

# 本章总结： 晶体结构

- 半导体材料和相关化学
- 晶体学
  - “正”体系和“倒”体系
- 实验技术

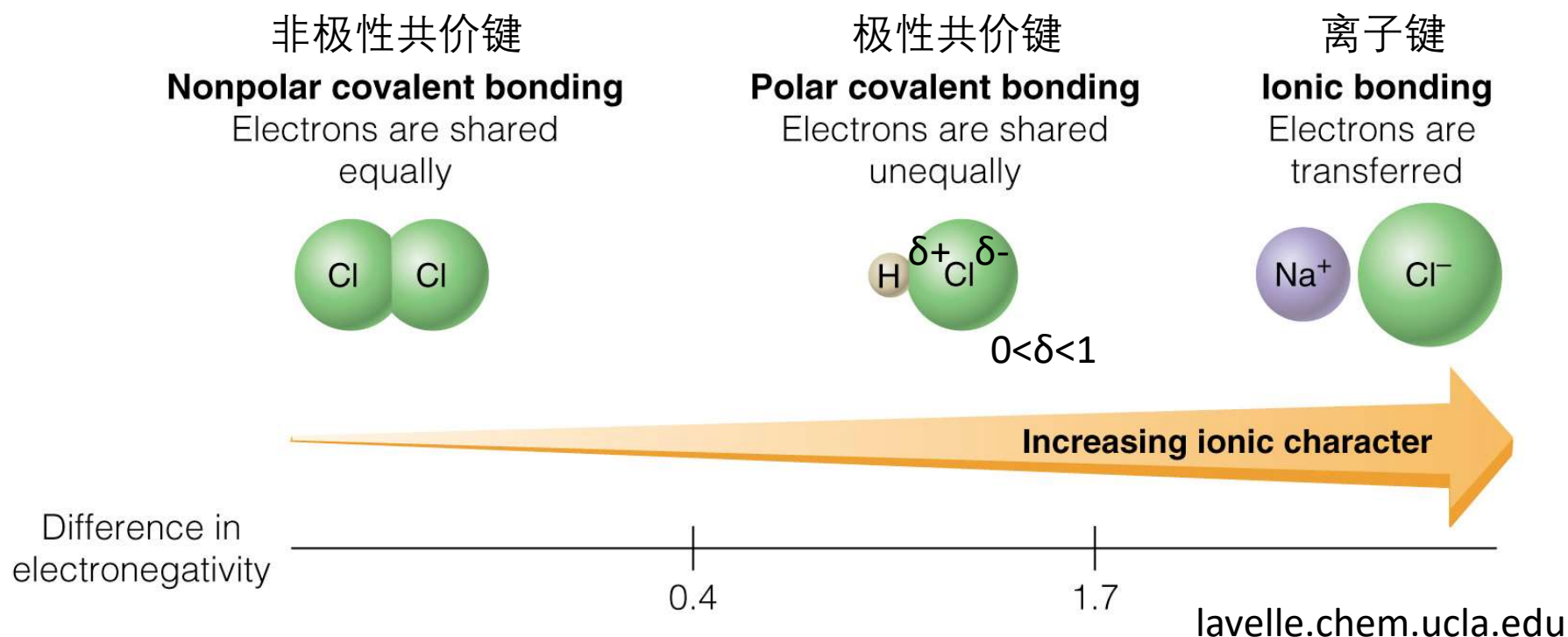
1	2	<div> <div>Atomic Number</div> <div>Valence</div> <div>Symbol</div> <div>Element Name</div> <div>Atomic Mass (u)</div> </div>																<table> <tr> <td>Alkali metals</td><td>Lanthanides</td></tr> <tr> <td>Alkaline earth metals</td><td>Actinides</td></tr> <tr> <td>Transition metals</td><td>Nonmetals</td></tr> <tr> <td>Post-transition metals</td><td>Halogens</td></tr> <tr> <td>Metalloid</td><td>Noble gases</td></tr> </table>		Alkali metals	Lanthanides	Alkaline earth metals	Actinides	Transition metals	Nonmetals	Post-transition metals	Halogens	Metalloid	Noble gases	18
Alkali metals	Lanthanides																													
Alkaline earth metals	Actinides																													
Transition metals	Nonmetals																													
Post-transition metals	Halogens																													
Metalloid	Noble gases																													
1 1 H Hydrogen 1.008	2 4 Be Beryllium 9.012																	2 2 He Helium 4.003												
3 3 Li Lithium 6.941	4 9 F Fluorine 18.998	5 5 B Boron 10.811	6 6 C Carbon 12.011	7 7 N Nitrogen 14.007	8 8 O Oxygen 15.999	9 9 F Fluorine 18.998	10 10 Ne Neon 20.180											17 17 Cl Chlorine 35.453	18 18 Ar Argon 39.948											
11 11 Na Sodium 22.990	12 12 Mg Magnesium 24.305																	15 15 P Phosphorus 30.974	16 16 S Sulfur 32.066	17 17 Cl Chlorine 35.453	18 18 Ar Argon 39.948									
