晶向

- 六方晶体类似，略复杂一些
  - 密勒-布拉伐指数(hkml)
  - 一些常见的晶面

(0001)

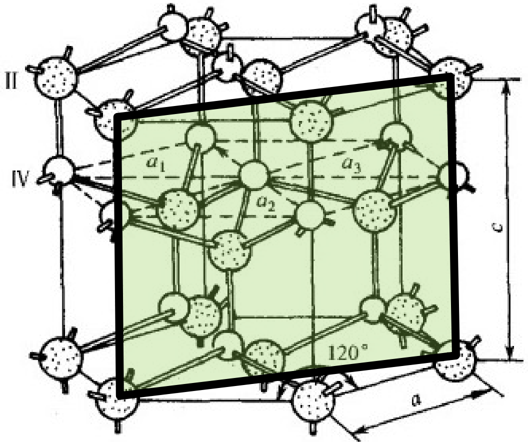


c-plane



(01-10)

m-plane



(11-20)

a-plane

小结：晶面和晶向

- [111]方向的硅/闪锌矿有六方对称性
  - 但晶胞有7层原子，和纤锌矿晶胞的5层不同
- 解理的概念
  - 硅的{110}解理面
- 原子面终止的概念

观测晶体结构的实验手段

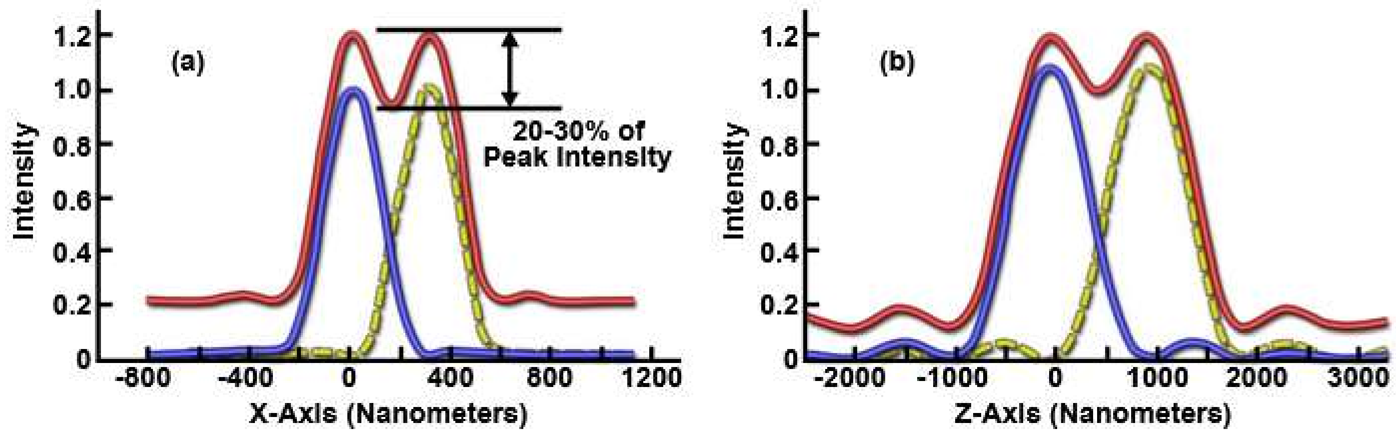
- 直接观察手段
  - 透射电子显微镜（TEM, transmission electron microscopy）
  - 扫描透射电子显微镜（STEM, scanning transmission electron microscopy），分辨率更高

- 间接精确测量手段
  - X射线衍射（XRD, X-ray diffraction）

显微镜的分辨率

两个点光源如果相隔太近，低于分辨率，就无法区分两者的艾里斑

Figure 2 - The Rayleigh Criterion for Lateral Axial Resolution



Nikon, microscopyu.com

$$R = 0.61\lambda/\mathrm{NA}$$

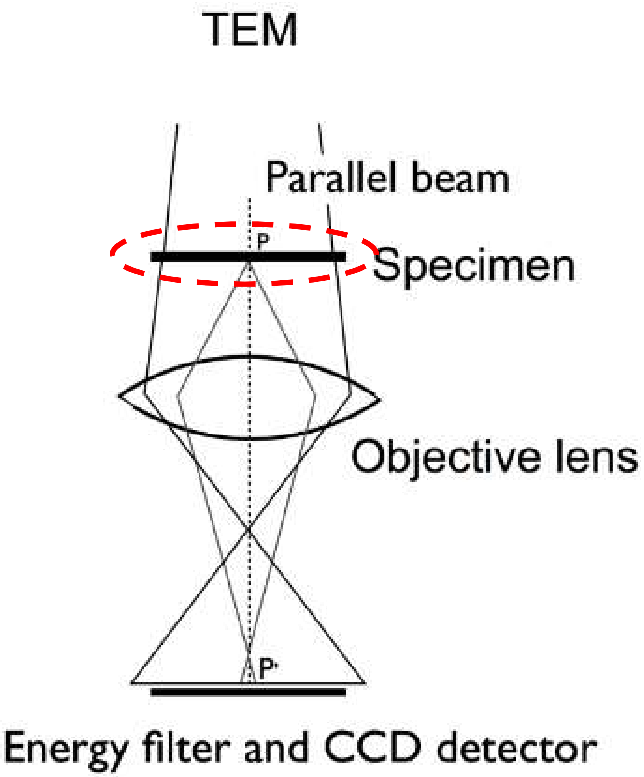
称为瑞利分辨率，λ为波长，NA~1称为数值孔径，和显微镜光路有关

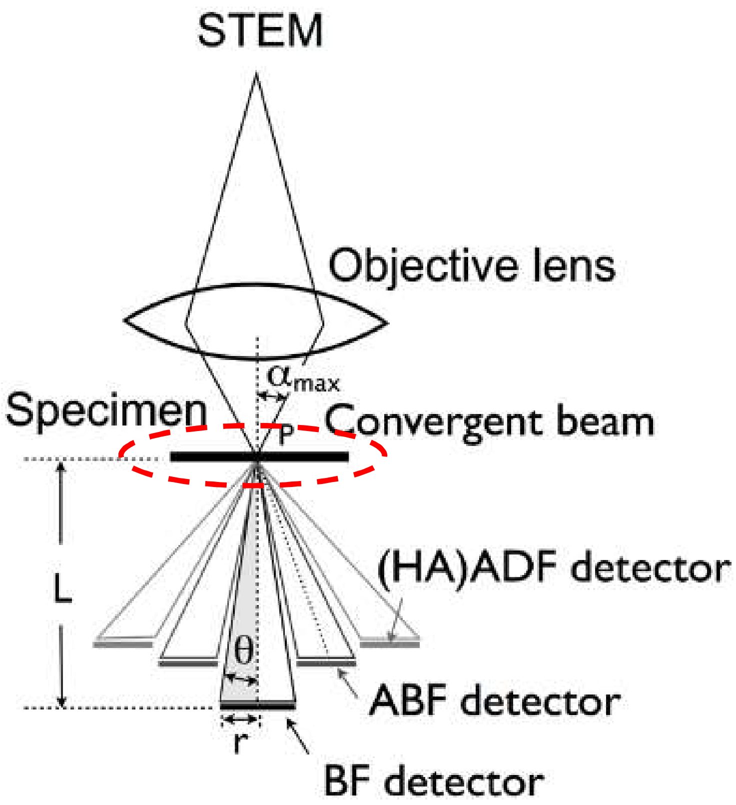
降低波长，分辨率更好（可见光400-700 nm）

100 keV能量电子，由$E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}$，$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$，k=2π/λ，波长为0.012 nm，远低于晶格常数

透射电子显微镜

利用高能电子的短波长，制备原子尺度分辨的显微镜



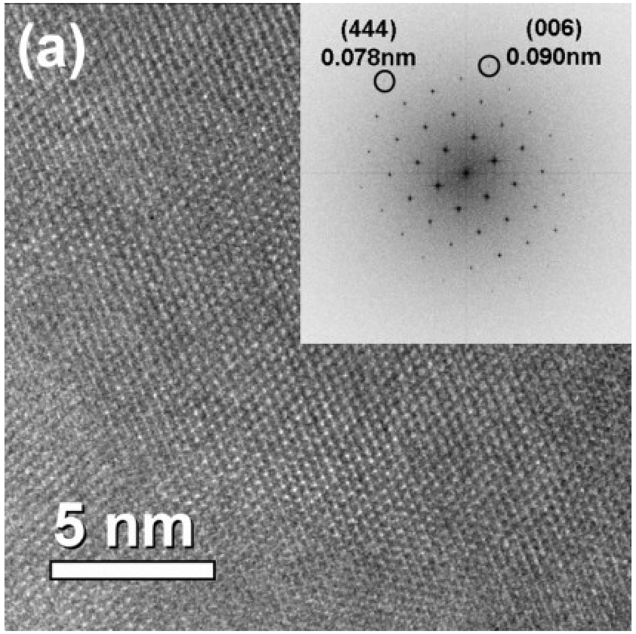


S. Wolf et al., *Nat Methods* **11**, 423 (2014).

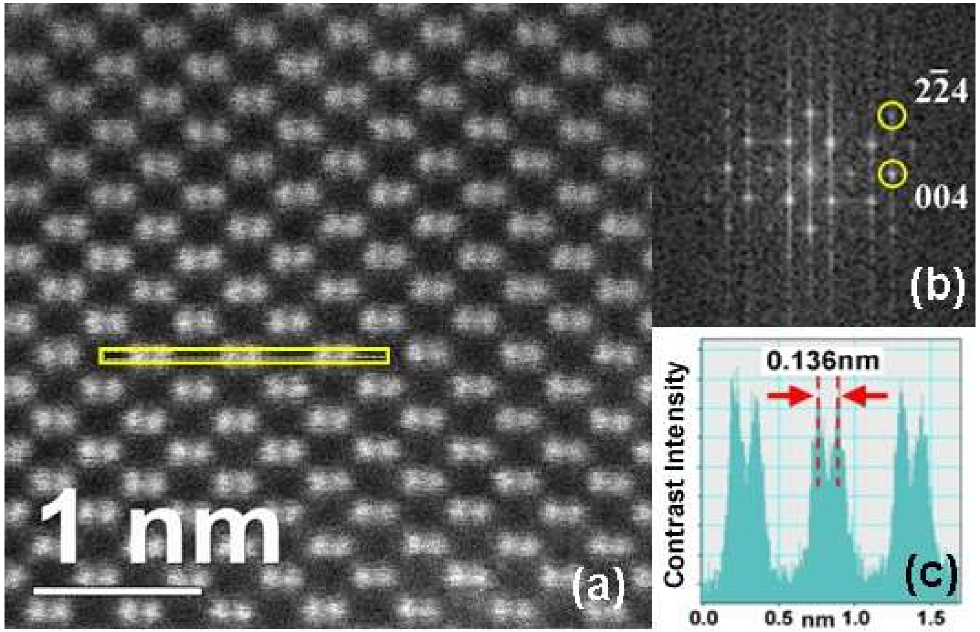
TEM：未完全聚焦的电子束照射到样品上　STEM：聚焦成一点的电子束照射到样品上

