

PART ONE 填空题

Q01\_01\_001 原胞中有  $p$  个原子。那么在晶体中有 3 支声学波和  $3p-3$  支光学波？

Q01\_01\_002 按结构划分，晶体可分为 7 大晶系，共 14 布喇菲格子？

Q01\_01\_004 面心立方原胞的体积为  $\Omega = \frac{1}{4}a^3$ ；其第一布里渊区的体积为  $\Omega^* = \frac{4(2\pi)^3}{a^3}$

Q01\_01\_005 体心立方原胞的体积为  $\Omega = \frac{a^3}{2}$ ；第一布里渊区的体积为  $\Omega^* = \frac{2(2\pi)^3}{a^3}$

Q01\_01\_006 对于立方晶系，有简单立方、体心立方和面心立方三种布喇菲格子。

Q01\_01\_007 金刚石晶体是复式格子，由两个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，晶胞中有 8 个碳原子。

Q01\_01\_008 原胞是最小的晶格重复单元。对于布喇菲格子，原胞只包含 1 个原子；

Q01\_01\_009 晶面有规则、对称配置的固体，具有长程有序特点的固体称为晶体；在凝结过程中不经过结晶（即有序化）的阶段，原子的排列为长程无序的固体称为非晶体。由晶粒组成的固体，称为多晶。

Q01\_01\_010 由完全相同的一种原子构成的格子，格子中只有一个原子，称为布喇菲格子。满足

$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$   $\begin{cases} = 2\pi & (i=j) \\ = 0 & (i \neq j) \end{cases}$  关系的  $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$  为基矢，由  $\vec{G}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$  构成的格子，

称作倒格子。由若干个布喇菲格子相套而成的格子，叫做复式格子。其原胞中有两个以上的原子。

Q01\_03\_001 由  $N$  个原胞构成的晶体，原胞中有  $l$  个原子，晶体共有  $3lN$  个独立振动的正则频率。

Q01\_03\_002 声子的角频率为  $\omega$ ，声子的能量和动量表示为  $\hbar\omega$  和  $\hbar\vec{q}$ 。

Q01\_03\_003 光学波声子又可以分为纵光学波声子和横光学波声子，它们分别被称为极化声子和电磁声子

Q01\_03\_004 一维复式原子链振动中，在布里渊区中心和边界，声学波的频率为

$$\omega_1 = \begin{cases} \left(\frac{2\beta}{M}\right)^{\frac{1}{2}}, & q = \pm \frac{\pi}{2a} \\ 0, & q \rightarrow 0 \end{cases}; \text{ 光学波的频率 } \omega_2 = \begin{cases} \left(\frac{2\beta}{\mu}\right)^{\frac{1}{2}} & q \rightarrow 0 \\ \left(\frac{2\beta}{m}\right)^{\frac{1}{2}} & q = \pm \frac{\pi}{2a} \end{cases}$$

Q01\_04\_001 金属的线度为  $L$ ，一维运动的自由电子波函数  $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ ；能量  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ；

波矢的取值  $k = \frac{2\pi n}{L}$

Q01\_04\_002 电子在三维周期性晶格中波函数方程的解具有  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$  形式？式中  $u_{\vec{k}}(\vec{r})$  在晶格平移下保持不变。

Q01\_04\_003 如果一些能量区域中，波动方程不存在具有布洛赫函数形式的解，这些能量区域称为禁带，即带隙；能带的表示有扩展能区图式法、简约布里渊区图式法、周期性能区图式法三种图式。

Q01\_04\_004 在能量标度下，费米自由电子气系统的态密度  $N(E) = CE^{\frac{1}{2}}$ 。

Q01\_04\_005 在动量标度下，费米自由电子气系统的态密度  $N(\vec{k}) = \frac{V_c}{4\pi^3}$ 。

Q01\_04\_006 电子占据了一个能带中所有的状态，称该能带为满带；没有任何电子占据（填充）的能带，称为空带；导带以下的第一个满带，或者最上面的一个满带称为价带；最下面的一个空带称为导带；两个能带之间，不允许存在的能级宽度，称为带隙。

Q01\_04\_007 能带顶部电子的有效质量为负（填写正，或负）；能带底部电子的效质量为正（填写正，或负）。

Q01\_06\_001 温度升高，金属的导电率减小，半导体的导电率增大。对于金属，温度越高，金属中的晶格振动对电子的散射作用越大。而在半导体中则是有更多的电子从价带激发到导带中。

Q01\_06\_002 自由电子气系统的费米能级为  $E_F^0$ ， $k$  空间费米半径  $k_F = \frac{\sqrt{2mE_F^0}}{\hbar}$ ；

