

固体物理学

杨一鸣 教授

微电子学院

大连理工大学

Email: ymyang@dlut.edu.cn

上课时间

2020~2021学年 第二学期

三四节课

五六节课

[illegible]

课程信息

- 上课时间：周二3,4节、周四5,6节，第1-8周
- 答疑时间：随堂QQ群答疑（可匿名）
- 作业提交：每周四布置/上交，迟交最多计**50%**分数
提交方式：手写，拍照上传超星平台
- 考试时间：预计第9周，闭卷笔试
- 成绩组成：平时作业30%，期末考试70%
- 课堂考勤：随机点名，无故缺席每次扣除总成绩10分

主要参考书

1. 黄昆原著，韩汝琦改编，《固体物理学》，高等教育出版社
2. 闫守胜著，《固体物理基础》，北京大学出版社
3. 胡安，章维益著，《固体物理学》，高等教育出版社
4. N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, Solid State Physics, 世界图书出版公司

本课程内容

- 第一章：晶体结构
- 第二章：固体的结合
- 第三章：晶格振动与晶体的热学性质
- 第四章：能带理论
- 第五章：晶体中电子在电磁场中的运动
- 第六章：金属电子论
- 第七章：半导体电子论

原子/
离子

电子

怎样学好固体物理

- 固体物理学内容范围广，知识体系庞大，涉及众多量子力学与统计物理的内容，对大二本科生来说难度较大。
- **建议一**：重心放在**概念**的理解与**物理图像**的建立
- **建议二**：“书读百遍，其义自见。”至少读两本以上参考书、读第一遍弄懂概念，第二遍再关注公式推导。
- **建议三**：独立思考，培养“批判性思维”。课本上有没有错误？假设能不能成立？

第一章

晶体结构

认识晶体

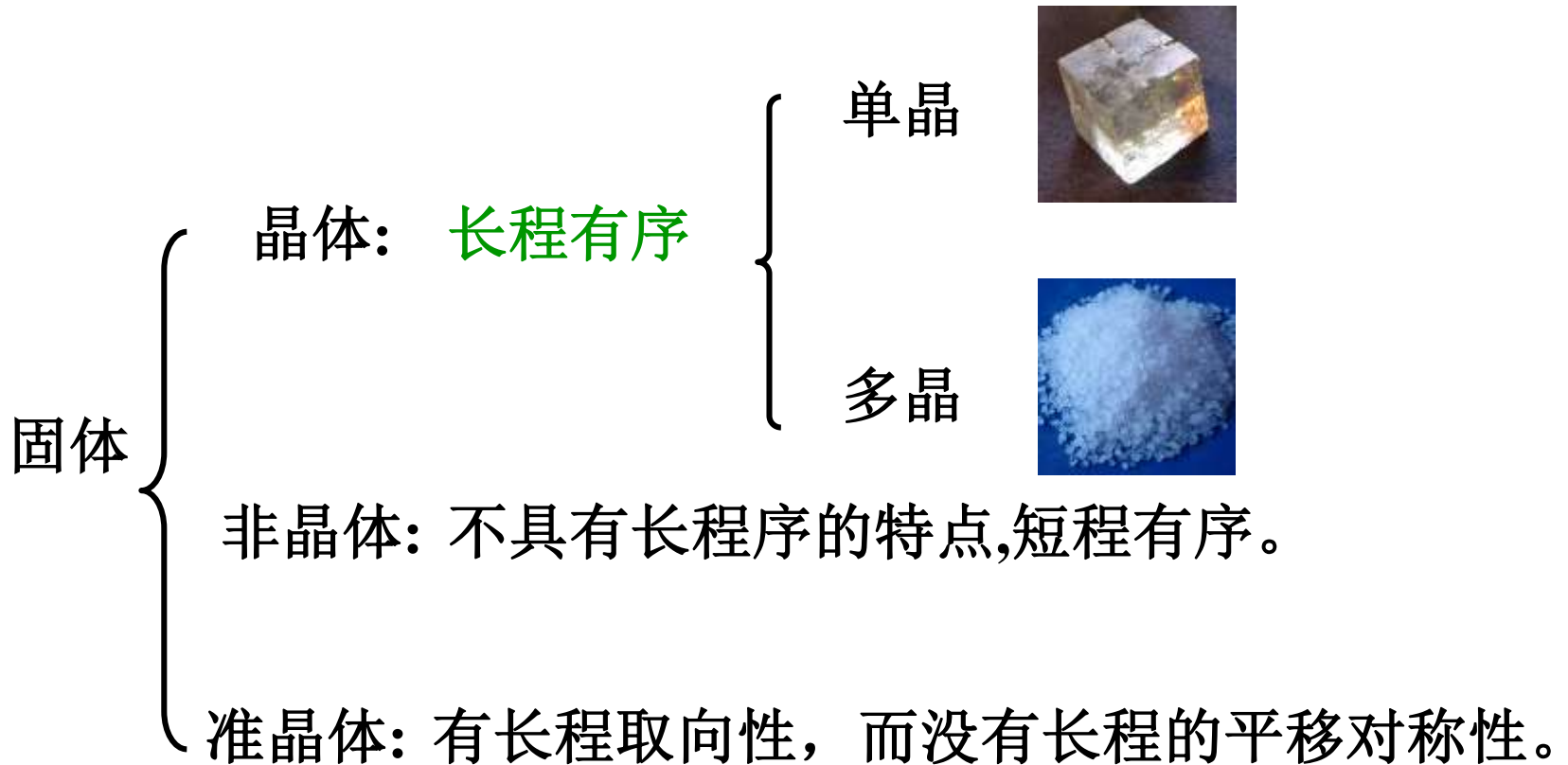
天然晶体大多具有规则的几何形状



微观原子或分子排列有序

想一想，生活中常见的晶体有哪些？

固体的分类



长程有序：一般在微米量级范围内原子排列具有周期性。

§ 1.1 一些晶体的实例

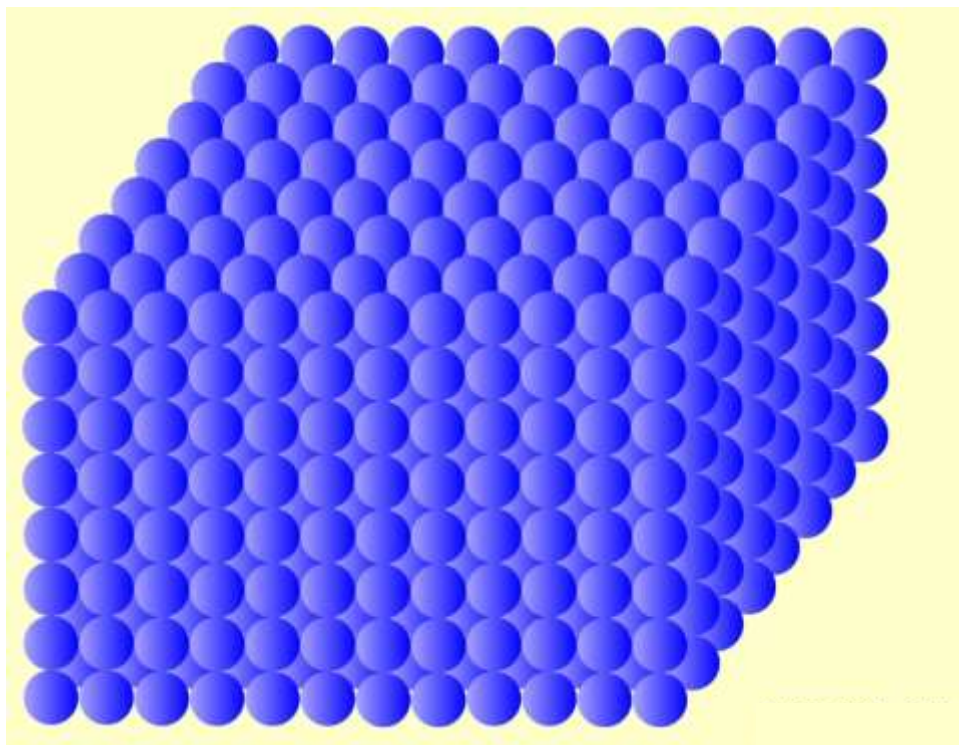
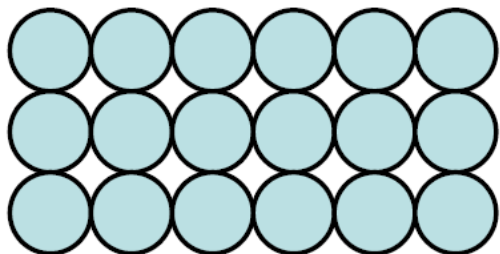
晶格 —— 晶体中原子排列的具体形式

原子、原子间距不同，但有相同排列规则，这些原子构成的晶体具有相同的晶格，如Cu和Ag； Ge和Si等等

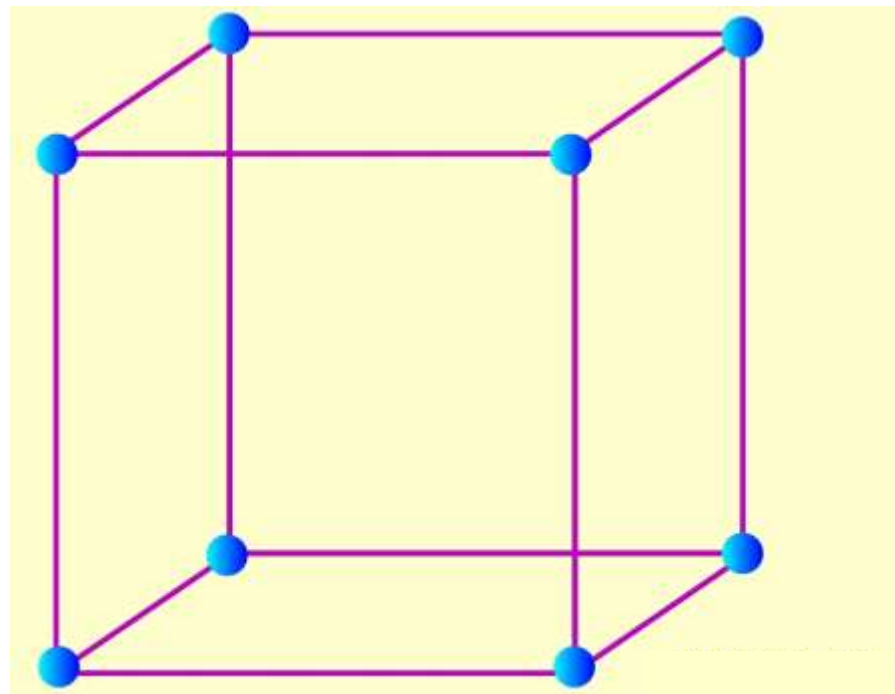
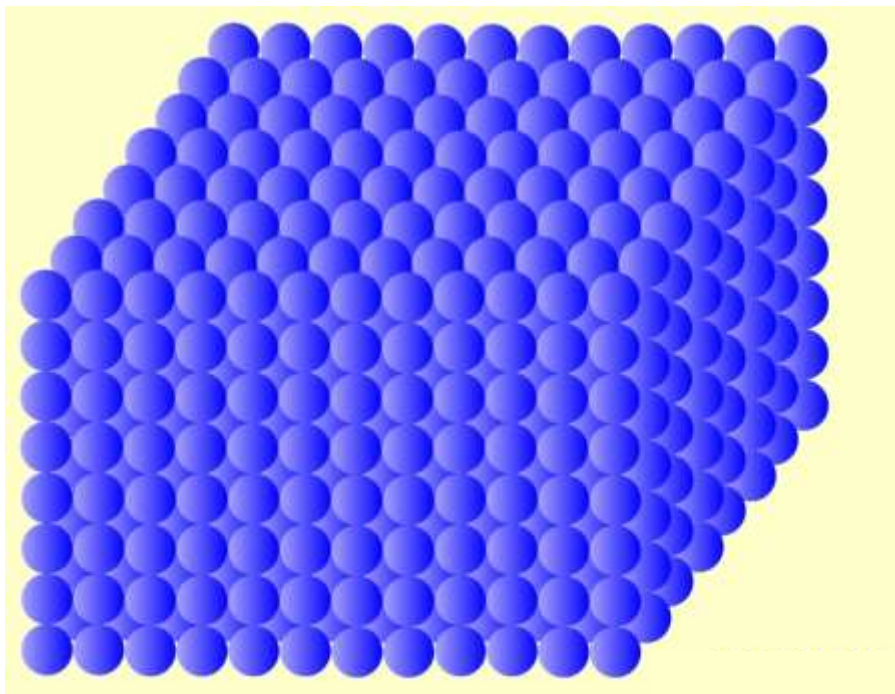
1. 简单立方晶格