TEM和STEM显微图像对比

TEM图像（及其傅里叶变换）



STEM图像（及其傅里叶变换）



I. M. Ross et al., J. Phys. Conference Series 371, 012013 (2012).

TEM和STEM中的原子列

TEM和STEM都需要俯视排列整齐的原子列（column）才能成像

Si晶胞

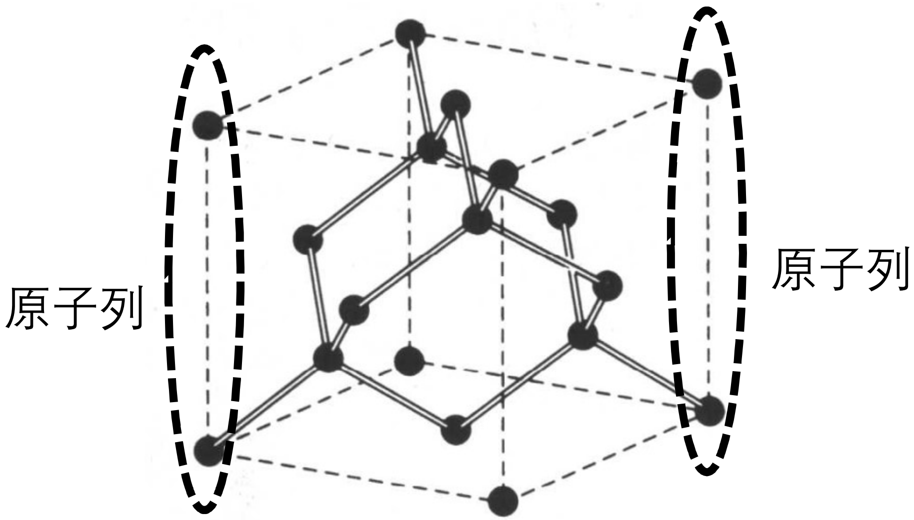
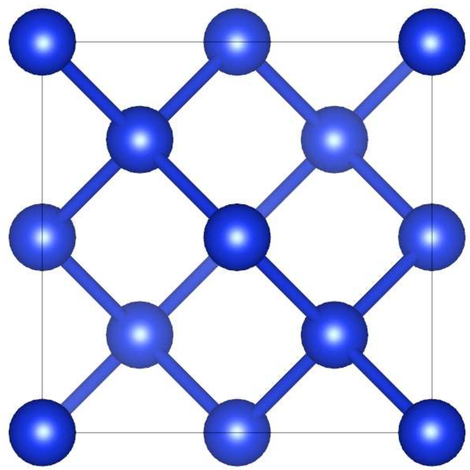


图 23 金刚石型晶体结构。图中显示了四面体键合的排列方式。

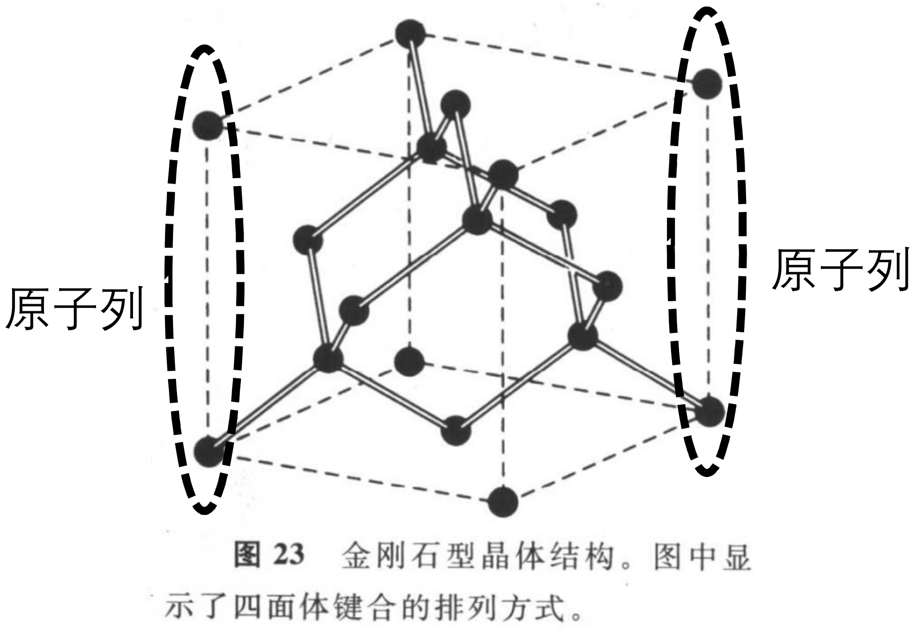
Si(001) 俯视



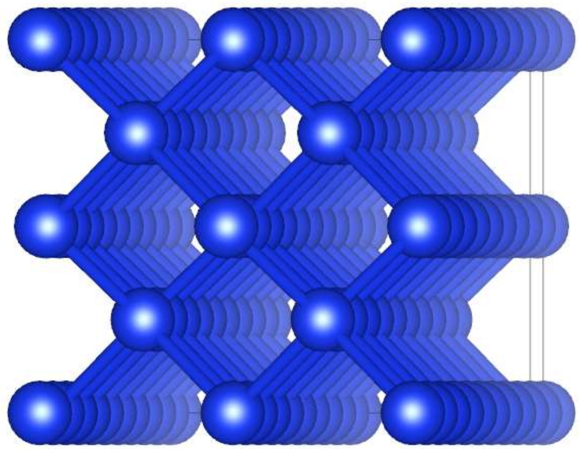
TEM和STEM中的原子列

如果斜着看就无法成像

Si晶胞



Si(001) 俯视，偏差2º



透射电子显微技术中，只能看到晶格的二维投影

观测晶体结构的实验手段

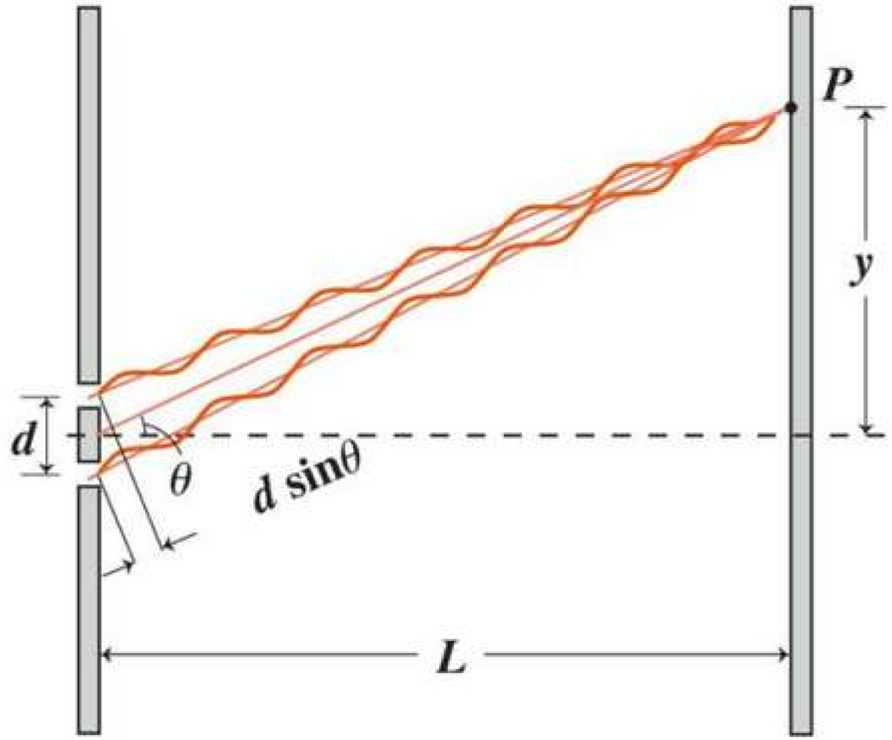
- 直接观察手段
  - 透射电子显微镜（TEM, transmission electron microscopy）
  - 扫描透射电子显微镜（STEM, scanning transmission electron microscopy），分辨率更高
- 间接精确测量手段
  - X射线衍射（XRD, X-ray diffraction）

常见的X射线相关表征方法

- X射线衍射（XRD, X-ray diffraction），用于测量晶格常数和晶格结构
- X射线反射（XRR, X-ray reflectivity），用于测量样品厚度
- X射线能谱技术
  - X射线光电效应能谱（XPS, X-ray photoemission spectroscopy），用于测量样品价带
  - X射线吸收谱（XAS, X-ray absorption spectroscopy），用于测量样品导带

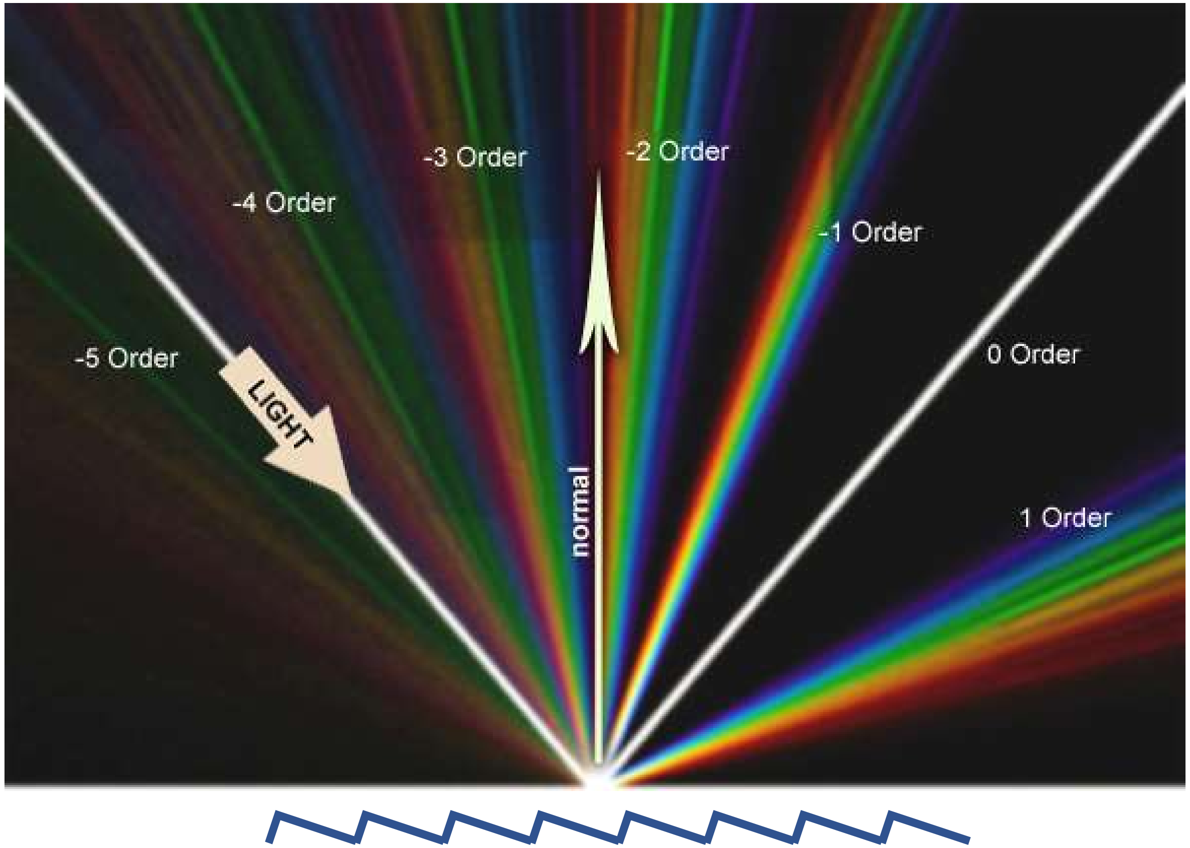
光的干涉

- 两个路径光程差为波长整数倍时，干涉增强；波长半整数倍时，干涉相消
- $d\ \sin\theta = n\lambda$， n为正整数，干涉增强



光栅衍射

光栅衍射（示意图）



光栅

- 光在周期性结构作用下衍射
  - 在某些方向上增强（峰值）
  - 周期需与光波长类似
  - 不同波长的光、不同光栅周期，峰值位置不同

https://www.alanzucconi.com/2017/07/15/the-mathematics-of-diffraction-grating/

X射线衍射

波长为0.1-1 nm的电磁波（X射线）和晶格常数相似，晶格可进行类似光栅的衍射

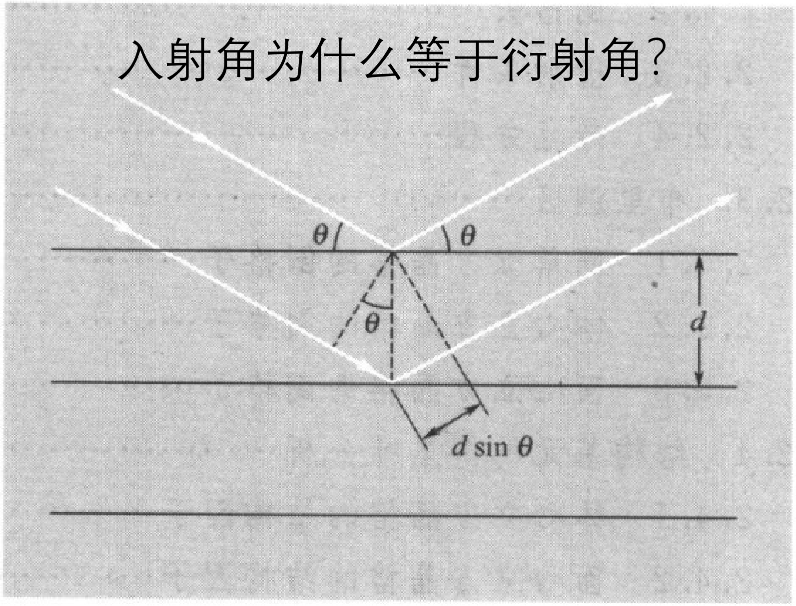


图 2 推导布拉格方程 $2d\sin\theta = n\lambda$ 的示意图。其中，d 为平行原子平面间的距离，$2\pi n$ 是相继原子平面反射辐射之间的相位差。反射面与具体样品的表面无关。