电子的平均能量  $E_{Kin} = \frac{3}{5} E_F^0$

Q01\_06\_003 温度为 0 K 时， $N$  个自由电子构成的三维自由电子气，体系的能量  $\bar{E}_0 = \frac{3}{5} NE_F^0$

Q01\_07\_001 N 型半导体主要含有一种施主，如果施主的能级是  $E_D$ ，施主浓度为  $N_D$ ，在足够低的温度下，载流子主要是从施主能级激发到导带的电子。当温度很低时，只有很少的施主被电离。当温度足够高时，施主几乎全部被电离，导带中的电子数接近于施主数。

## PART TWO 简述问题

Q02\_02\_001 原子结合成晶体时，原子的价电子产生重新分布，从而产生不同的结合力，分析离子性、共价性、金属性和范德瓦耳斯性结合力的特点。

➤ 离子性结合：正、负离子之间靠库仑吸引力作用而相互靠近，当靠近到一定程度时，由于泡利不相容原理，两个离子的闭合壳层的电子云的交会会产生强大的排斥力。当排斥力和吸引力相互平衡时，形成稳定的离子晶体；

➤ 共价性结合：靠两个原子各贡献一个电子，形成所谓的共价键；

➤ 金属性结合：组成晶体时每个原子的最外层电子为所有原子所共有，因此在结合成金属晶体时，失去了最外层（价）电子的原子实“沉浸”在由价电子组成的“电子云”中。在这种情况下，电子云和原子实之间存在库仑作用，体积越小电子云密度越高，库仑相互作用的库仑能愈低，表现为原子聚合起来的作用。

➤ 范德瓦耳斯性结合：惰性元素最外层的电子为 8 个，具有球对称的稳定封闭结构。但在某一瞬时由于正、负电中心不重合而使原子呈现出瞬时偶极矩，这就会使其它原子产生感应极矩。非极性分子晶体就是依靠这瞬时偶极矩的互作用而结合的。

Q02\_03\_001 什么是声子？

➤ 晶格振动的能量量子。在晶体中存在不同频率振动的模式，称为晶格振动，晶格振动能量可以用声子来描述，声子可以被激发，也可以湮灭。

Q02\_03\_002 什么是固体比热的德拜模型？并简述计算结果的意义。

➤ 德拜提出以连续介质的弹性波来代表格波，将布拉菲晶格看作是各向同性的连续介质，有 1 个纵波和 2 个独立的横波。

计算结果表明低温极限下： $C_V(T/\Theta_D) = \frac{12\pi^4}{15} R \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$  — 与温度的 3 次方成正比。

温度愈低，德拜近似愈好，说明在温度很低时，只有长波格波的激发是主要的。

Q02\_03\_003 什么是固体比热的爱因斯坦模型？并简述计算结果的意义。

➤ 对于有  $N$  个原子构成的晶体，晶体中所有的原子以相同的频率  $\omega_0$  振动。

计算结果表明温度较高时： $C_V \cong 3Nk_B$  —— 与杜隆-珀替定律一致。

温度非常低时： $C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}\right)^2 e^{-\frac{\hbar\omega_0}{k_B T}}$  —— 按温度的指数形式降低，与实验结果  $C_V = AT^3$  不符。

爱因斯坦模型忽略了各格波的频率差别。

Q02\_04\_001 根据能带理论简述金属、半导体和绝缘体的导电性；

➡ 对于金属：电子在能带中的填充可以形成不满带，即导带，因此它们一般是导体。对于半导体：从能带结构来看与绝缘体的相似，但半导体禁带宽度较绝缘体的窄，依靠热激发即可以将满带中的电子激发到导带中，因而具有导电能力。

➡ 对于绝缘体：价电子刚好填满了许可的能带，形成满带。导带和价带之间存在一个很宽的禁带，所以在电场的作用下没有电流产生。

Q02\_04\_002 简述近自由电子近似模型、方法和所得到的主要结论。

➡ 考虑金属中电子受到粒子周期性势场的作用，假定周期性势场的起伏较小。作为零级近似，可以用势场的平均值代替离子产生的势场： $\bar{V} = V(\bar{r})$ 。周期性势场的起伏量  $V(\bar{r}) - \bar{V} = \Delta V$  作为微扰来处理。当两个由相互自由的矩阵元状态  $\bar{k}$  和  $\bar{k}' = \bar{k} + \bar{G}_n$  的零级能量相等时，一级修正波函数和二级能量修正趋于无穷大。

即： $|\bar{k}|^2 = |\bar{k} + \bar{G}_n|^2$ ，或者  $\bar{G}_n \cdot (\bar{k} + \frac{1}{2}\bar{G}_n) = 0$ ，在布里渊区的边界处，能量发出突变，形成一系列的能带。

