

# 课程信息

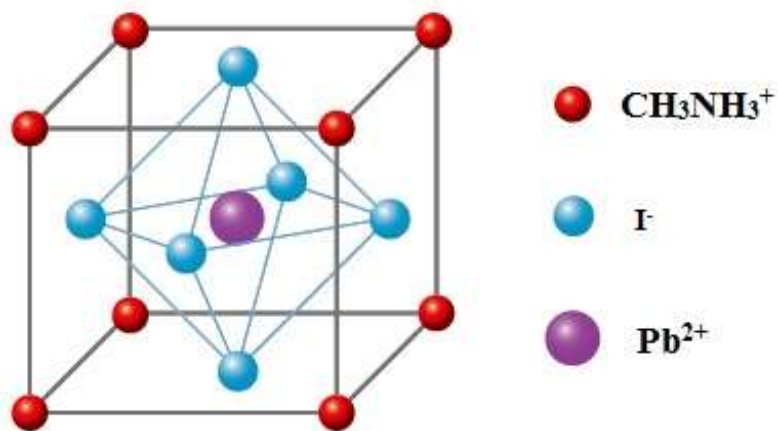
课程目标	毕业要求指标点
1. 获取知识目标：正确理解和掌握有关半导体的基本物理概念、物理现象、物理过程及其电子的运动规律；能够将半导体物理知识用于半导体器件制备中半导体材料特性的比较。	掌握电子科学技术基础及专业知识，能够将相关知识和数学模型方法用于电子科学与技术工程问题解决方案的比较与综合。
2. 分析问题目标：掌握半导体在热平衡、非热平衡时，基本半导体器件结构在热平衡、施加电压时电子的运动规律、电流-电压特性，并能够运用所学的半导体的基本规律对半导体及半导体器件的基本特性进行识别并正确的表述、分析。	具备运用数学、物理、半导体基本理论对电子科学与技术工程领域中的复杂工程问题的关键环节进行识别和表达的能力。
3.国际视野目标：查找并阅读国内外文献资料，掌握半导体物理领域国内外发展前沿和热点。	掌握电子科学与技术领域的前沿和热点，具备顺利开展跨文化交流与合作的能力。
4.终身学习目标：了解半导体物理知识体系不断更新，认同解决问题需要不断学习新知识内容。	认同终身教育和持续教育理念，并投身相关实践与研讨。

# 课程信息

- 作业提交时间：3月3日（周五）23:59，超星平台线上提交
- 第一章作业：
  - 1.（20分）阅读黄昆《固体物理学》第一章1-1至1-7小节、讲义第一章《晶体结构》后，解释以下重要概念：晶格、原胞、单胞（晶胞）、布拉伐格子、晶向、晶面、配位数。
  - 2.（20分）画出体心立方、面心立方、六角密排与金刚石晶格结构；
  - 3.（20分）书后习题1.3，1.7；

#### 4. (20分) (2019年期末考试题)

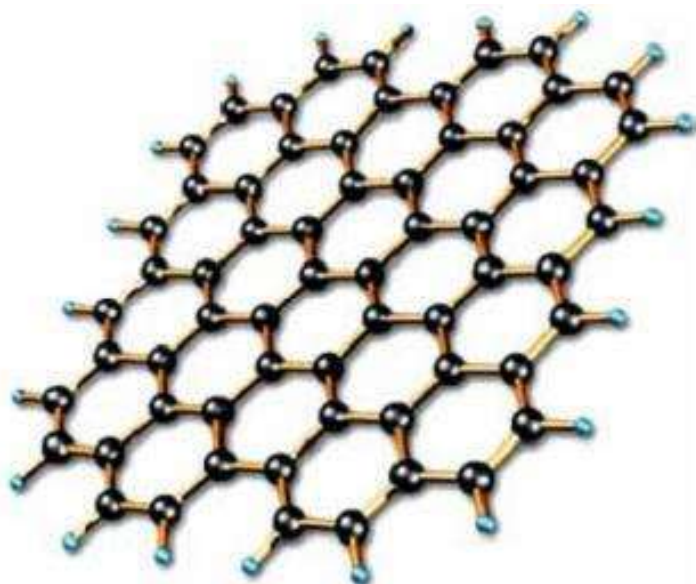
甲基胺碘化铅是近年来发现的一种新型卤化物钙钛矿半导体材料，其晶格结构属于立方晶系，如下图所示。其中，甲基胺离子 ( $\text{CH}_3\text{NH}_3^+$ ) 位于立方体的顶角，碘离子 ( $\text{I}^-$ ) 位于立方体的面心，铅离子 ( $\text{Pb}^{2+}$ ) 位于立方体的体心。



- 1) 在如图所示的甲基胺碘化铅晶胞中，分别包含几个甲基胺离子、碘离子和铅离子？由此写出甲基胺碘化铅的化学式
- 2) 为满足理想的立方晶格结构，甲基胺离子、碘离子和铅离子的半径需要满足怎样的关系？
- 3) 试写出此晶格的布拉伐格子数学表达式。

5. (20分) (2020年期末考试题)

石墨烯可由机械剥离石墨制备，是一种由碳原子组成的二维材料，厚度仅为一个原子层。石墨烯的晶体结构如下图所示，其原子成六角蜂窝状排布，相邻原子间距为 $a$ 。



- 1) 画出石墨烯的一个**原胞**，并写出其对应的基矢表达式。注意：一个石墨烯的原胞中包含几个原子？
- 2) 试找出石墨烯**晶体**的所有对称操作。

## 6. (10分) 附加题

试通过画图说明，为什么十四种布拉伐格子中没有面心四角晶格？

### Bravais lattice in 3D (14-types)

	Triclinic	Cubic	Tetragonal	Orthorhombic	Rhombohedral	Hexagonal	Monoclinic
P							
I							
F							
C							

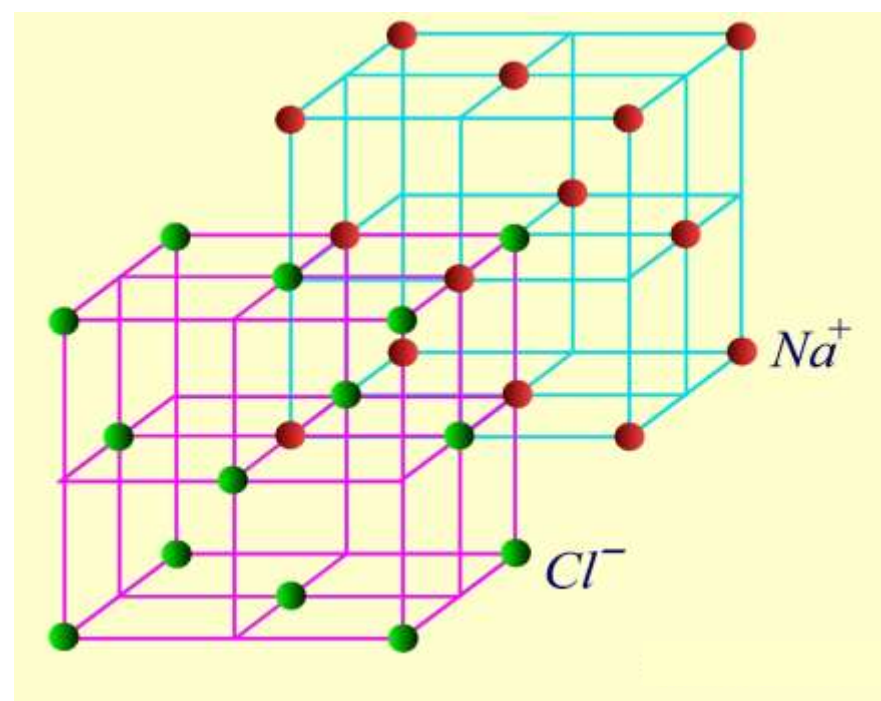
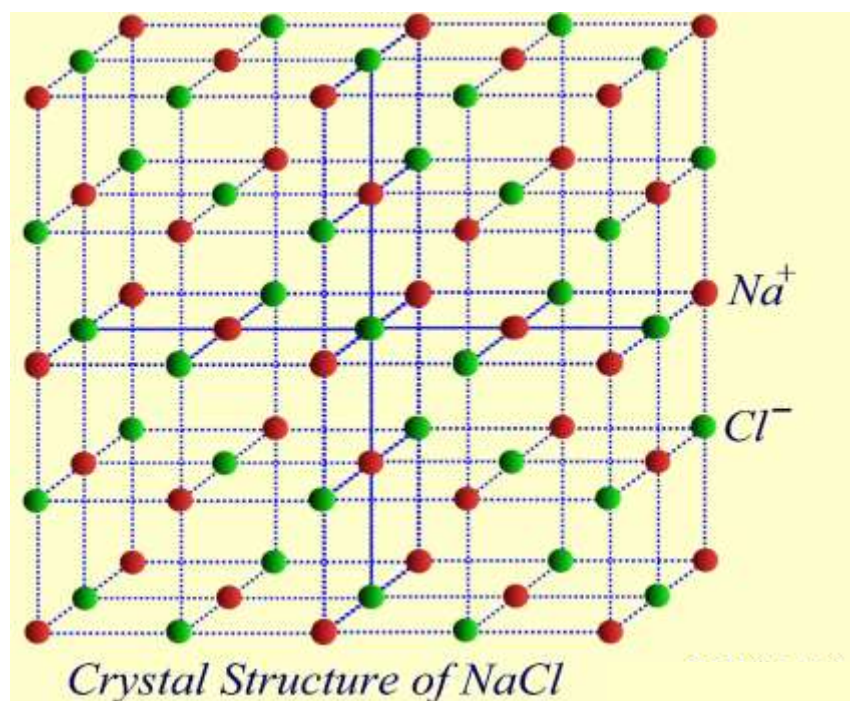
# 第一章

## 晶体结构（二）

## 6. 几种化合物晶体的晶格

### 1) NaCl晶体的结构

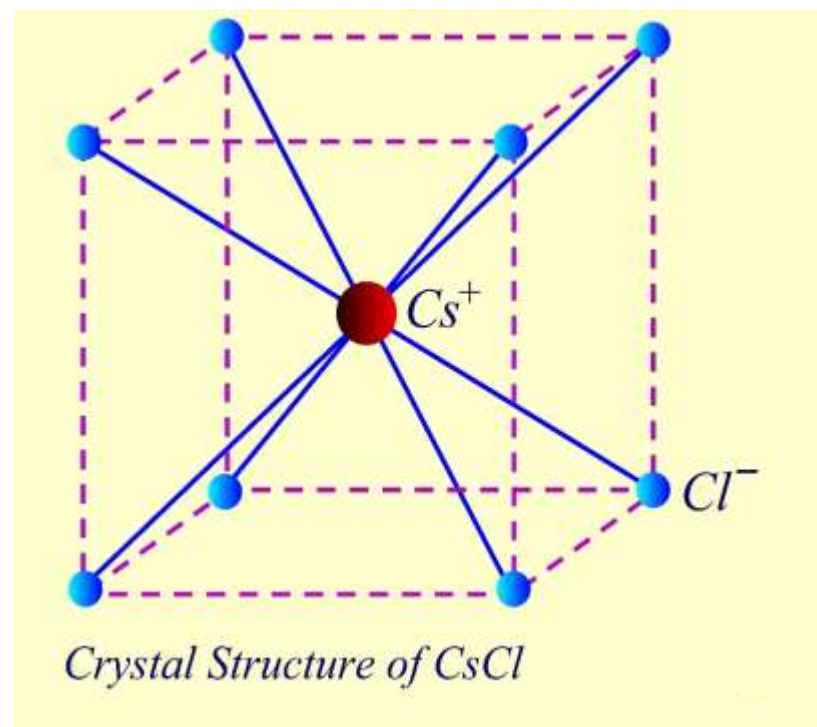
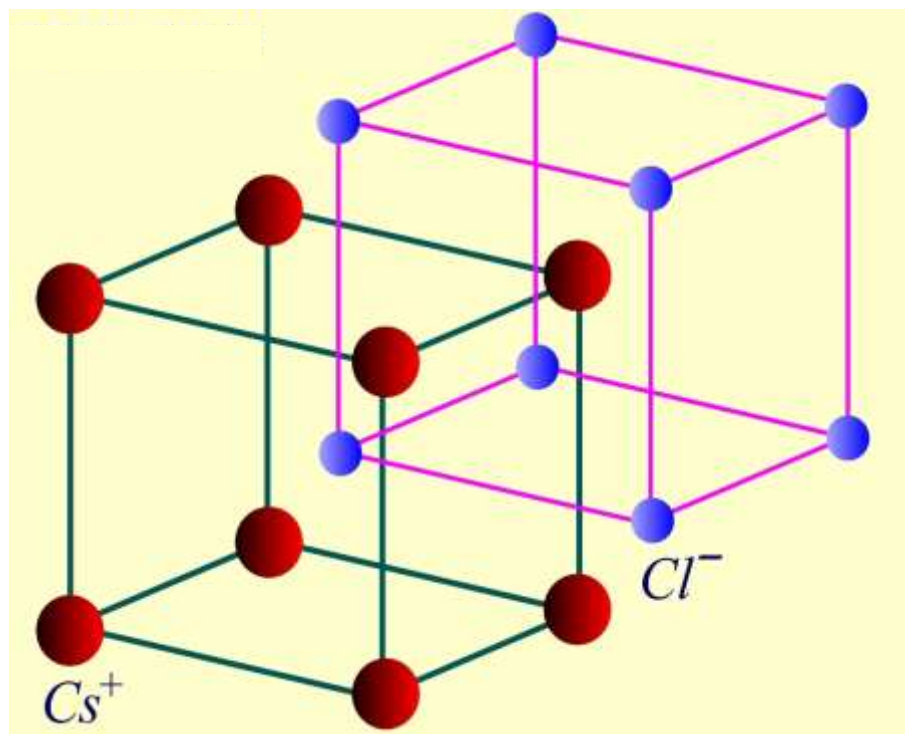
氯化钠由 $\text{Na}^+$ 和 $\text{Cl}^-$ 结合而成，是一种典型的离子晶体  
 $\text{Na}^+$ 构成面心立方格子； $\text{Cl}^-$ 也构成面心立方格子





## 2) CsCl晶体的结构

CsCl结构 —— 由两个简单立方子晶格彼此沿立方体空间对角线位移 $1/2$ 的长度套构而成

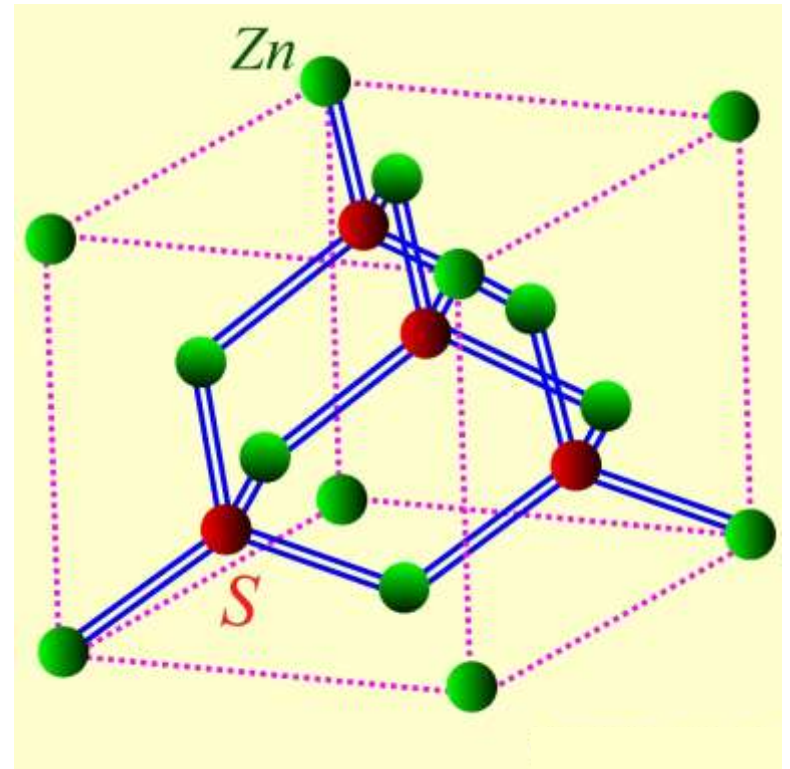
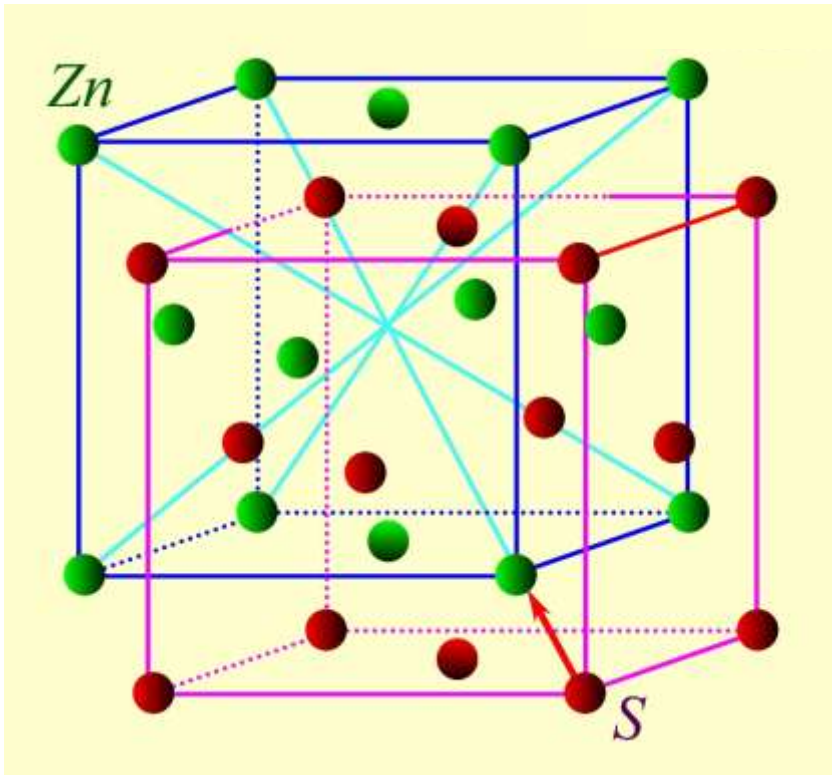