光程差为波长整数倍时，干涉增强

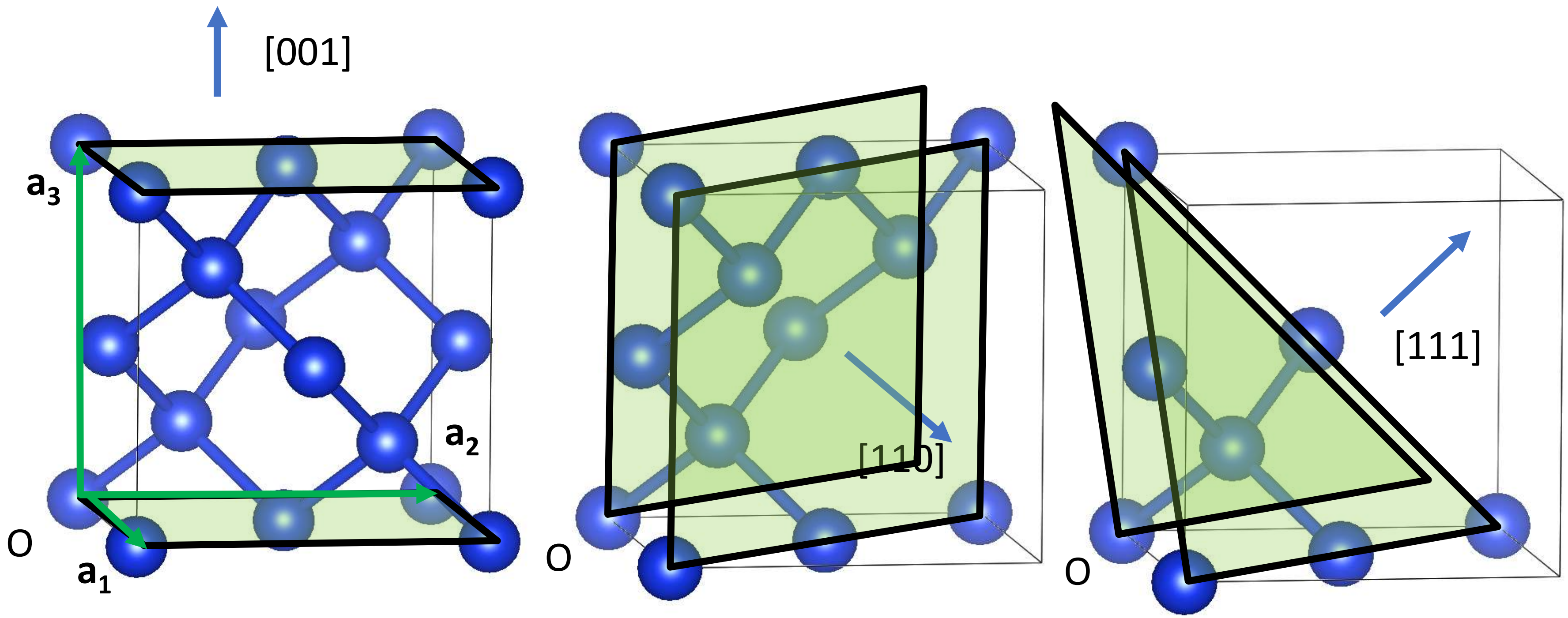
布拉格定律Bragg’s law

$$2d\ \sin\theta = n\lambda$$

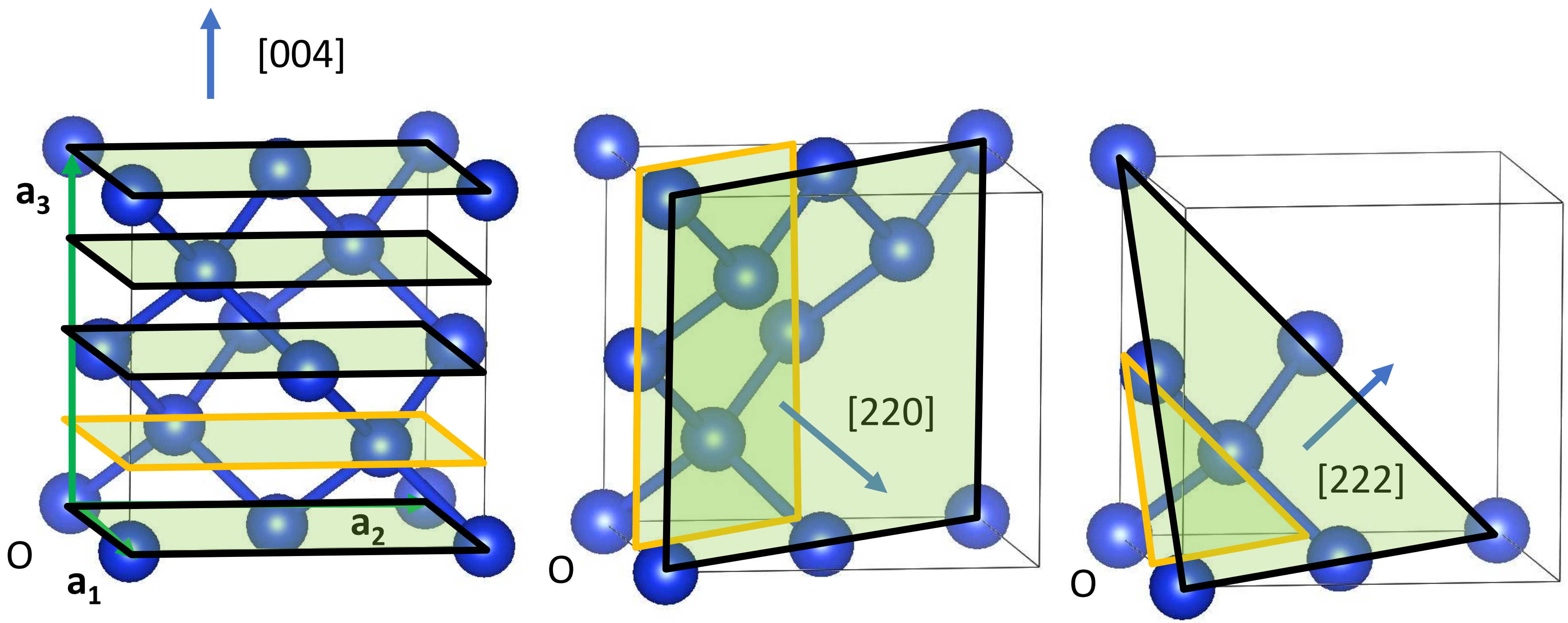
其中d为晶面间距，θ为衍射角，n为正整数，λ为X射线波长（使用第二种晶面指标传统时，通常n取1）

<u>利用波长和角度计算晶面间距和晶格常数</u>

硅的常见晶面间距



硅的常见晶面间距

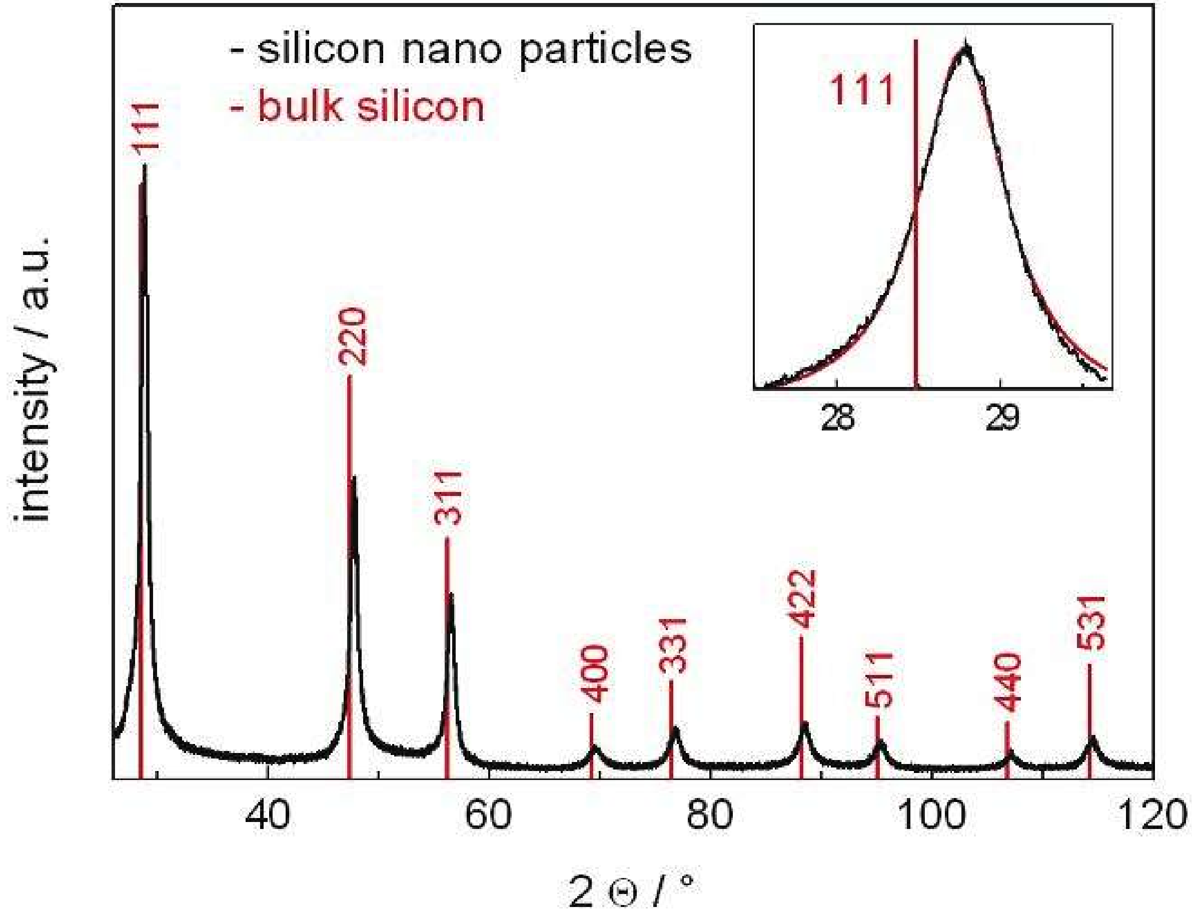


X射线衍射的实验操作

注意：测量时需要关上舱门

硅的X射线衍射谱

硅的XRD谱图，可以看到大量衍射峰



T. Huelser et al., NSTI-Nanotech 2010, 1, 330 (2010).

布拉格定律Bragg’s law

$$2d\ \sin\theta = n\lambda$$

可计算不同晶体的晶格常数

由于对称性，(100)、(200)、(110)等衍射峰并不存在

观测晶体结构的实验手段

- 综合TEM/STEM、XRD，能得知：
  - 晶胞
  - 晶格
  - 晶格常数
- 晶体结构就完全清楚了

遗留问题

- TEM、STEM的傅里叶变换是什么?