Q02\_04\_003 简述紧束缚近似模型的主要思想和主要结论。

➡ 紧束缚近似方法的思想：电子在一个原子（格点）附近时，主要受到该原子势场的作用，而将其它原子（格点）势场的作用看作是微扰，将晶体中电子的波函数近似看成原子轨道波函数的线性组合，这样可以得到原子能级和晶体中能带之间的关系。

一个原子能级  $\epsilon_i$  对应一个能带，不同的原子能级对应不同的能带。当原子形成固体后，形成了一系列的能带。

能量较低的能级对应内层电子，其轨道较小，原子之间内层电子的波函数相互重叠较少，所以对应的能带较窄。

能量较高的能级对应外层电子，其轨道较大，原子之间外层电子的波函数相互重叠较多，所以对应的能带较宽。

Q02\_05\_001 什么是空穴？

➡ 一个空的  $\bar{k}_1$  状态的近满带中所有电子运动形成的电流和一个带正电荷  $e$ ，以  $\bar{k}_1$  状态电子速度  $\bar{v}_e(\bar{k}_1)$  运动的粒子所产生的电流相同。这个空状态称为空穴。

Q02\_05\_002 将粒子看作是经典粒子时，它的速度和运动方程是什么？

➡ 电子状态变化基本公式： $\frac{d(\hbar\bar{k})}{dt} = \bar{F}$ ；电子的速度： $\bar{v}_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E$

Q02\_05\_003 简述导带中的电子在外场作用下产生电流的原因。

➡ 导带中只有部分状态被电子填充，外场的作用会使布里渊区的状态分布发生变化。所有的电子状态以相同的速度沿着电场的反方向运动，但由于能带是不满带，逆电场方向上运动的电子较多，因此产生电流。

Q02\_05\_004 简述满带中的电子在外场作用下不产生电流的原因。

➡ 有外场  $E$  时，所有的电子状态以相同的速度沿着电场的反方向运动。在满带的情形中，电子的运动不改变布里渊区中电子的分布。所以在有外场作用的情形时，满带中的电子不产生宏观的电流。

Q02\_06\_001 从电子热容量量子理论简述金属中的电子对固体热容的贡献。

➡ 在量子理论中，大多数电子的能量远远低于费密能量  $E_F^0$ ，由于受到泡利原理的限制不能参与热激发，只有在  $E_F^0$  附近约  $\sim k_B T$  范围内电子参与热激发，对金属的热容量有贡献。计算结果表明电子的热容量与温度一次方成正比。

Q02\_06\_002 为什么温度较高时可以不考虑电子对固体热容量的贡献？

➡ 在量子理论中，大多数电子的能量远远低于费密能量  $E_F^0$ ，由于受到泡利原理的限制不能参与热激发，只有在  $E_F^0$  附近约  $\sim k_B T$  范围内电子参与热激发，对金属的热容量有贡献。在一般温度下，晶格振动的热容量要比电子的热容量大得多；在温度较高下，热容量基本是一个常数。

Q02\_06\_003 为什么温度较低时必须考虑电子对固体热容量的贡献？

➡ 在低温范围下，晶格振动的热容量按温度的 3 次方趋于零，而电子的热容量与温度 1 次方成正比，随温度下降变化比较缓慢，此时电子的热容量可以和晶格振动的热容量相比较，不能忽略。

Q02\_06\_004 为什么在绝对零度时，金属中的电子仍然具有较高的能量？

➡ 温度  $T = 0$  时：电子的平均能量（平均动能）： $E_{kin} = \frac{3}{5} E_F^0$ ，电子仍具有相当大的平均能量。因为电子必须满足泡利不相容原理，每个能量状态上只能容许两个自旋相反的电子。这样所有的电子不可能都填充在最低能量状态。

Q02\_06\_005 简述研究金属热容量的意义，并以过渡元素 Mn、Fe、Co 和 Ni 具有较高的电子热容量为例说明费密能级附近能态密度的情况。

➡ 许多金属的基本性质取决于能量在  $E_F$  附近的电子，电子的热容量  $C_V = [\frac{\pi^2}{3} N(E_F^0)(k_B T)]k_B$  与  $N(E_F^0)$  成正比，由电子的热容量可以获得费米面附近能态密度的信息。