### 3) ZnS晶体的结构 —— 闪锌矿结构

立方系的硫化锌 —— 具有金刚石类似的结构

化合物半导体 —— 锑化铟、砷化镓、磷化铟



## §1.2 晶格的周期性

### 1. 晶格周期性的描述 —— 原胞和基矢

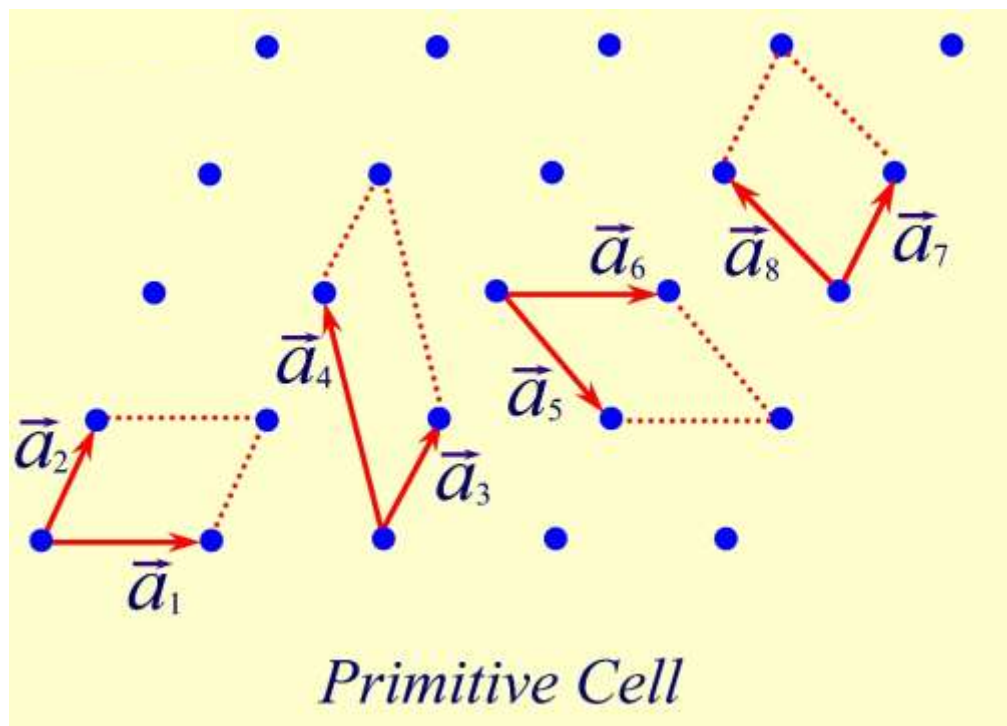
晶格共同特点 —— 周期性，可以用原胞和基矢来描述

**原胞** —— 一个晶格中最小重复单元

**基矢** —— 原胞的边矢量

—— 三维晶格的重复单元是平行六面体

—— 重复单元的边长矢量



## 2. 简单晶格

—— 由完全等价的一种原子构成的晶格

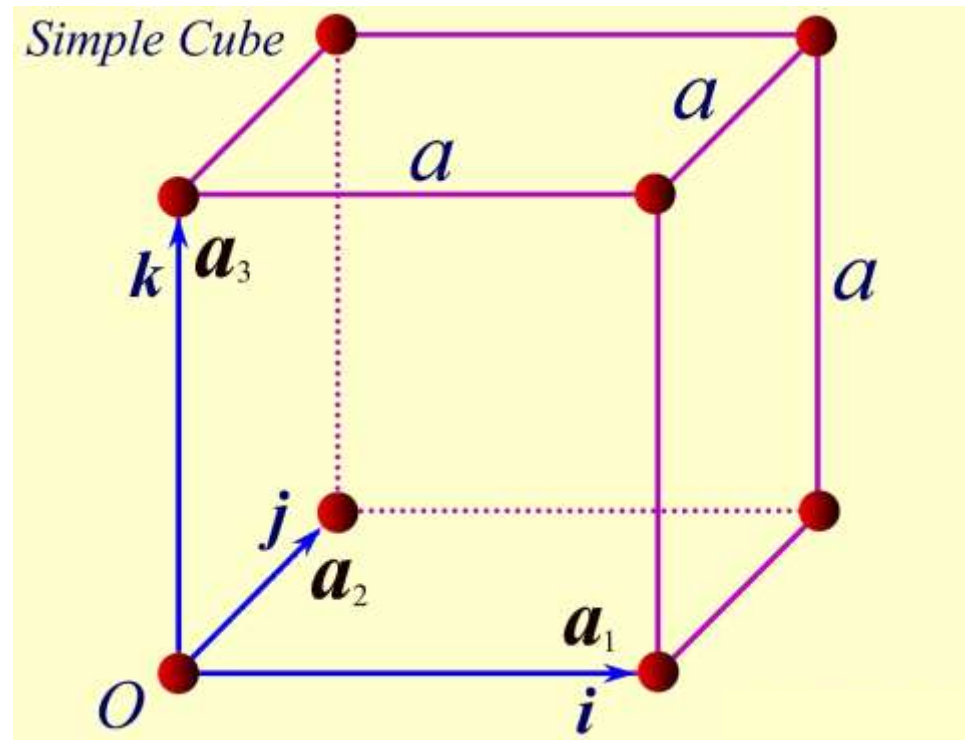
1) 简单立方晶格 —— 原胞为简单立方晶格的立方单元

基矢

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= a\vec{i} \\ \vec{a}_2 &= a\vec{j} \\ \vec{a}_3 &= a\vec{k}\end{aligned}$$

原胞体积  $\Omega = a^3$

—— 原胞中只包含一个原子



## 2) 面心立方晶格

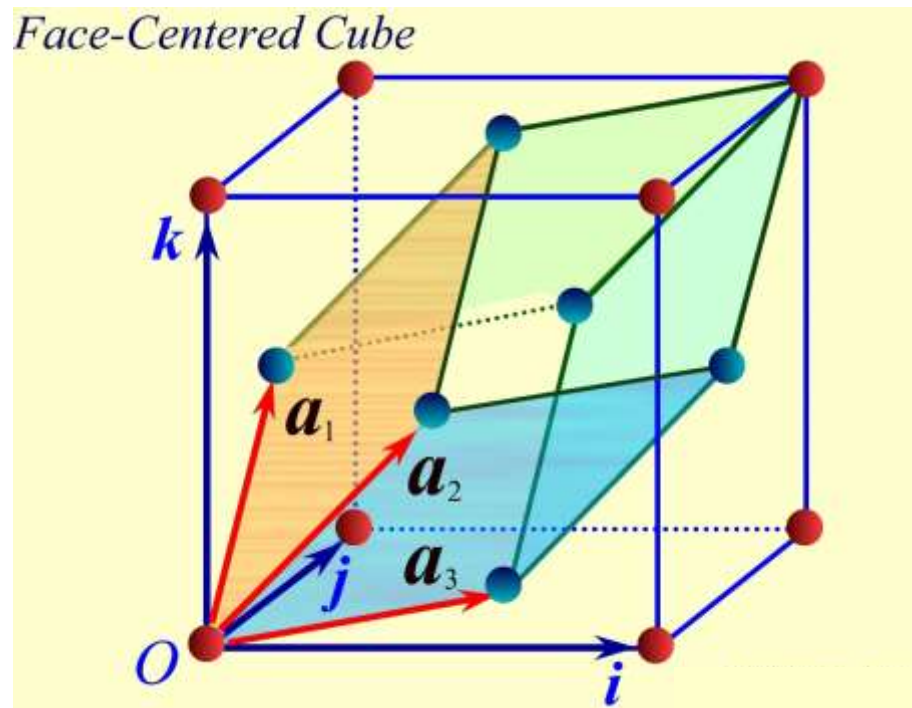
立方体的顶点到三个近邻的面心引三个基矢

基矢

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(\vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j}) \end{aligned} \right.$$

原胞体积

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{1}{4}a^3$$



—— 原胞中只包含一个原子

### 3) 体心立方晶格

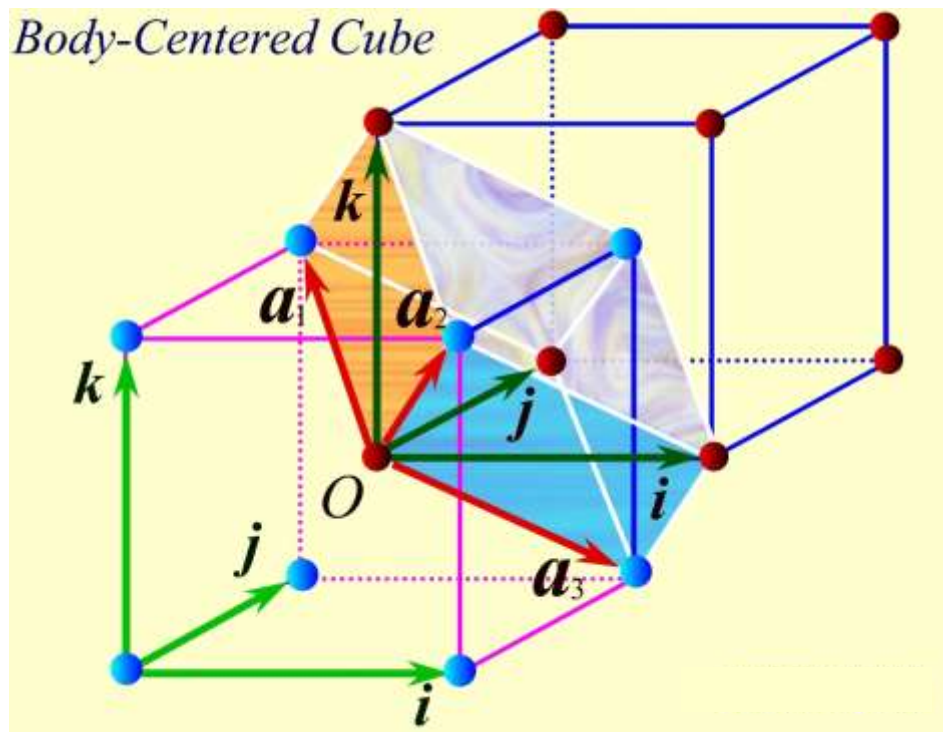
由立方体的中心到三个顶点引三个基矢

基矢

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a}{2}(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a}{2}(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \end{aligned} \right.$$

原胞体积

$$\Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{1}{2}a^3$$



——原胞中只包含一个原子

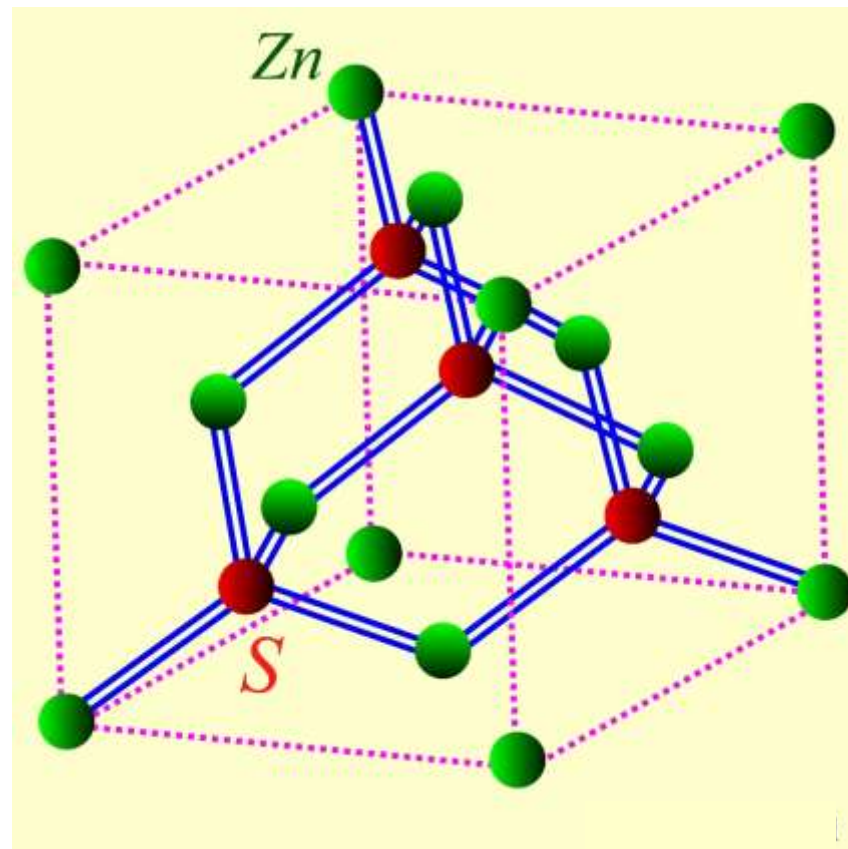
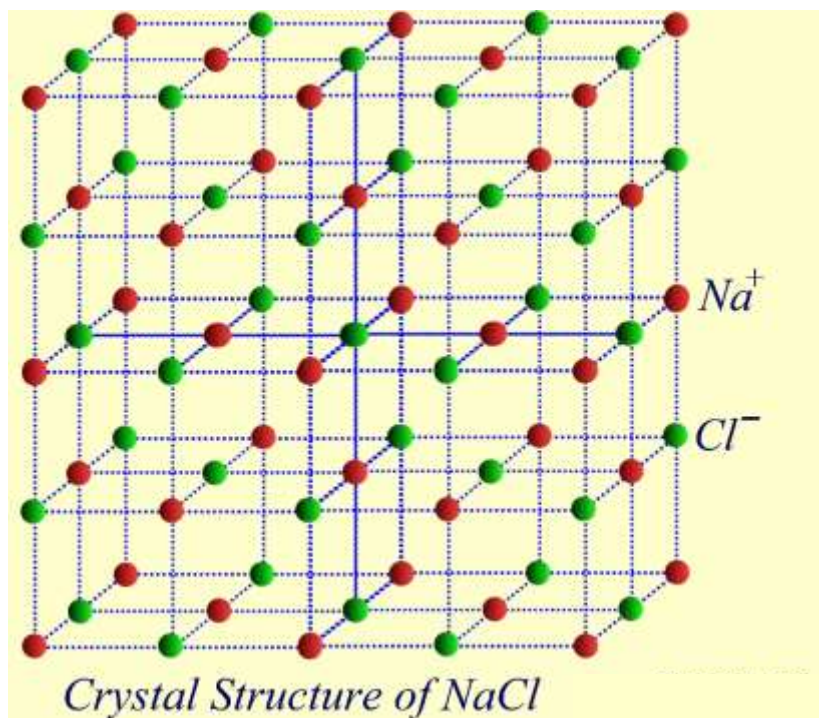