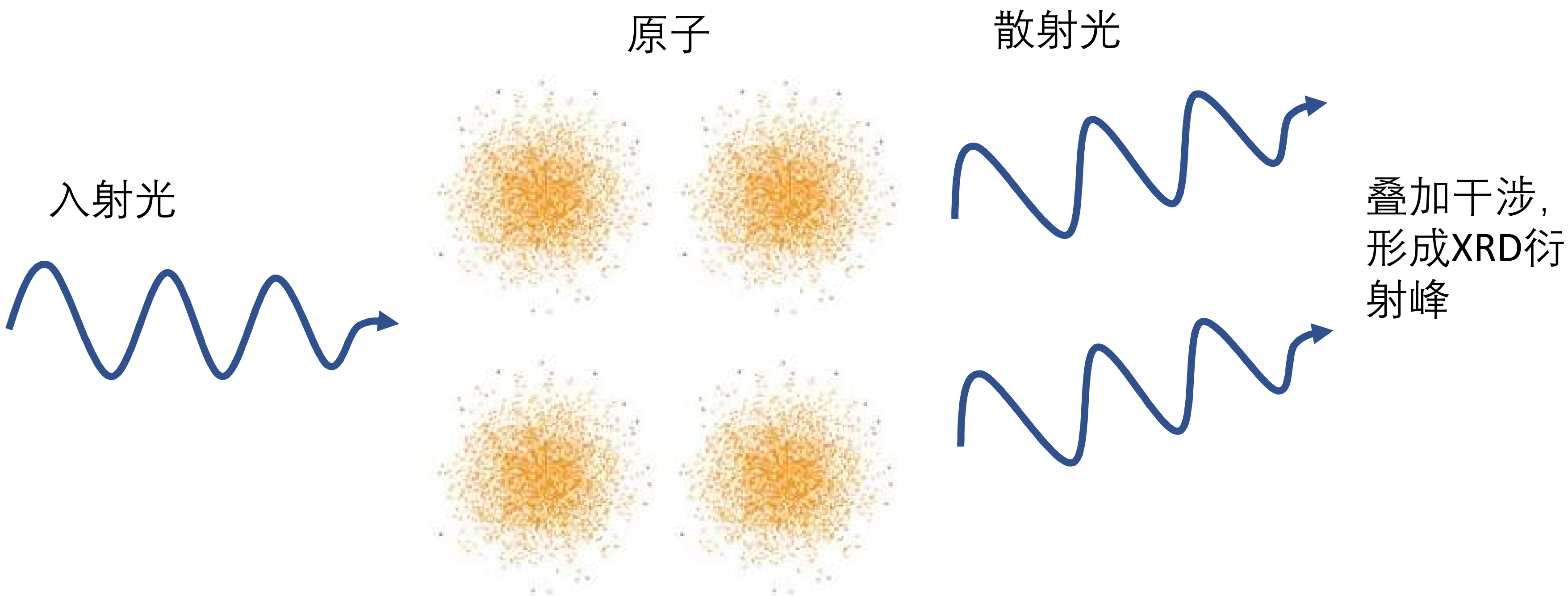
- TEM、STEM的傅里叶变换出现的亮点（以“密勒指数”编号），和XRD中的衍射峰（以晶面的密勒指数编号）有没有什么关系?

- XRD中，入射角为什么等于衍射角?

波的晶格散射理论

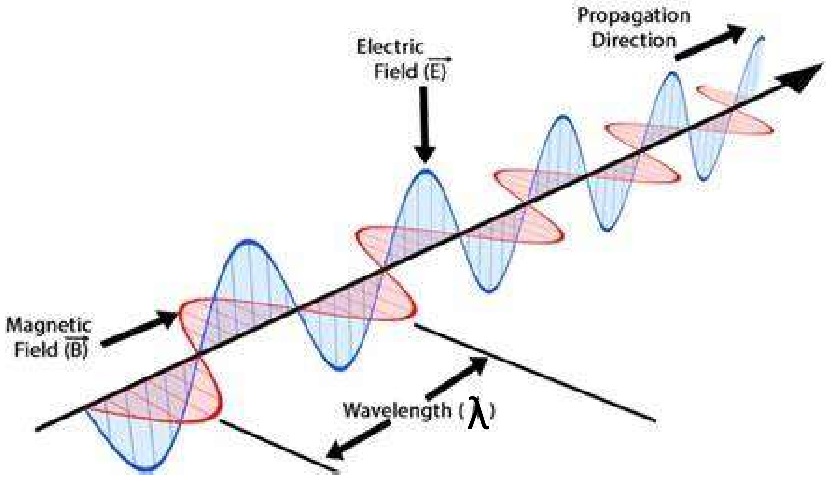
定量描述XRD

光的晶格散射



光的描述

光：周期性的电磁场（波）



波长λ，频率ν，光速c； λν = c

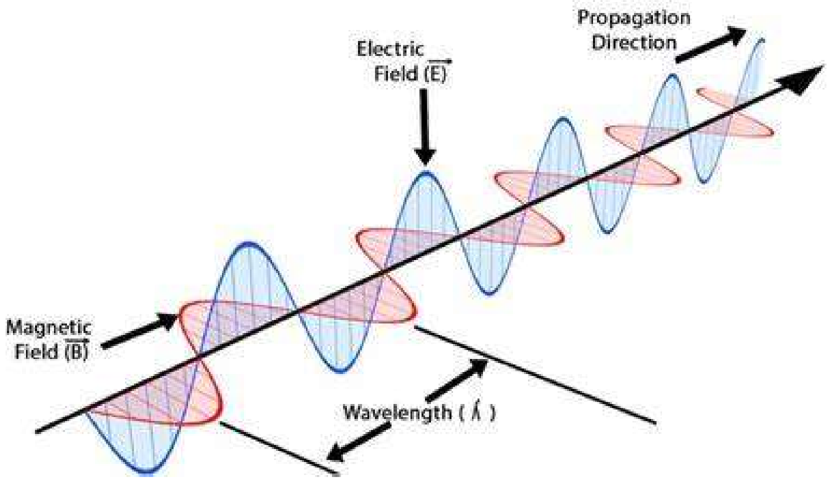
波矢量k，k = 2π/λ；角频率ω， ω = 2πν

这个关系是怎么来的？

ω/k = c

光的描述

光：周期性的电磁场（波）



严格形式由麦克斯韦方程解出　　　怎么解?

$$\nabla^2 \boldsymbol{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2}$$

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 e^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x} - \omega t)} \quad (\boldsymbol{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2})$$

即ω/k = c

注意能量（标量）E和电场（矢量）**E**的符号类似，但不同

相关数学符号复习

- 矢量内积$\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$，矢量矢积$\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$
  - $|\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}|$为两矢量间平行四边形面积
  - $(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{c}$为三矢量间平行六面体面积
- 标量场$\phi(\boldsymbol{x},t)$和矢量场$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$
- 三维偏导数算符$\boldsymbol{\nabla}=\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right)$
- 梯度$\boldsymbol{\nabla}\phi$、散度$\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}$、旋度$\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}$
- 拉普拉斯算符$\boldsymbol{\nabla}^2\phi=\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{\nabla}\phi=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\phi$
- $\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{A}=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\boldsymbol{A}$

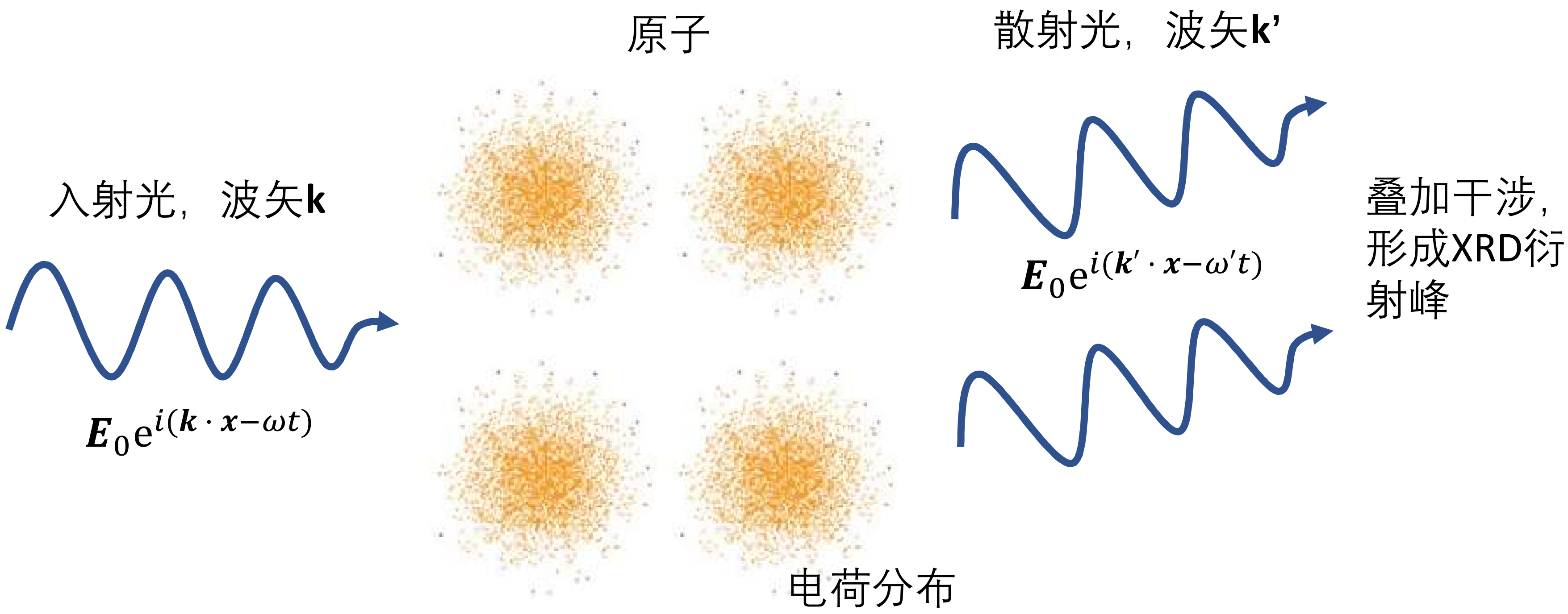
相关电磁学知识复习

- $\boldsymbol{E} = -\boldsymbol{\nabla}\phi$ （电场-电势关系）
- $\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{E} = \rho/\epsilon_0$ （高斯定理）
- $\boldsymbol{\nabla}^2\boldsymbol{E} = \frac{1}{\mathrm{c}^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{E}}{\partial t^2}$ （麦克斯韦方程）
- $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0\mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}$ （电磁波，麦克斯韦方程的解）
  - 代入可解得：
  - $\boldsymbol{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$ （解的限制条件）
  - 即ω/k = c

光的干涉

- 一束光分为两个路径传播
  - $\boldsymbol{E}_0 \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}$
  - $\boldsymbol{E}_0 \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t+\varphi)}$（多一个相位）
- $\boldsymbol{E}_0 \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)} + \boldsymbol{E}_0 \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t+\varphi)} = ?$
  - $\varphi = 0$，上式= $2\boldsymbol{E}_0 \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}$，干涉增强（光程差λ的整数倍）
  - $\varphi = \pi$，上式=0（$e^{i\pi}=-1$），干涉相消（光程差λ的半整数倍）
  - 相位φ = 2π*光程差/λ = k*光程差