—— 原子球在一个平面内呈现为**正方**排列

—— 平面的原子层叠加起来得到**简单立方格子**

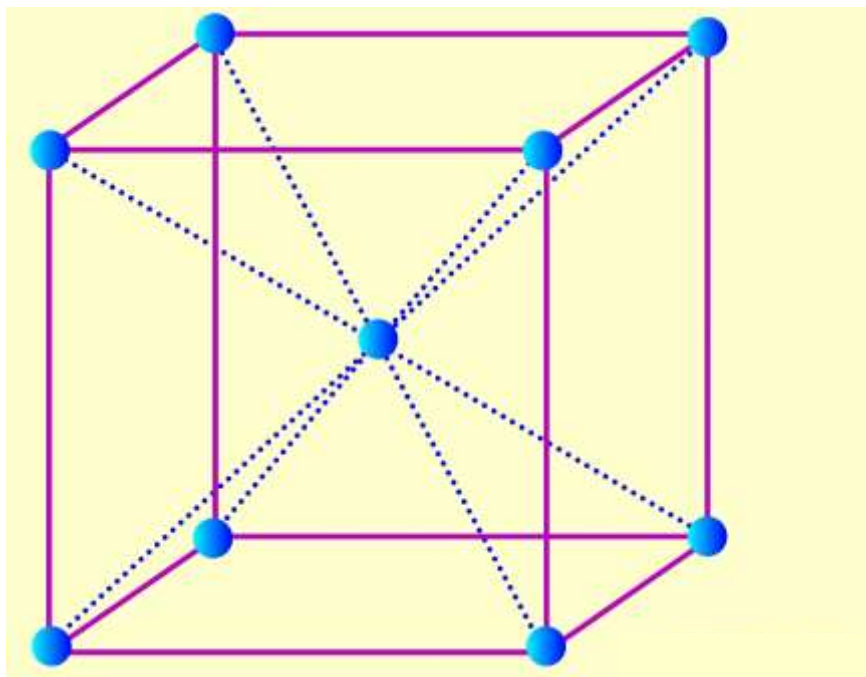


用圆点表示原子的位置——得到简单立方晶格结构

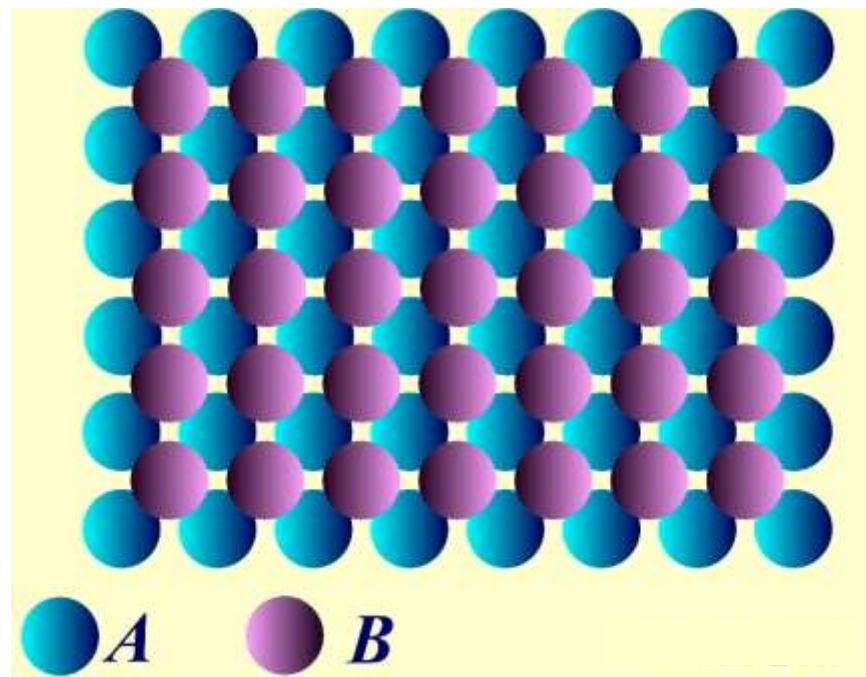


2. 体心立方晶格

体心立方晶格

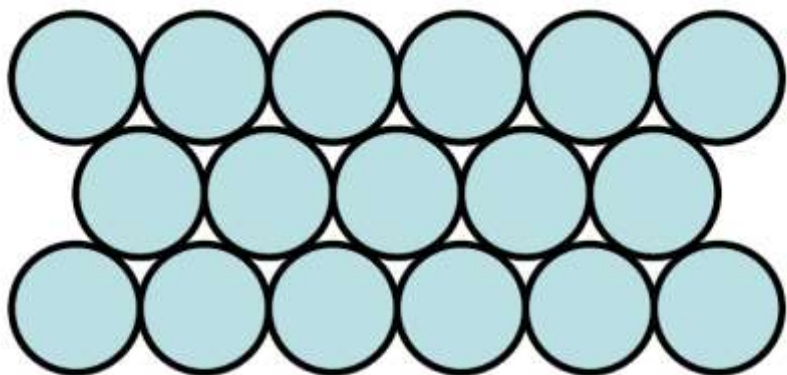


原子球排列形式



体心立方原子球排列方式表示为 AB AB AB

密排堆积

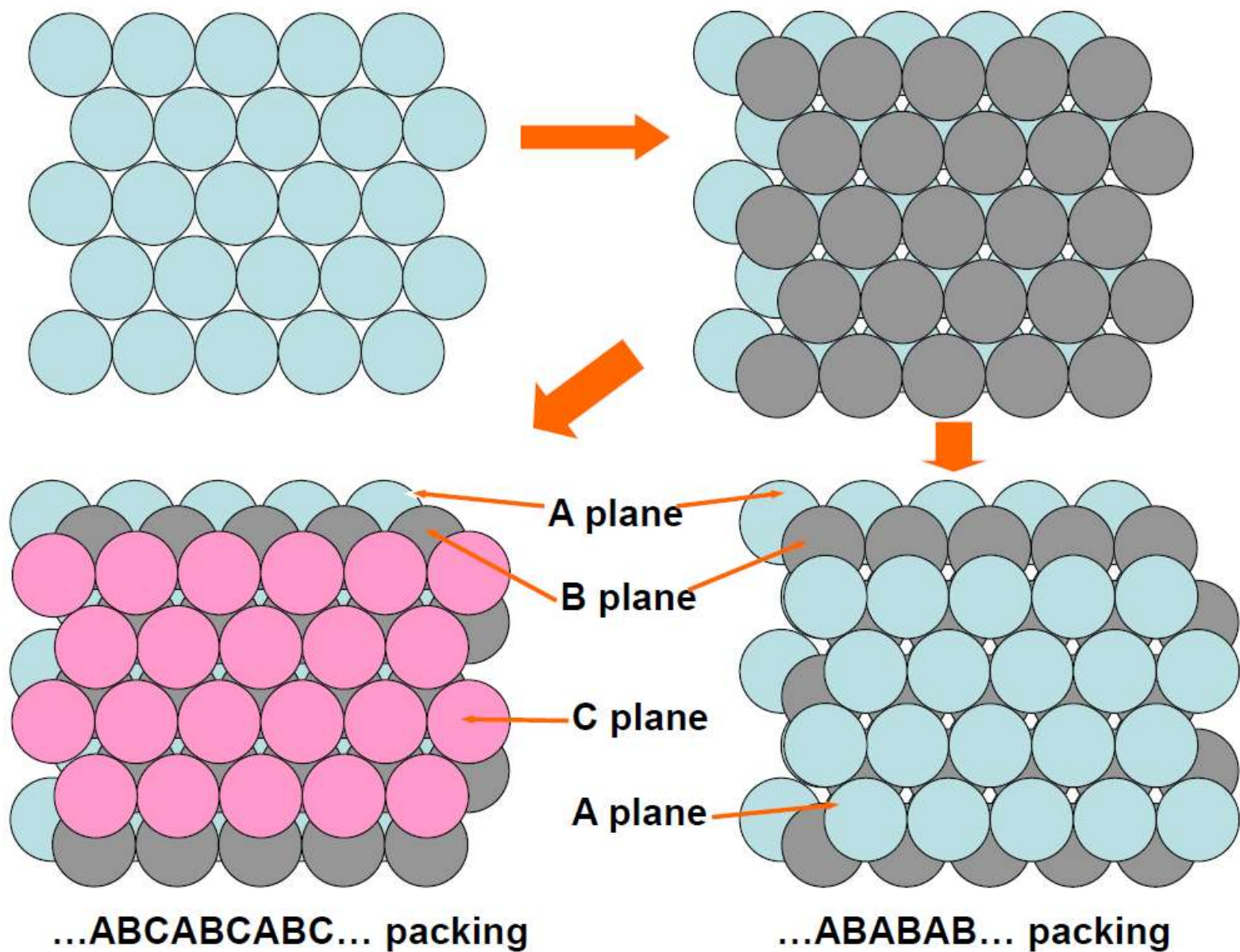


二维密排堆积



密排堆积——晶体由同一种粒子组成，将粒子看作小圆球
这些全同的小圆球最紧密的堆积

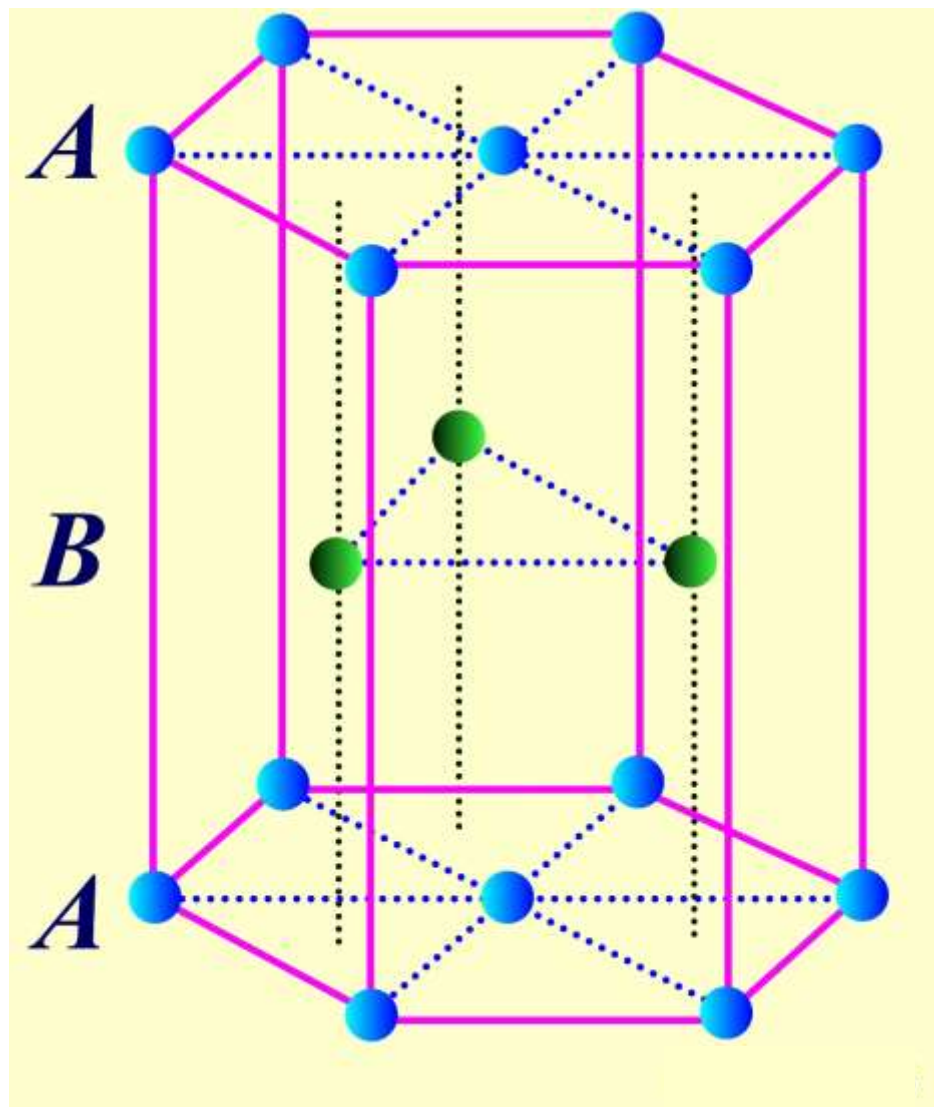
两种密排堆积方式



原子球排列为：AB AB AB

3. 六角密排晶格

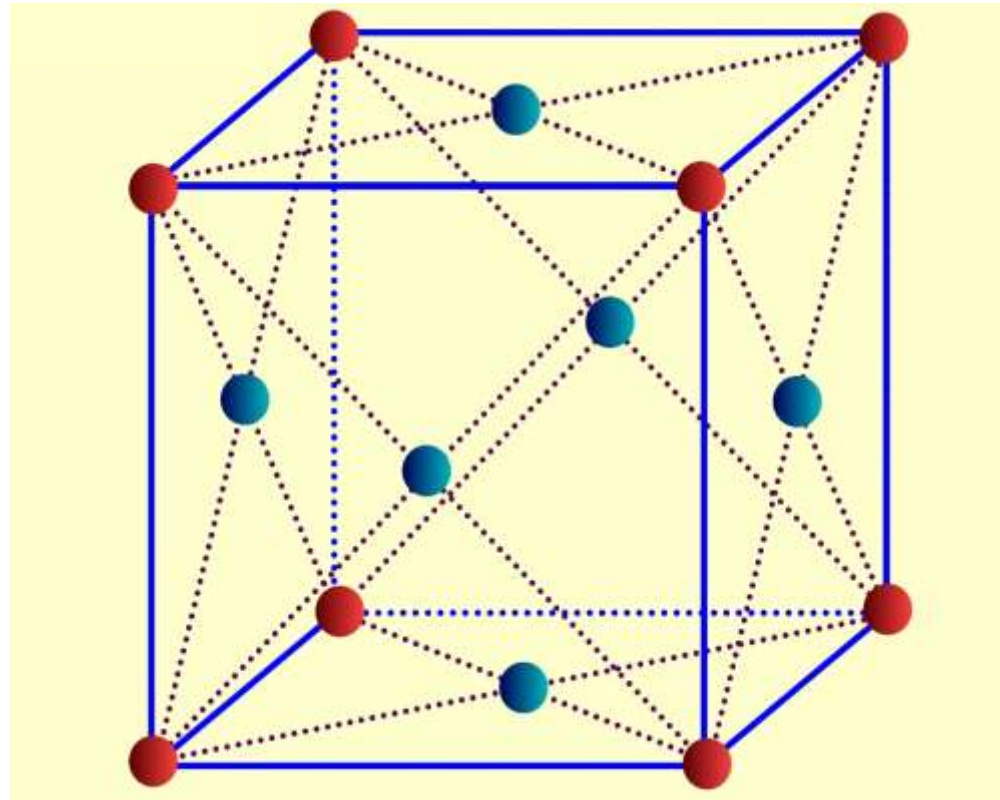
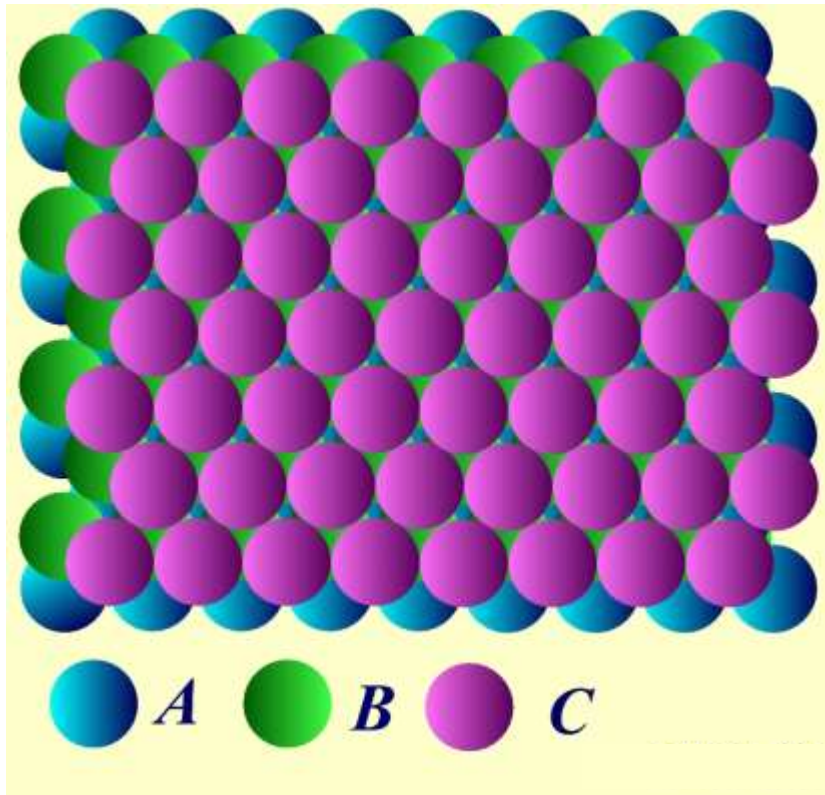
Be、Mg、Zn、Cd