19 19 K Potassium 39.098	20 20 Ca Calcium 40.078	21 21 Sc Scandium 44.956	22 22 Ti Titanium 47.88	23 23 V Vanadium 50.942	24 24 Cr Chromium 51.996	25 25 Mn Manganese 54.938	26 26 Fe Iron 55.845	27 27 Co Cobalt 58.933	28 28 Ni Nickel 58.693	29 29 Cu Copper 63.546	30 30 Zn Zinc 65.38	31 31 Ga Gallium 69.723	32 32 Ge Germanium 72.631	33 33 As Arsenic 74.922	34 34 Se Selenium 78.971	35 35 Br Bromine 79.904	36 36 Kr Krypton 84.798													
37 37 Rb Rubidium 85.468	38 38 Sr Strontium 87.62	39 39 Y Yttrium 88.906	40 40 Zr Zirconium 91.224	41 41 Nb Niobium 92.906	42 42 Mo Molybdenum 95.95	43 43 Tc Technetium 98.907	44 44 Ru Ruthenium 101.07	45 45 Rh Rhodium 102.96	46 46 Pd Palladium 106.42	47 47 Ag Silver 107.868	48 48 Cd Cadmium 112.414	49 49 In Indium 114.818	50 50 Sn Tin 118.711	51 51 Sb Antimony 121.760	52 52 Te Tellurium 127.6	53 53 I Iodine 126.904	54 54 Xe Xenon 131.294													
55 55 Cs Cesium 132.905	56 56 Ba Barium 137.328	57-71 * Lanthanide Series	72 72 Hf Hafnium 178.49	73 73 Ta Tantalum 180.948	74 74 W Tungsten 183.85	75 75 Re Rhenium 186.207	76 76 Os Osmium 190.23	77 77 Ir Iridium 192.22	78 78 Pt Platinum 195.08	79 79 Au Gold 196.967	80 80 Hg Mercury 200.59	81 81 Tl Thallium 204.383	82 82 Pb Lead 207.2	83 83 Bi Bismuth 208.980	84 84 Po Polonium [209]	85 85 At Astatine [210]	86 86 Rn Radon [222]													
87 87 Fr Francium 223.020	88 88 Ra Radium 226.025	89-103 ** Actinide Series	104 104 Rf Rutherfordium [261]	105 105 Db Dubnium [262]	106 106 Sg Seaborgium [266]	107 107 Bh Bohrium [264]	108 108 Hs Hassium [269]	109 109 Mt Meitnerium [278]	110 110 Ds Darmstadtium [281]	111 111 Rg Roentgenium [280]	112 112 Cn Copernicium [285]	113 113 Nh Nihonium [286]	114 114 Fl Flerovium [289]	115 115 Mc Moscovium [289]	116 116 Lv Livermorium [293]	117 117 Ts Tennessine [294]	118 118 Og Oganesson [294]													