过渡元素 Mn、Fe、Co 和 Ni 具有较高的电子热容量，反映了它们在费米面附近具有较大的能态密度。

过渡元素的特征是 d 壳层电子填充不满，从能带理论来分析，有未被电子填满的 d 能带。由于原子的 d 态是比较靠内的轨道，在形成晶体时相互重叠较小，因而产生较窄的能带，加上的轨道是 5 重简并的，所以形成的 5 个能带发生一定的重叠，使得 d 能带具有特别大的能态密度。过渡金属只是部分填充 d 能带，所以费密能级位于 d 能带内。

Q02\_06\_006 简述金属接触电势差的形成？

➡ 两块不同的金属 A 和 B 相互接触，由于两块金属的费米能级不同，当相互接触时可以发生电子交换，电子从费米能级较高的金属流向费米能级较低的金属，使一块金属的接触面带正电（电子流

出的金属), 使另一块金属的接触面带负电 (电子流入的金属), 当两块金属达到平衡后, 具有相同的费米能级, 电子不再流动交换。因此在两块金属中产生了接触电势差。

Q02\_07\_001 以对 Si 掺入 As 后形成的 N 型半导体为例, 简述掺杂对半导体导电能力的影响。

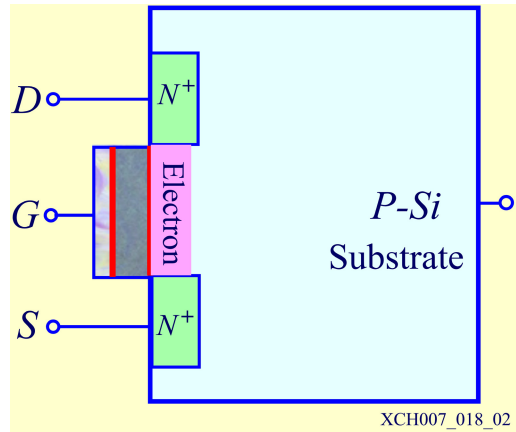
➡ 对纯的半导体材料掺入适当的杂质, 也能提供载流子。在 Si 掺入 As 后形成的 N 型半导体, 杂质在带隙中提供带有电子的能级, 能级略低于导带底的能量, 和价带中的电子相比较, 很容易激发到导带中形成电子载流子。

Q02\_07\_002 如图 XCH007\_018\_02 所示, 简述 N 沟道晶体管的工作原理。

➡ 栅极电压很小时, 源区 S 和漏区 D 被 P 型区隔开, 即使在 SD 之间施加一定的电压, 但由于 SP 和 DP 区构成两个反向 PN 结, 因此只有微弱的 PN 反向结电流。

如果栅极电压达到或超过一定的阈值, 在 P 型半导体和氧化物表面处形成反型层——电子的浓度大于体内空穴的浓度, 反型层将源区 S 和漏区 D 连接起来, 此时在 SD 施加一个电压, 则会有明显的电流产生。

通过控制栅极电压的极性和数值, 使 MOS 晶体管处于导通和截止状态, 源区 S 和漏区 D 之间的电流受到栅极电压的调制——集成电路应用。



Q02\_07\_003 半导体本征吸收光的波长为多少?

➡ 本征光吸收光子的能量满足:  $\hbar\omega \geq E_g$ ,  $\omega = \frac{2\pi c}{\lambda}$ ,  $\frac{2\pi\hbar c}{\lambda} \geq E_g$ , 长波极限:  $\lambda_0 = \frac{2\pi\hbar c}{E_g}$  ——

本征吸收边。

Q02\_07\_004 简述半导体本征激发的特点。

➡ 在足够高的温度时, 由满带到导带的电子激发 (本征激发) 将是主要的。本征激发的特点是每产生一个电子同时将产生一个空穴: 有:  $n \approx p$

由  $np = N_- N_+ e^{-\frac{E_- - E_+}{k_B T}}$ ,  $n \approx p = \sqrt{N_- N_+} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$ , 其中  $E_g = E_- - E_+$  为带隙宽度。

因为:  $E_g \gg E_i$ , 因此本征激发随温度变化更为陡峭。在这个范围里, 测量和分析载流子随温度的变化关系, 可以确定带隙宽度。

Q02\_07\_005 什么是非平衡载流子?