原子球排列为：ABC ABC ABC

4. 面心立方晶格

Cu、Ag、Au、Al

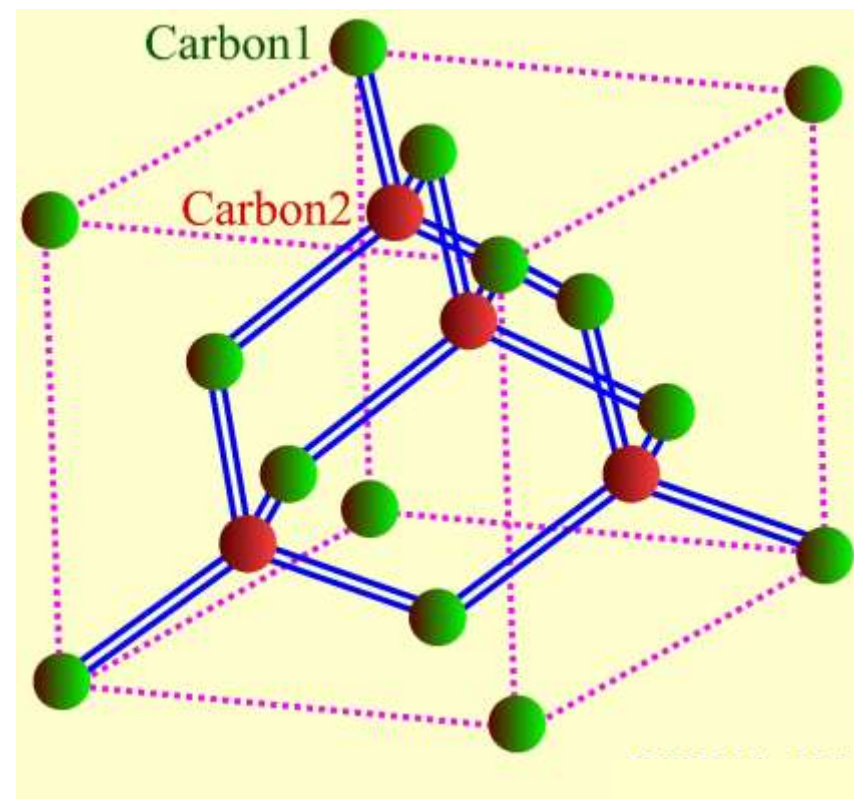


5. 金刚石晶格结构

—— 碳原子构成的一个面心立方原胞内还有四个原子，分别位于四个空间对角线的 $1/4$ 处

—— 一个碳原子和其它四个碳原子构成一个正四面体

—— 金刚石结构的半导体晶体
Ge、Si等

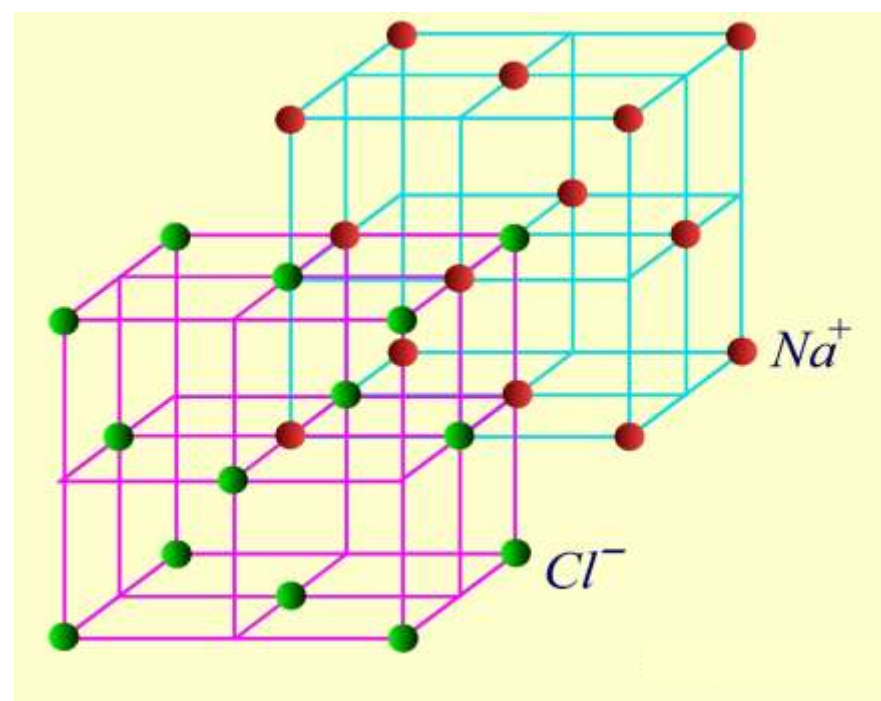
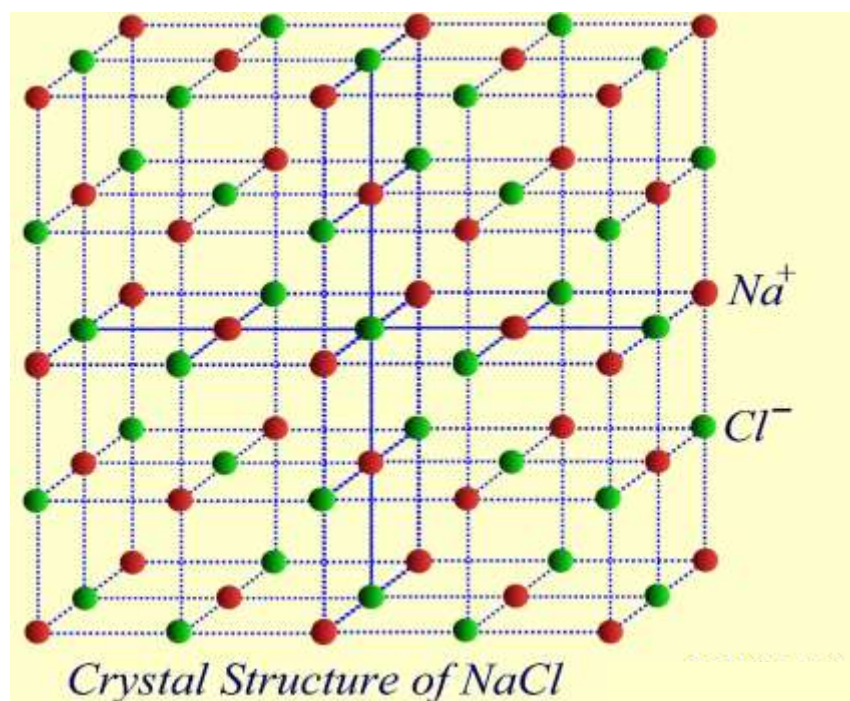


6. 几种化合物晶体的晶格

1) NaCl晶体的结构

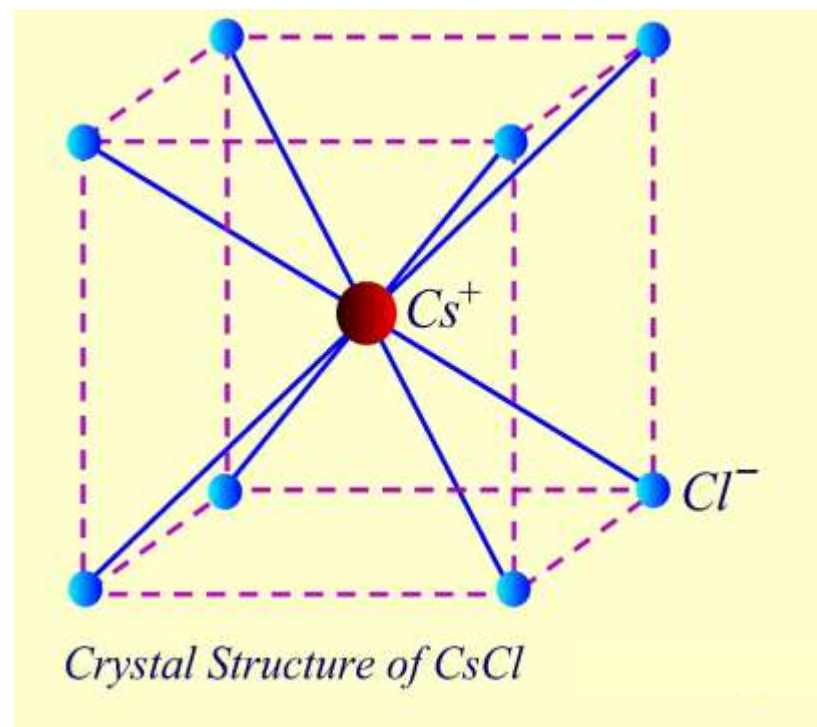
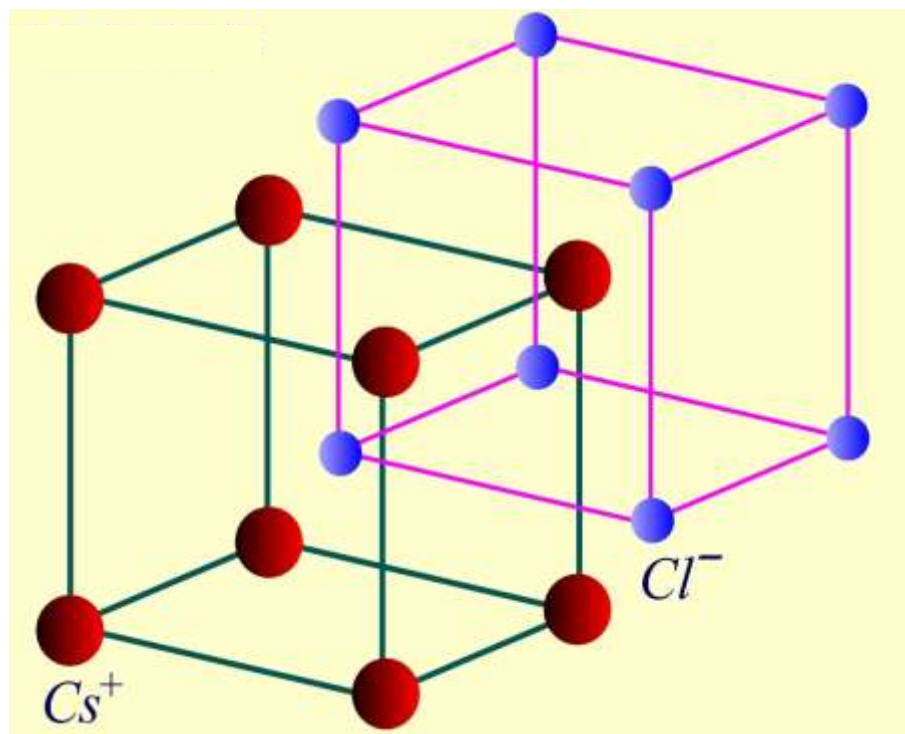
氯化钠由 Na^+ 和 Cl^- 结合而成，是一种典型的离子晶体

Na^+ 构成面心立方格子； Cl^- 也构成面心立方格子



2) CsCl晶体的结构

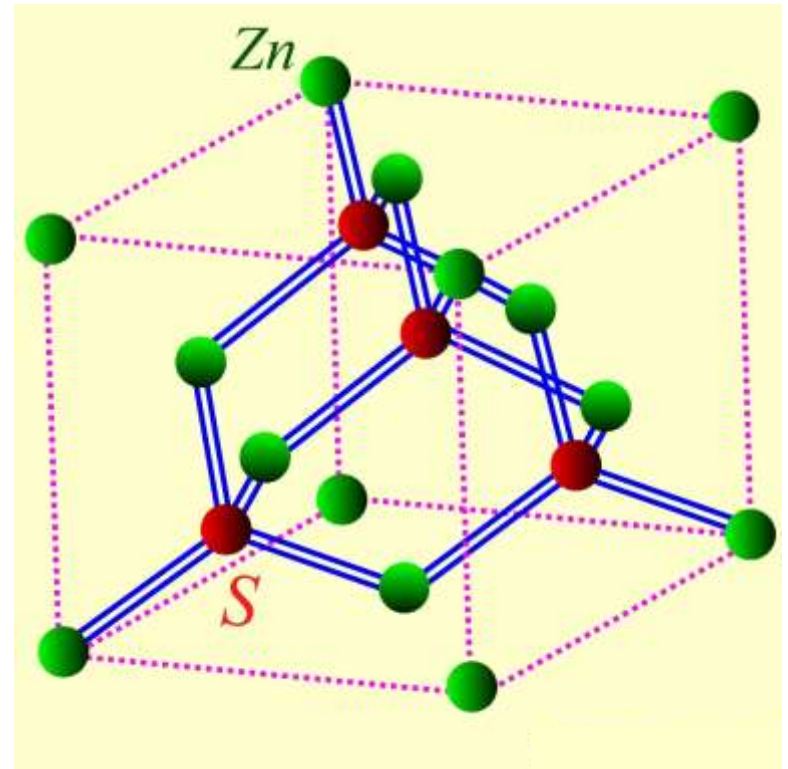
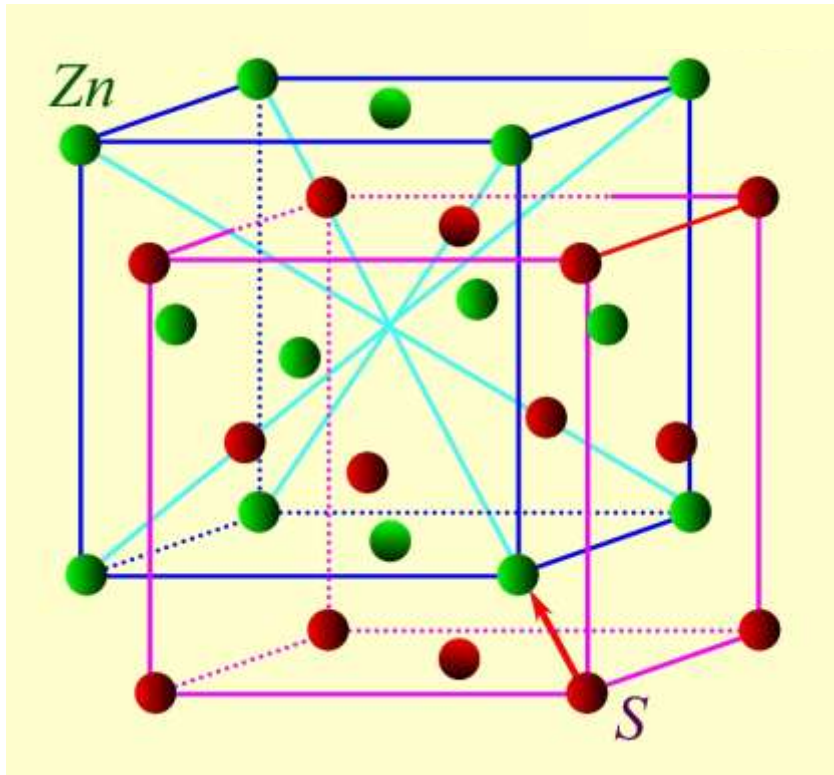
CsCl结构 —— 由两个简单立方子晶格彼此沿立方体空间对角线位移 $1/2$ 的长度套构而成