# 本章总结：电负性

Group (vertical)	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period (horizontal)																		
1	H 2.20																	He
2	Li 0.98	Be 1.57											B 2.04	C 2.55	N 3.04	O 3.44	F 3.98	Ne
3	Na 0.93	Mg 1.31											Al 1.61	Si 1.90	P 2.19	S 2.58	Cl 3.16	Ar
4	K 0.82	Ca 1.00	Sc 1.36	Ti 1.54	V 1.63	Cr 1.66	Mn 1.55	Fe 1.83	Co 1.88	Ni 1.91	Cu 1.90	Zn 1.65	Ga 1.81	Ge 2.01	As 2.18	Se 2.55	Br 2.96	Kr 3.00
5	Rb 0.82	Sr 0.95	Y 1.22	Zr 1.33	Nb 1.6	Mo 2.16	Tc 1.9	Ru 2.2	Rh 2.28	Pd 2.20	Ag 1.93	Cd 1.69	In 1.78	Sn 1.96	Sb 2.05	Te 2.1	I 2.66	Xe 2.60
6	Cs 0.79	Ba 0.89	*	Hf 1.3	Ta 1.5	W 2.36	Re 1.9	Os 2.2	Ir 2.20	Pt 2.28	Au 2.54	Hg 2.00	Tl 1.62	Pb 2.33	Bi 2.02	Po 2.0	At 2.2	Rn 2.2
7	Fr 0.7	Ra 0.9	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo
Lanthanides	*	La 1.1	Ce 1.12	Pr 1.13	Nd 1.14	Pm 1.13	Sm 1.17	Eu 1.2	Gd 1.2	Tb 1.1	Dy 1.22	Ho 1.23	Er 1.24	Tm 1.25	Yb 1.1	Lu 1.27		
Actinides	**	Ac 1.1	Th 1.3	Pa 1.5	U 1.38	Np 1.36	Pu 1.28	Am 1.13	Cm 1.28	Bk 1.3	Cf 1.3	Es 1.3	Fm 1.3	Md 1.3	No 1.3	Lr 1.291		