### 3. 复式晶格

—— 复式格子包含两种或两种以上的等价原子

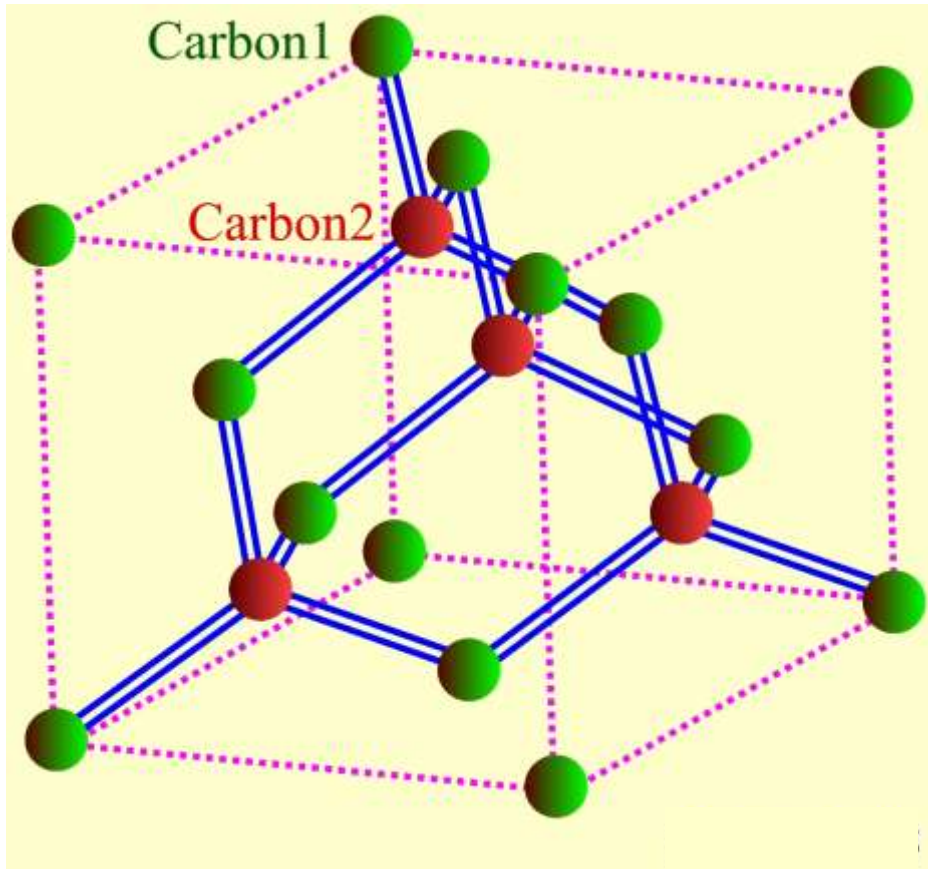
1) 不同原子或离子构成的晶体

NaCl、CsCl、ZnS等

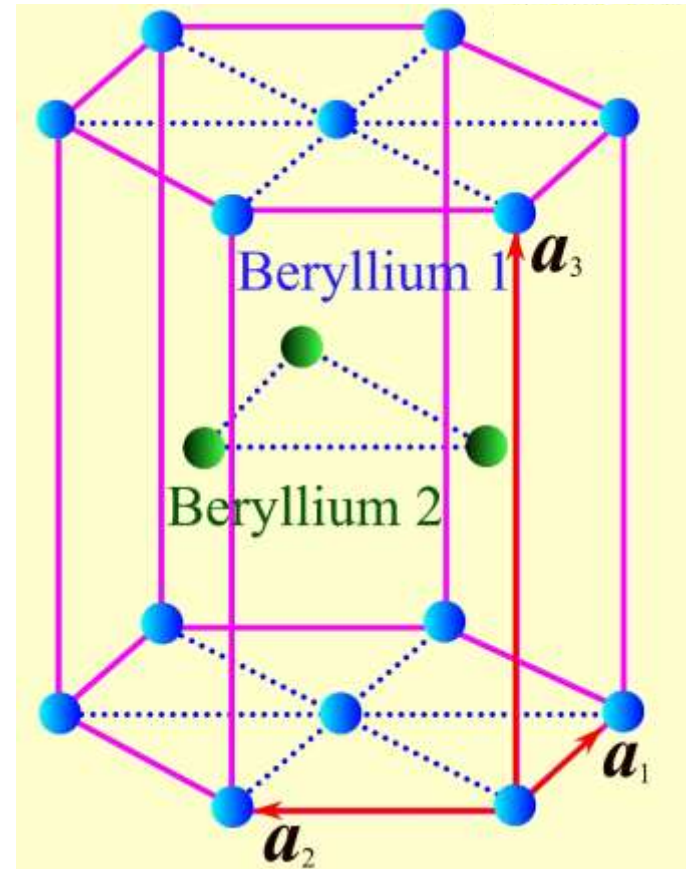


## 2) 相同原子但几何位置不等价的原子构成的晶体

金刚石结构的C、Si、Ge



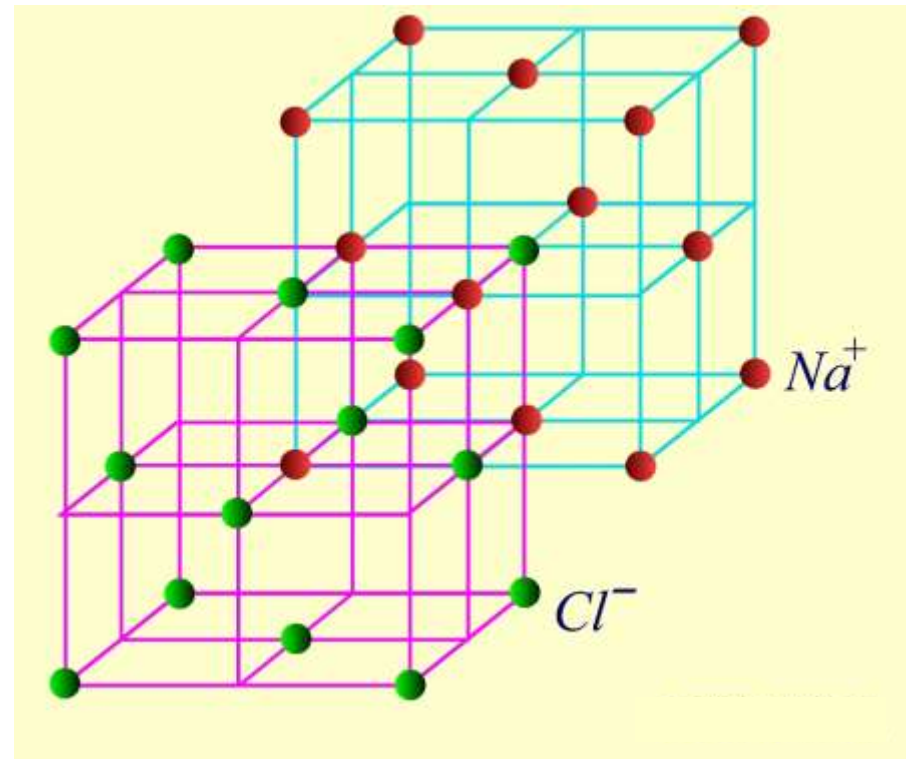
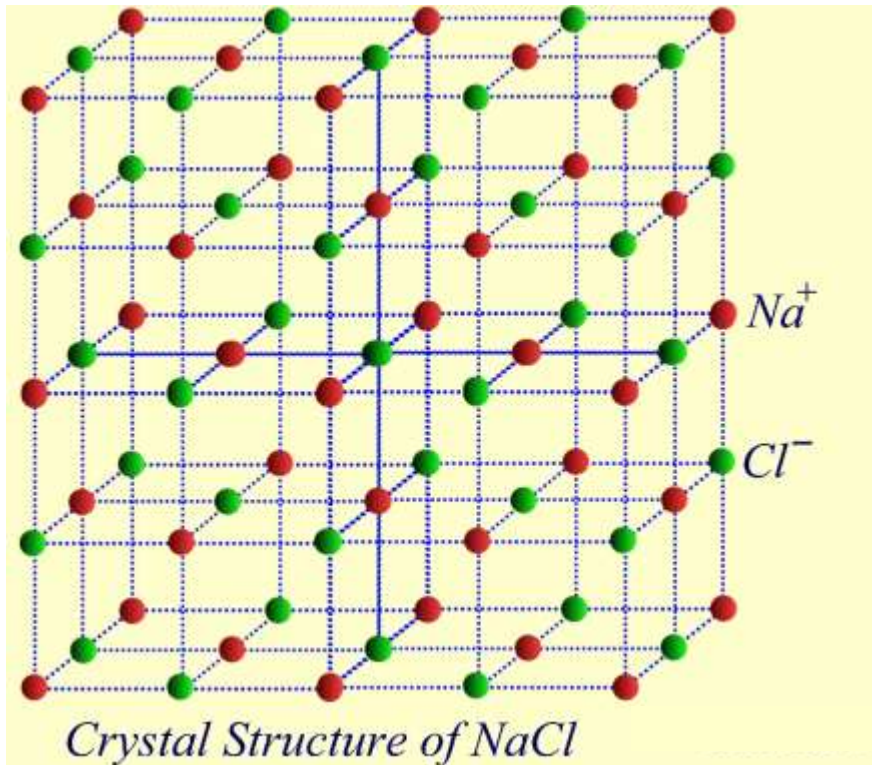
六角密排结构Be、Mg、Zn





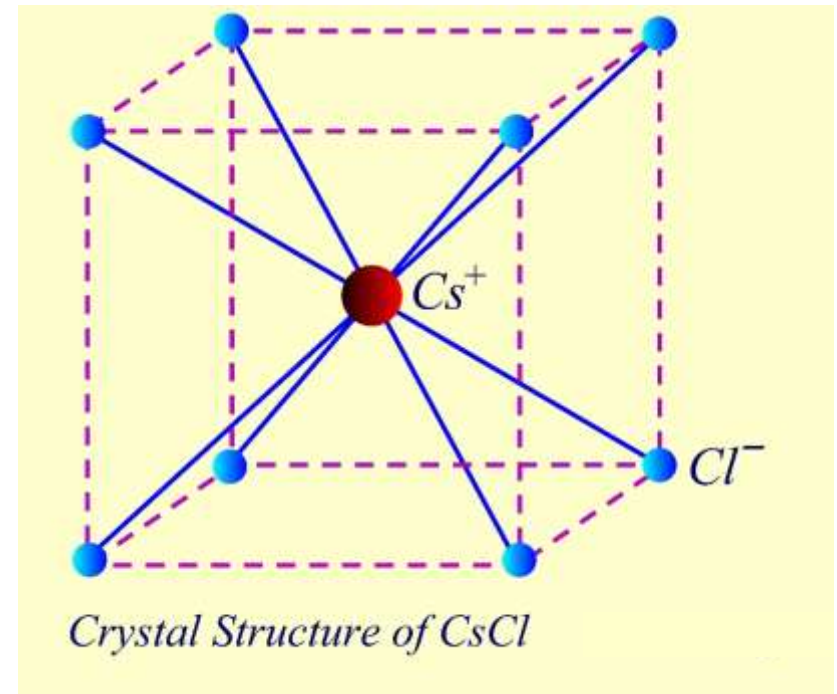
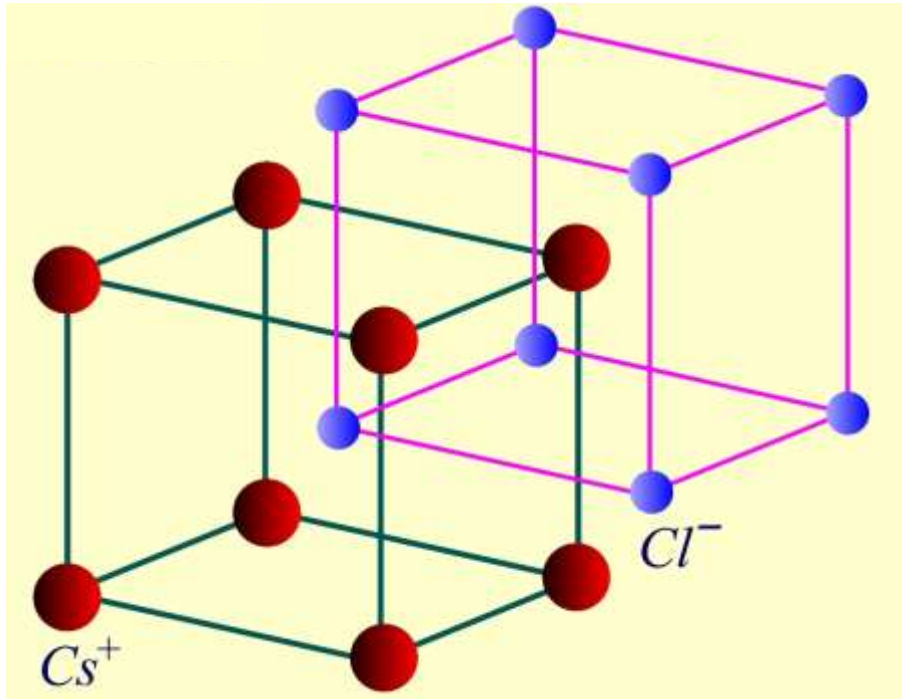
3) 复式格子的特点：不同等价原子各自构成相同的简单晶格（子晶格），复式格子由它们的子晶格相套而成

NaCl晶格—— $Na^+$ 和 $Cl^-$ 各有一个相同的面心立方晶格



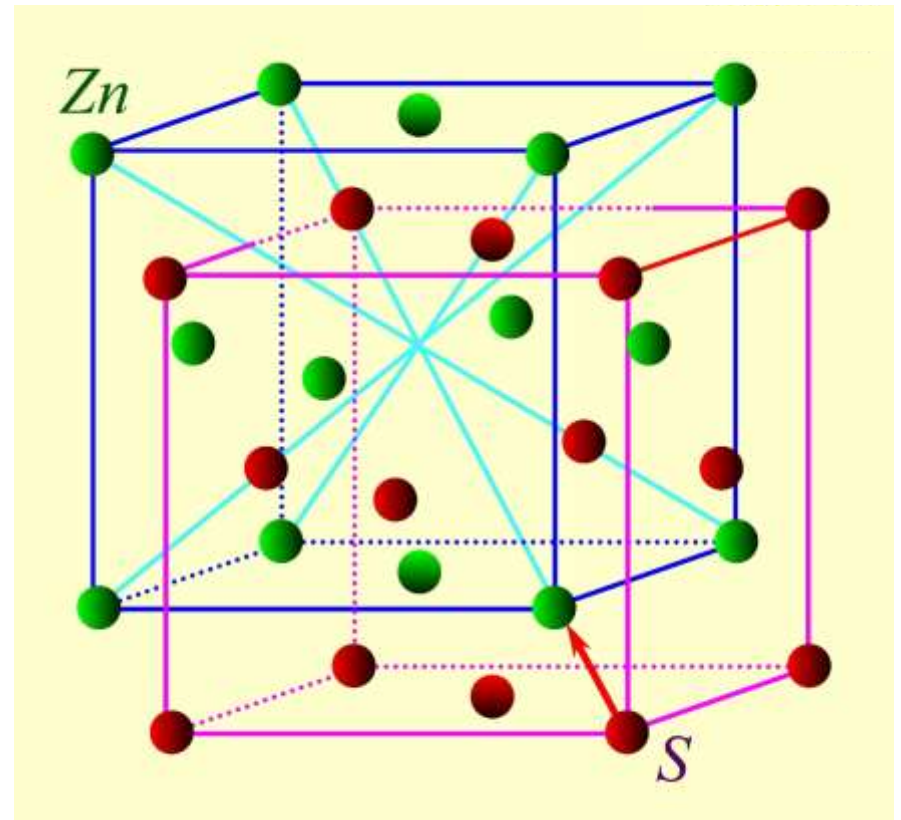
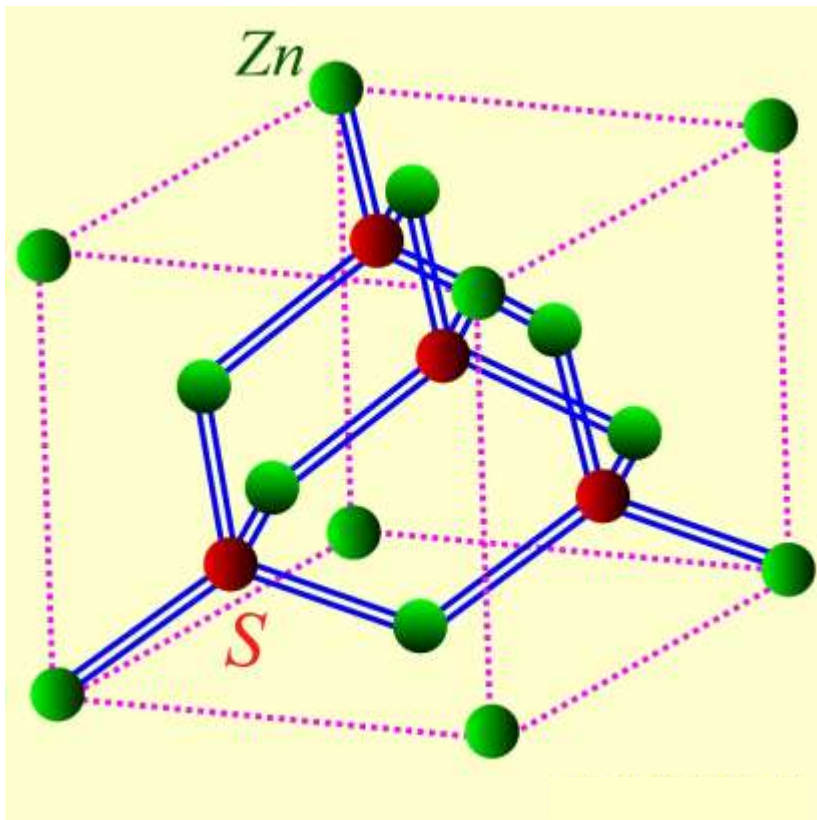
## CsCl的复式晶格

