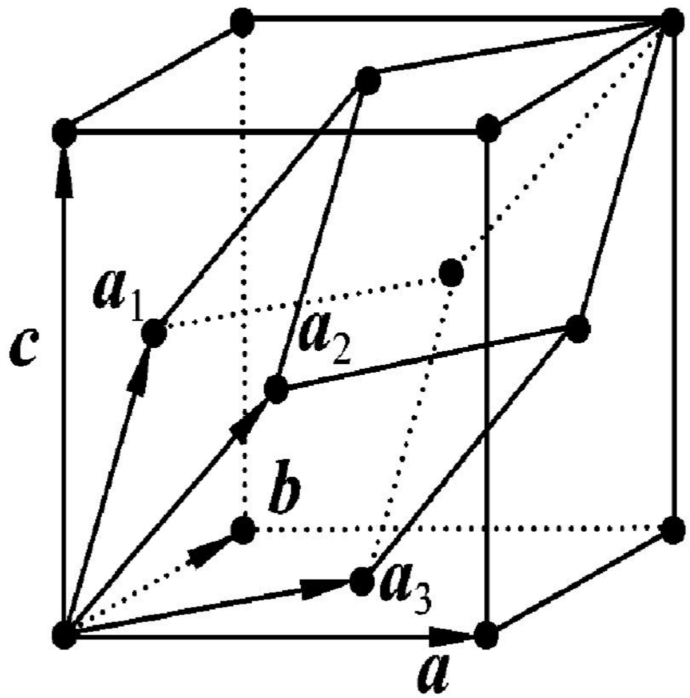
半导体物理

课后作业01 参考解答

助教：王晓荣072052058@fudan. edu. cn
杨金东072052053@fudan. edu. cn

1、假设面心立方点阵的惯用立方晶胞的边长为a，用矢量分析方法证明面心立方初基原胞的体积为$a^3/4$；证明矢量$\mathbf{a}_1$，$\mathbf{a}_2$和$\mathbf{a}_3$间的夹角为60度。



1. $\vec{a}_1 = \frac{1}{2}(\vec{b}+\vec{c}), \vec{a}_2 = \frac{1}{2}(\vec{c}+\vec{a}), \vec{a}_3 = \frac{1}{2}(\vec{a}+\vec{b})$

$$V = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3) = \frac{1}{8}a^3 (j+k)\cdot[(k+i)\times(i+j)]$$

$$= \frac{1}{4}a^3$$

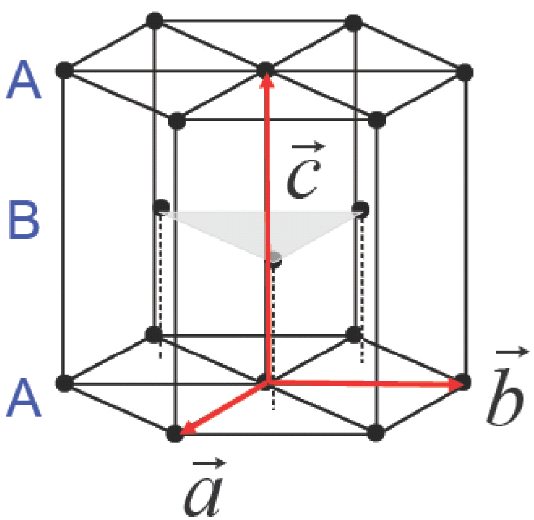
2. $\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 = |\vec{a}_1||\vec{a}_2|\cos(\vec{a}_1, \vec{a}_2) \Rightarrow$

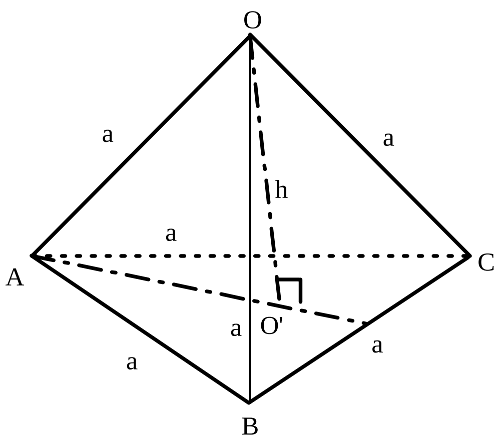
$$\cos(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 / |\vec{a}_1||\vec{a}_2| = 1/2$$

$\Rightarrow angel = 60^\circ$； Same to two others.