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

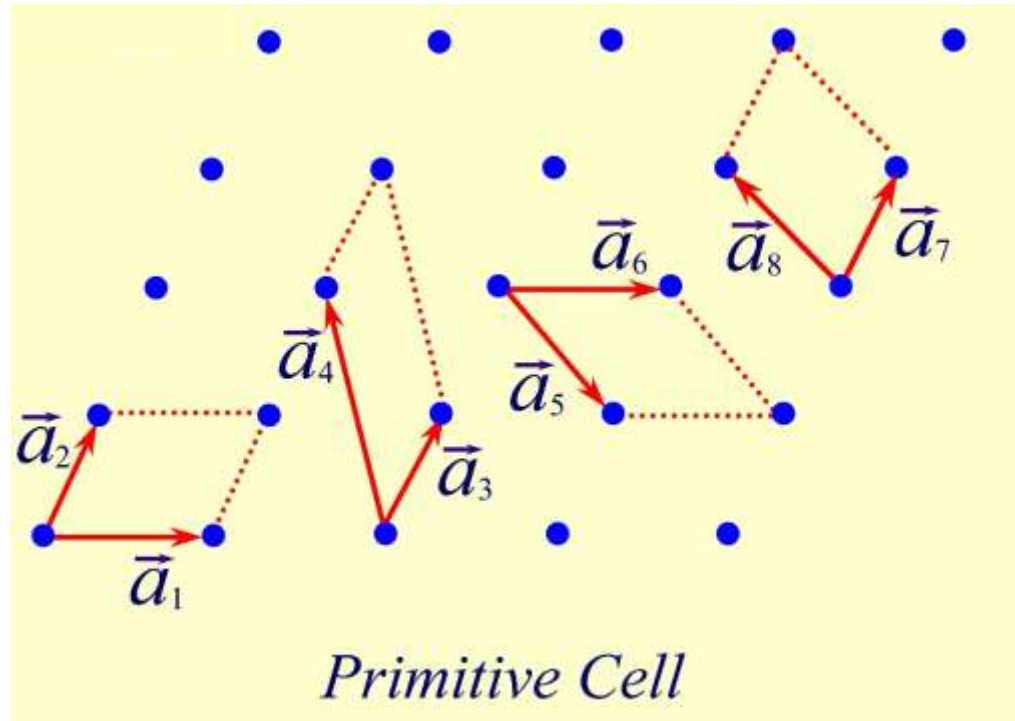
晶格共同特点 —— 周期性，可以用原胞和基矢来描述

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

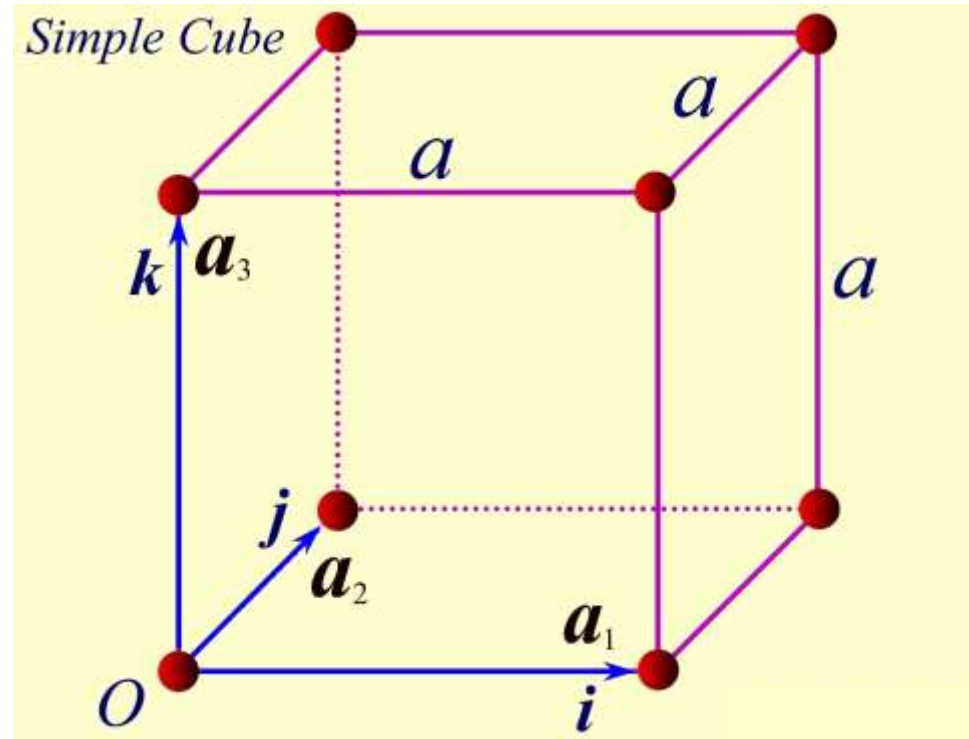
基矢

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

原胞体积

$$\Omega = a^3$$

—— 原胞中只包含一个原子



2) 面心立方晶格

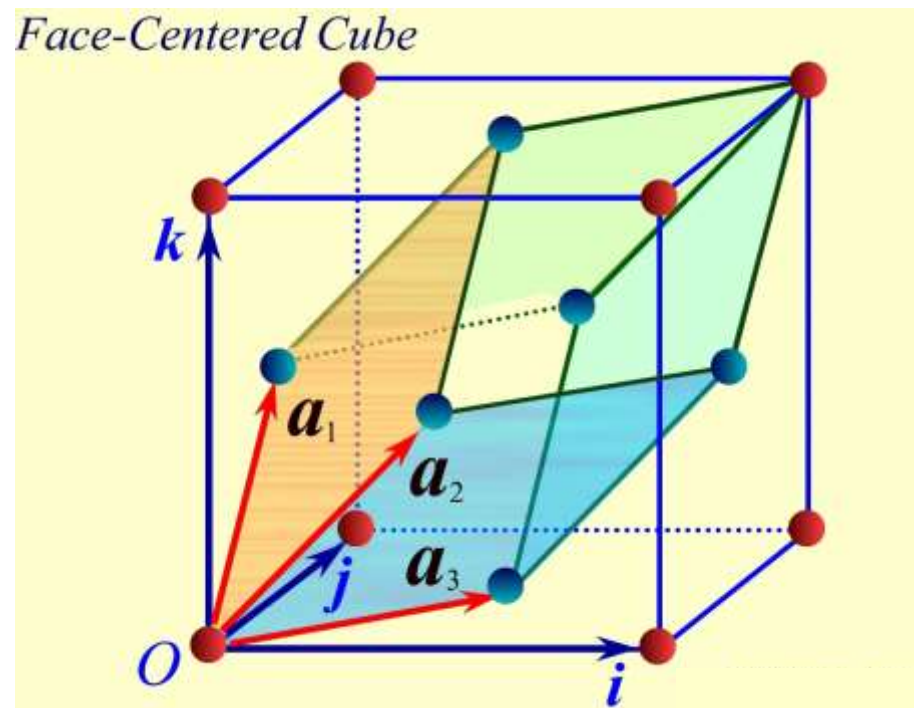
立方体的顶点到三个近邻的面心引三个基矢

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

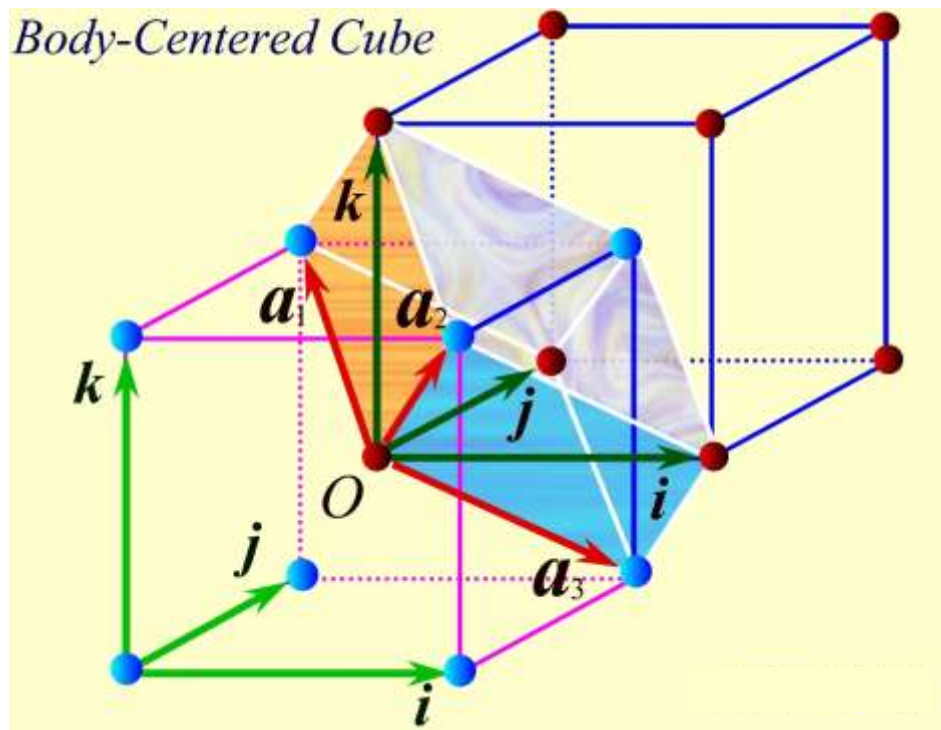
由立方体的中心到三个顶点引三个基矢

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

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



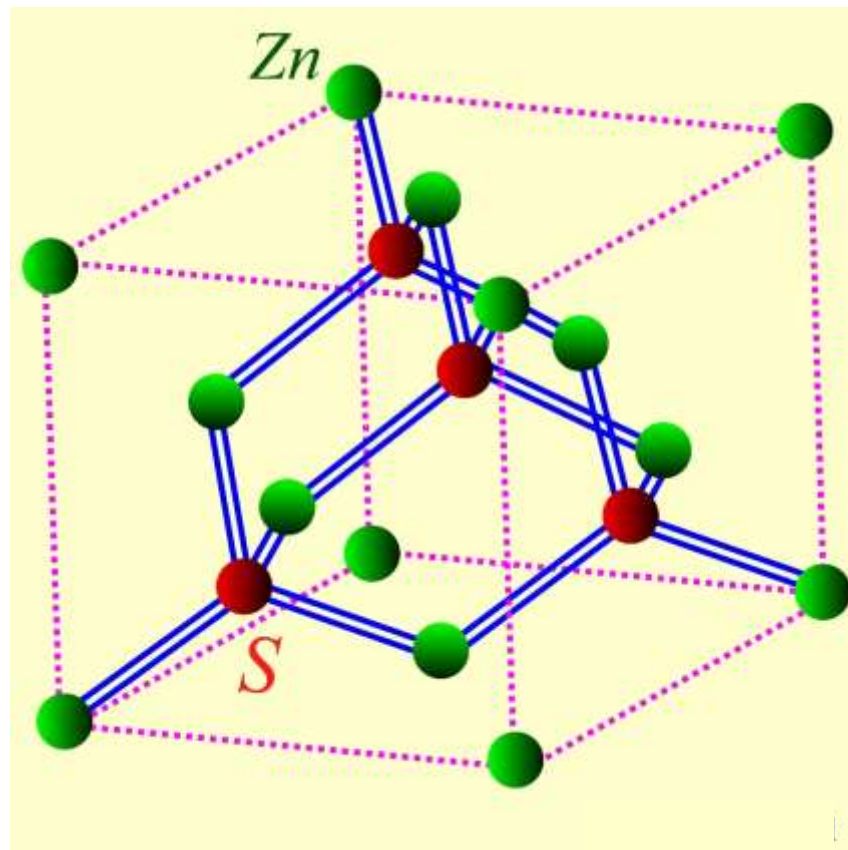
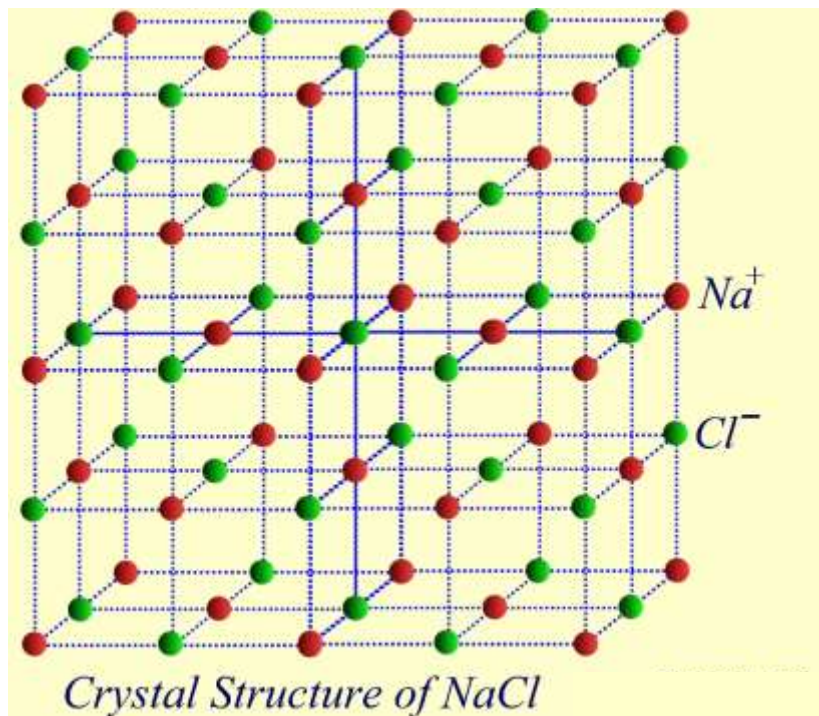
—— 原胞中只包含一个原子