—— CsCl结构是由两个简立方的子晶格彼此沿立方体空间对角线位移 $1/2$ 的长度套构而成



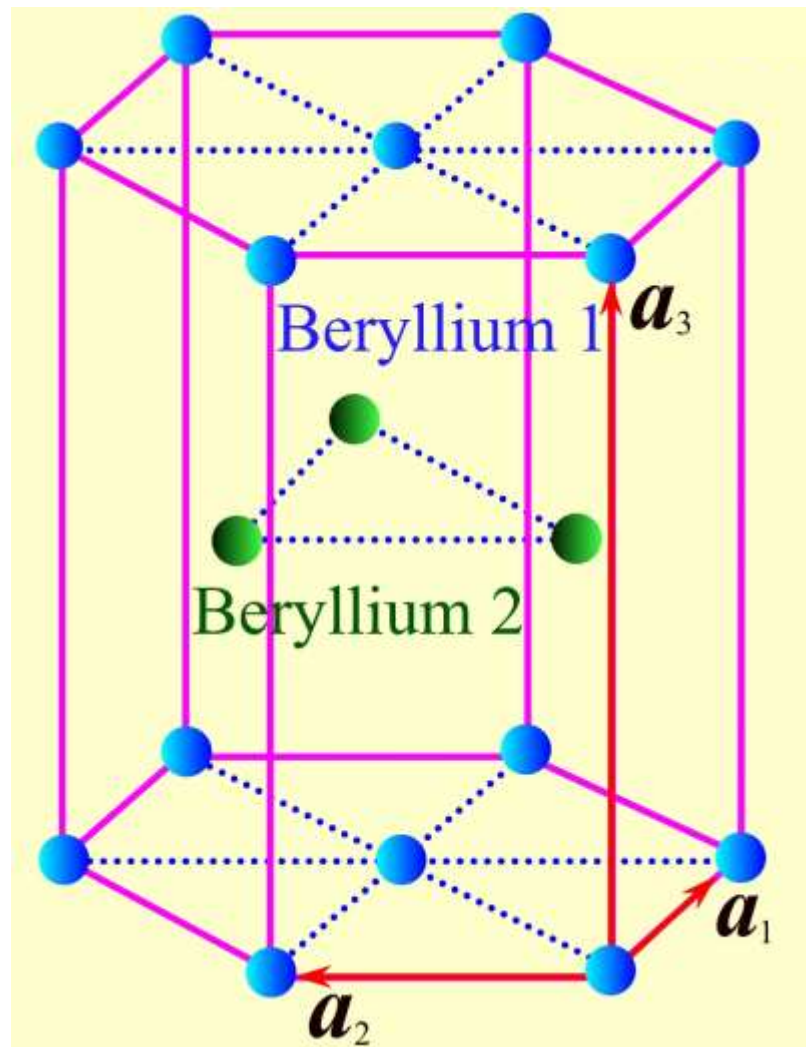
## ZnS的复式晶格

立方系的ZnS —— S和Zn分别组成面心立方结构的子晶格沿空间对角线位移  $1/4$  的长度套构而成



## 六角密排晶格的原胞基矢选取

- 一个原胞中包含A层和B层原子各一个
- 共两个原子





**单胞** —— 为了反映晶格的对称性，常取最小重复单元的几倍作为重复单元，又称作晶胞

单胞的边在晶轴方向，边长等于该方向上的一个周期

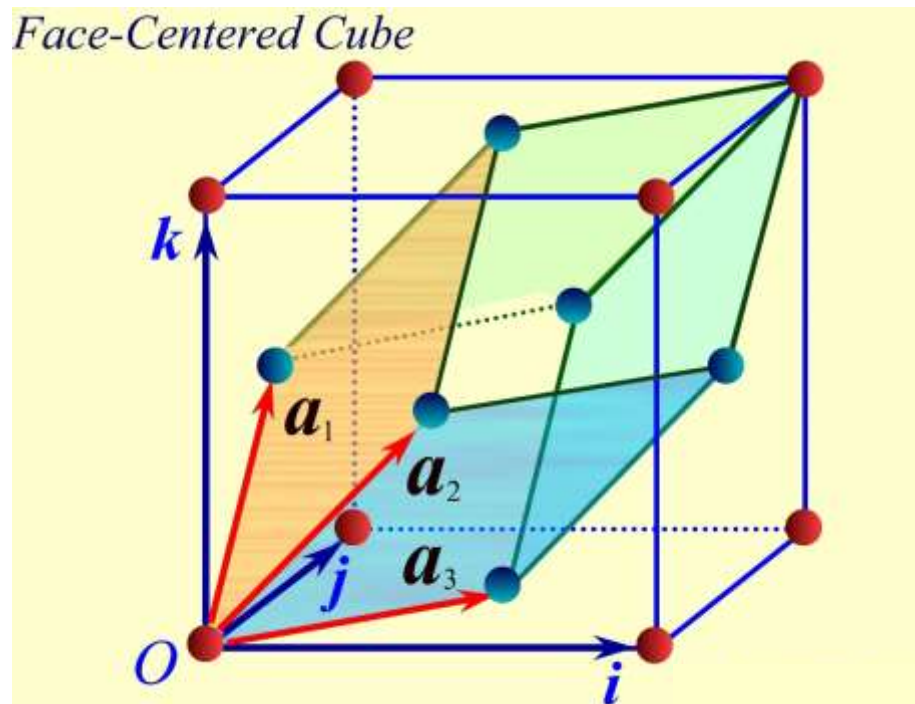
—— 代表单胞三个边的矢量称为单胞的基矢

一些情况下，单胞就是原胞

一些情况下，单胞不是原胞

简单立方晶格 —— 单胞是原胞

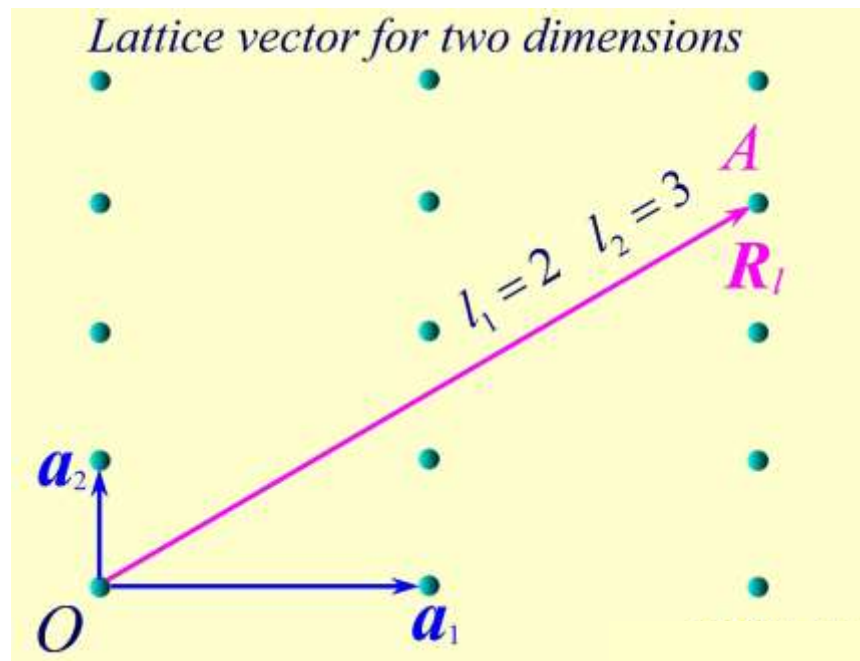
面心立方晶格 —— 单胞不是原胞



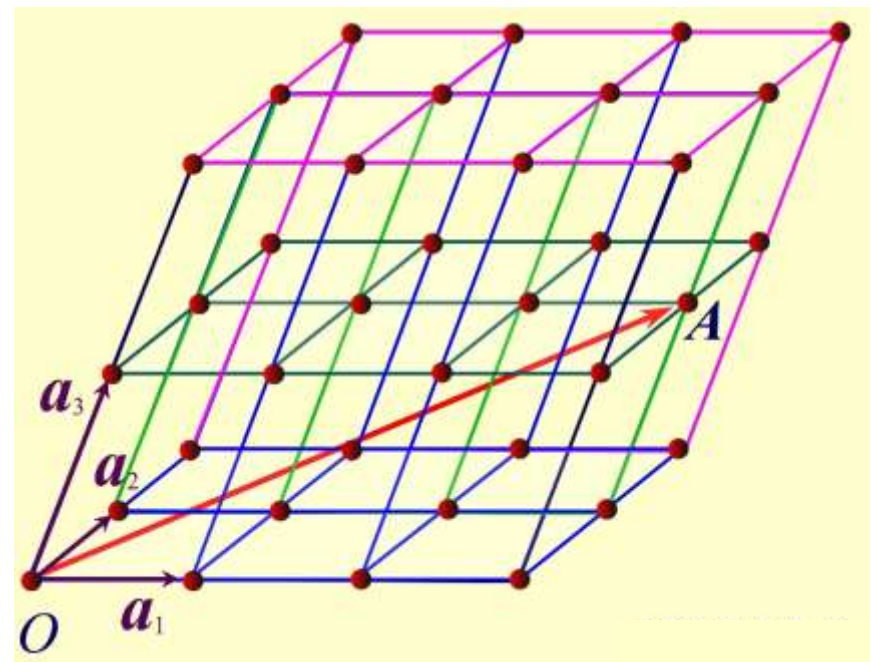
## 4. 晶格周期性的数学描述 —— 布拉伐格子

简单晶格，任一原子A的位矢  $\vec{R}_l = l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$

### 二维晶格



### 三维晶格



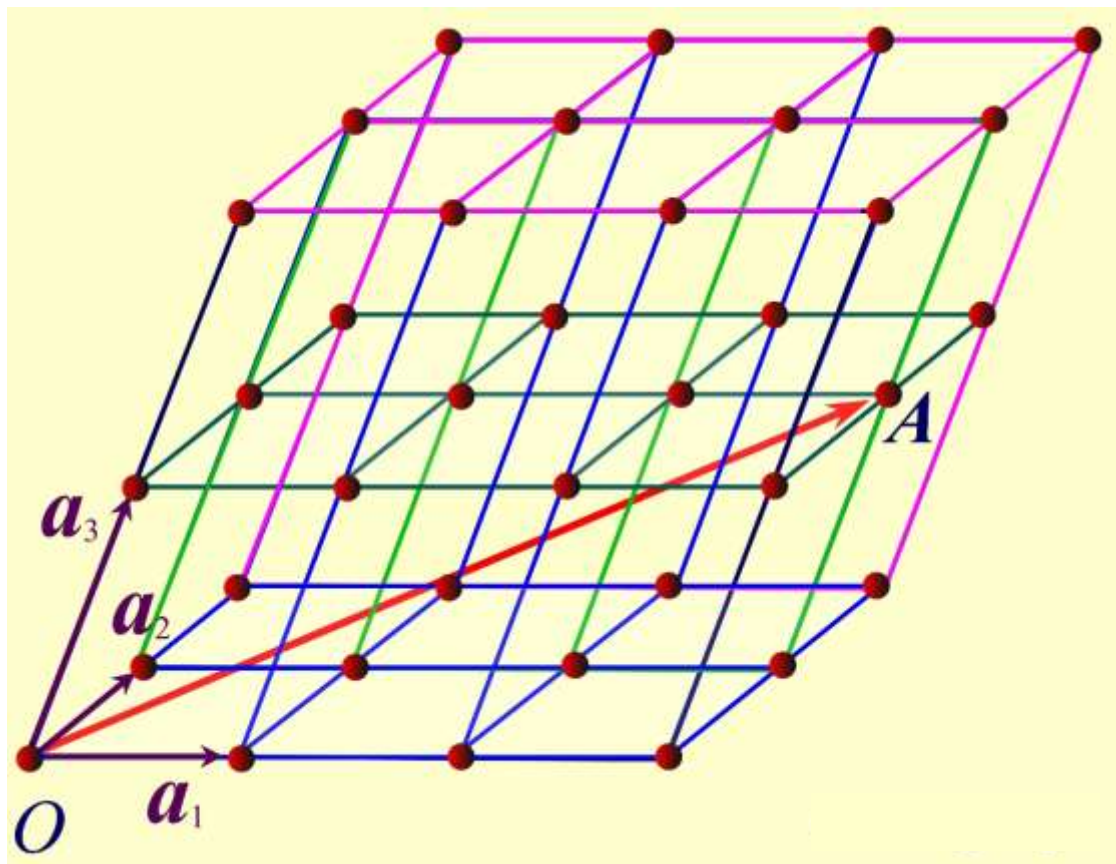
可以用  $l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$  表示一个空间格子

—— 一组  $l_1, l_2, l_3$  的取值可以囊括所有的格点

—— 布拉伐格子

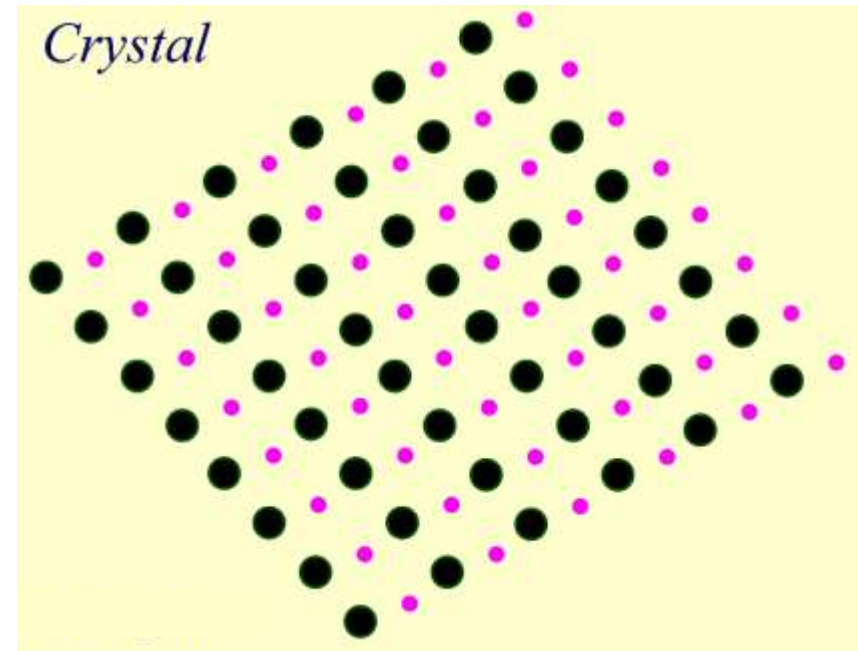
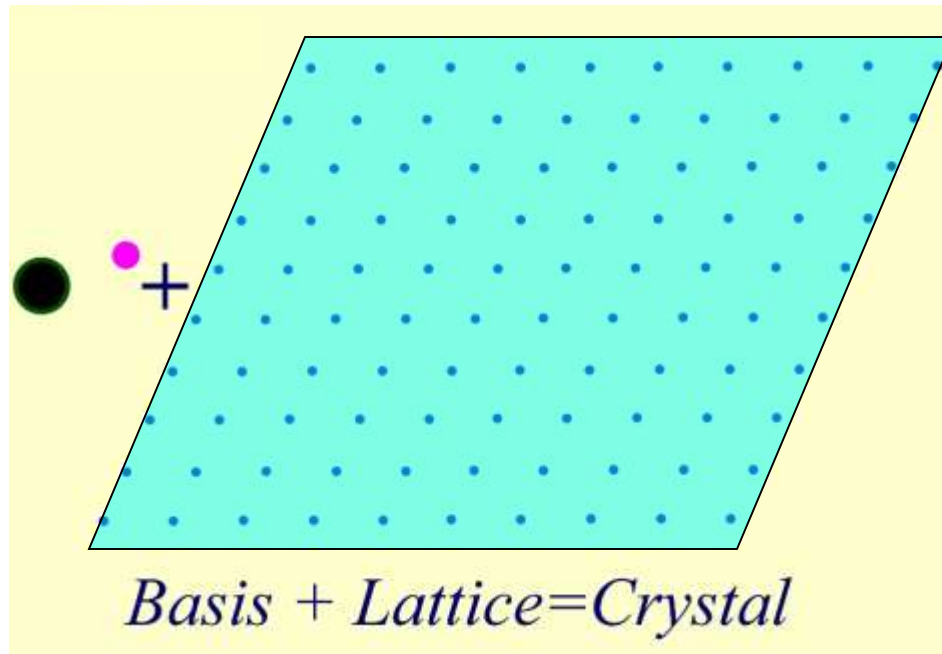
由  $l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$

确定的空间格子





—— 晶体可以看作是在**布拉伐格子 (Lattice)** 的每一个格点上放上一组**原子基元 (Basis)** 构成的

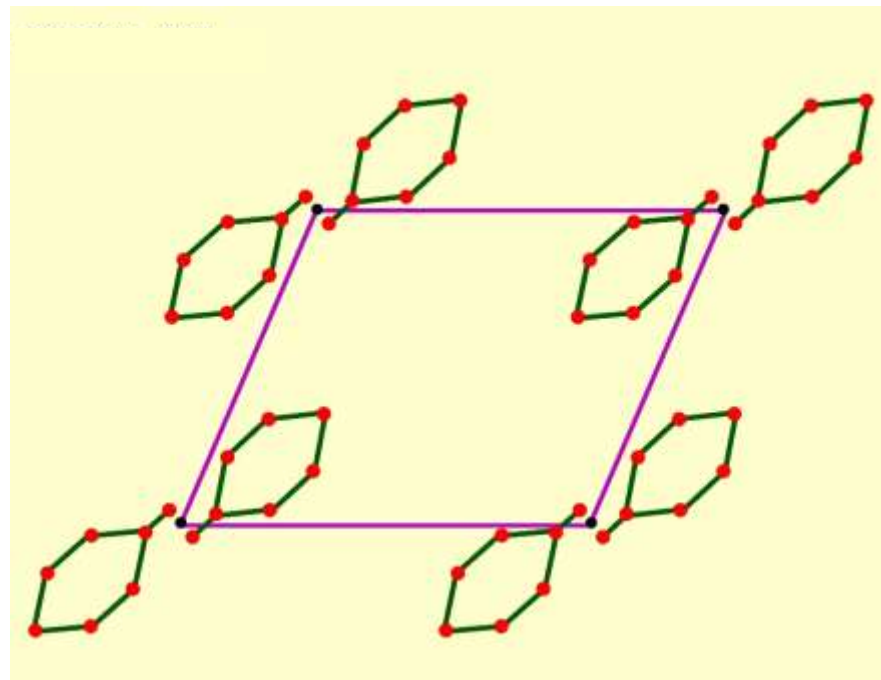
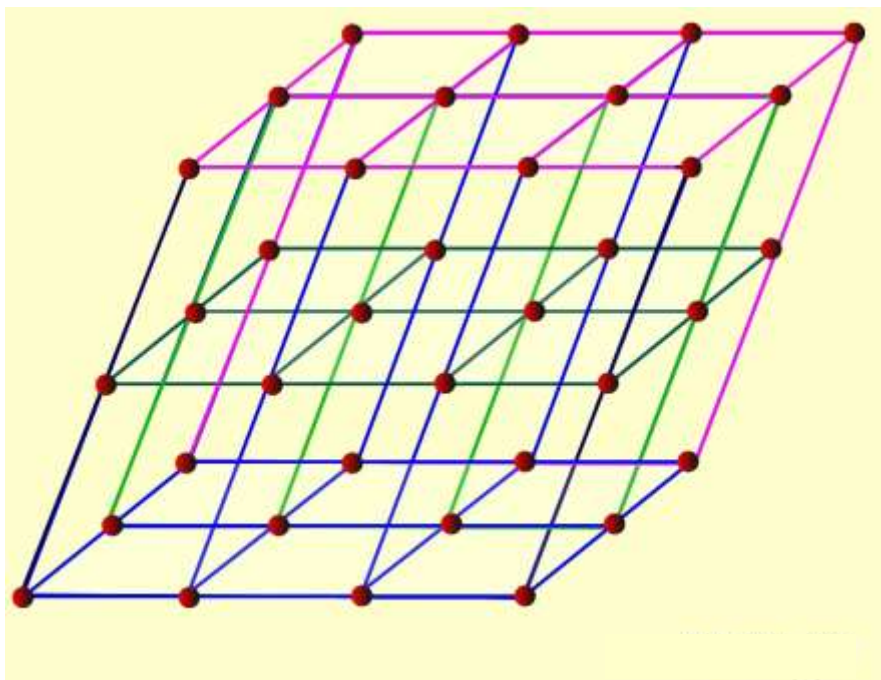


晶体 = ( 晶格 ) + 原子

晶体 = ( 布拉伐格子 ) + 基元

简单晶格 —— 基元是一个原子

复式晶格 —— 基元是一个以上原子



复式晶格：任一原子A的位矢

$$\vec{R}_l = \vec{r}_a + l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3, \quad \alpha = 1, 2, 3, \dots$$

原胞中各种等价原子之间的相对位移

—— 金刚石晶格

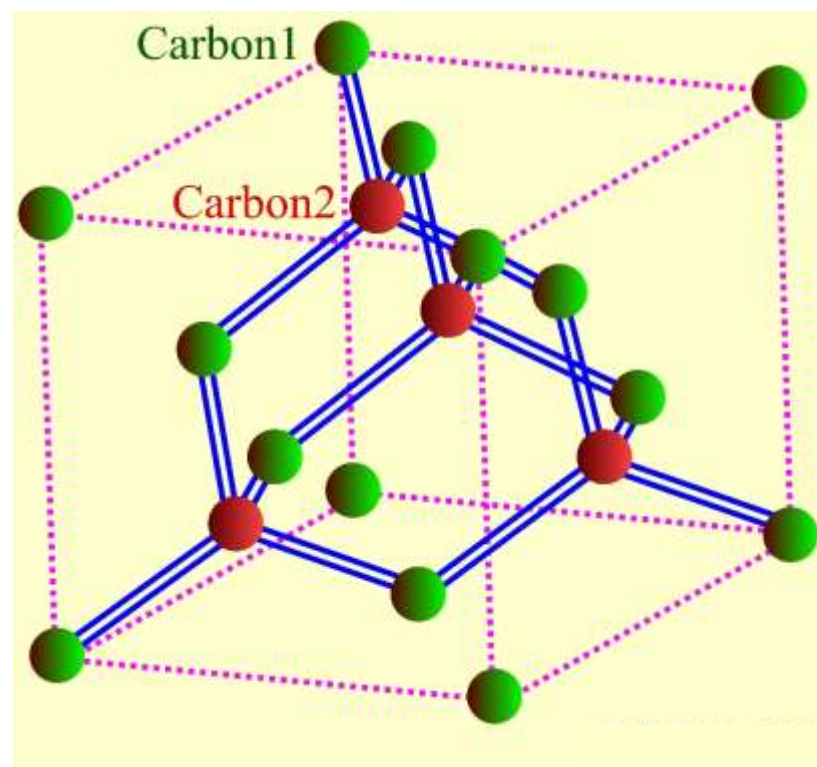
—— 碳1位置  $l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$