Periodic table of electronegativity using the Pauling scale

# 本章总结：键和极性



离子键和极性共价键还依靠库仑力降低能量，使得原子相互结合

离子键没有电子共有化运动，只有库仑力

# 本章总结： 半导体的主要结构

IV族单质：C（金刚石）、  
Si、Ge

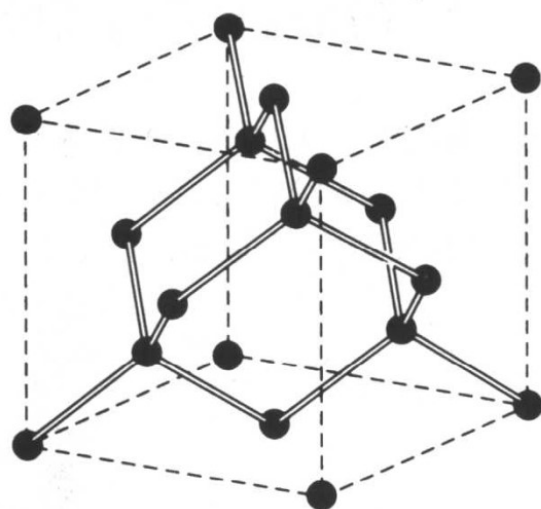


图 23 金刚石型晶体结构。图中显示了四面体键合的排列方式。

金刚石结构  
非极性共价键

IV、III-V、II-VI族化合物：  
SiC、GaAs、InSb、ZnS等

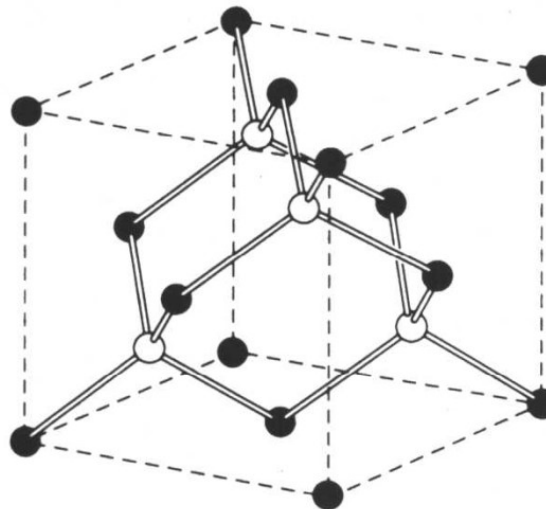


图 24 立方硫化锌的晶体结构。

立方闪锌矿结构  
弱极性共价键

IV、III-V、II-VI族化合物：  
SiC、GaN、ZnO、ZnS等

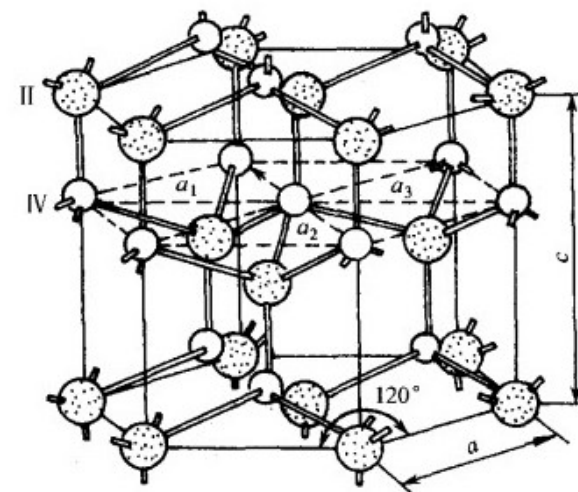


图 1-3 纤锌矿型结构

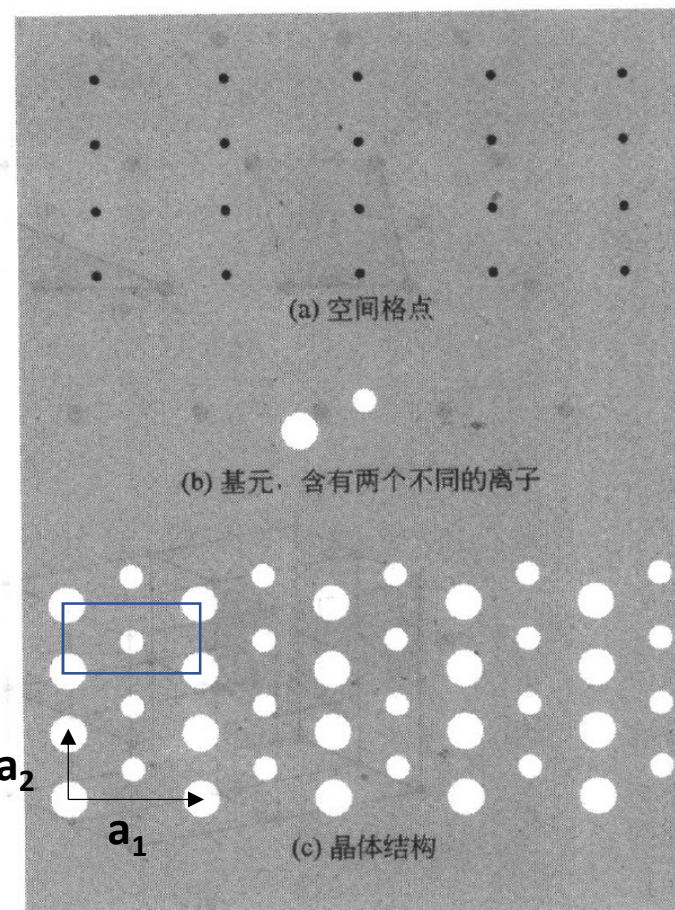
六方纤锌矿结构  
强极性共价键



# 本章总结：晶体学

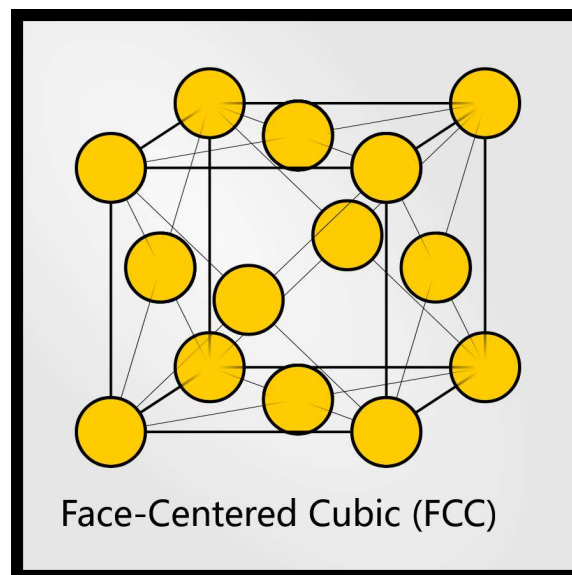
- 晶体结构的根本特征：  
平移不变性
- 平移矢量（正格矢）  
 $\mathbf{a}_i$  ( $i=1,2,3$ )
- 晶胞、晶格、晶格常数
- 晶体/物质在实空间