光-晶格散射



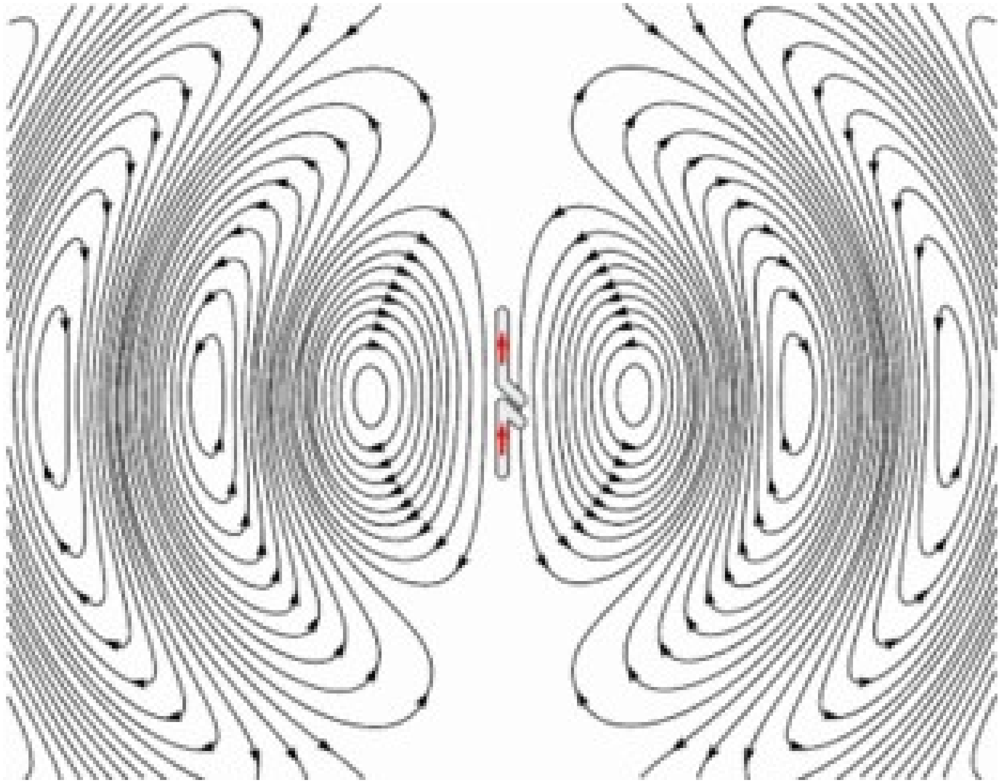
散射光的波矢和频率？

光-电荷弹性散射：电磁场和电荷作用，造成电荷周期性极化

变化的电偶极矩产生偶极辐射，辐射各个方向的光

偶极辐射

变化的电偶极子

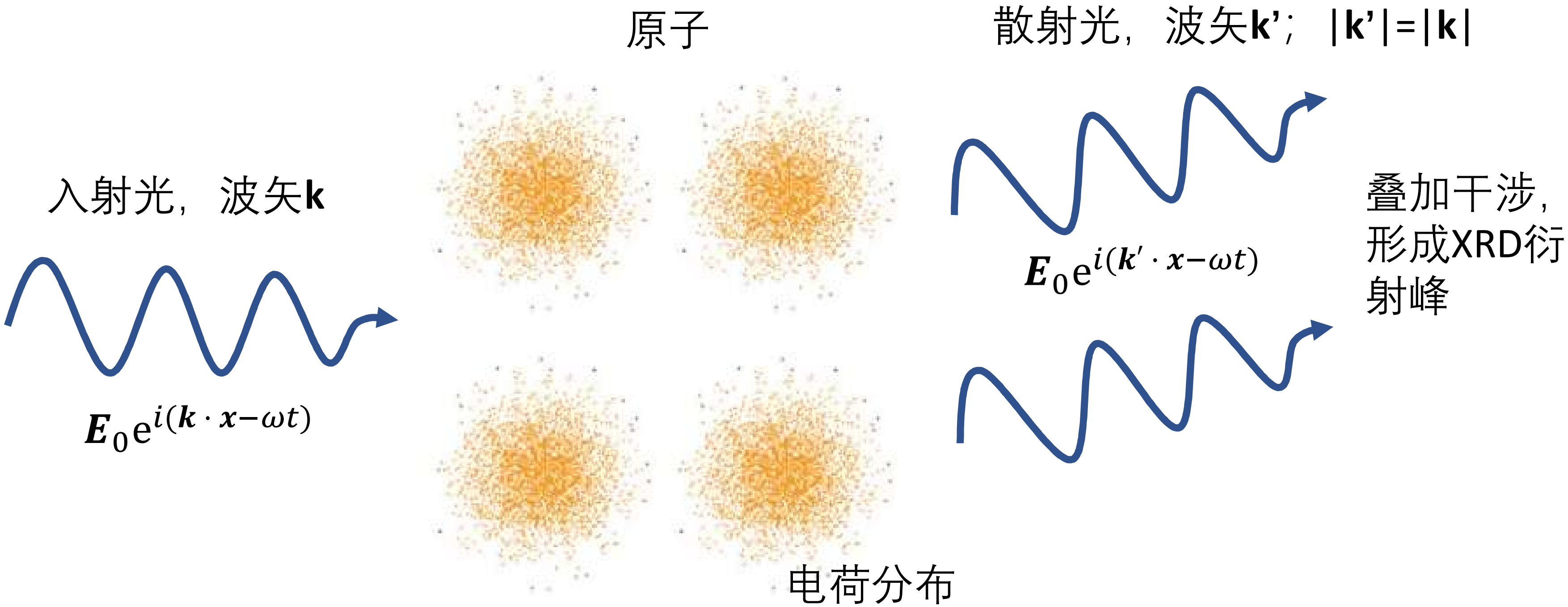


辐射的电场

电荷密度越高，偶极矩越大，散射越强

辐射的频率应和入射光相同；由 $\boldsymbol{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$，辐射的波矢量大小和入射光相同（弹性散射）

光-晶格散射

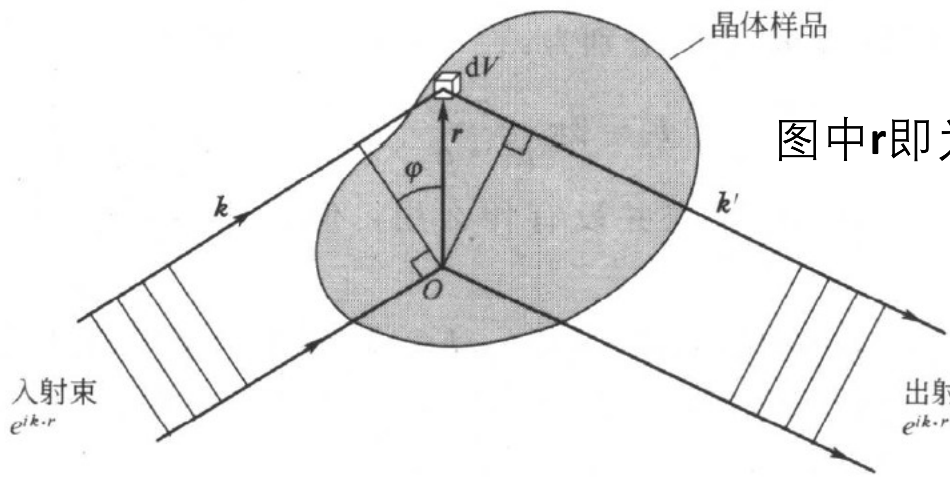


辐射的频率应和入射光相同；由 $\boldsymbol{k}^2 = \frac{\omega^2}{c^2}$ ，辐射的波矢量大小和入射光相同（弹性散射）

散射和电荷密度成正比

所有散射光干涉叠加（积分），构成XRD衍射峰

光-晶格散射



图中**r**即为**x**，位置矢量

图 6 入射波（$\boldsymbol{k}$）在点 O 和点 $\boldsymbol{r}$ 处的行程差是 $r\sin\varphi$，相角差是$\frac{2\pi r\sin\varphi}{\lambda}$（等于 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}$）；衍射波的相角差是$-\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}$。总的相角差是（$\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$）$\cdot\boldsymbol{r}$，从$\boldsymbol{r}$ 处体积元 dV 散射的波相对于从原点 O 处体积元散射的波，其相位差因子是 exp $[i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}]$。

衍射波振幅 $\boldsymbol{E}\sim\int\rho(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}dV$

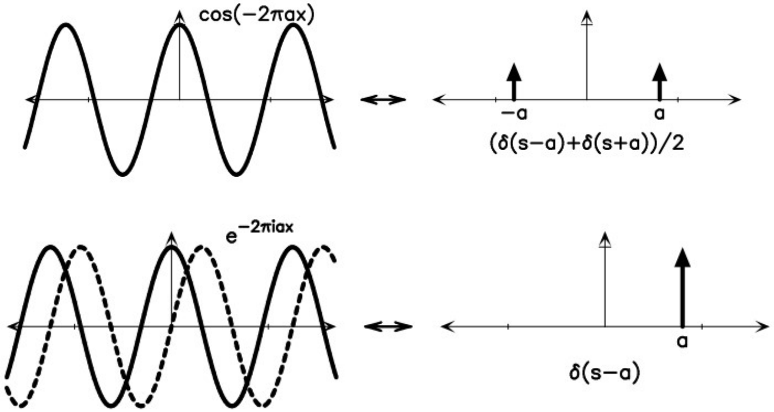
正比于每个体积元的散射强度和干涉因子$\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}$

其中$\rho(\boldsymbol{x})$ 是电荷密度，显示了散射的强度，是一个周期函数

周期为$\mathbf{a}_1$、$\mathbf{a}_2$、$\mathbf{a}_3$

傅里叶变换

- 将时域变为频域
  - $F(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}f(t)e^{-i\omega t}dt$



周期函数变换为频谱里的一系列周期性的“δ函数”（尖峰）

https://www.cv.nrao.edu/~sransom/web/A1.html

- 将波函数变为“波矢量函数”
  - $F(\boldsymbol{k})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}f(\boldsymbol{x})e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}dV$

衍射波振幅 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\sim\int\rho(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}dV$

傅里叶变换

- 衍射波振幅$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\sim\int\rho(\boldsymbol{x})\,\mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}}dV$
  - 有了电荷密度可精确计算

- 特征： $\rho(\boldsymbol{x})$周期为$\mathbf{a}_1$、$\mathbf{a}_2$、$\mathbf{a}_3$
- $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$是一系列周期性的尖峰
  - 周期是什么？
  - k单位为m^{-1}，显然不是$\mathbf{a}_1$、$\mathbf{a}_2$、$\mathbf{a}_3$的简单线性组合

倒格矢

- 平移矢量$\boldsymbol{a_1}$、$\boldsymbol{a_2}$、$\boldsymbol{a_3}$又称为“正格矢”
  - $h\boldsymbol{a_1} + k\boldsymbol{a_2} + l\boldsymbol{a_3}$从晶格的一个格点指向另一个格点
- 定义

$$\boldsymbol{b_1} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3}}{\boldsymbol{a_1} \cdot (\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3})} \quad \boldsymbol{b_2} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_3} \times \boldsymbol{a_1}}{\boldsymbol{a_1} \cdot (\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3})} \quad \boldsymbol{b_3} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_1} \times \boldsymbol{a_2}}{\boldsymbol{a_1} \cdot (\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3})}$$

为“倒格矢”，满足

$$\begin{array}{lll}
\boldsymbol{a_1} \cdot \boldsymbol{b_1} = 2\pi & \boldsymbol{a_1} \cdot \boldsymbol{b_2} = 0 & \boldsymbol{a_1} \cdot \boldsymbol{b_3} = 0 \\
\boldsymbol{a_2} \cdot \boldsymbol{b_1} = 0 & \boldsymbol{a_2} \cdot \boldsymbol{b_2} = 2\pi & \boldsymbol{a_2} \cdot \boldsymbol{b_3} = 0 \\
\boldsymbol{a_3} \cdot \boldsymbol{b_1} = 0 & \boldsymbol{a_3} \cdot \boldsymbol{b_2} = 0 & \boldsymbol{a_3} \cdot \boldsymbol{b_3} = 2\pi
\end{array}$$

即$\boldsymbol{b_1}$垂直于$\boldsymbol{a_2}$、$\boldsymbol{a_3}$，$\boldsymbol{b_2}$垂直于$\boldsymbol{a_1}$、$\boldsymbol{a_3}$，$\boldsymbol{b_3}$垂直于$\boldsymbol{a_1}$、$\boldsymbol{a_2}$

倒空间

- 倒格矢的单位为m^{-1}，其存在的空间称为“倒空间”、“倒易空间”(reciprocal space)，与实空间(real space)对应

$$\boldsymbol{b_1} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3}}{\boldsymbol{a_1} \cdot (\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3})} \quad \boldsymbol{b_2} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_3} \times \boldsymbol{a_1}}{\boldsymbol{a_1} \cdot (\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3})} \quad \boldsymbol{b_3} = 2\pi \frac{\boldsymbol{a_1} \times \boldsymbol{a_2}}{\boldsymbol{a_1} \cdot (\boldsymbol{a_2} \times \boldsymbol{a_3})}$$