➡ 在热平衡下, 半导体中的杂质电子, 或价带中的电子通过吸收热能, 激发到导带中 (载流子的产生), 同时电子又可以回落到价带中和空穴发生复合 (载流子的复合), 最后达到平衡时, 载流子的产生率和复合率相等, 电子和空穴的浓度有了一定的分布。



电子和空穴的浓度满足： $n_0 p_0 = N_- N_+ e^{-\frac{E_g}{k_B T}}$

在外界的影响作用下，电子和空穴浓度可能偏离平衡值。如本征光吸收将产生电子—空穴对。

即有： $\Delta n = n - n_0$ ， $\Delta p = p - p_0$ ——称为非平衡载流子

Q02\_07\_006 以在 P 型材料形成的 PN 结为例，简述光生伏特效应？

➡ 利用扩散掺杂的方法，在 P 型半导体的表面形成一个薄的 N 型层，在光的照射下，在 PN 结及其附近产生大量的电子和空穴对，在 PN 结附近一个扩散长度内，电子—空穴对还没有复合就有可能通过扩散达到 PN 结的强电场区域（PN 结自建电场），电子将运动到 N 型区，空穴将运动到 P 型区，使 N 区带负电、P 区带正电，在上下电极产生电压——光生伏特效应。

Q02\_07\_007 什么是异质结的窗口效应？

➡ 光子能量小于宽带隙的 N 型层，即  $h\nu < (E_g)_N$ ，可以透过 N 型层，在带隙较窄的 P 型层被吸收。

用同质 PN 结制作光电池，入射光的大部分在表面一层被吸收，由于表面缺陷引起的表面复合和高掺杂层中载流子寿命低等因素，使得一些电子—空穴对不能到达强电场以前，就发生了复合，降低了太阳能电池的效率。利用异质结的窗口效应，可以有效地减小电子—空穴的复合率，提高太阳能电池的光电转换效率。

Q02\_07\_008 对于掺杂的 N 型半导体在热平衡下，为什么导带中电子的浓度越高，价带中空穴的浓度越低？

➡ 半导体中的电子和金属中的电子一样服从费密——狄拉克统计。

导带中电子浓度： $n = N_- e^{-\frac{E_- - E_F}{k_B T}}$  和价带中空穴浓度： $p = N_+ e^{-\frac{E_F - E_+}{k_B T}}$ ， $np = N_- N_+ e^{-\frac{E_- - E_+}{k_B T}}$

在 N 型半导体中，施主越多，激发到导带中的电子越多，电子跃迁与价带中空穴发生复合的几率越大，因此满带中的空穴越少。

Q02\_07\_009 什么是本征光吸收跃迁和电子—空穴复合发光？

➡ 本征光吸收：光照可以将价带中的电子激发到导带中，形成电子—空穴对，这一过程称为本征光吸收。电子—空穴对复合发光是本征光吸收的逆过程，即导带底部的电子跃迁到价带顶部的空能级，发出能量约为带隙宽度的光子。

Q02\_07\_010 为什么半导体掺杂可以提高其导电能力？

➡ 理想的半导体材料是没有缺陷或没有杂质，半导体中的载流子只能是激发到导带中的电子和价带中的空穴。对纯的半导体材料掺入适当的杂质，也能提供载流子。因此实际的半导体中除了与能带对应的电子共有化状态以外，还有一些电子可以为杂质或者缺陷原子所束缚，束缚电子具有确定的能级，杂质能级位于带隙中接近导带的位置，在一般温度下即可被激发到导带中，从而对半导体的导电能力产生大的影响。

Q02\_07\_011 什么是 P 型和 N 型半导体？

➤ 根据掺杂元素对导电的不同影响，杂质态可分为两种类型。

杂质在带隙中提供带有电子的能级，能级略低于导带底的能量，和价带中的电子相比较，很容易激发到导带中，称为电子载流子。主要含有施主杂质的半导体，主要依靠施主热激发到导带的电子导电——N 型半导体。

杂质提供带隙中空空的能级，电子由价带激发到受主能级要比激发到导带容易的多。主要含有受主杂质的半导体，因价带中的一些电子被激发到施主能级，而在价带中产生许多空穴，主要依靠这些空穴导电——P 型半导体。

Q02\_07\_012 半导体中掺入深能级杂质，对半导体的导电有何影响？

➤ 1) 可以成为有效复合中心，大大降低载流子的寿命；2) 可以成为非辐射复合中心，影响半导体的发光效率；3) 可以作为补偿杂质，大大提高半导体材料的电阻率。

Q02\_07\_013 以在 Ge 半导体掺入 As 为例，简述为什么类氢杂质能级的施主能级位于导带附近？

➤ 一个第IV族元素Ge（4 价元素）被一个第V族元素As（5 价元素）所取代的情形，As原子和近邻的Ge原子形成共价键后尚剩余一个电子。因为共价键是一种相当强的化学键，束缚在共价键上的电子能量很低，从能带的角度来说，就是处于价带中的电子。多余一个电子受到 $As^+$ 离子静电吸引，其束缚作用是相当微弱的，在能带图中，它位于带隙之中，且非常接近导带底。这个电子只要吸收很小的能量，就可以从带隙跃迁到导带中成为电子载流子。