3. 复式晶格

—— 复式格子包含两种或两种以上的等价原子

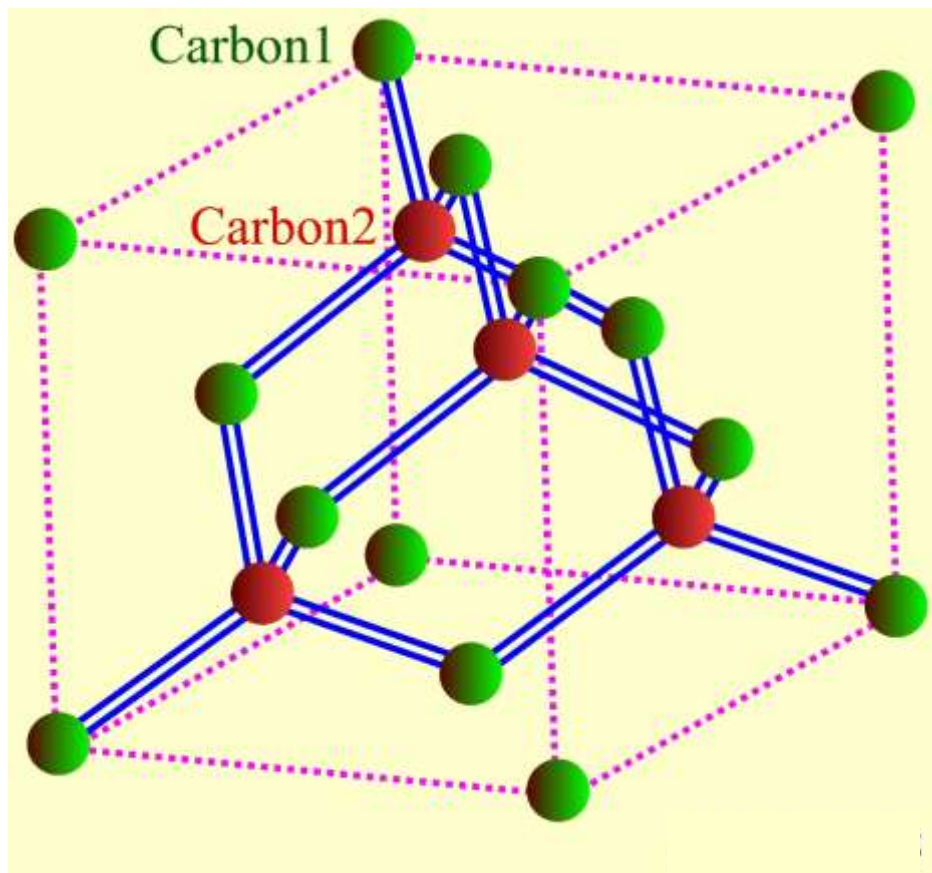
1) 不同原子或离子构成的晶体

NaCl、CsCl、ZnS等

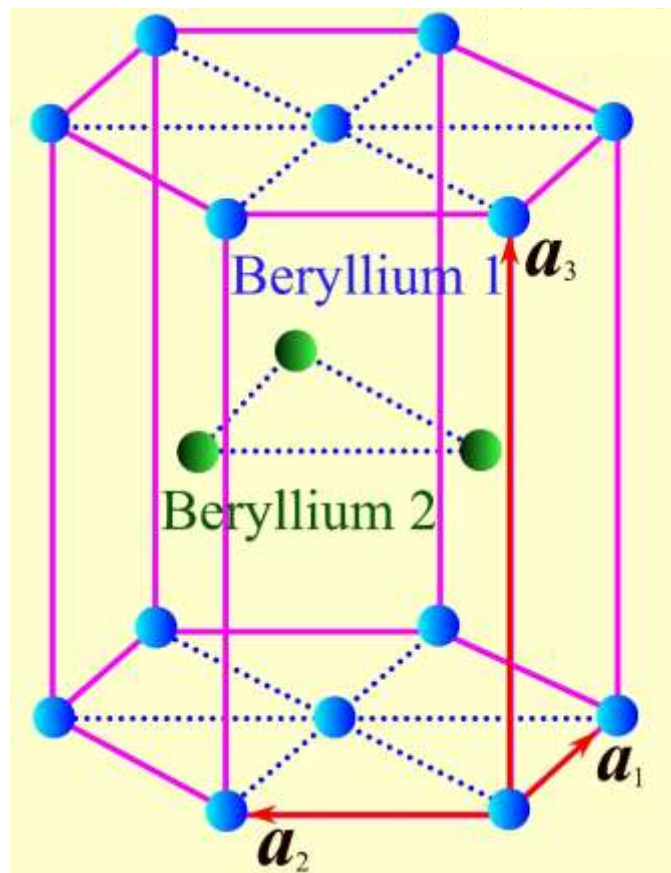


2) 相同原子但几何位置不等价的原子构成的晶体

金刚石结构的C、Si、Ge

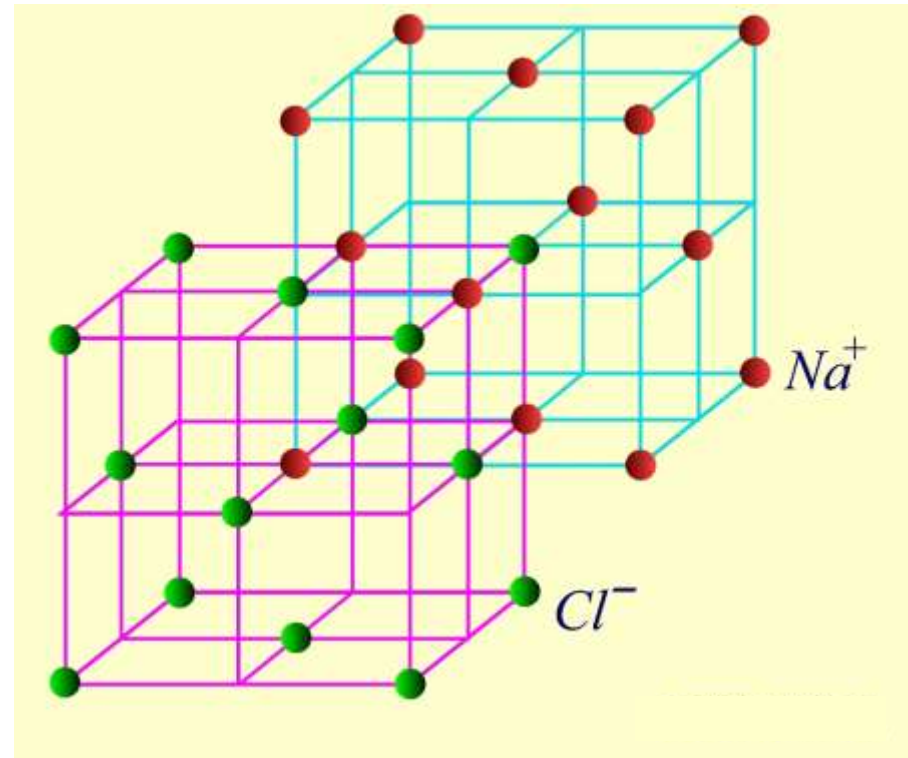
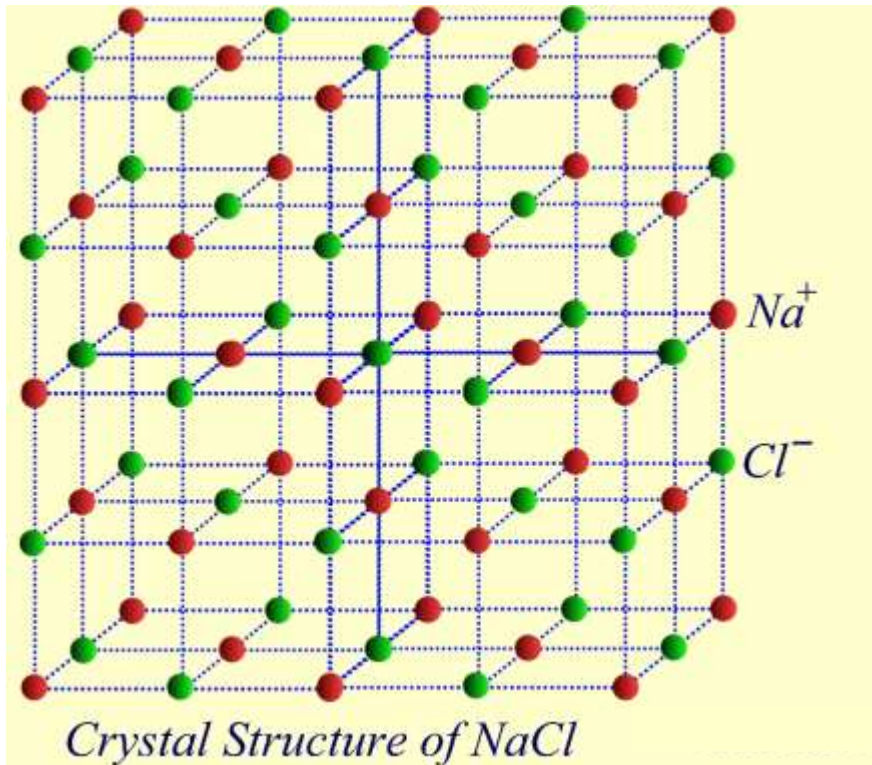


六角密排结构Be、Mg、Zn



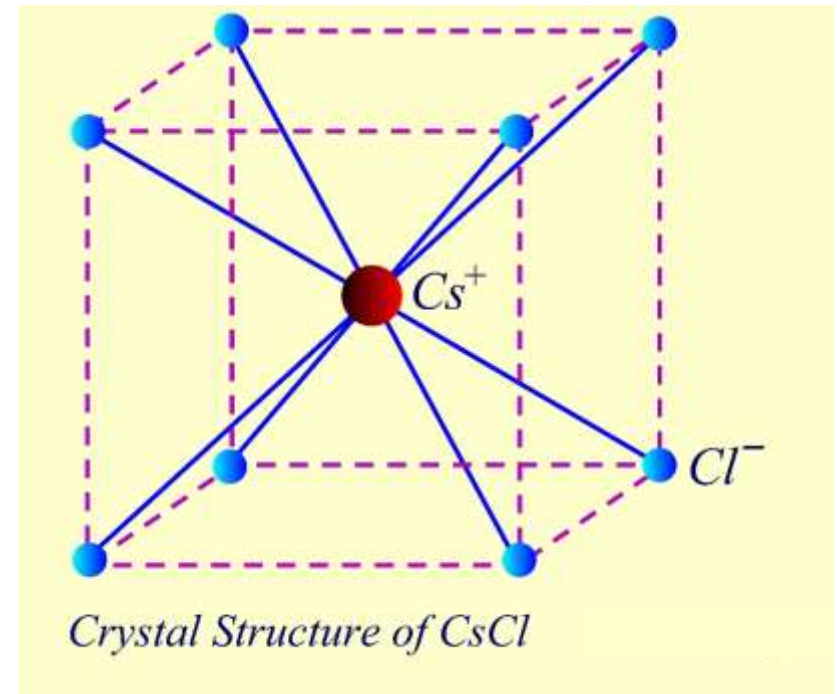
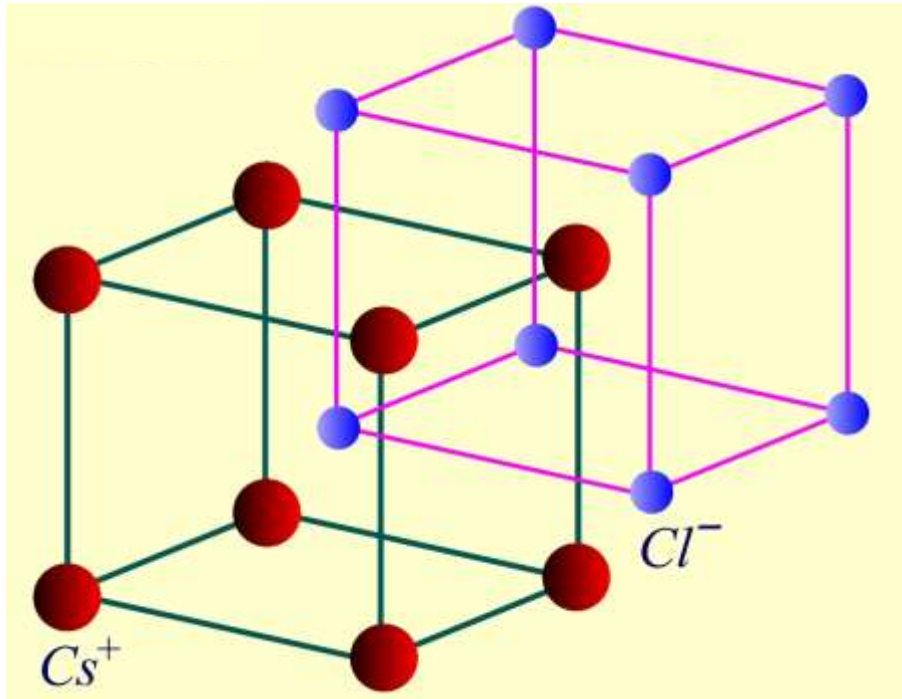
3) 复式格子的特点：不同等价原子各自构成相同的简单晶格（子晶格），复式格子由它们的子晶格相套而成