2、假设六角密堆积结构的三个轴矢为矢量a，b和c，且a，b大小相等均为a，轴矢c的大小为c，证明理想六角密堆结构中存在如下关系：

$$\frac{c}{a}=\sqrt{\frac{8}{3}}$$





$$AO'=\frac{\sqrt{3}}{3}a,$$

$$h=OO'=\sqrt{OA^2-AO'^2}=\sqrt{\frac{2}{3}}a$$

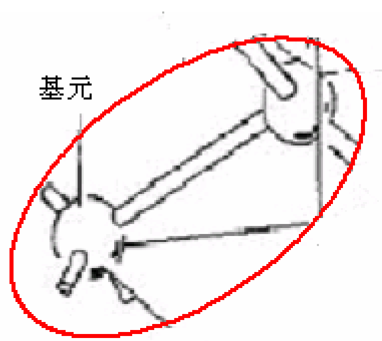
$$\therefore\quad c=2h=\sqrt{\frac{8}{3}}a$$

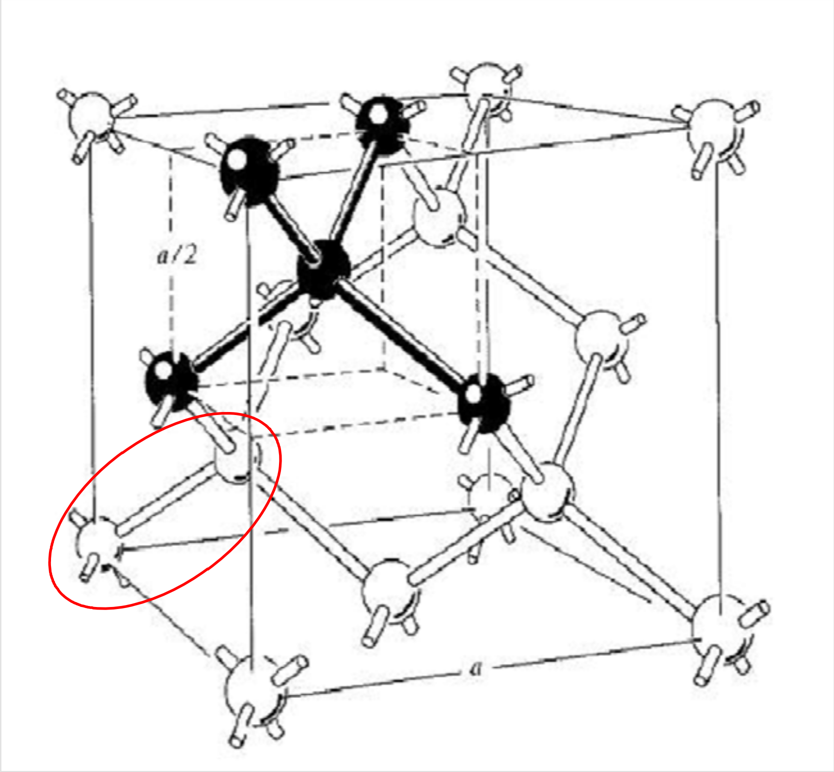
3. 对于Si的金刚石结构，它对应的布喇非点阵是什么？基元是怎么组成的？图中5个实心黑色球代表的原子构成了一个正四面体，证明Si-Si成键的键角为109º28'；已知室温下单晶Si惯用立方晶胞的边长为5.43埃，请计算Si原子的体密度（cm^{-3}）。

- （1）a. 布喇菲点阵：面心立方点阵
  b. 组成基元：两个硅原子

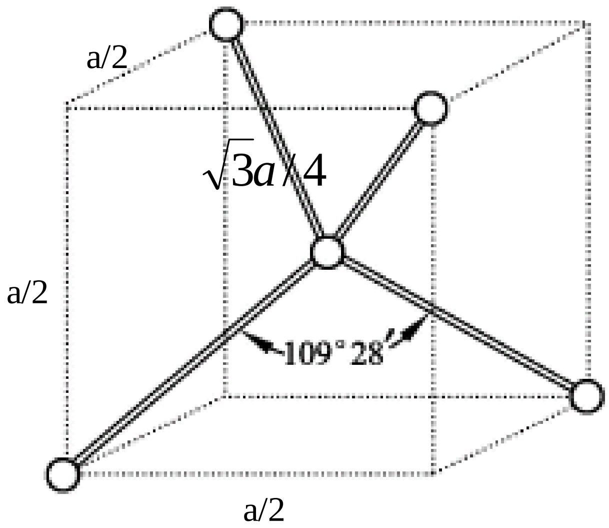
点阵+基元＝晶体结构

硅的金刚石结构中有四个基元





- (2)考虑金刚石结构中的四面体



$$\cos\theta = \frac{(\frac{\sqrt{3}a}{4})^2 + (\frac{\sqrt{3}a}{4})^2 - (\frac{\sqrt{2}a}{2})^2}{2\times(\frac{\sqrt{3}a}{4})^2} = -\frac{1}{3}$$

$$\Rightarrow \theta = 109^\circ 28'$$

- (3)金刚石结构，立方体晶胞中，顶角8个原子，面心6个原子，体内对角线上4个原子，所以一个金刚石晶胞所占原数 $8\times\frac{1}{8}+6\times\frac{1}{2}+4=8$ ，立方体晶胞体积 $V=a^3$，所以金刚石Si原子的体密度：

$$\rho=8/a^3=8/(5.43\times10^{-8})^3=5\times10^{22}/cm^3$$