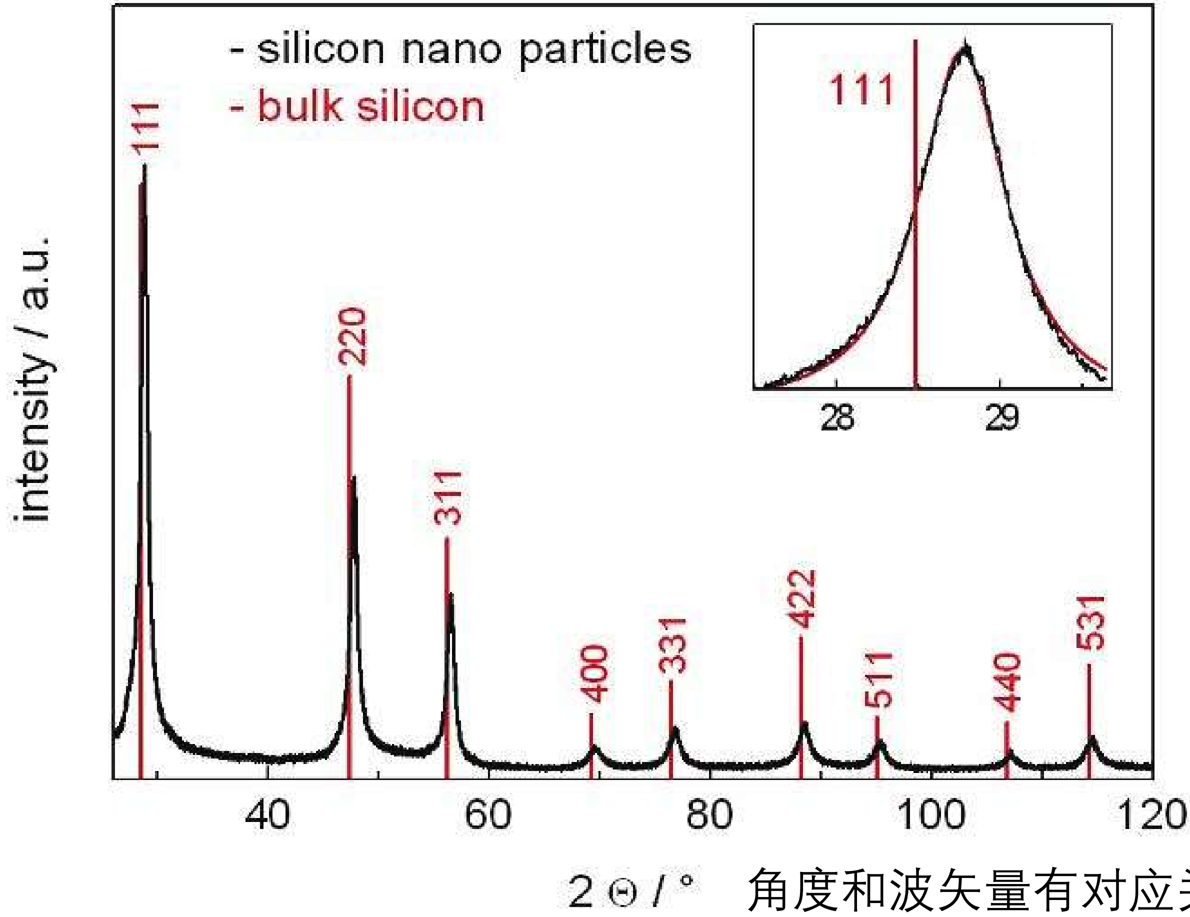
- $h\boldsymbol{b_1} + k\boldsymbol{b_2} + l\boldsymbol{b_3}$（整数hkl）称为“倒格点”，形成的集合叫倒晶格，与格点、晶格对应
- 可以证明，$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k'} - \boldsymbol{k}) \sim \int \rho(\boldsymbol{x})\, \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k'}-\boldsymbol{k})\cdot \boldsymbol{x}} dV$（衍射波振幅）的周期为倒格矢$\mathbf{b}_1$、$\mathbf{b}_2$、$\mathbf{b}_3$
- 因此，$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k'} - \boldsymbol{k})$是倒格点位置处的尖峰

光-晶格散射：总结

- 入射光$\boldsymbol{E}_0 \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\omega t)}$
- 衍射波振幅$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}) \sim \int \rho(\boldsymbol{x})\, \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{x}} dV$
  - 是电荷密度$\rho(\boldsymbol{x})$的傅里叶变换
- 电荷密度函数$\rho(\boldsymbol{x})$有周期性，周期为$\mathbf{a}_1$、$\mathbf{a}_2$、$\mathbf{a}_3$
- 其傅里叶变换为周期性的尖峰，周期为倒格矢$\mathbf{b}_1$、$\mathbf{b}_2$、$\mathbf{b}_3$
  - $h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3$形成的集合称为倒晶格
- 衍射波振幅$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$为倒晶格上的尖峰
- XRD测得的峰即为倒晶格对应的峰
  - 角度即为波矢量的方向，有对应关系

硅的X射线衍射谱

硅的XRD谱图，可以看到大量衍射峰



角度和波矢量有对应关系：可用**k**作为横轴

布拉格定律Bragg’s law

$$2d\ \sin\theta = n\lambda$$

可计算不同晶体的晶格常数

由于对称性，(100)、(200)、(110)等衍射峰并不存在

T. Huelser et al., NSTI-Nanotech 2010, 1, 330 (2010).

XRD用散射理论解释

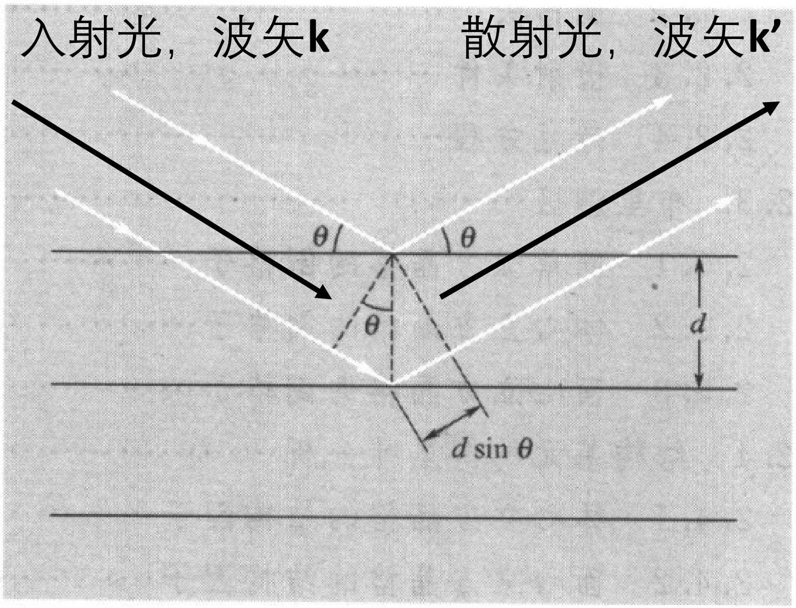


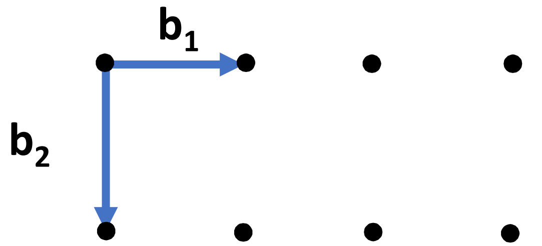
图 2 推导布拉格方程 $2d\sin\theta=n\lambda$ 的示意图。其中，d 为平行原子平面间的距离，$2\pi n$ 是相继原子平面反射辐射之间的相位差。反射面与具体样品的表面无关。

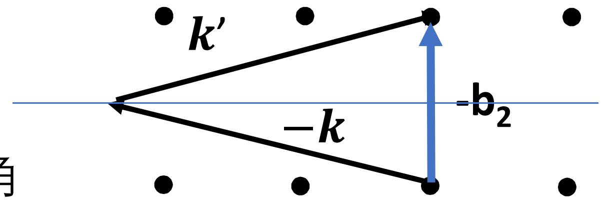
散射振幅$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$是倒格点位置处的尖峰

衍射时必有

$$\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}=h\boldsymbol{b}_1+k\boldsymbol{b}_2+l\boldsymbol{b}_3$$

相当于(hkl)晶面

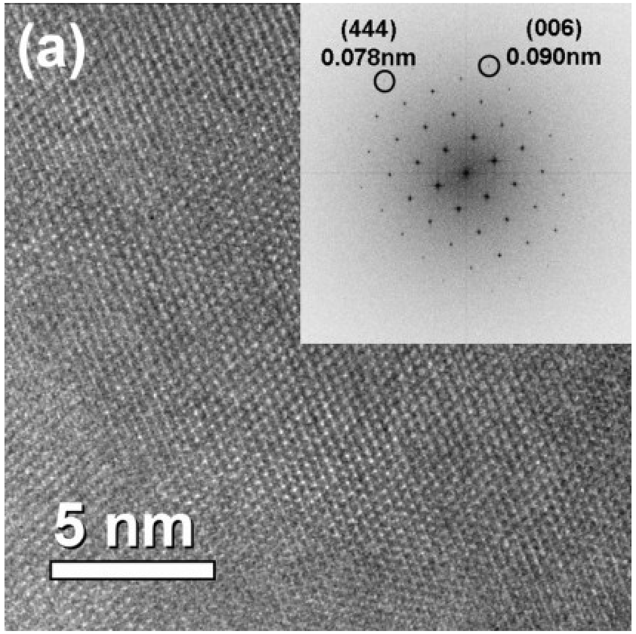




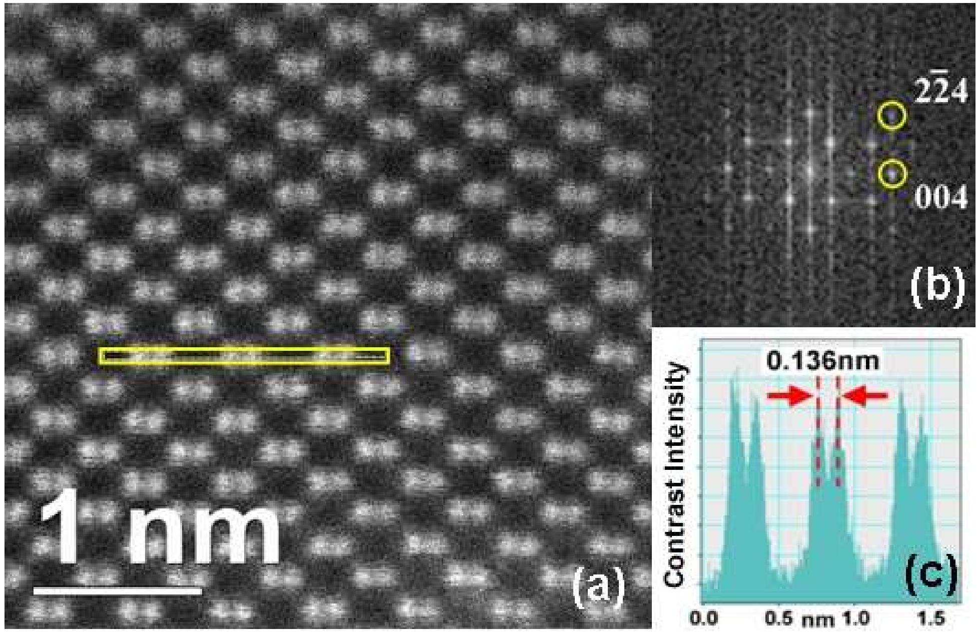
k=k'大小相等，则必有入射角等于衍射（散射）角

TEM和STEM中的傅里叶变换

TEM图像（及其傅里叶变换）



STEM图像（及其傅里叶变换）



I. M. Ross et al., J. Phys. Conference Series 371, 012013 (2012).

TEM/STEM图像本质是电荷密度的反映，做傅里叶变换后恰好成为倒格子处的亮点

倒晶格的意义

- 倒空间是波矢量**k**所处的线性空间
- 能带结构E(**k**)的定义域就位于倒空间中
  - 注意E为能量，**E**为电场
- 我们之后的教学，很多都要围绕倒空间来开展

例：一维晶体的倒晶格

一维晶体的倒晶格

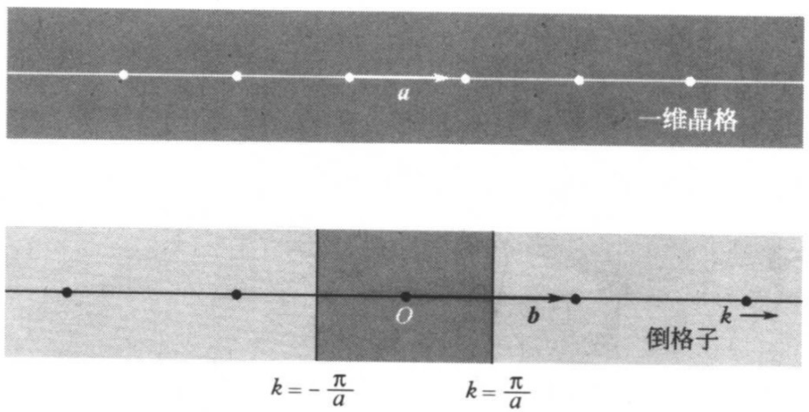


图 11 一维晶体的正格子和倒格子。倒格子空间中的基矢是 $\boldsymbol{b}$，长度等于 $2\pi/a$。由原点出发的最短倒格矢是 $\boldsymbol{b}$ 和 $-\boldsymbol{b}$。这些矢量的垂直平分线构成第一布里渊区的边界。边界位于 $k=\pm\pi/a$。

$$\boldsymbol{b_1} = 2\pi\frac{\boldsymbol{a_2}\times\boldsymbol{a_3}}{\boldsymbol{a_1}\cdot(\boldsymbol{a_2}\times\boldsymbol{a_3})}$$