晶格

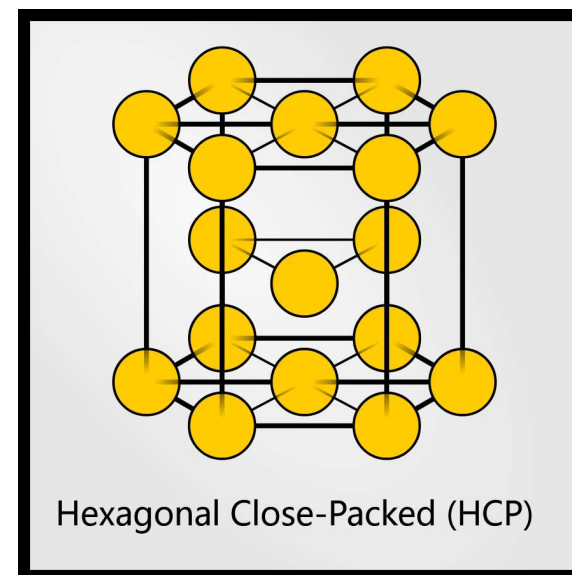


# 本章总结：晶体学

- 原胞
- 立方晶体
- 六方晶体



面心立方晶格/点阵



六方密堆积晶格/点阵

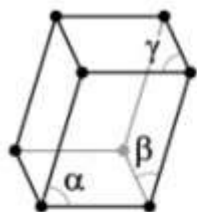
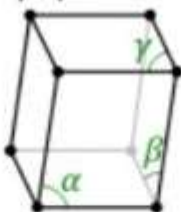
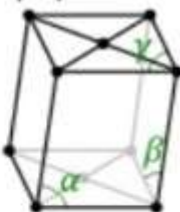
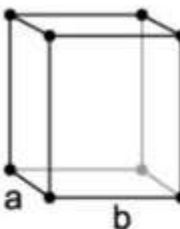
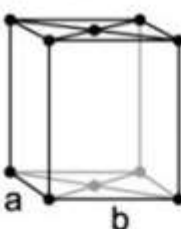
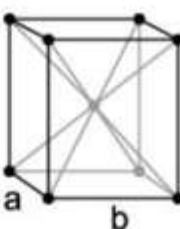

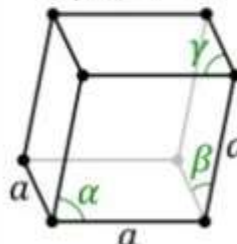
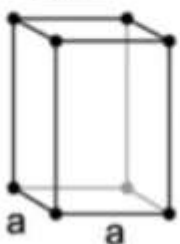
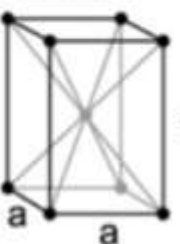
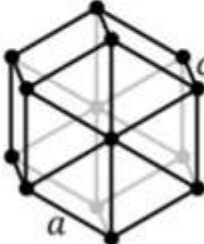
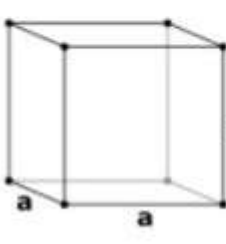
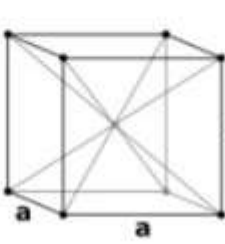
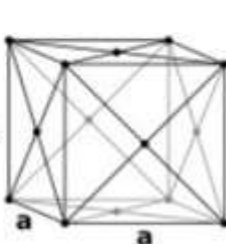
提示：六方密堆积不是标准的晶格（布拉伐晶格），但是是传统晶格