—— 碳2位置

$$\vec{\tau} + l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$$

对角线位移

$$|\vec{\tau}| = 1/4$$



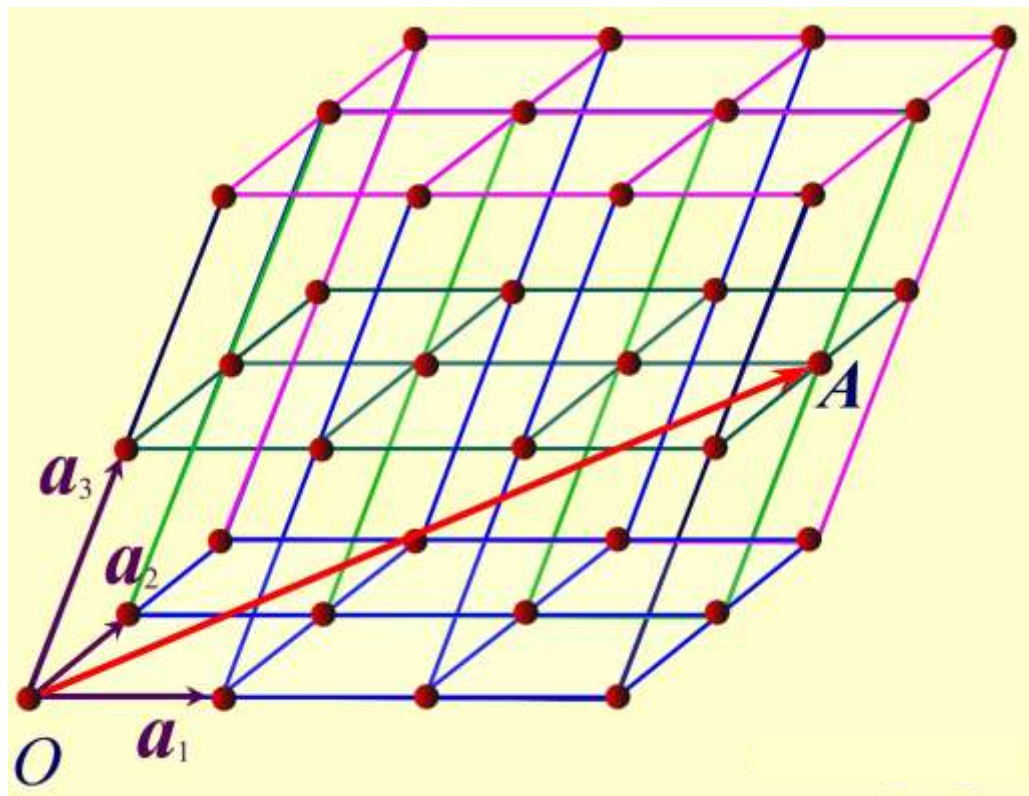
## §1.3 晶向 晶面和它们的标志

布拉伐格子的特点 —— 所有格点周围的情况都是一样的

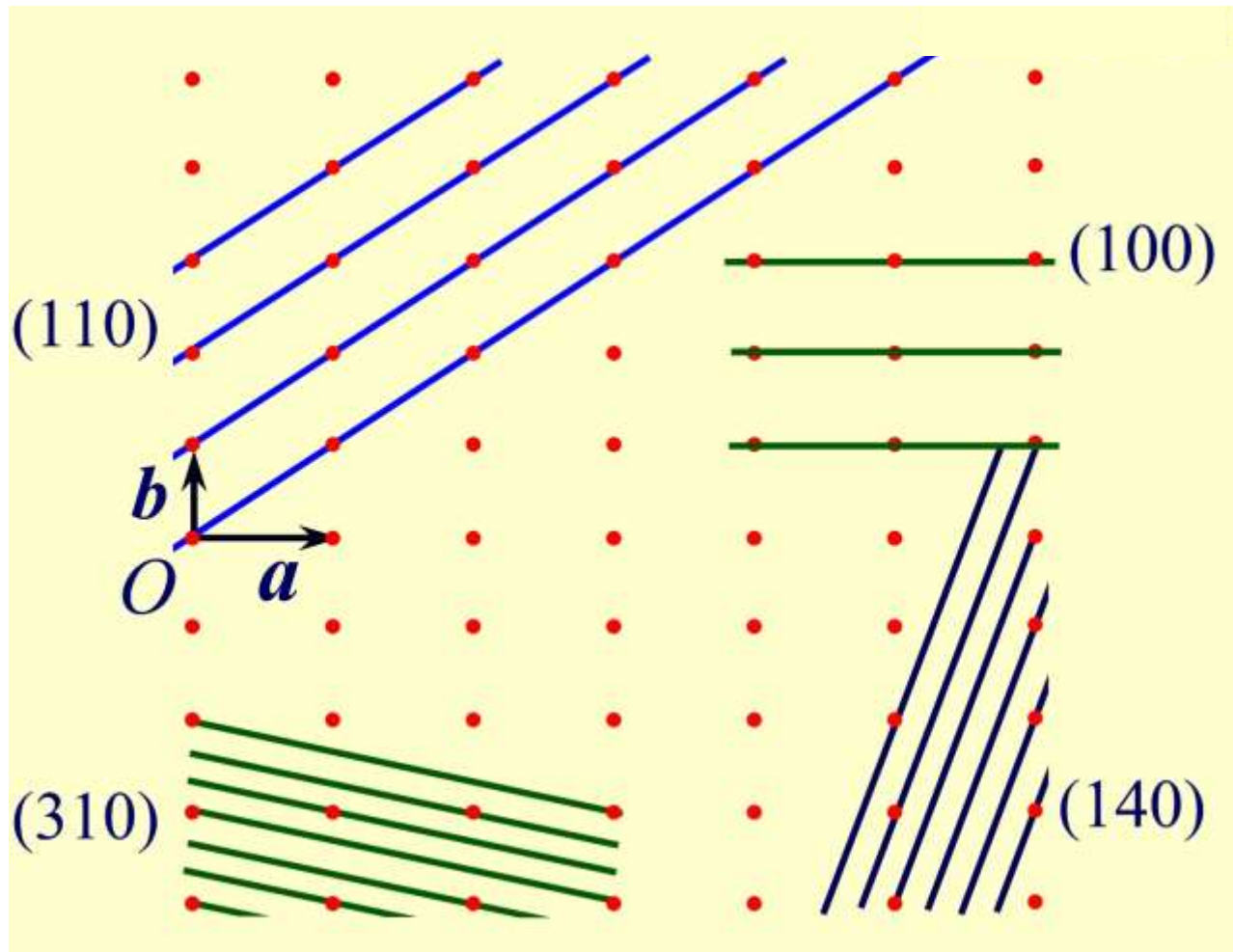
—— 晶体的晶列

—— 在布拉伐格子中  
作一簇平行的直线，  
这些平行直线可以将  
所有的格点包括无遗

平行直线 —— 晶列



- 在一个平面里，相邻晶列之间的距离相等
- 每一簇晶列定义了一个方向 —— 晶向





## 晶向的标志

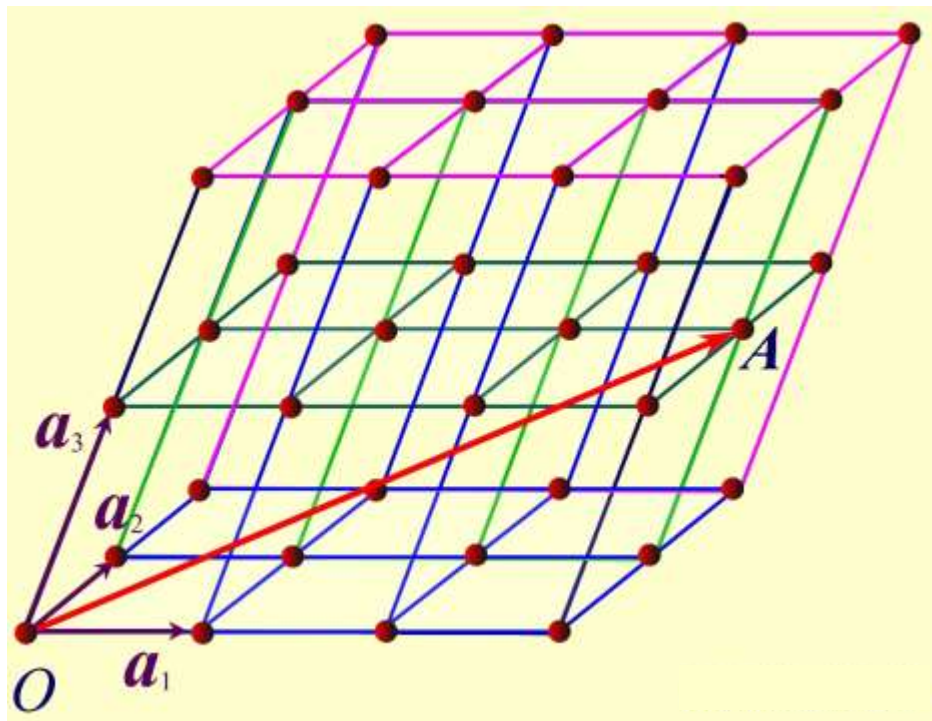
取某一原子为原点 $O$ ，原胞的三个基矢  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

—— 沿晶向到最近的一个格点的位矢  $l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$

$l_1, l_2, l_3$  —— 一组整数

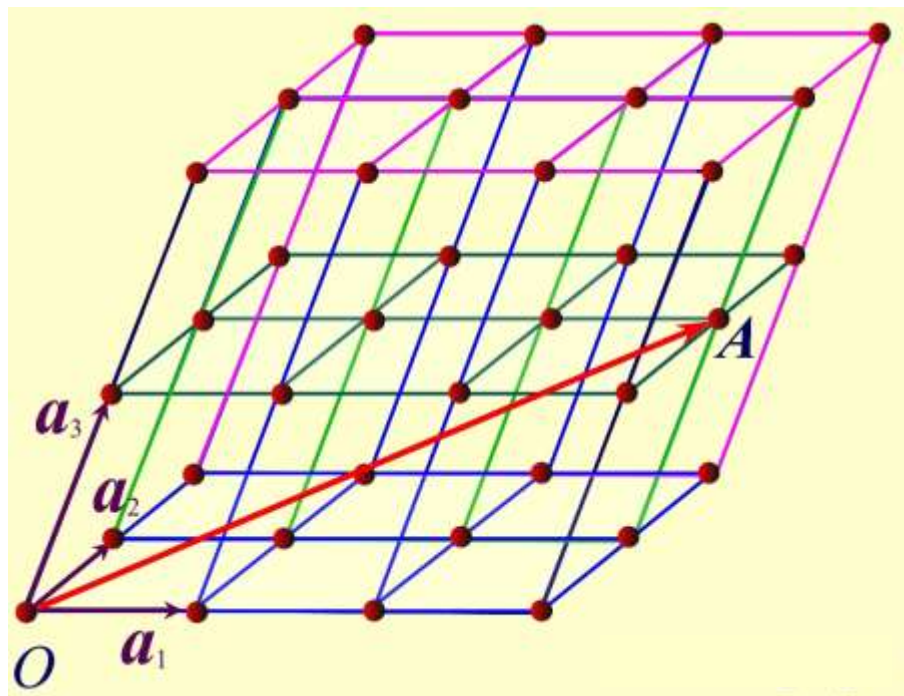
晶向指数  $[l_1 \ l_2 \ l_3]$

—— 对于单胞，也有类似的晶向指数



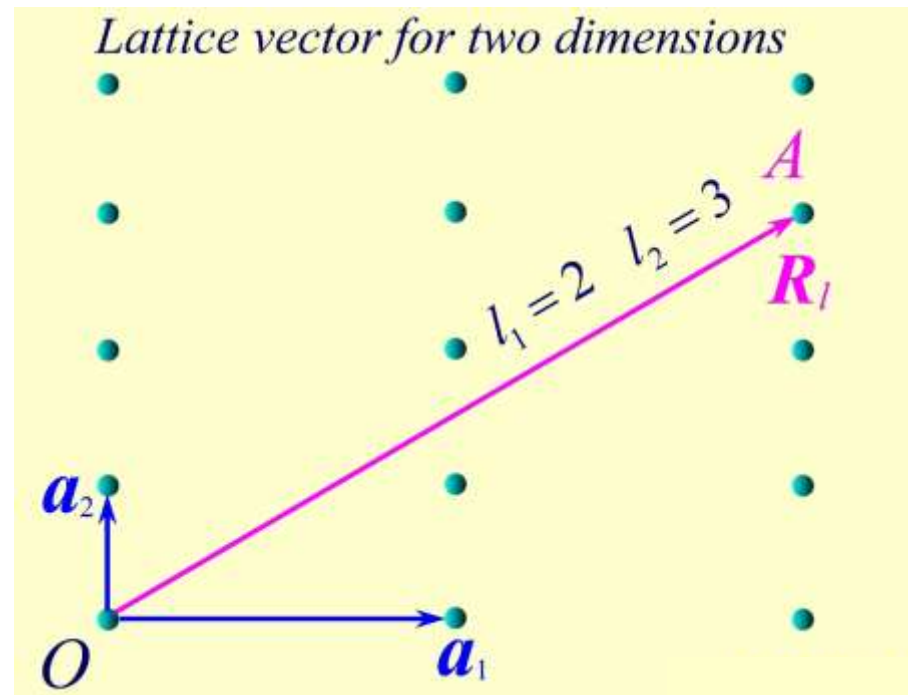


$$\vec{R}_A = 3\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3$$



晶向指数 [311]

$$\vec{R}_A = 2\vec{a}_1 + 3\vec{a}_2$$



晶向指数 [230]