可取$\mathbf{a_2}\perp\mathbf{a_3}$，均垂直于$\mathbf{a_1}$

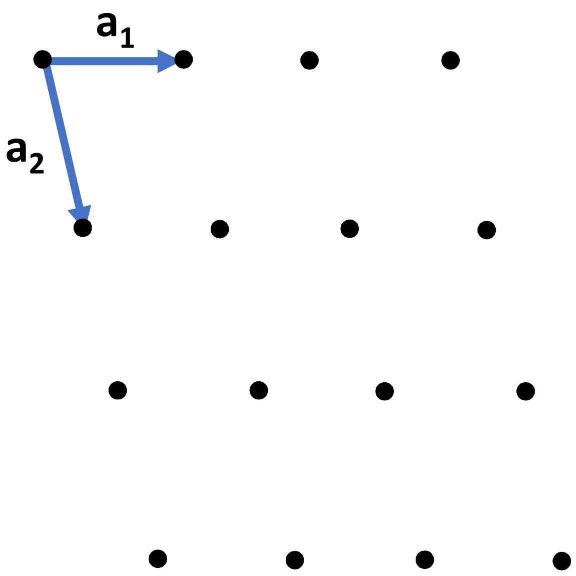
$$\boldsymbol{b_1} = 2\pi\frac{\boldsymbol{a_1}}{a_1^2}$$

第一布里渊区、简约布里渊区，或简称布里渊区(Brillouin Zone)，指倒晶格的原胞

确切地说，指的是一个倒格点到它最邻近的几个倒格点连线的垂直平分线所围成的区域（Wigner-Seitz原胞）

例：二维晶体的倒晶格

二维晶格



二维倒晶格和布里渊区

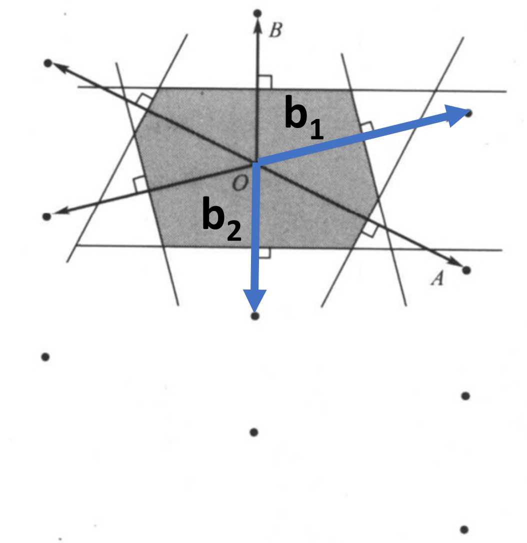


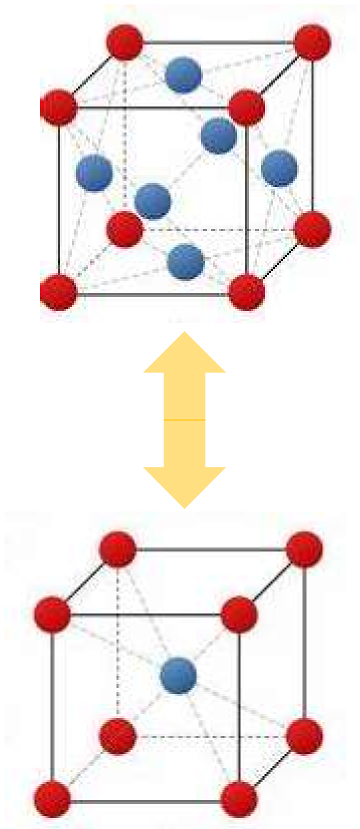
图 10 二维斜晶格第一布里渊区的作图法。首先在倒格子中从 O 点到邻近各点画若干矢量，然后通过这些矢量的中点作垂直线，被其围成的最小面积就是第一布里渊区。

$$\boldsymbol{b}_1 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)} \quad \boldsymbol{b}_2 = 2\pi\frac{\boldsymbol{a}_3 \times \boldsymbol{a}_1}{\boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{a}_3)}$$

可取$\mathbf{a}_3$垂直于$\mathbf{a}_1$、$\mathbf{a}_2$

面心立方晶格的倒晶格

面心立方和体心立方互为倒晶格



面心立方晶格的布里渊区

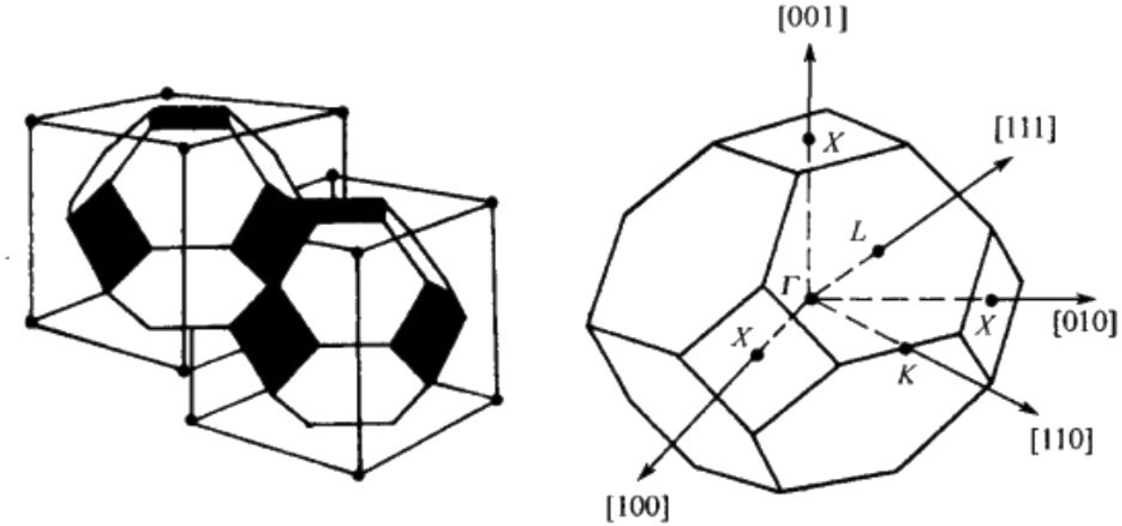


图 1-11　面心立方晶格和金刚石型结构的第一布里渊区

Γ：$\frac{2\pi}{a}(0,\ 0,\ 0)$，布里渊区中心；

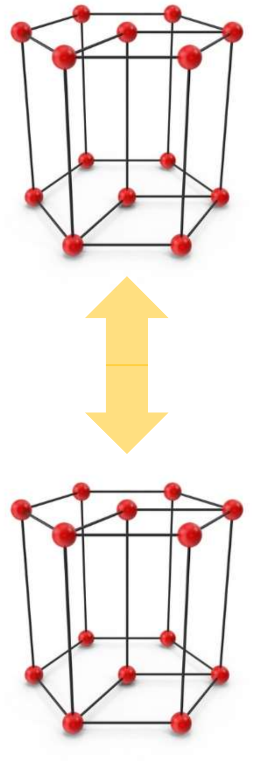
L：$\frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2},\ \frac{1}{2},\ \frac{1}{2}\right)$，布里渊区边沿与〈111〉轴的交点；