NaCl晶格 —— Na^+ 和 Cl^- 各有一个相同的面心立方晶格



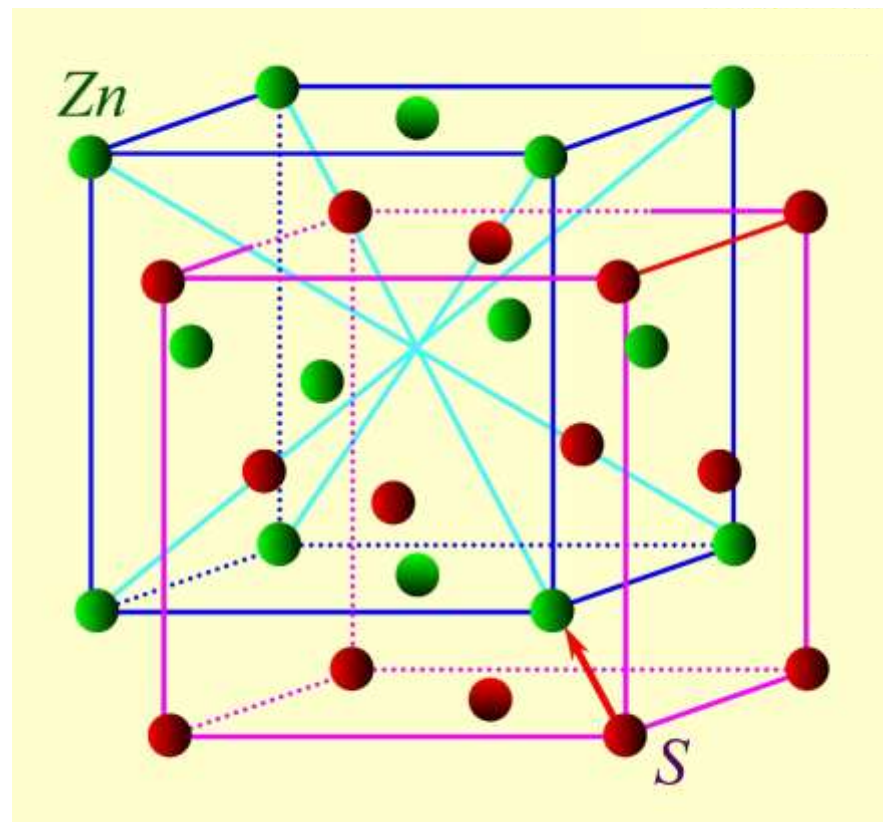
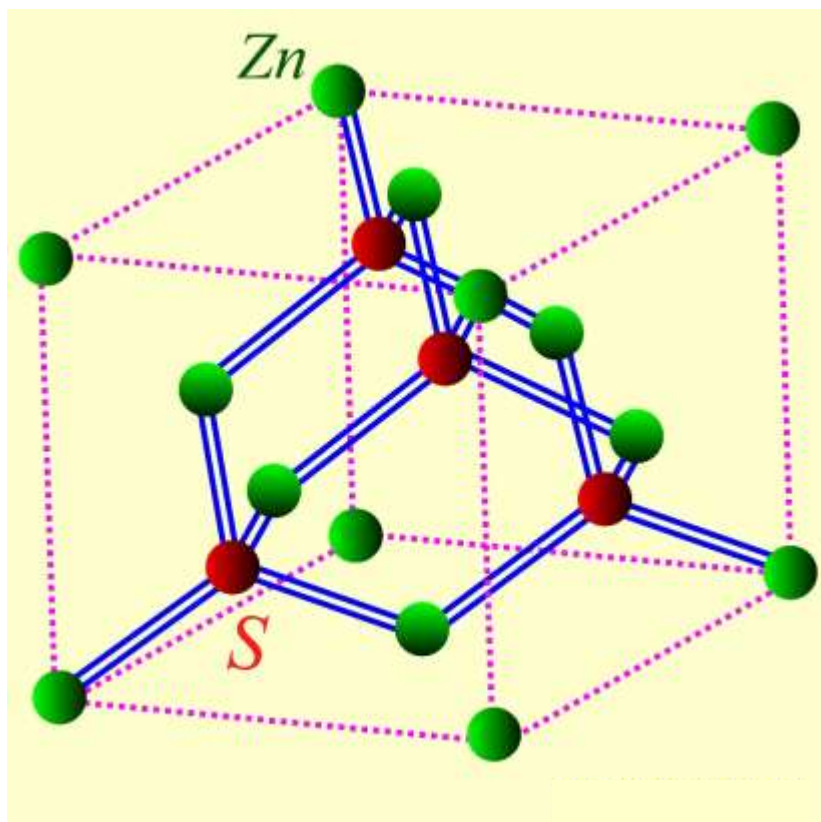
CsCl的复式晶格

—— 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



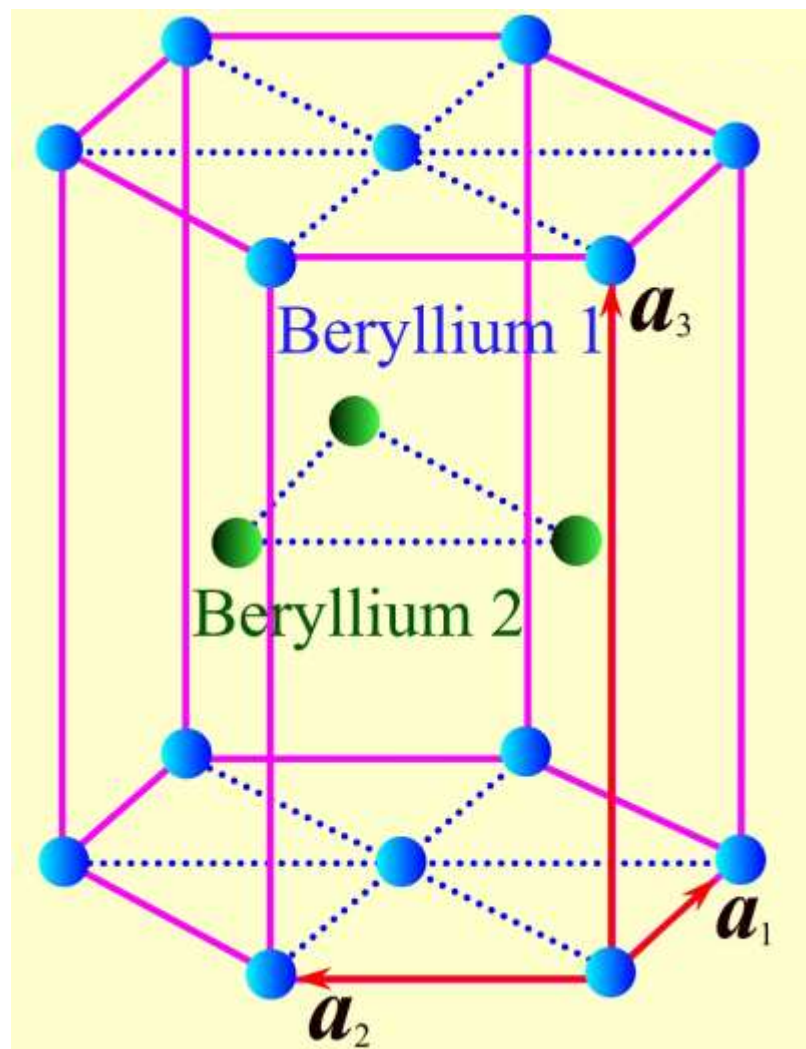
ZnS的复式晶格

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

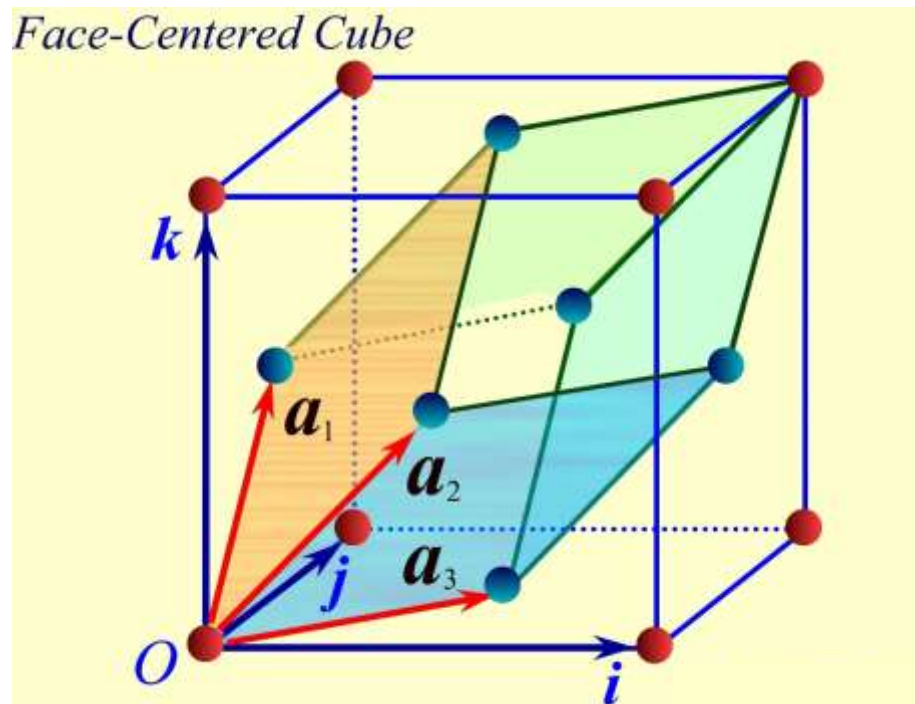
单胞基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

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

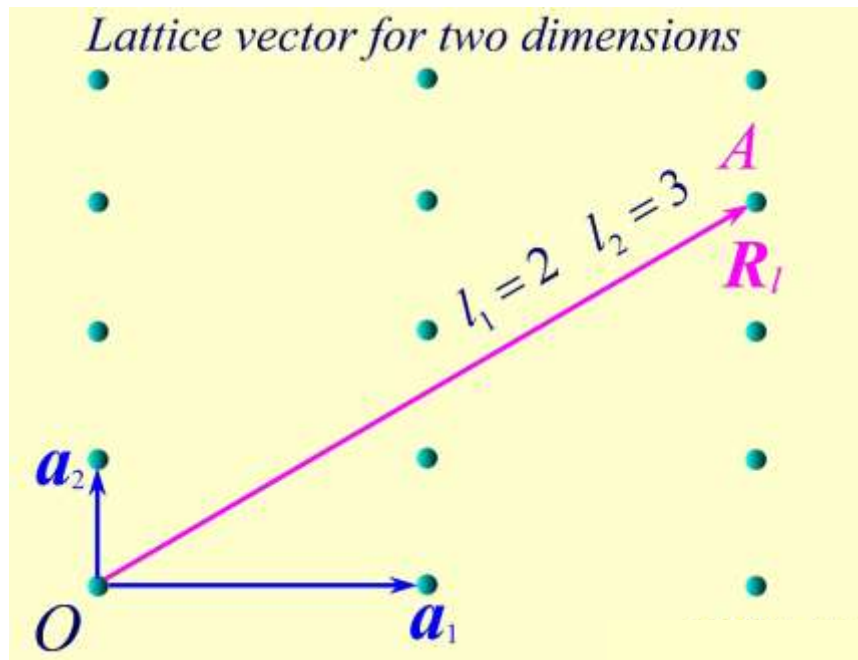
面心立方晶格 —— 单胞不是原胞



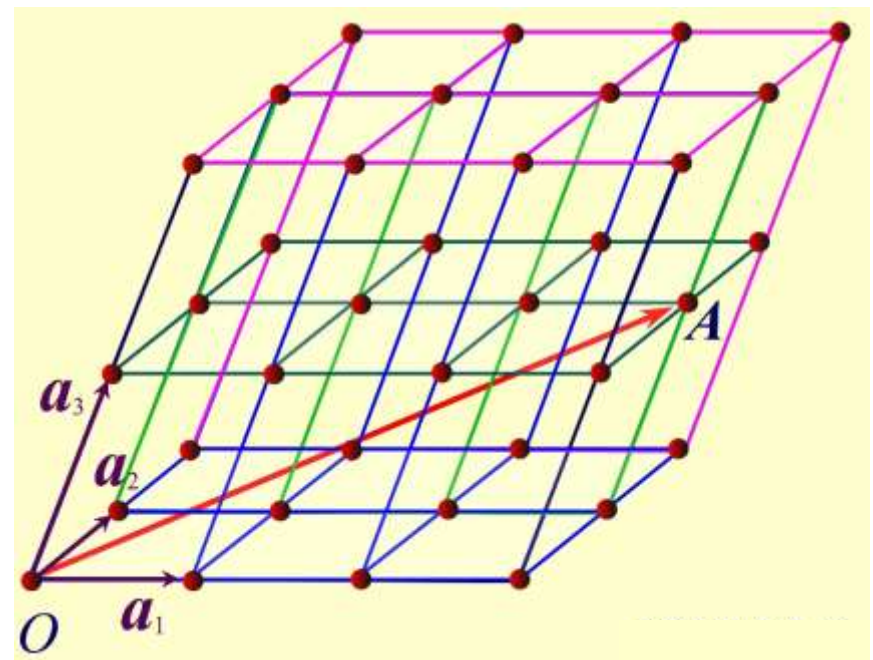
4. 晶格周期性的数学描述 —— 布拉伐格子

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



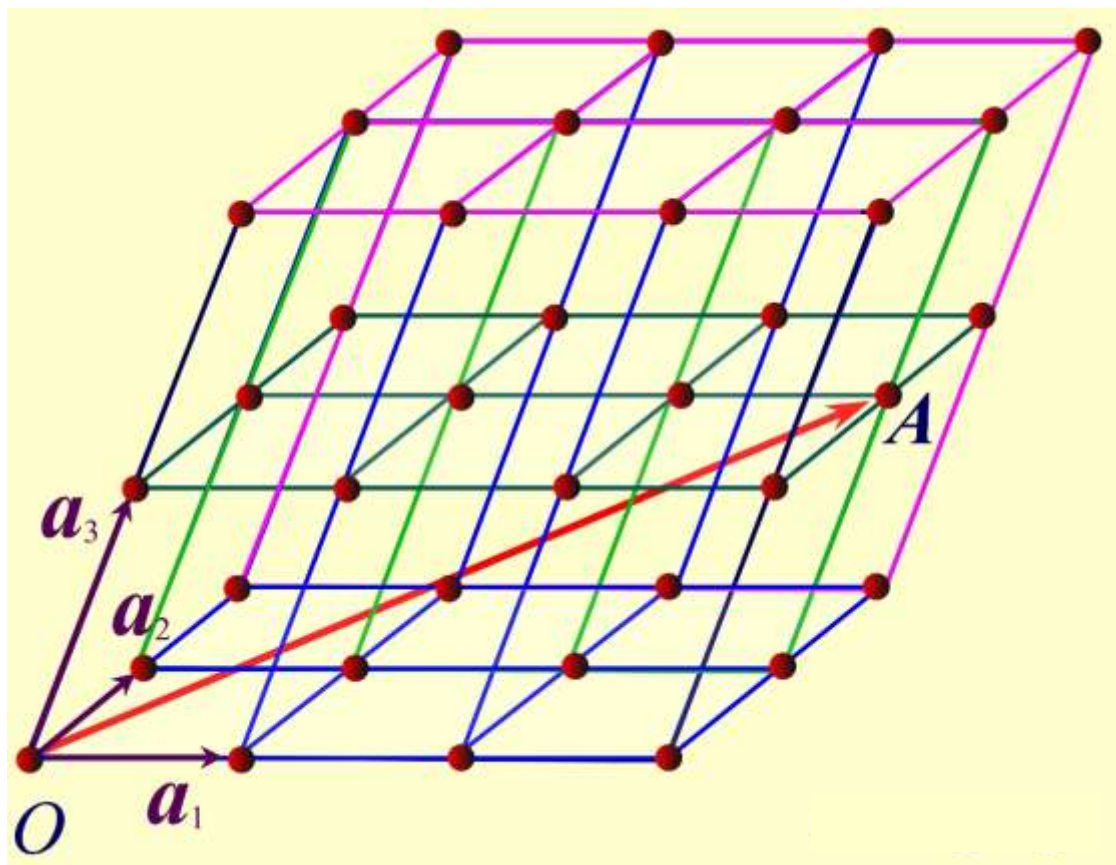
可以用 $l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$ 表示一个空间格子