# 标准晶格的种类

三斜

单斜

正交

$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 	$\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$  Centered $\alpha \neq 90^\circ$ $\beta, \gamma = 90^\circ$  Simple	$a \neq b \neq c$  Simple $a \neq b \neq c$  Base Centered $a \neq b \neq c$  Face Centered $a \neq b \neq c$  Body Centered	
Triclinic	Monoclinic	Orthorhombic	
$\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$ 	$a \neq c$  Simple $a \neq c$  Body Centered	$a \neq c$  $a \neq c$  Simple $a \neq c$  Body Centered $a \neq c$  Face Centered	
Rhombohedral	Tetragonal	Hexagonal	Cubic (or isometric)

菱方（三方）

四方

六方

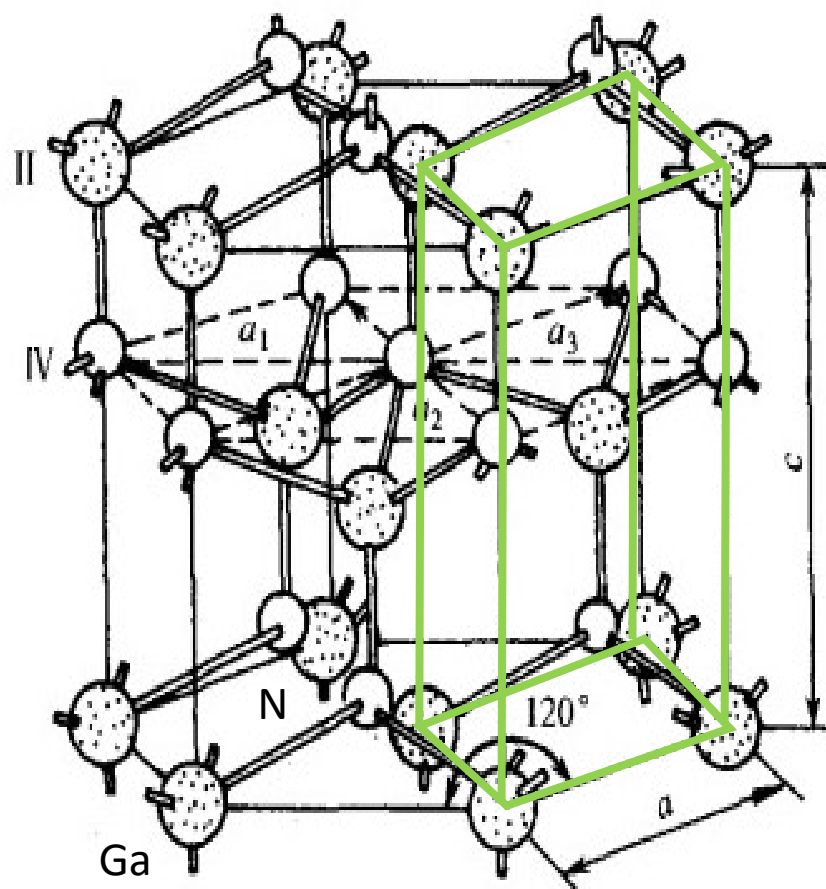
立方

[https://www.geocaching.com/geocache/GC1FG1Z\\_speaking-of-crystals-dp-ec22](https://www.geocaching.com/geocache/GC1FG1Z_speaking-of-crystals-dp-ec22)



# 标准晶格下的纤锌矿原胞

标准晶格：六方；对应原胞：平行四边形原胞 ( $2\text{Ga}+2\text{N}$ )