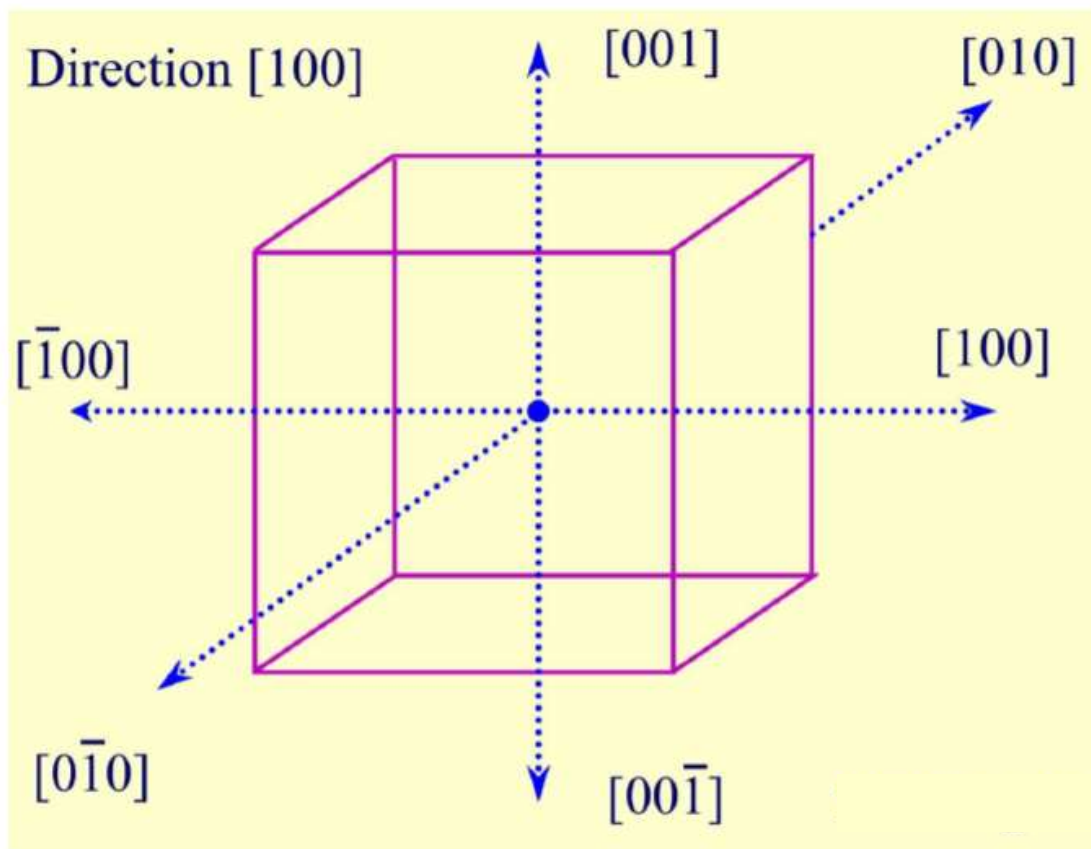
## 简单立方晶格的晶向标志

立方边 $OA$ 的晶向  $[100]$

立方边共有6个不同的晶向

$[100], [\bar{1}00], [010]$   
 $[0\bar{1}0], [001], [00\bar{1}]$

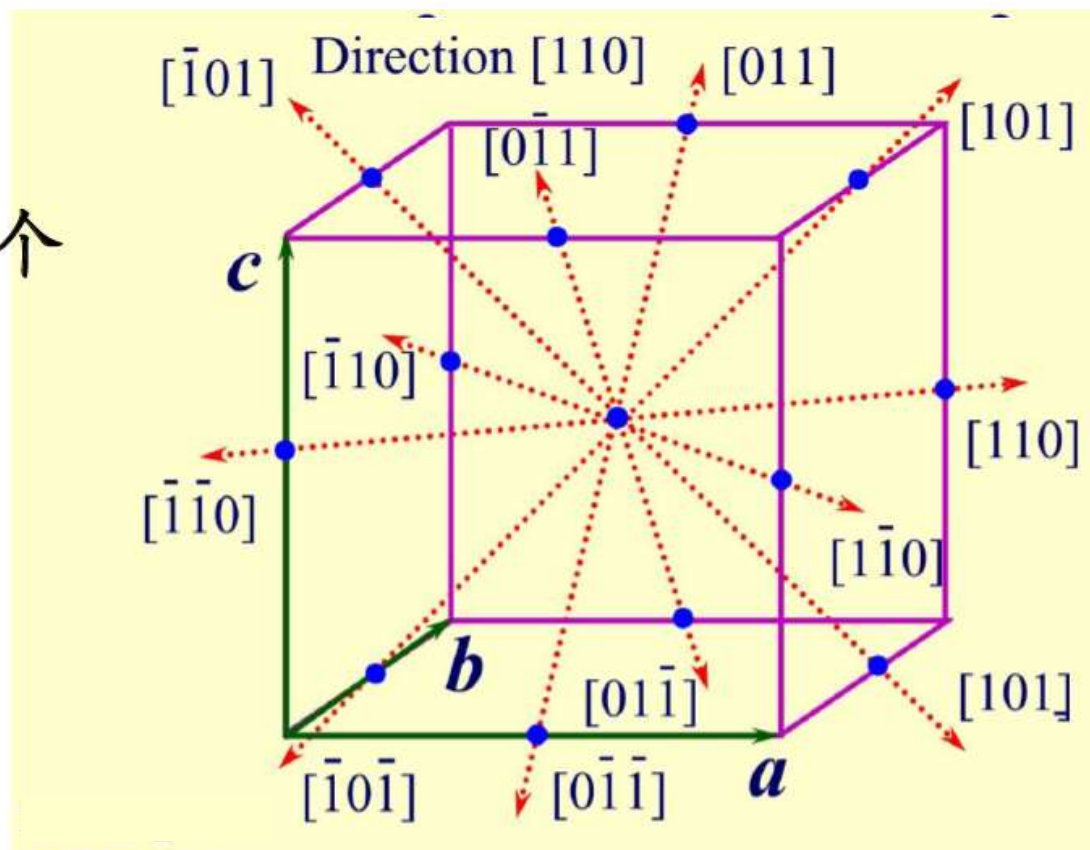
统称 $\langle 100 \rangle$



面对角线 $OB$ 的晶向  $[110]$

面对角线晶向共有12个

统称 $\langle 110 \rangle$

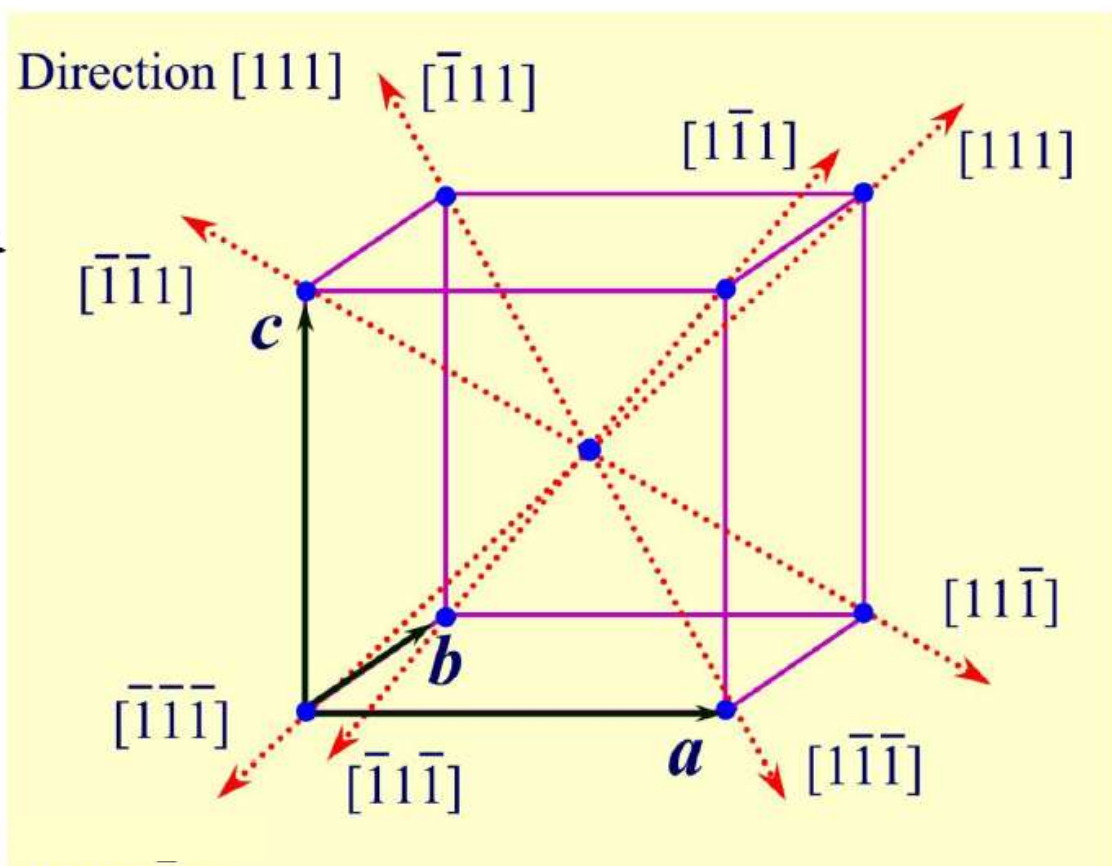


体对角线 $OC$ 的晶向

$[111]$

体对角线晶向共有8个

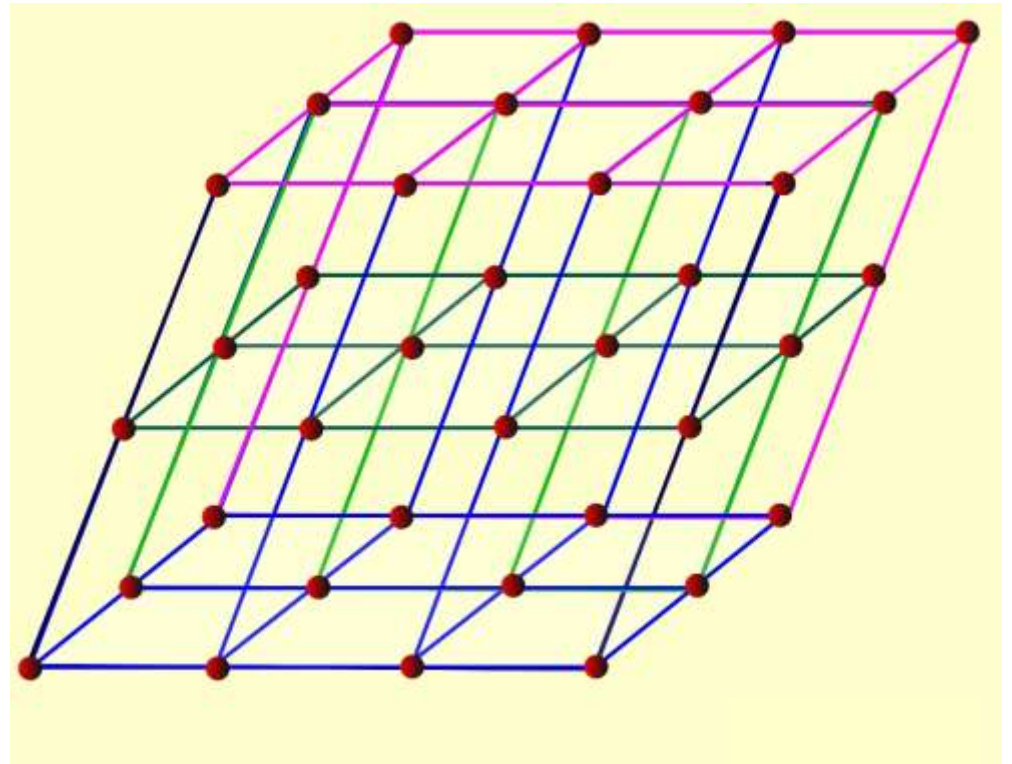
统称 $\langle 111 \rangle$



## 晶面的标志

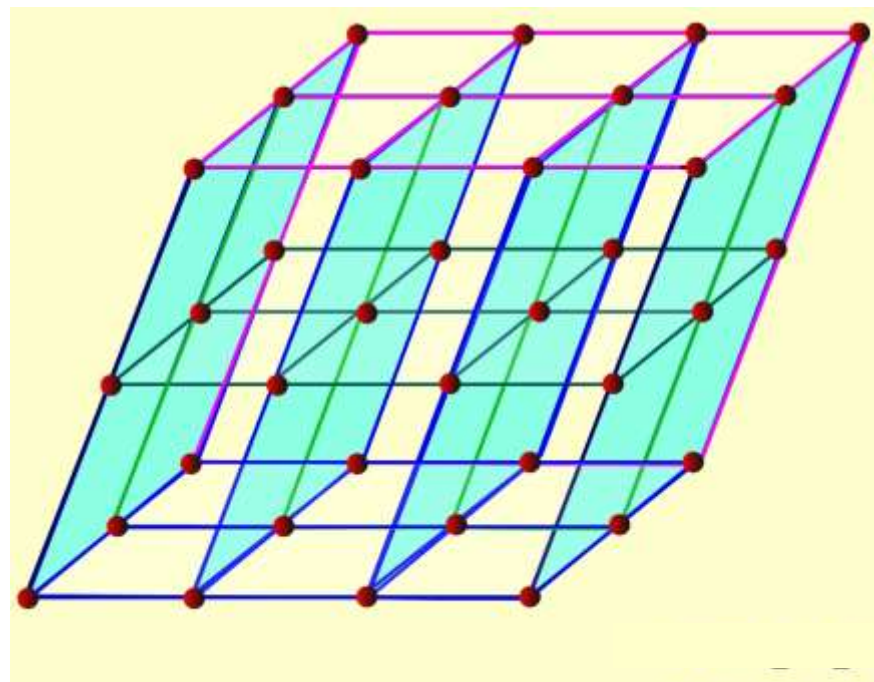
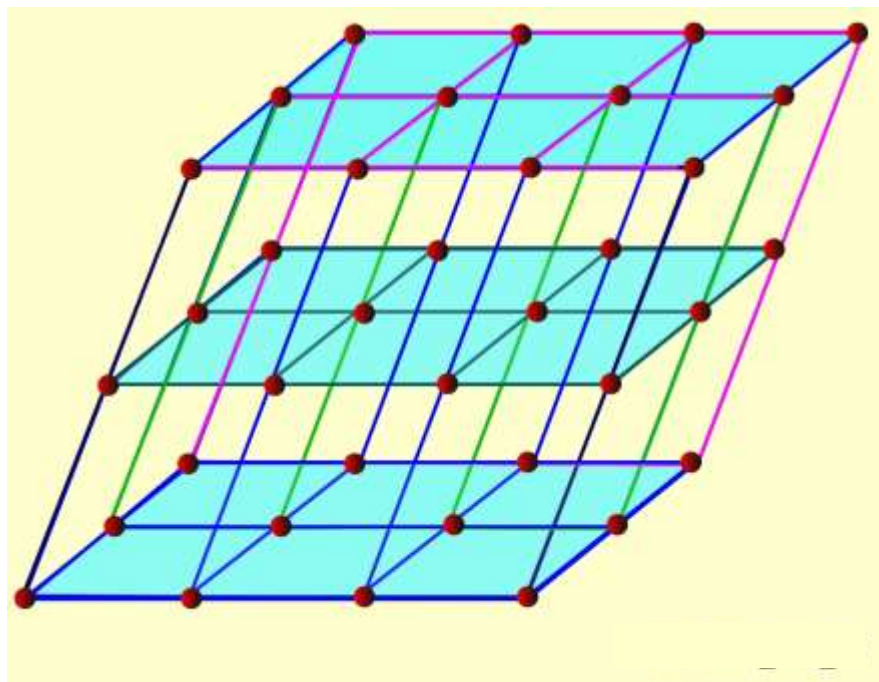
晶体的晶面 —— 在布拉伐格子中作一簇平行的平面，这些相互平行、等间距的平面可以将所有的格点包括无遗

—— 这些相互平行的平面称为晶体的晶面





同一个格子，两组不同的晶面族

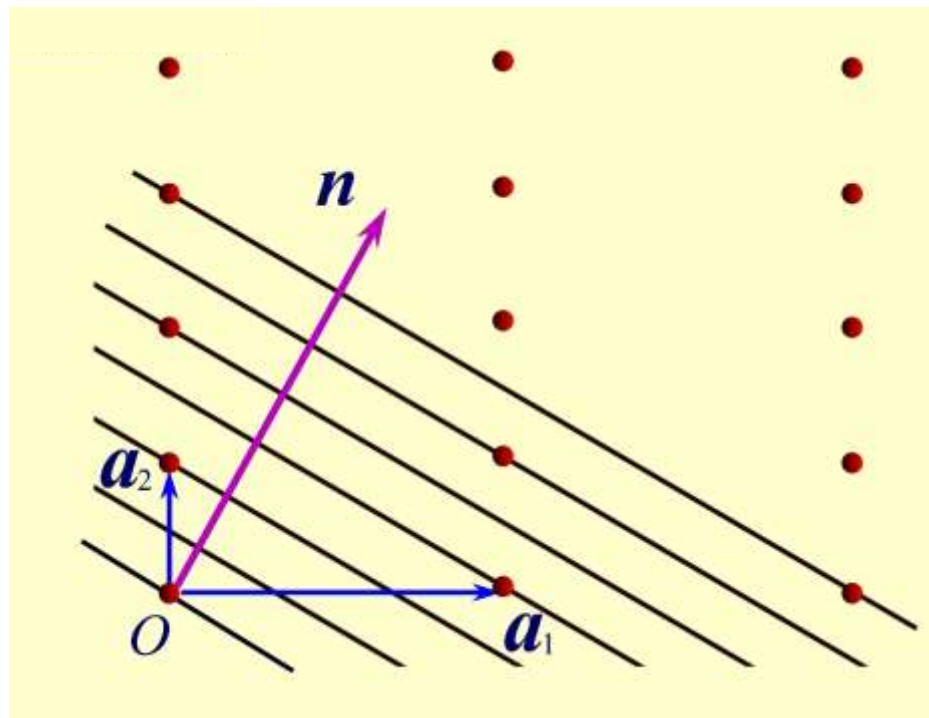


取某一原子为原点 $O$ ，原胞的三个基矢  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

为坐标系的三个轴，不一定相互正交

—— 晶格中一族的晶面  
不仅平行，并且等距

—— 一族晶面必包含了  
所有格点而无遗漏





设  $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$  末端上的格点分别落在离原点的距离

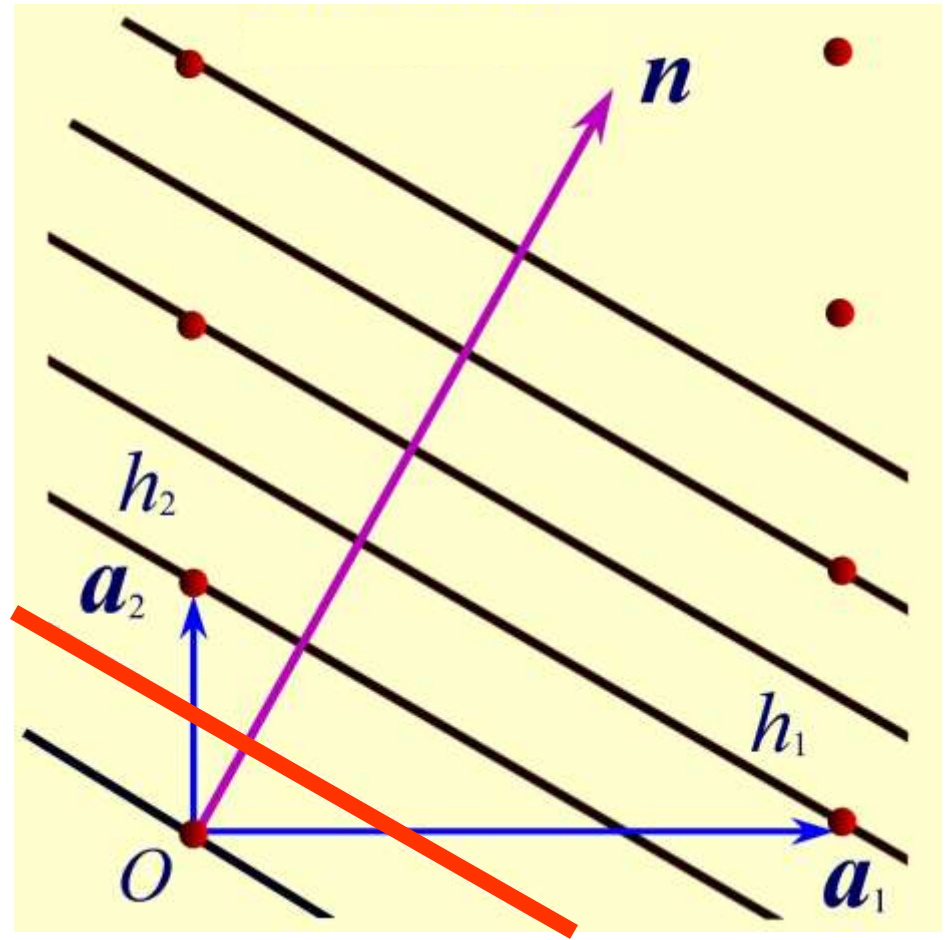
$h_1d, h_2d, h_3d$  的晶面上

$h_1, h_2, h_3$  —— 整数

$d$  —— 晶面间距

—— 最靠近原点的晶面  
在坐标轴上的截距

$$\frac{a_1}{h_1}, \frac{a_2}{h_2}, \frac{a_3}{h_3}$$

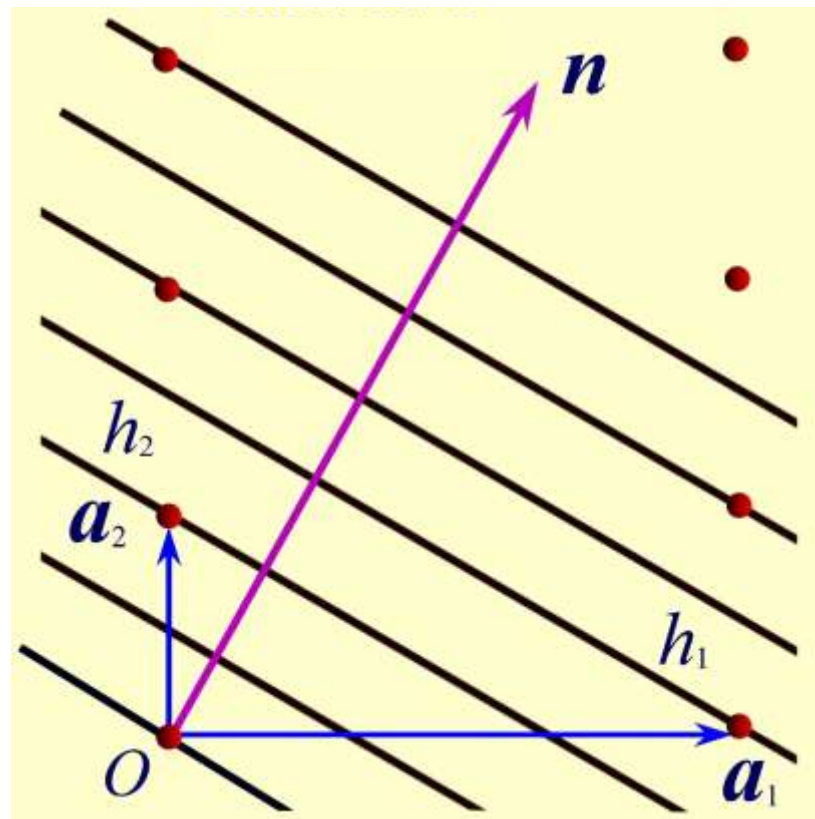


—— 同族中其它晶面的截距是  $\frac{a_1}{h_1}$ ,  $\frac{a_2}{h_2}$ ,  $\frac{a_3}{h_3}$  的整数倍