—— 一组 l_1, l_2, l_3 的取值可以囊括所有的格点

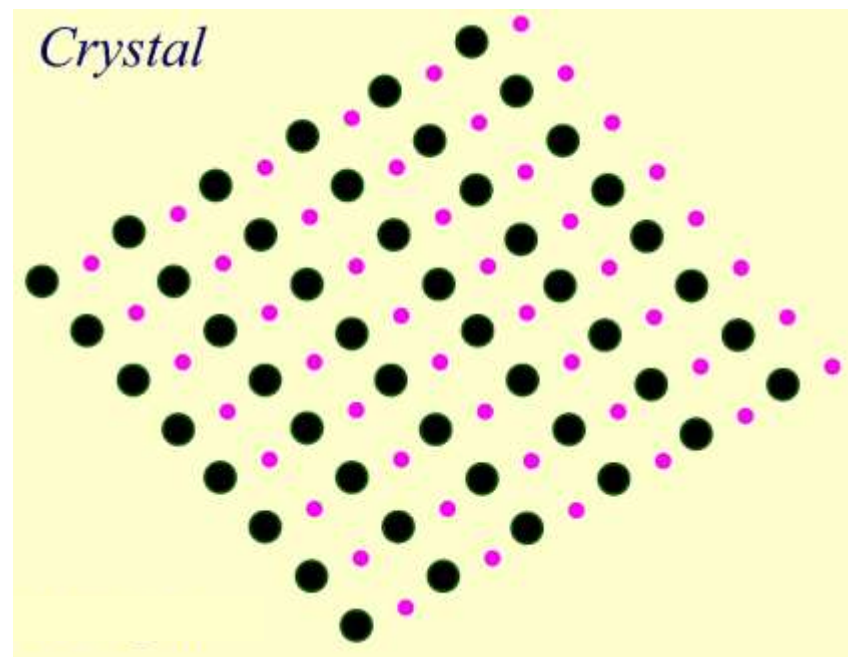
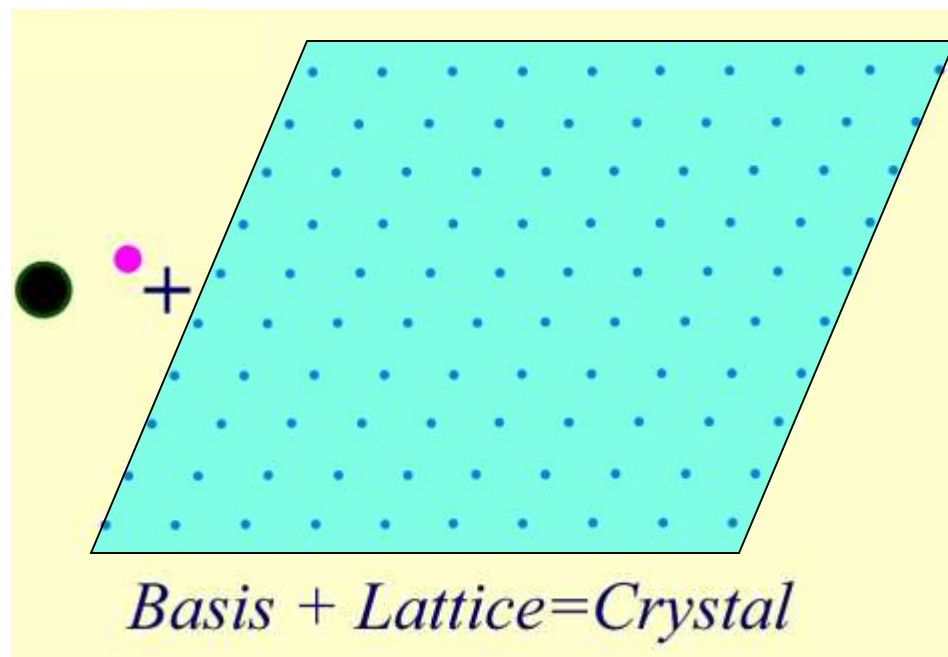
—— 布拉伐格子

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

确定的空间格子

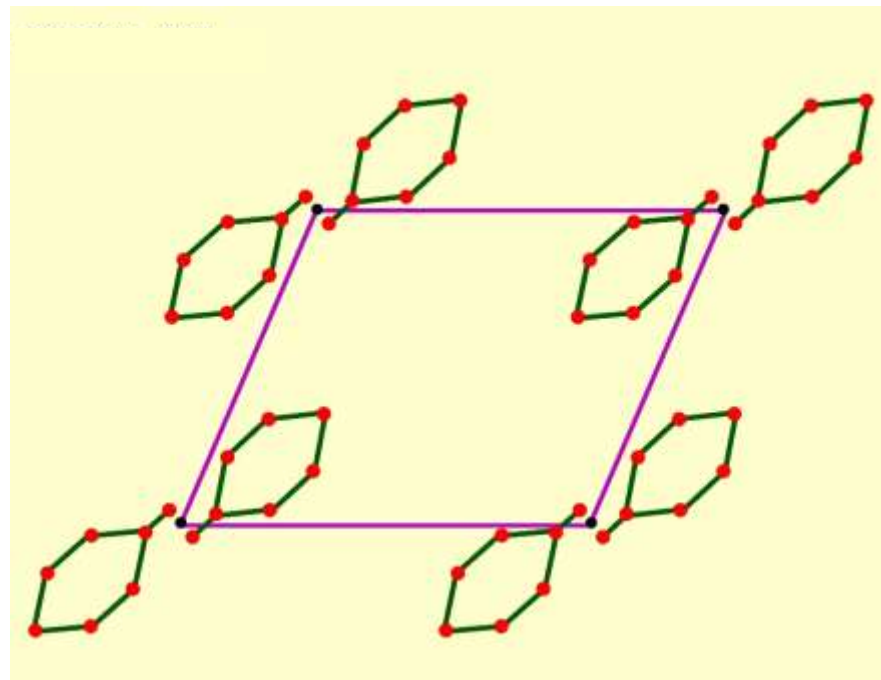
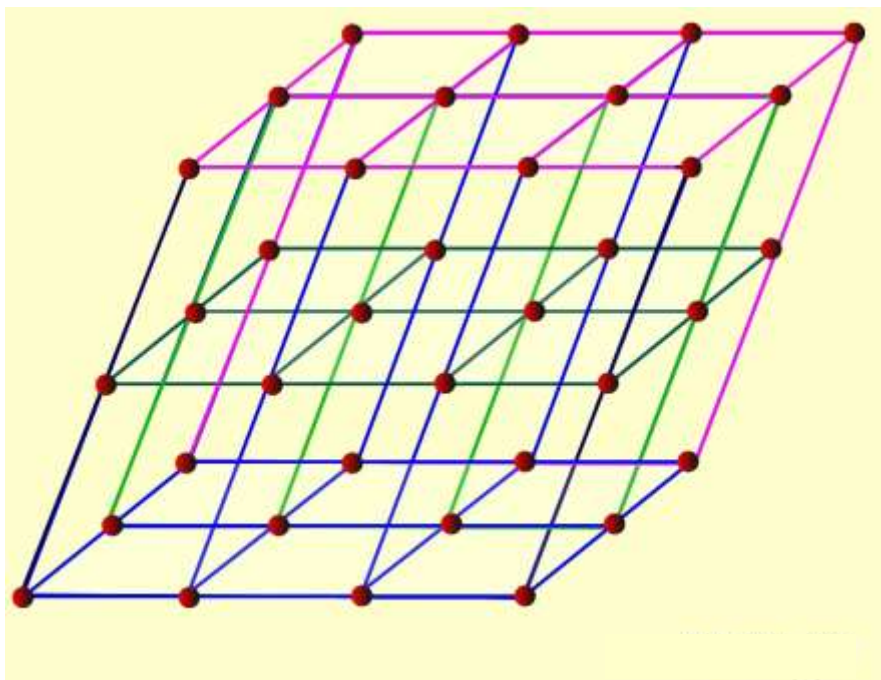


—— 晶体可以看作是在**布拉伐格子**（**Lattice**）的每一个格点上放上一组**原子基元**（**Basis**）构成的



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

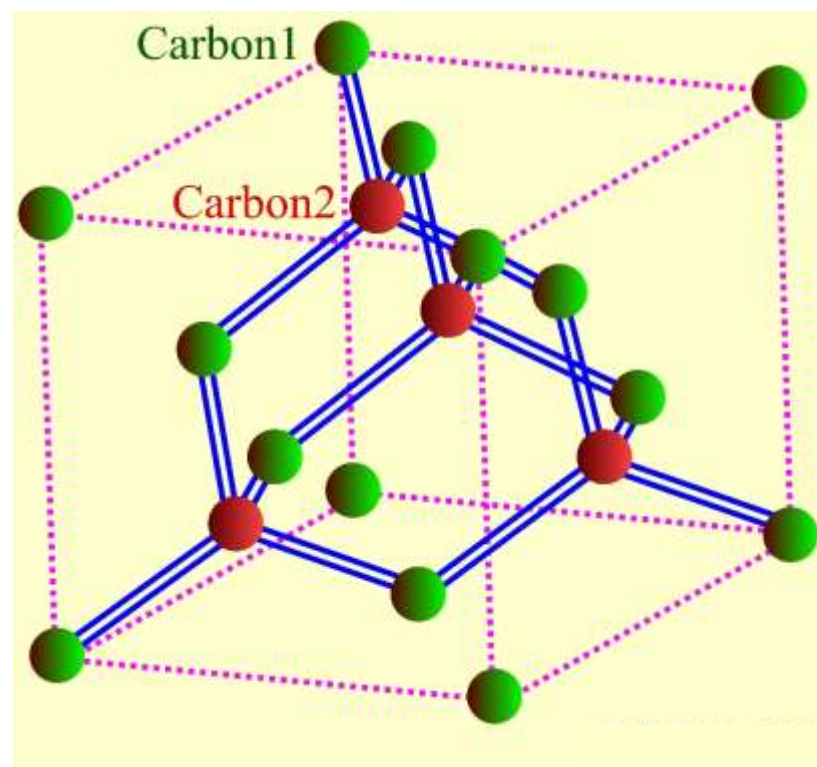
—— 碳1位置 $l_1 \vec{a}_1 + l_2 \vec{a}_2 + l_3 \vec{a}_3$