X：$\frac{2\pi}{a}(0,\ 0,\ 1)$，布里渊区边沿与〈100〉轴的交点；

K：$\frac{2\pi}{a}\left(\frac{3}{4},\ \frac{3}{4},\ 0\right)$，布里渊区边沿与〈110〉轴的交点。

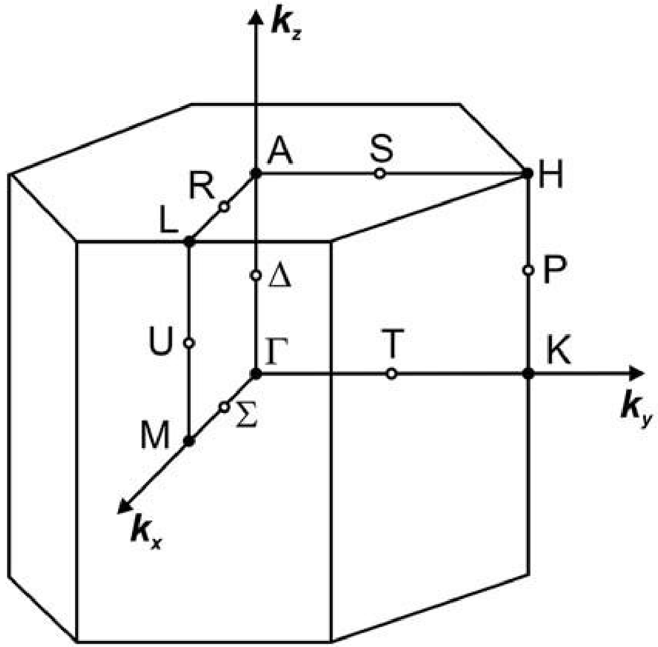
六方晶格的倒晶格

六方晶格和六方晶格互
为倒晶格



六方密堆积晶格有“分数格点”
现象，不适合计算倒晶格

六方晶格的布里渊区

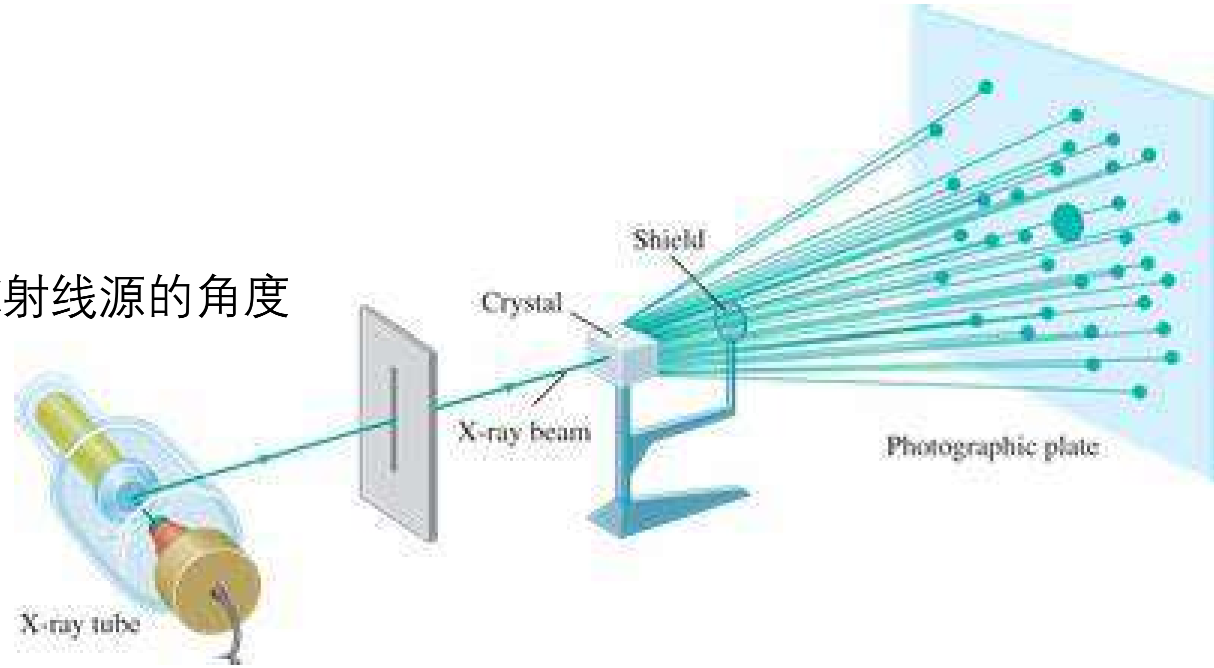


Γ：布里渊区中心
M：侧面面心
K：侧棱棱心
A：顶面面心

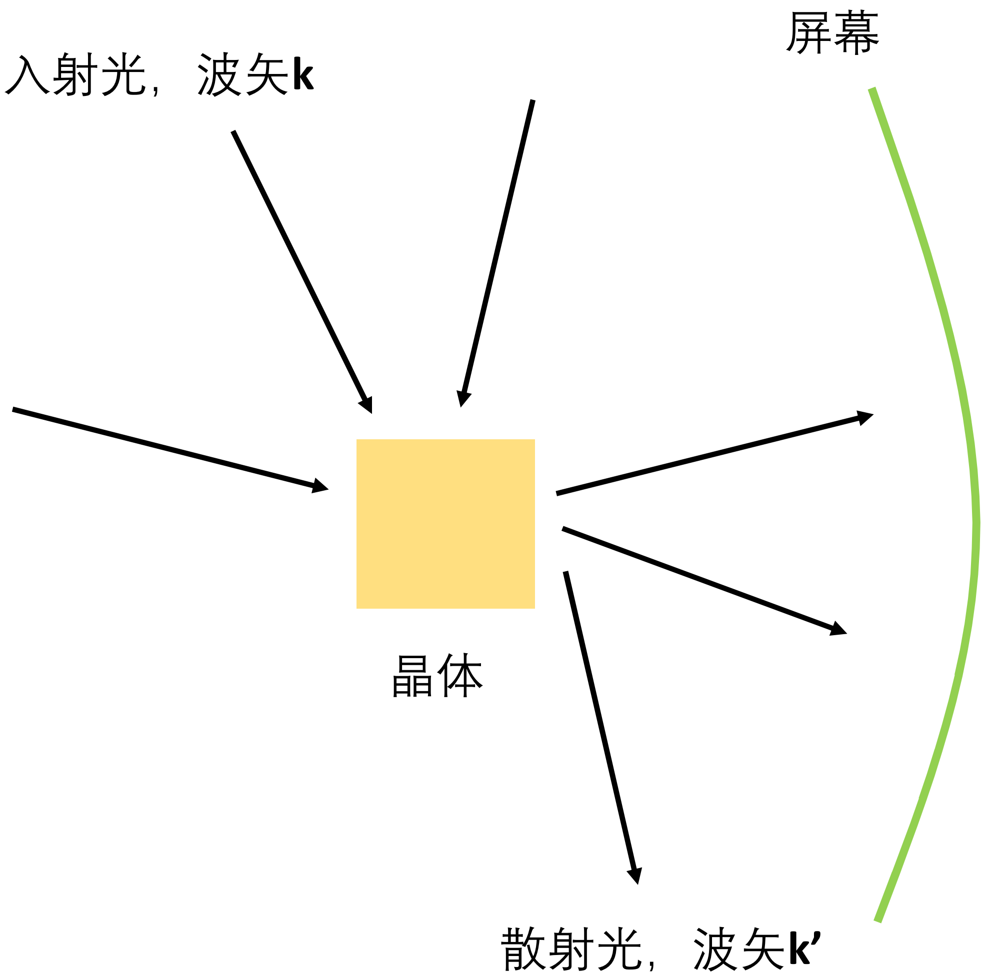
如何用实验探测倒空间的结构？

- 1. 测量TEM、STEM，傅里叶变换（二维）
- 2. 利用XRD：X射线单晶衍射

旋转X射线源的角度



X射线单晶衍射

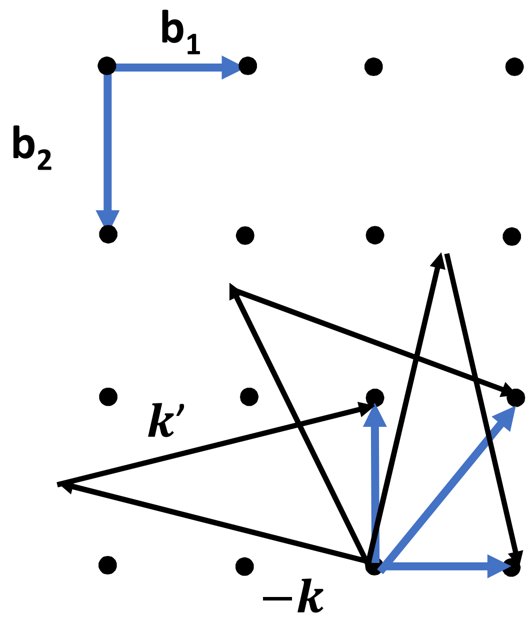


散射振幅$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})$是倒格点位置处的尖峰

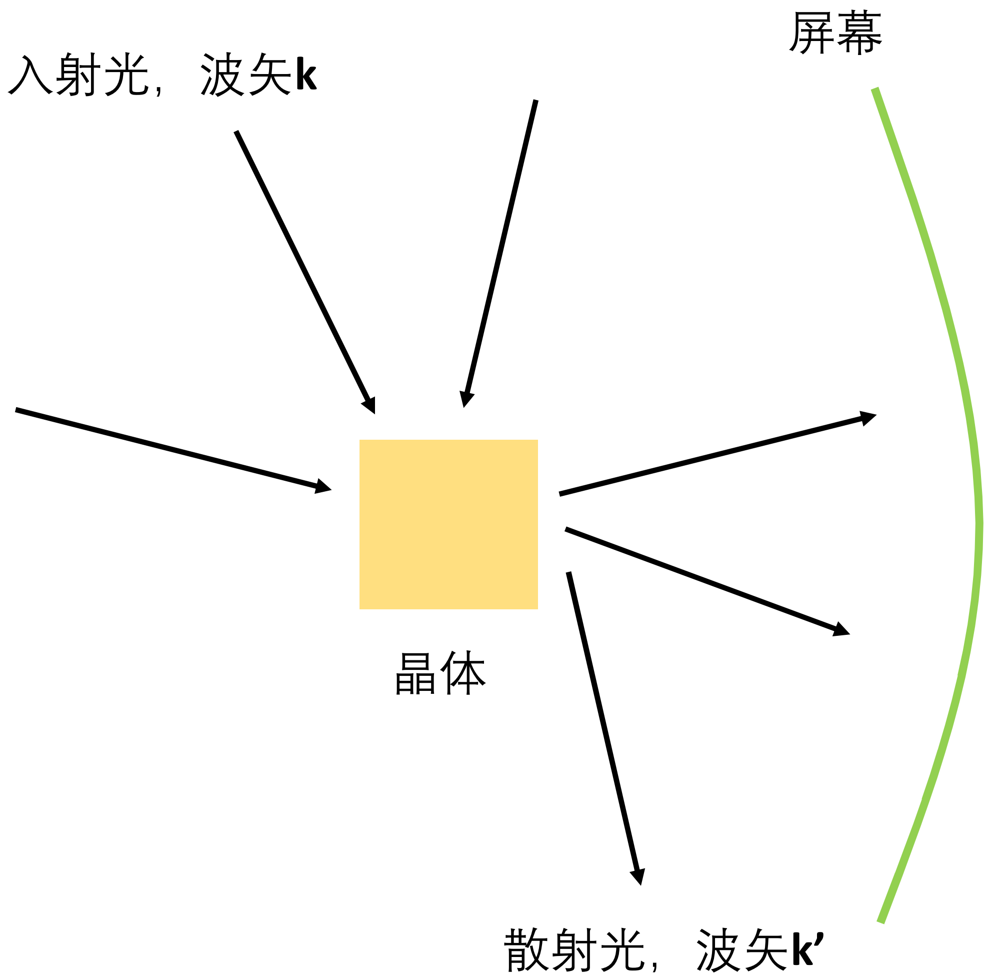
衍射时必有

$$\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}=h\boldsymbol{b}_1+k\boldsymbol{b}_2+l\boldsymbol{b}_3$$

相当于(hkl)晶面



X射线单晶衍射



- 利用入射光、散射光角度计算$\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k}$，进而得出$h\boldsymbol{b}_1 + k\boldsymbol{b}_2 + l\boldsymbol{b}_3$
- 从而重构出三维倒空间的结构

课程目的

- **用理论解释半导体材料中的电学现象**
  - 理解产生相关现象的（微观）机制
    - **晶体结构：单晶半导体是周期性排布的原子**
    - 能带结构：能带论描述半导体中的电子状态
    - 热力学统计：温度、杂质等能控制半导体中的载流子密度
    - 载流子输运：多种散射机制决定半导体的导电性能
    - 非平衡载流子：普遍情况下半导体中的载流子行为

  - 初步了解用于确认微观机制的实验方法

课程内容

- **研究主体：半导体中的电子**
- **第一部分：晶体结构**
- 第二部分：能带结构
- 第三部分：热力学统计
- 第四部分：载流子输运
- 第五部分：非平衡载流子

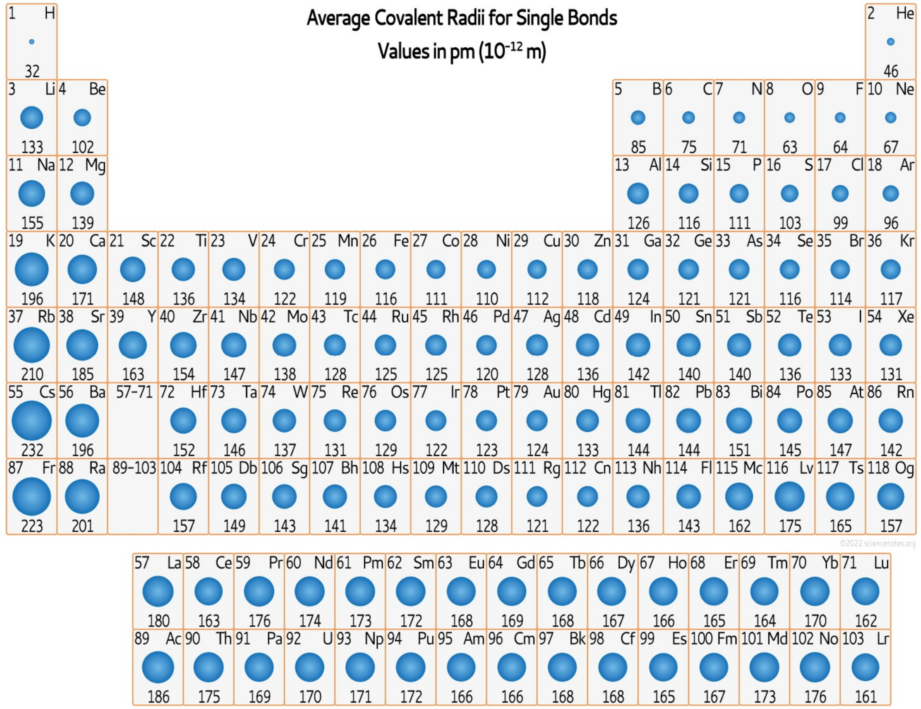
习题

- 1. 利用GaN的结构计算其密度。
- 2. (a)计算Si的原子数密度（单位体积内的原子数，单位cm^{-3}）。(b)某工艺能使1%的Si被Ge取代（称为掺杂）。假设掺杂后的晶格和纯Si晶格完全相同，求$Si_{0.99}Ge_{0.01}$中Ge的原子数密度（称为掺杂浓度）。
- 3. 计算Si(001)面的原子数面密度（单位面积内的原子数，单位cm^{-2}）。
- 4. 已知GaN的极化强度（单位体积内的电偶极矩）约为0.029 C/m^2，试求Ga和N原子分别带多少电荷量。

Scientific Reports **7**, 40483 (2017).

习题

- 5. 右图是各个原子大致的共价半径。(a)试求C、Si、Ge三种晶体的晶格常数之比。(b)试求AlN、GaN、InN的晶格常数之比。(c)试求GaAs、GaP和GaN的晶格常数之比。



https://sciencenotes.org/covalent-radius-definition-and-trend/

习题

- 6. 六方晶格的正格矢是怎样的？注意，$\mathbf{a}_1$、$\mathbf{a}_2$夹角应为120°。求相应倒格矢。倒格矢和相应晶面垂直吗？
- 7. 证明：在立方晶体中，晶面(hkl)和倒格矢$h\mathbf{b}_1+k\mathbf{b}_2+l\mathbf{b}_3$垂直，且其晶面间距是2π除以倒格矢$h\mathbf{b}_1+k\mathbf{b}_2+l\mathbf{b}_3$的模。（该结论其实对所有晶体都成立）
- 8. 已知X射线波长为0.15406 nm，Si(111)衍射峰位置在28.44°，求Si的晶格常数。