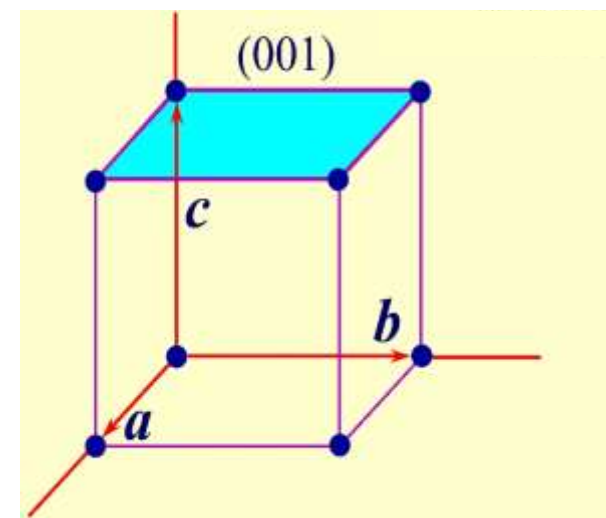
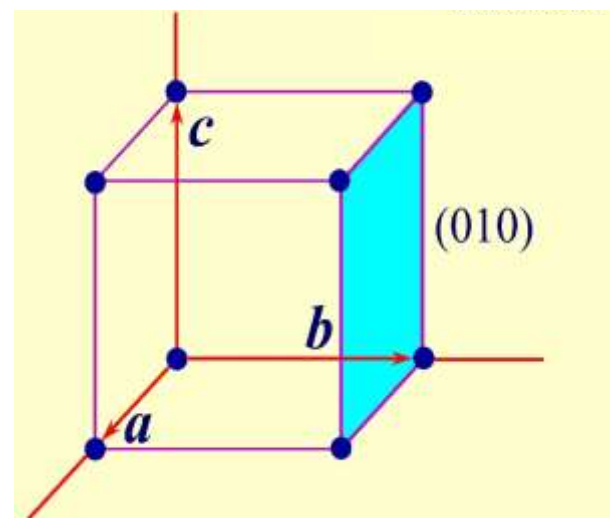
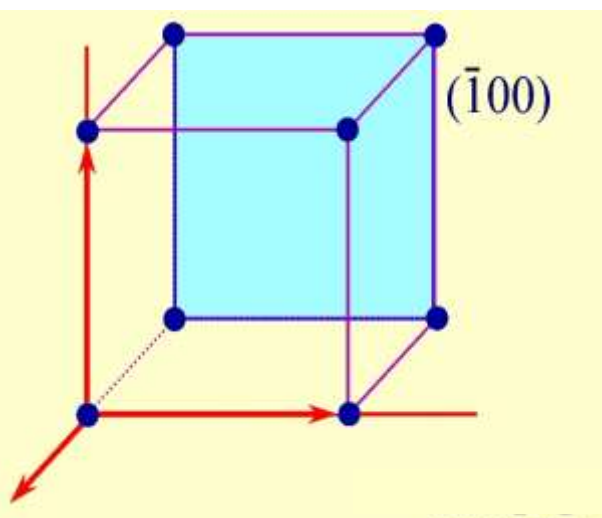
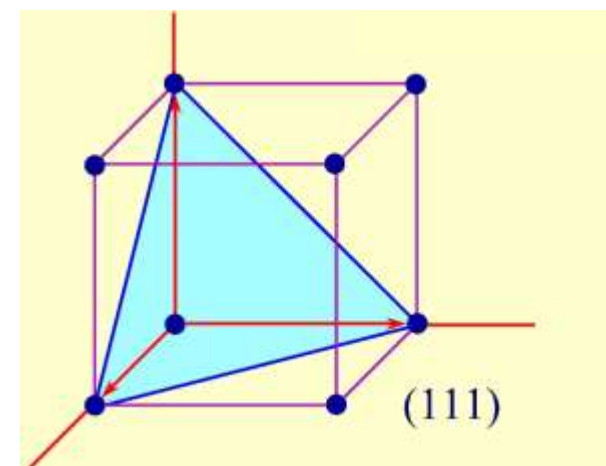
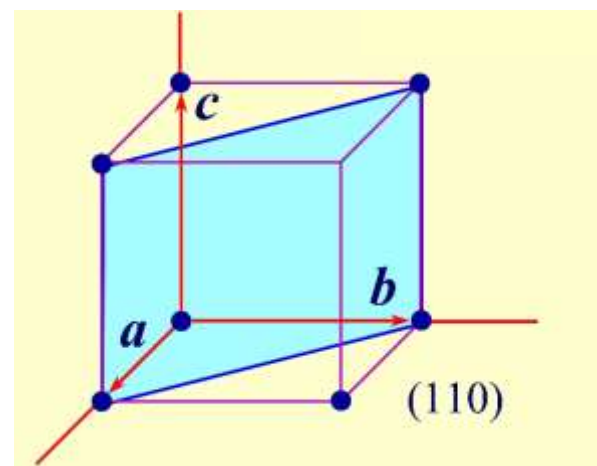
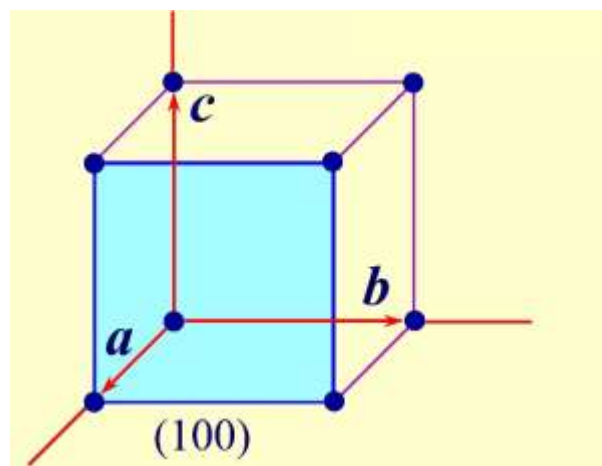
密勒指数 ——  $(h_1 h_2 h_3)$

标记这个晶面系

—— 以单胞的基矢为参考，  
所得出的晶列指数和晶面的  
密勒指数，有着重要的意义



## 立方晶格的几种主要晶面标记

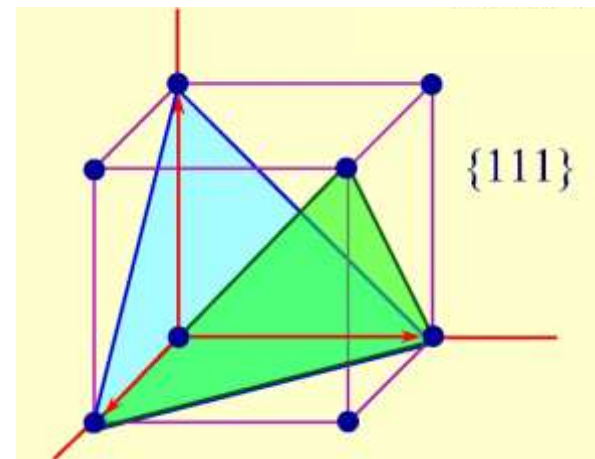
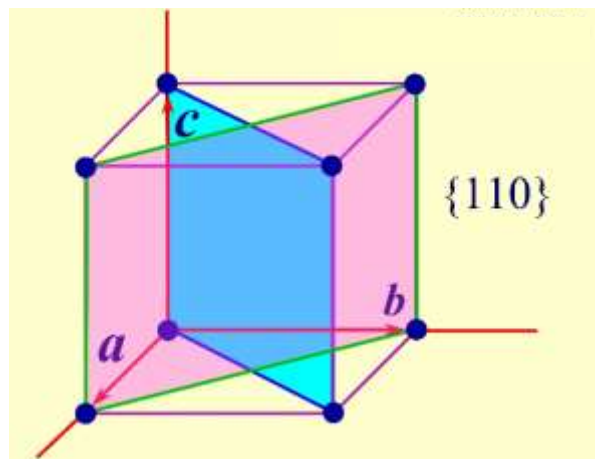
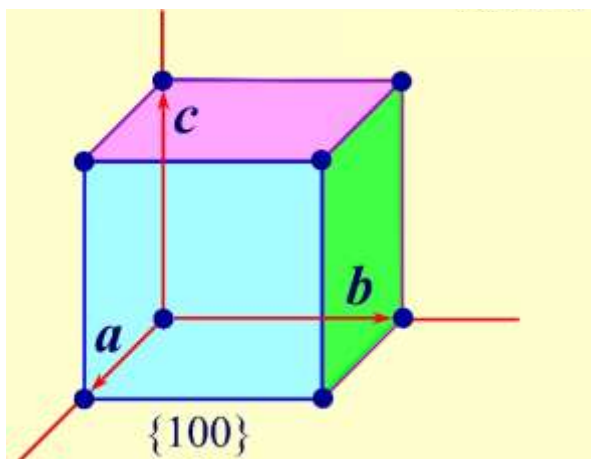


晶面密勒指数和晶面法线的晶向指数完全相同

(100) 面等效的晶面数分别为：3个 表示为  $\{100\}$

(110) 面等效的晶面数分别为：6个 表示为  $\{110\}$

(111) 面等效的晶面数分别为：4个 表示为  $\{111\}$



—— 符号相反的晶面指数只是在区别晶体的外表面时才有意义, 在晶体内部这些面都是等效的

## §1.4 晶体的对称性

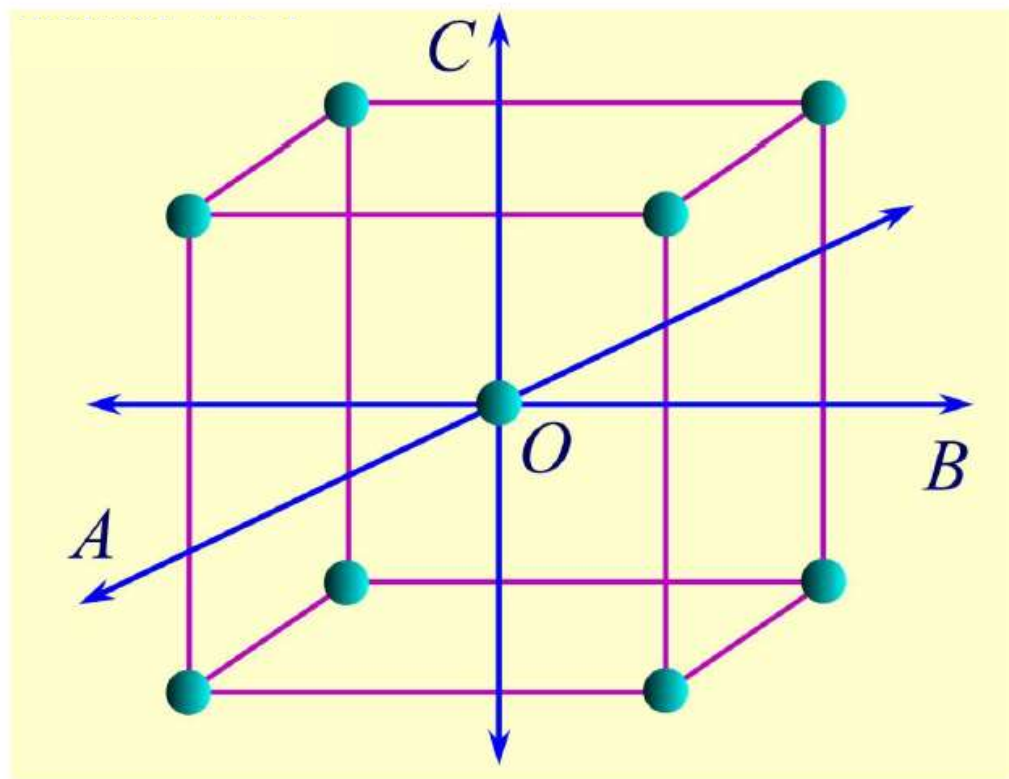
对称操作 —— 一个物体在某一个正交变换下保持不变  
—— 物体的对称操作越多，其对称性越高

### 1. 立方体的对称操作

1) 绕三个立方轴转动

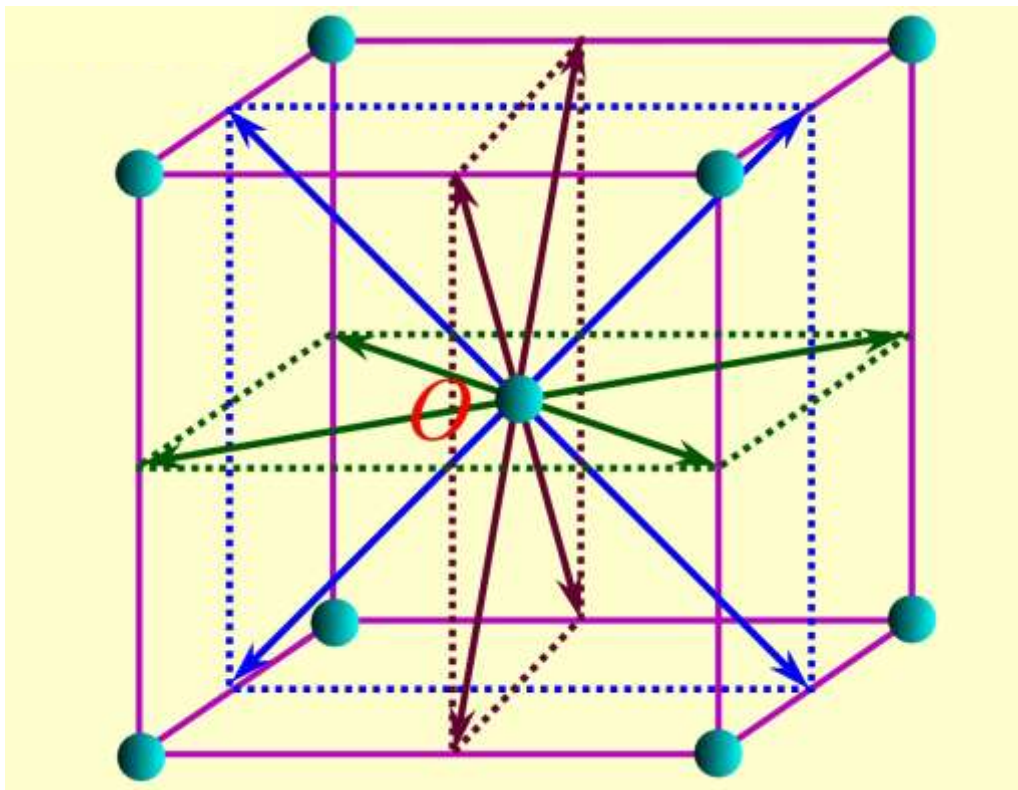
$$\frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}$$

—— 9个对称操作





2) 绕6条面对角线轴转动  $\pi$  —— 共有6个对称操作



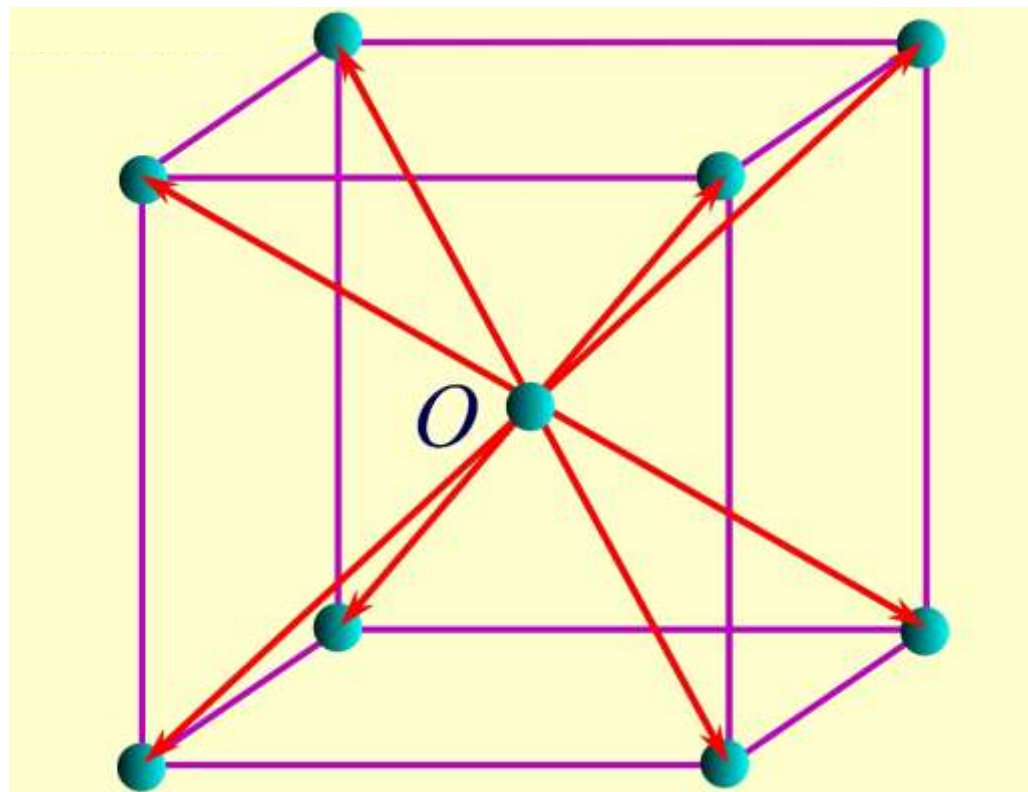
3) 绕4个立方体对角线

轴转动  $\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3}$

—— 8个对称操作

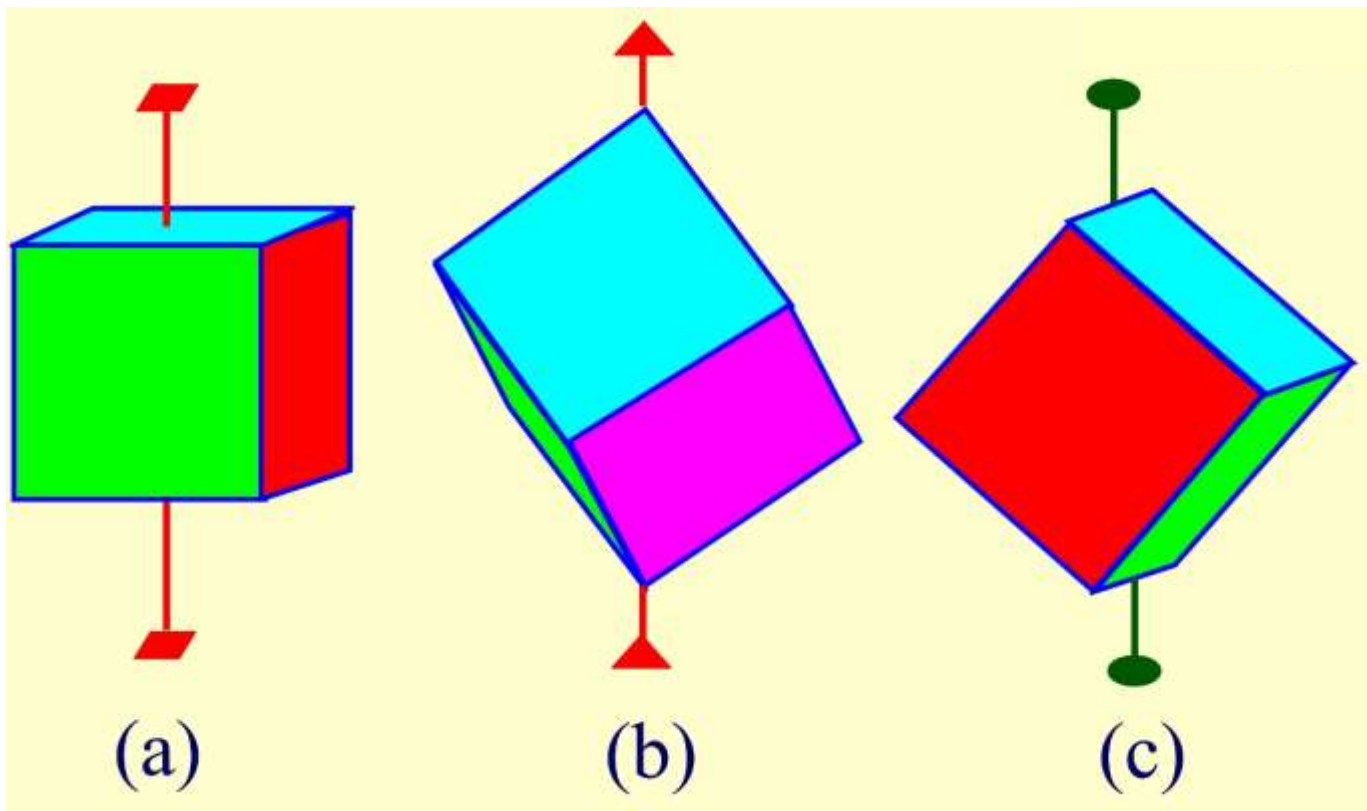
4) 不变操作

—— 1个对称操作



5) 以上24个对称操作加中心反演仍是对称操作

—— 立方体的对称操作共有48个



取中心为原点，将晶体中任一点  $(x_1, x_2, x_3)$  变成  $(-x_1, -x_2, -x_3)$

## 2 正六面柱的对称操作

1) 绕中心轴线转动  $\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}, \pi, \frac{4\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}$  —— 5个