—— 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

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



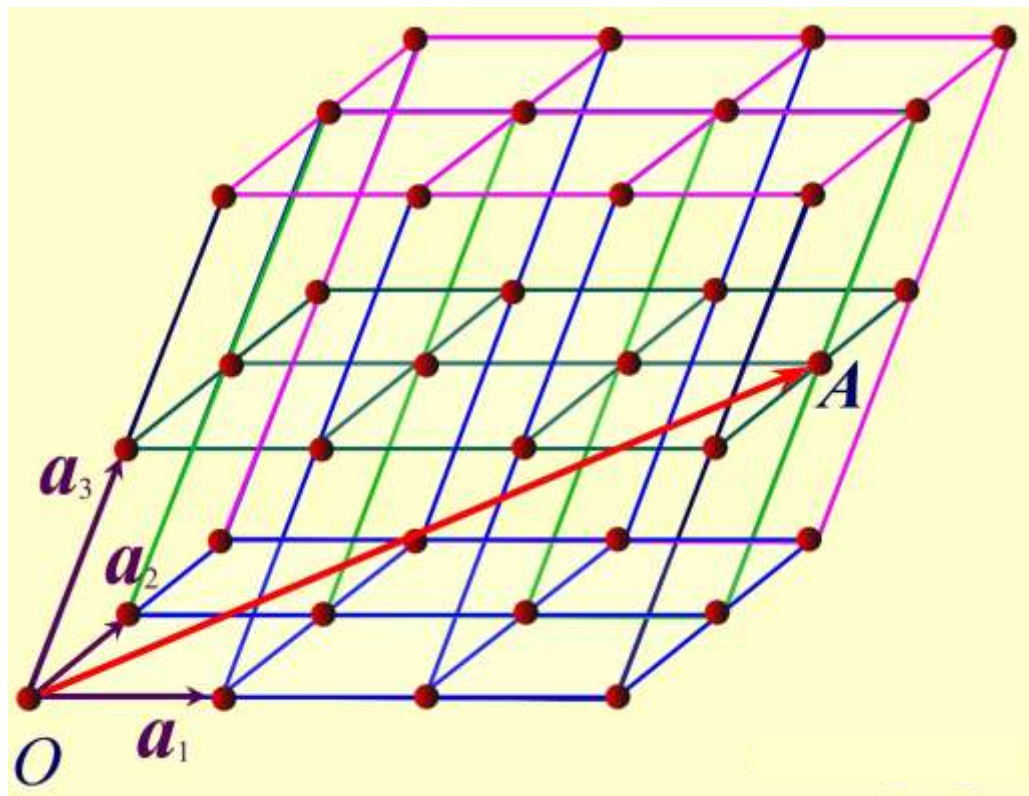
§ 1.3 晶向 晶面和它们的标志

布拉伐格子的特点 —— 所有格点周围的情况都是一样的

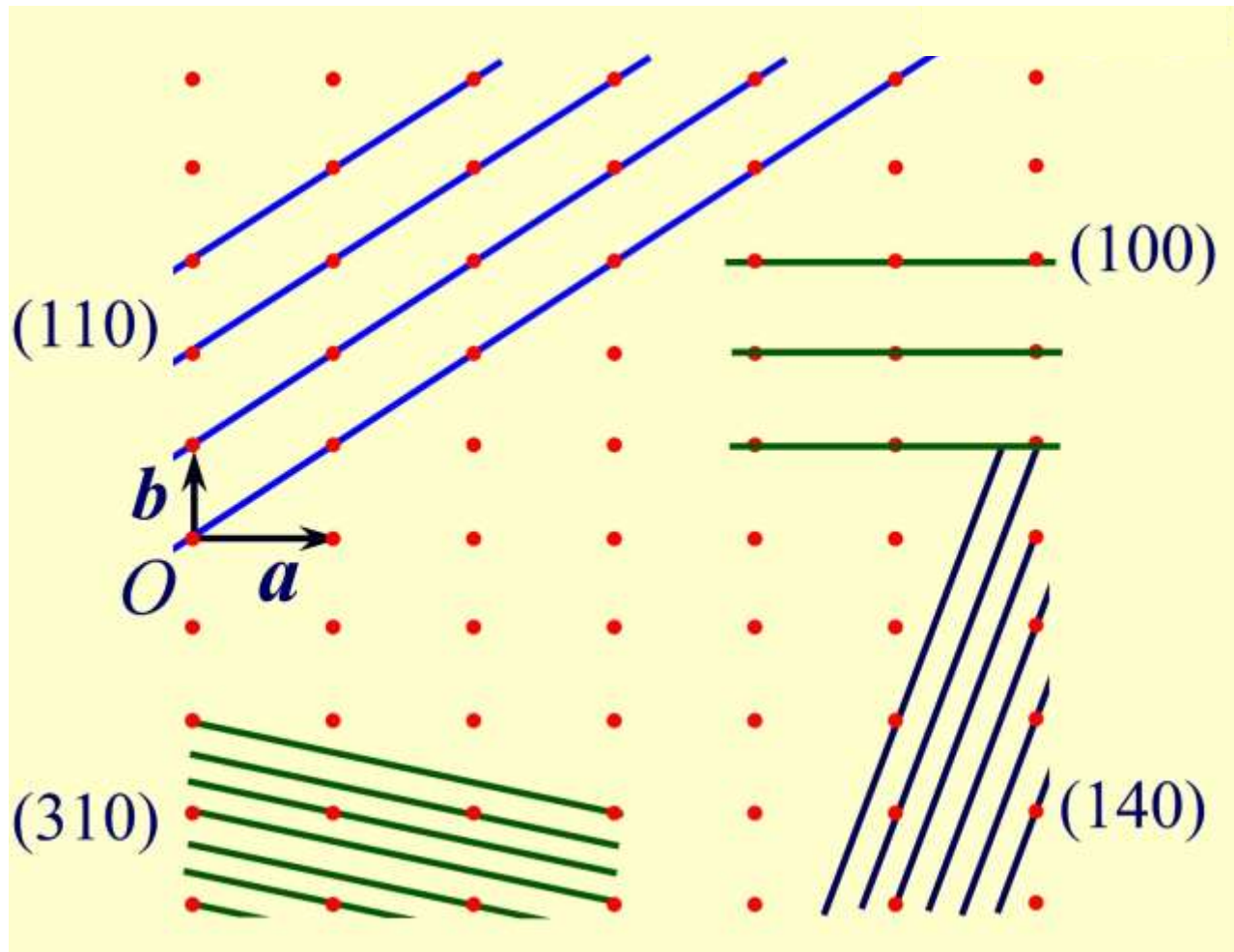
—— 晶体的晶列

—— 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

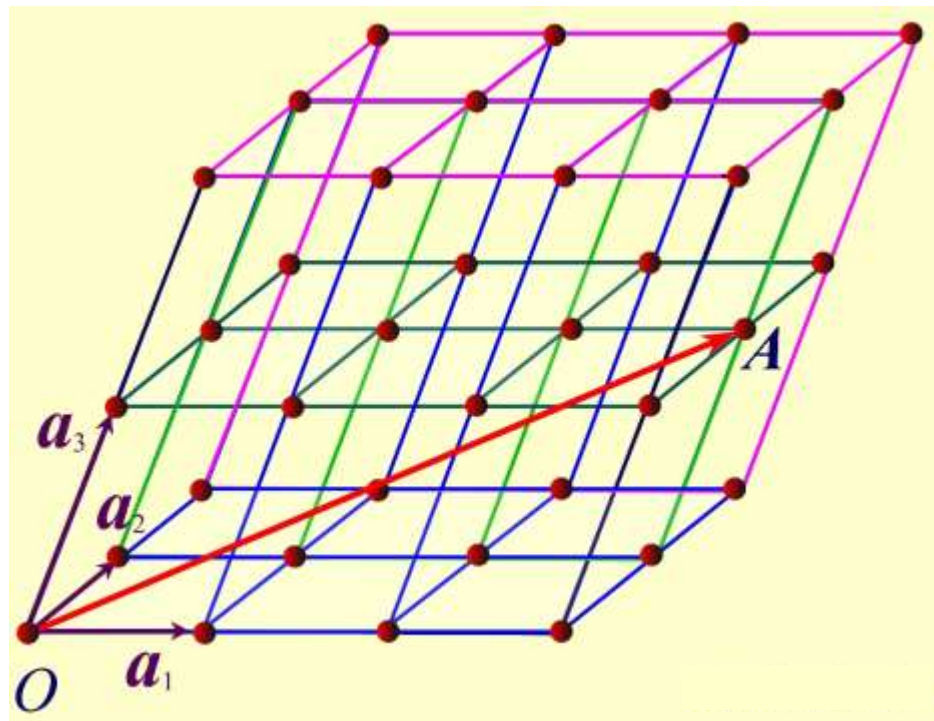
取某一原子为原点 O ，原胞的三个基矢 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

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

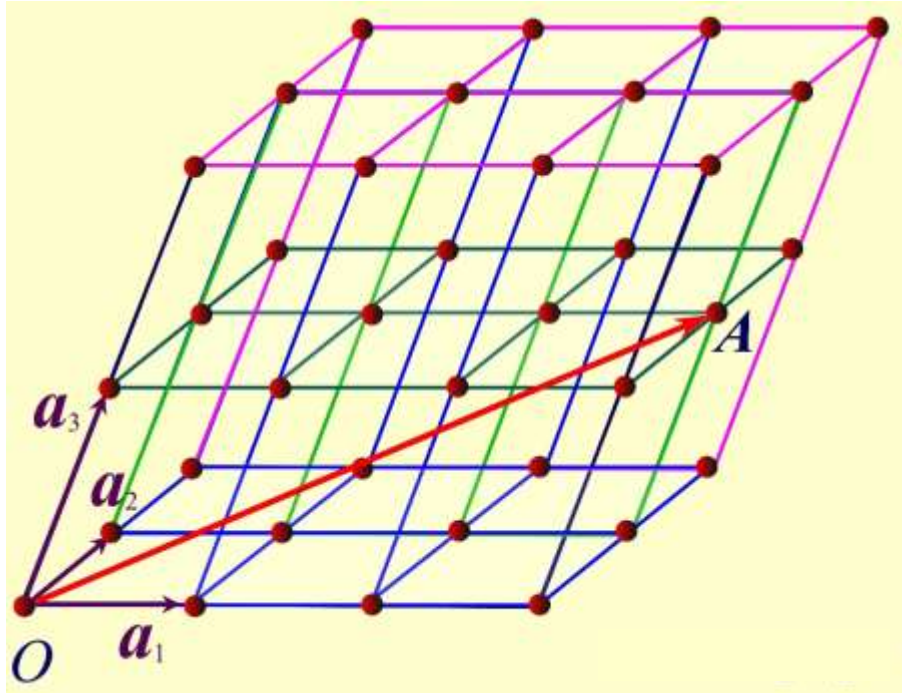
l_1, l_2, l_3 —— 一组整数

晶向指数 $[l_1 \ l_2 \ l_3]$

—— 对于单胞，也有类似的晶向指数

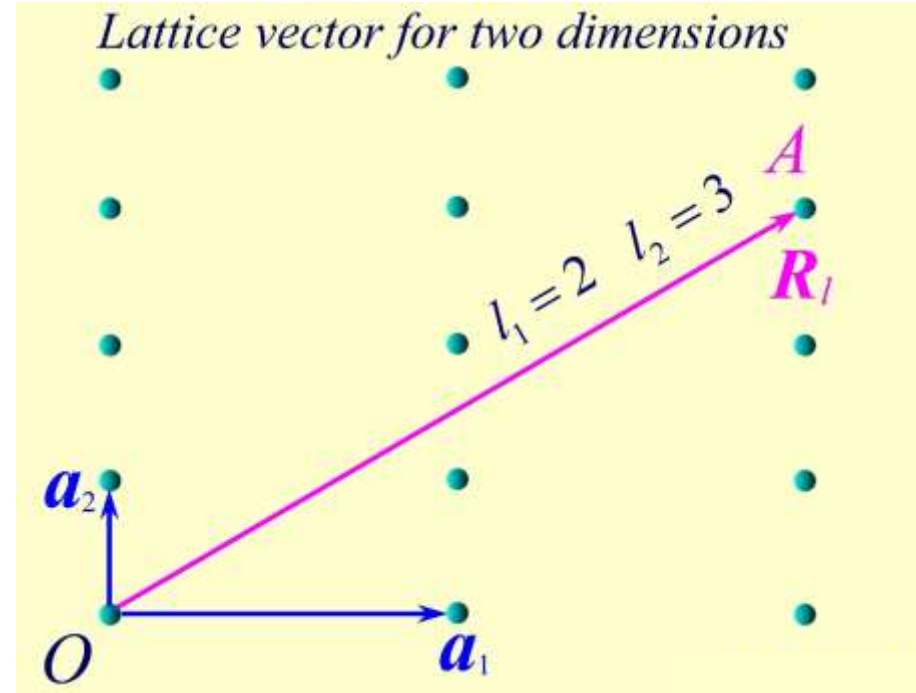


$$\vec{R}_A = 3\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3$$



晶向指数 [311]

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



晶向指数 [230]

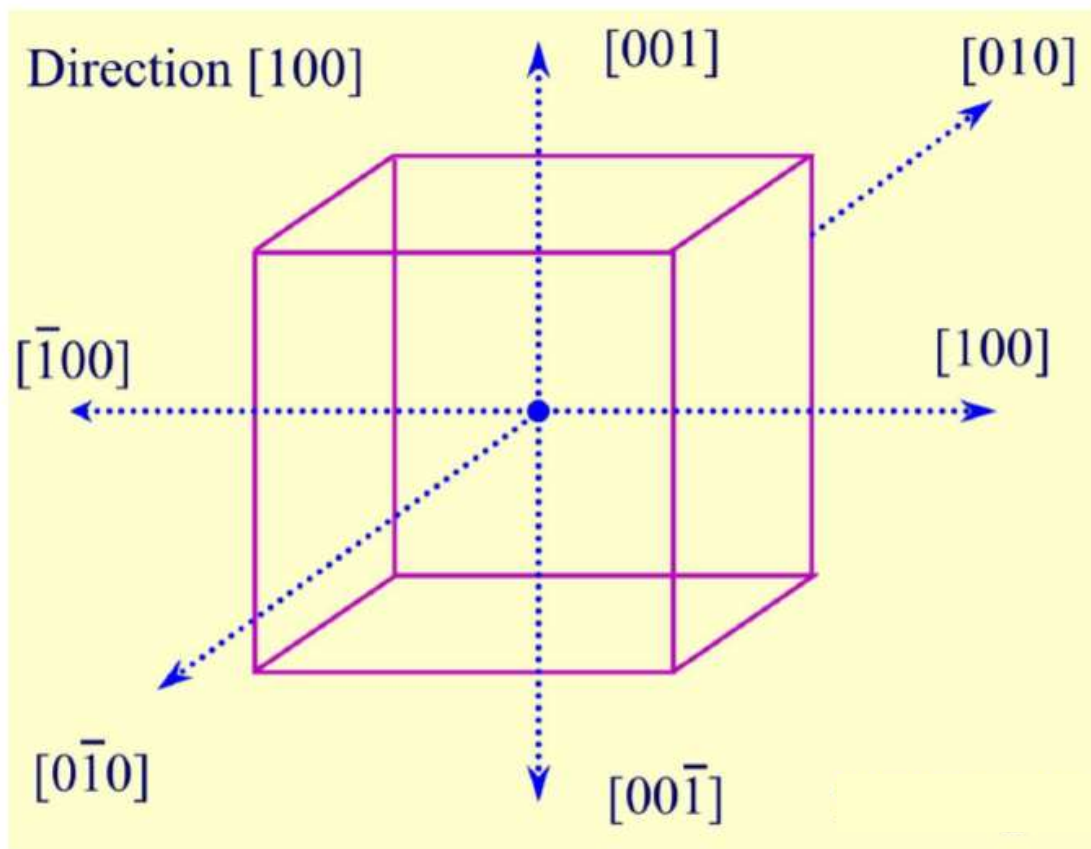
简单立方晶格的晶向标志

立方边 OA 的晶向 $[100]$

立方边共有6个不同的晶向

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

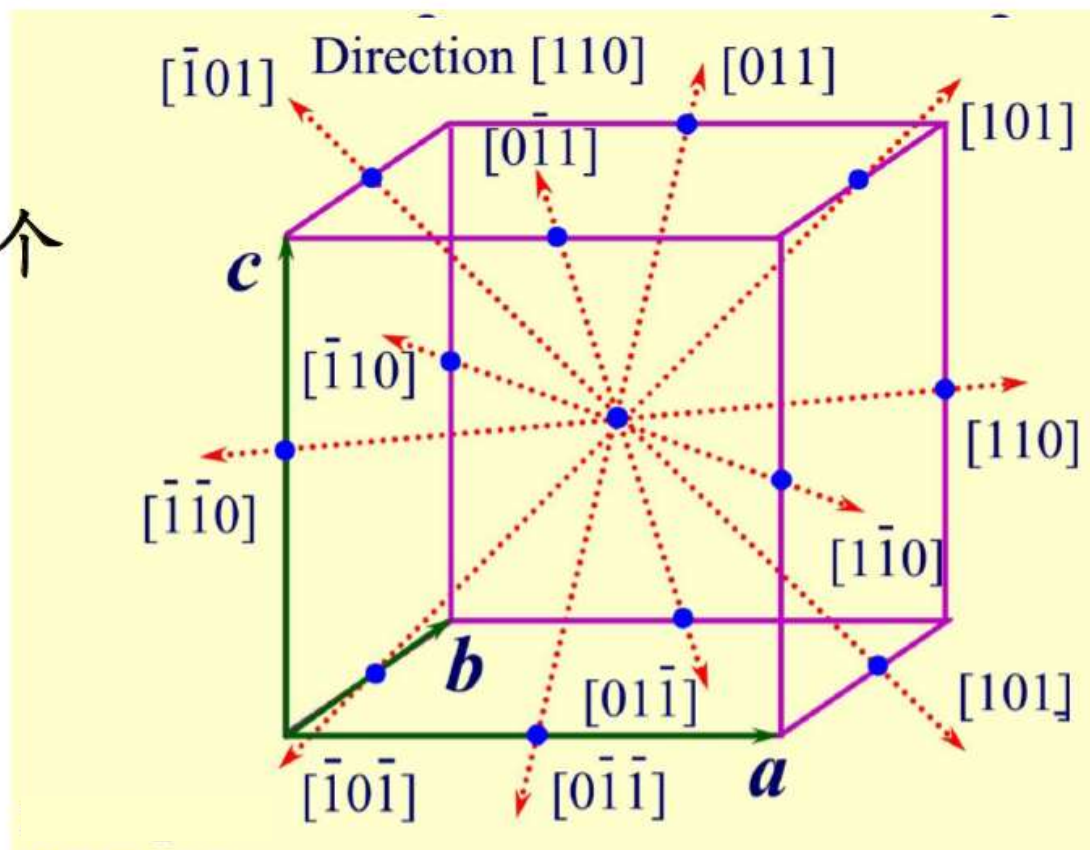
统称 $\langle 100 \rangle$



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 $\langle 111 \rangle$