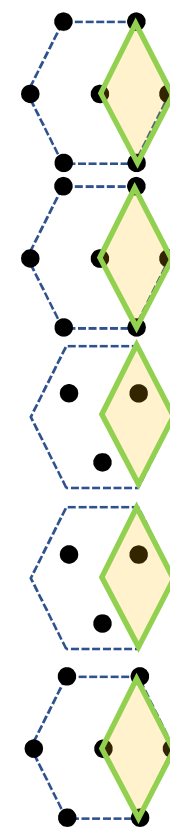
第五层=第一层

第四层  $5c/8$  N

第三层  $c/2$  Ga

第二层  $c/8$  N

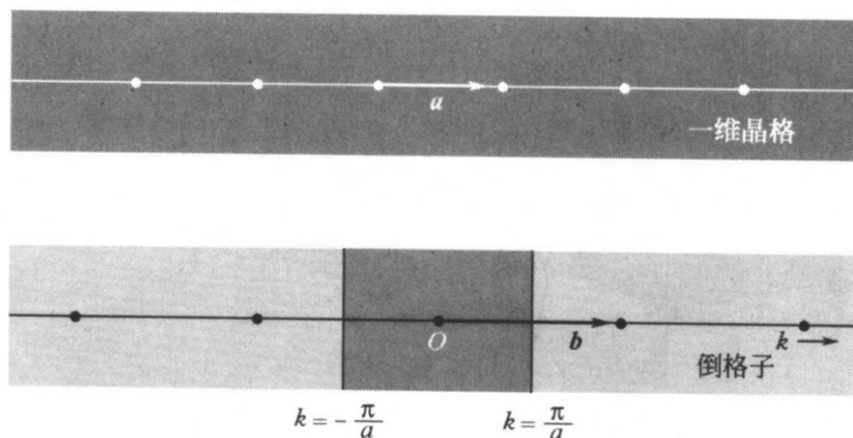
第一层 0 Ga



具体选择哪种晶格，需要看上下文

# 本章总结：倒空间

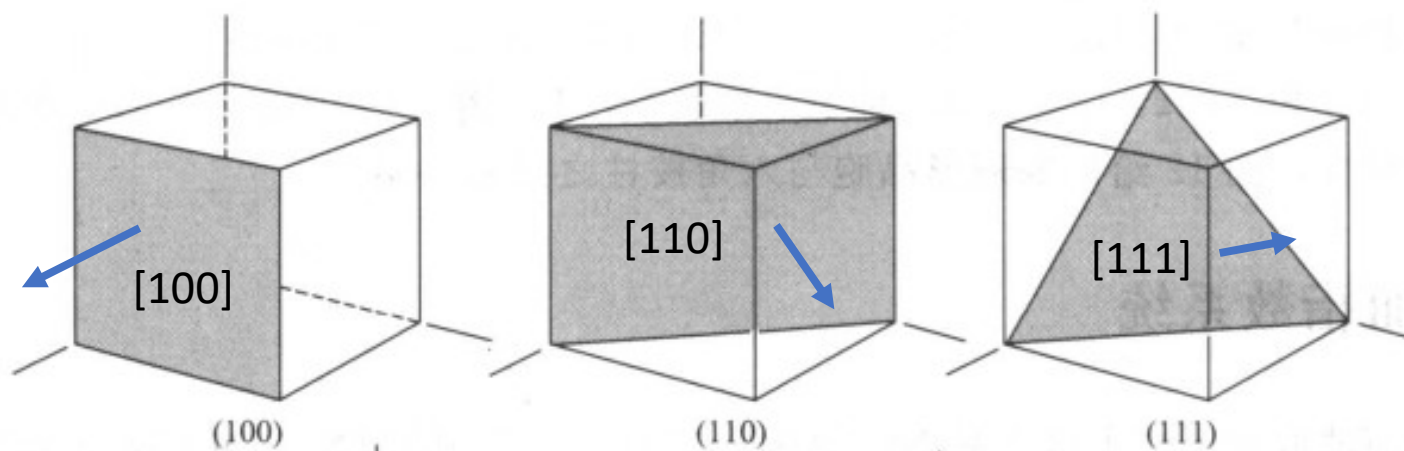
- 对晶格进行傅里叶变换成为倒晶格
- 平移矢量：倒格矢  $\mathbf{b}_i$  ( $i=1,2,3$ )，和对应脚标不同的正格矢构成的平面垂直
- 倒格矢、波矢量在倒空间
- 倒晶格的原胞：布里渊区