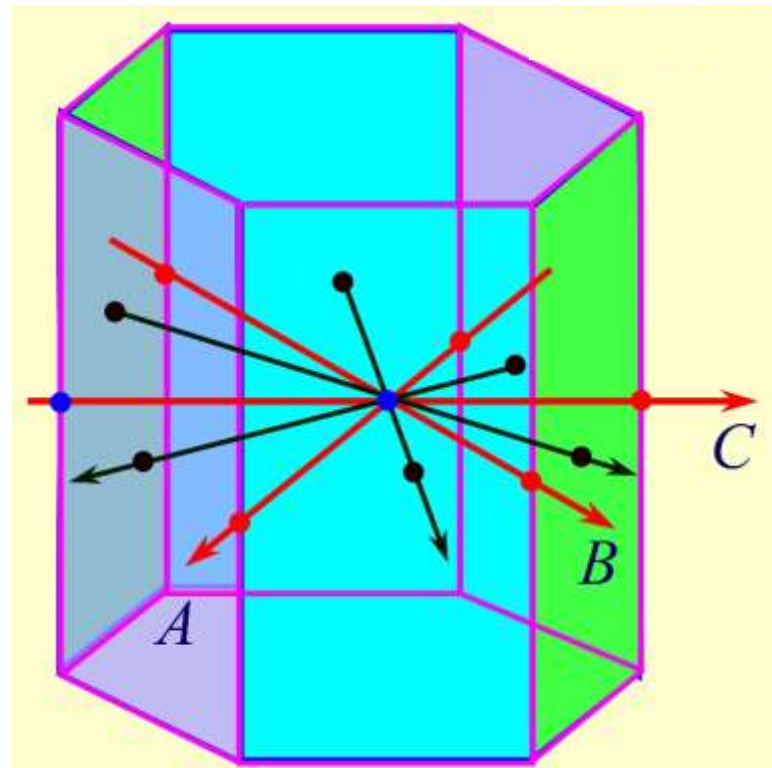
2) 绕对棱中点连线转动  $\pi$  —— 3个

3) 绕相对面中心连线转动  $\pi$   
—— 3个

4) 不变操作 —— 1个

5) 以上12个对称操作加中心  
反演仍是对称操作

—— 正六面柱的对称操作有24个



### 3 对称素

“对称素”——简洁明了地概括一个物体的对称性

对称素 —— 一个物体的旋转轴、旋转 - 反演轴

一个物体绕某一个转轴转动  $2\pi / n$ ，以及其倍数不变时  
—— 该轴为物体 **n重旋转轴**，计为  $n$

一个物体绕某一个转轴转动  $2\pi / n$  加上中心反演的联合操作，以及其联合操作的倍数不变时  
—— 该轴为物体 **n重旋转 - 反演轴**，计为  $\bar{n}$



# 立方体

立方轴  $(\frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2})$  为4重轴，计为4

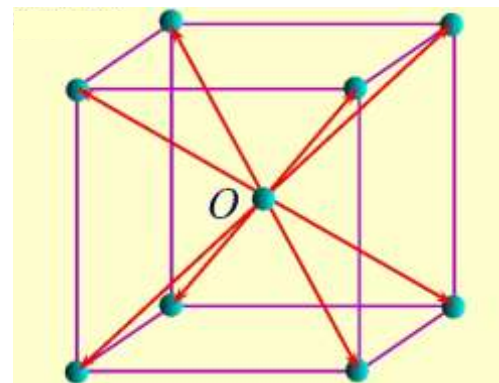
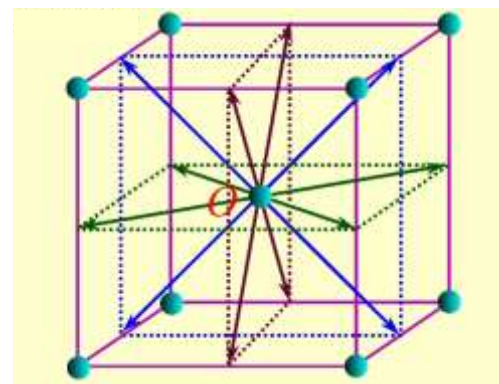
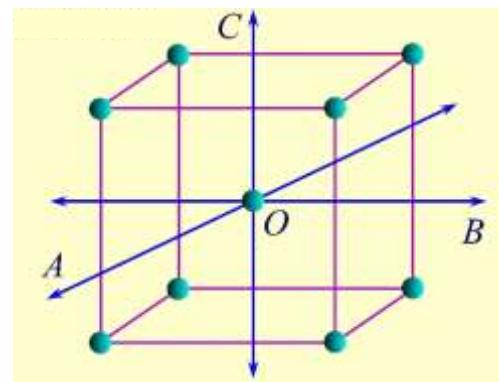
同时也是4重旋转－反演轴，计为  $\bar{4}$

面对角线  $(\pi)$  为2重轴，计为2

同时也是2重旋转－反演轴，计为  $\bar{2}$

体对角线轴  $(\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3})$  为3重轴，计为3

同时也是2重旋转－反演轴，计为  $\bar{3}$



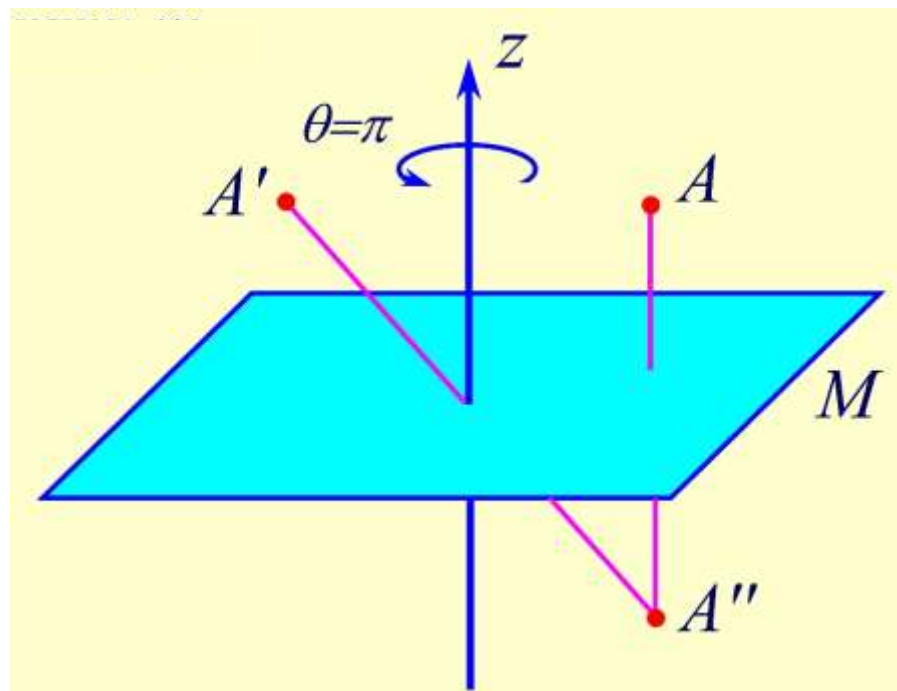
## 对称素 $\bar{2}$ 的含义

—— 先绕轴转动，再作中心反演

A''点实际上是A点在通过中心垂直于转轴的平面M的镜像，  
表明对称素  $\bar{2}$  存在一个对称面M

—— 对称素为镜面

一个物体的全部对称操作  
构成一个对称操作群



## 4 群的概念

—— 群代表一组“元素”的集合， $G \equiv \{E, A, B, C, D, \dots\}$   
这些“元素”被赋予一定的“乘法法则”，满足下列性质：

- 1) 集合 $G$ 中任意两个元素的“乘积”仍为集合内的元素  
—— 若  $A, B \in G$ , 则  $AB = C \in G$ . 叫作群的封闭性
- 2) 存在单位元素 $E$ , 使得所有元素满足：  $AE = A$
- 3) 对于任意元素 $A$ , 存在逆元素 $A^{-1}$ , 有：  $AA^{-1} = E$
- 4) 元素间的“乘法运算”满足结合律：  $A(BC) = (AB)C$

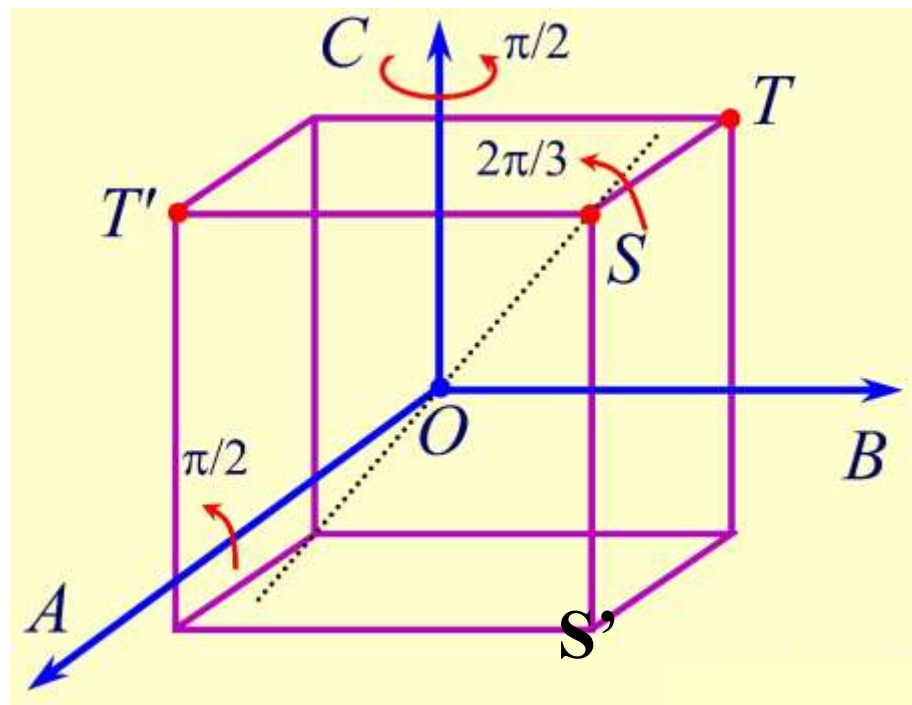
**单位元素** —— 不动操作

任意元素的**逆元素** —— 绕转轴角度 $\theta$ ，其逆操作为绕转轴角度 $-\theta$ ；中心反演的逆操作仍是中心反演；

连续进行A和B操作  
—— 相当于C操作

A 操作 —— 绕OA轴转动 $\pi/2$   
—— S点转到T'点

B 操作 —— 绕OC轴转动 $\pi/2$   
—— T'点转到S点



上述操作中S和O没动，而T点转动到T'点  
—— 相当于一个操作C：绕OS轴转动 $2\pi/3$

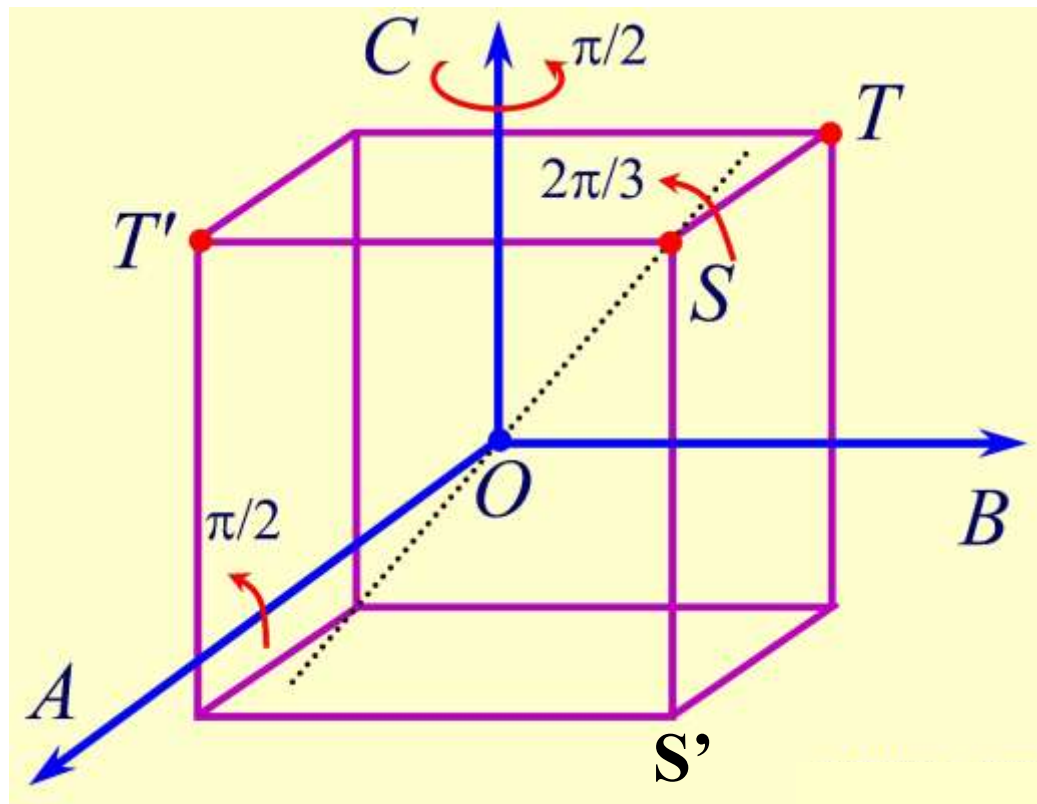
表示为  $C = BA$

—— 群的封闭性

可以证明

$$A(BC) = (AB)C$$

—— 满足结合律





## 晶体中存在多少个多重轴？

设想有一个对称轴垂直于平面，平面内晶面的格点可以用来描述  $l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2$

—— 绕通过A的转轴的任意对称操作，转过角度 $\theta$

B点转到B'点 —— B'点必有一个格点

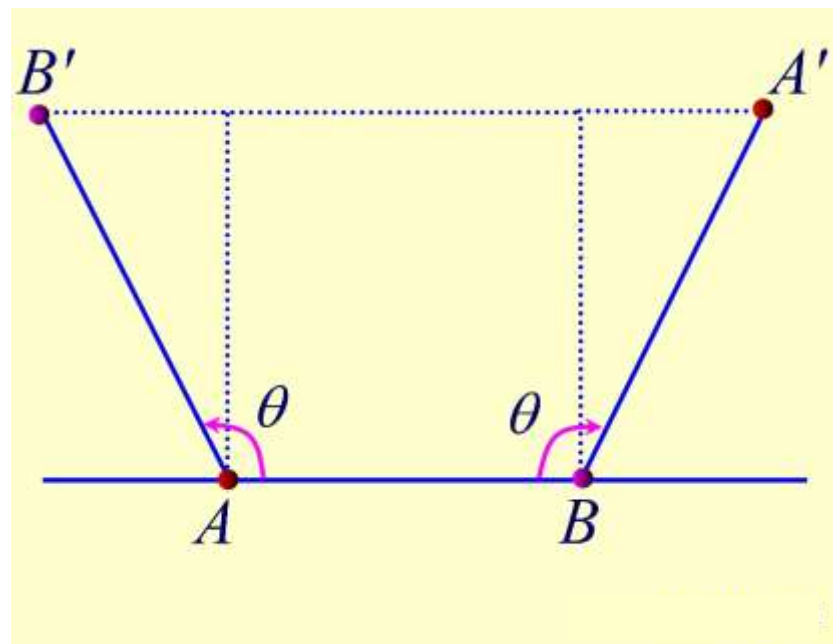


A和B两点等价——以通过B点的轴顺时针转过 $\theta$

A点转到A'点

—— A'点必有一个格点

且有  $\overline{B'A'} = n \overline{AB}$  —— n为整数



$$\overline{B'A'} = n \overline{AB}$$

$$\overline{B'A'} = \overline{AB}(1 - 2\cos\theta)$$

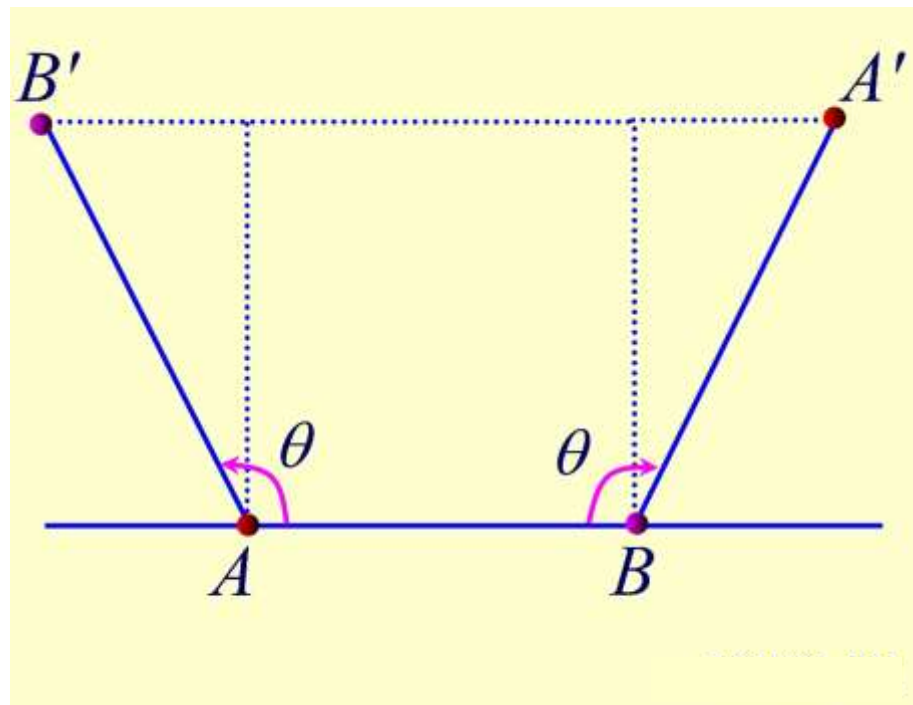
$$1 - 2\cos\theta = n$$

$$\cos\theta: -1 \sim +1$$

$$n = -1, 0, 1, 2, 3$$

$$\theta = 0^\circ, 60^\circ, 90^\circ, 120^\circ, 180^\circ$$

—— 任何晶体的宏观对称性只能有以下十种对称素



$$1, 2, 3, 4, 6$$

$$\overline{1}, \overline{2}, \overline{3}, \overline{4}, \overline{6}$$