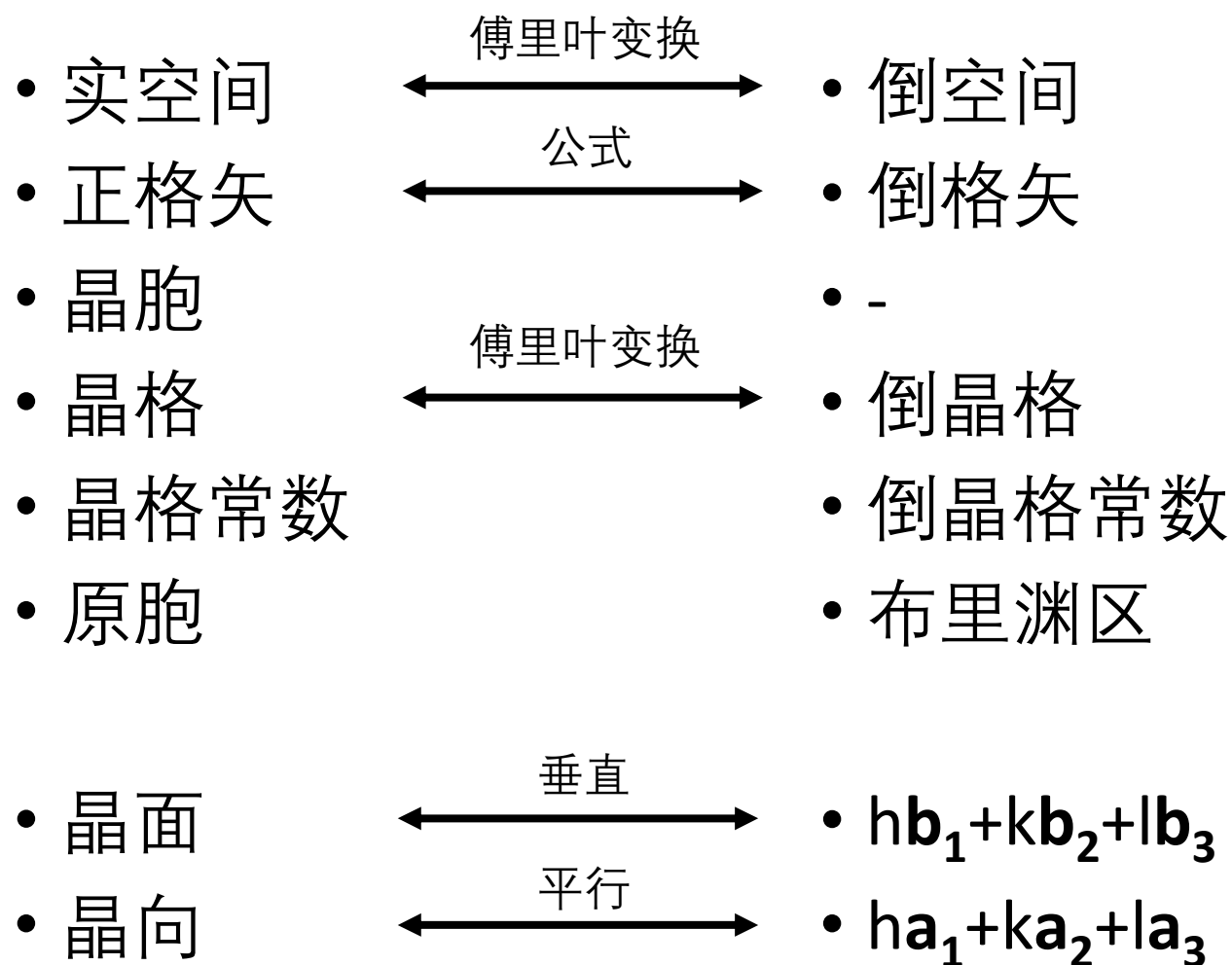
# 本章总结：晶面和晶向

- 晶面(hkl)和晶向[hkl]
- 晶面(hkl)为截距倒数，垂直于 $hb_1+kb_2+lb_3$
- 晶向[hkl]平行于 $ha_1+ka_2+la_3$

立方晶体的常见晶面和晶向



# 本章总结：概念之间的关系



# 本章总结： 实验技术

- 电子显微技术
  - 用短波长的电子波替代光波观察原子排布
  - 透射电子显微镜（TEM）和扫描透射电子显微镜（STEM）
- X射线衍射（XRD）技术
  - 利用周期排布的原子作为光栅衍射X射线，精确测量晶面间距/晶格常数