

半导体物理

课后作业02 参考解答

助教： 王晓荣072052058@fudan.edu.cn

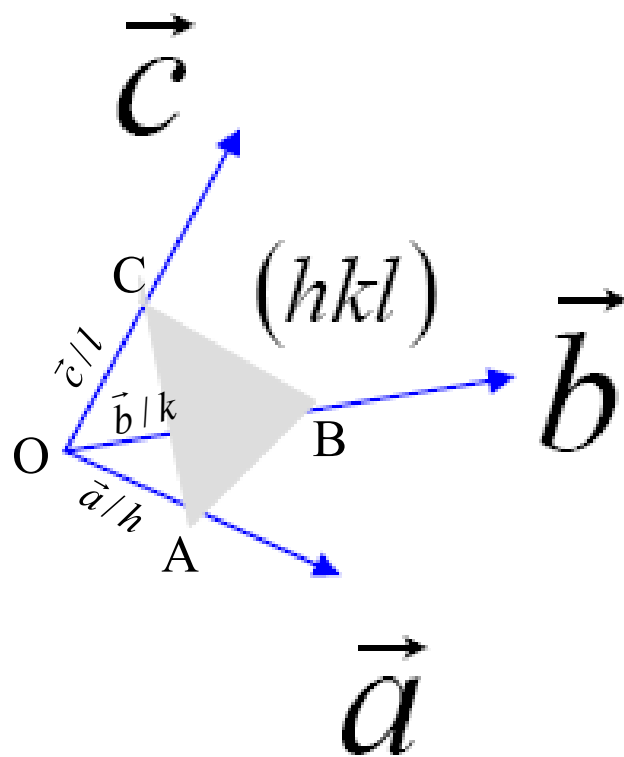
杨金东072052053@fudan.edu.cn

1、晶面间距. 考虑晶体点阵中的一个平面(hkl).

(a) 证明倒易点阵矢量 $\vec{G}=h\vec{A}+k\vec{B}+l\vec{C}$ 垂直于这个面.

(b) 证明点阵的两个相邻平行平面的间距是 $d(hkl) = 2\pi / |\vec{G}|$

(c) 证明对于简单立方点阵有 $d^2 = a^2 / (h^2 + k^2 + l^2)$



(a) 如图所示, ABC为点阵中平面(hkl),

$$\vec{G} \cdot \overrightarrow{AB} = (h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}) \cdot (\vec{b}/k - \vec{a}/h) = 2\pi - 2\pi = 0$$

$$\vec{G} \cdot \overrightarrow{BC} = (h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}) \cdot (\vec{a}/h - \vec{b}/k) = 2\pi - 2\pi = 0$$

\therefore 命题成立

- (b) : 由 (a) 中证明可得：晶面的法向与倒易点阵矢量方向相同，晶面单位法向矢量为：

$$\vec{n} = \vec{G} / |\vec{G}|$$

则晶面间距：

$$\left. \begin{aligned} d &= \vec{a} / h \cdot \vec{G} / |\vec{G}| \\ \vec{G} &= h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$d = \frac{\vec{a}}{h} \cdot \frac{h\vec{A}}{|\vec{G}|} = \frac{\vec{a}}{h} \cdot \frac{h \cdot 2\pi}{|\vec{G}|} \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|}$$

(c) 若是简立方点阵，则设：

$$\vec{a} = a\vec{i} \quad \vec{b} = a\vec{j} \quad \vec{c} = a\vec{k}$$

$$\vec{G} = \frac{2\pi}{a} (h\vec{i} + k\vec{j} + l\vec{k})$$

由(2)中结论可得：

$$d^2 = \left(\frac{2\pi}{|\vec{G}|} \right)^2 = \frac{a^2}{(h^2 + k^2 + l^2)}$$

2、布里渊区的体积. 证明三维晶体第一布里渊区的体积是: $(2\pi)^3 / V_c$
此处 V_c 是晶体初基晶胞的体积.

$$V_c = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})$$

$$\vec{A} = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{b} \times \vec{c}) \quad \vec{B} = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{c} \times \vec{a}) \quad \vec{C} = \frac{2\pi}{V_c} (\vec{a} \times \vec{b})$$

若 \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} 为晶体初基轴矢, 则根据倒易点阵平移矢量 \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} 的定义可知 \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} 也为该晶体倒易点阵对应的初基轴矢。由 \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} 构成的平行六面体就决定了该倒易点阵对应的初基晶胞体积。而点阵初基晶胞也可以按照维格纳—赛茨晶胞法选取, 但二者作为初基晶胞, 它们的体积是一样的。由于倒易点阵空间中的维格纳—赛茨中央晶胞就是第一布里渊区, 因此其体积可以通过计算由 \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} 构成的平行六面体的体积得到, 即

$$\Omega = \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \frac{(2\pi)^3}{V_c^3} (\vec{b} \times \vec{c}) \cdot [(\vec{c} \times \vec{a}) \times (\vec{a} \times \vec{b})]$$

$$\because (\vec{c} \times \vec{a}) \times (\vec{a} \times \vec{b}) = V_c \vec{a}$$

$$\therefore \Omega = \frac{(2\pi)^3}{V_c^3} (\vec{b} \times \vec{c}) \cdot V_c \vec{a} = \frac{(2\pi)^3}{V_c}$$

3、电子气的动能。证明0K下含N个自由电子的三维电子气的总动能为： $U_0 = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$ ， ε_F ；费米势。

设三维电子气的动能为： ε ，则总动能为：

$$U_0 = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon dN = \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon \frac{dN}{dE} d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

$$N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{3/2} \Rightarrow D = \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \varepsilon^{1/2} \quad \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{2/3}$$

4、二维情况下的化学势

(a) 导出二维情况下自由电子气系统对应的能态密度公式

(b) 若单位实空间面积含 n 个电子，证明温度 T 下二维电子气的化学势为

$$\mu(T) = kT \ln\left[\exp\left(\frac{\pi n \hbar^2}{mkT}\right) - 1\right]$$

(a) 对于二维情况， k_F 二维面内存在的电子总数：
$$N = 2\left(\frac{\pi k_F^2}{(2\pi/L)^2}\right) = \frac{k_F^2 L^2}{2\pi}$$

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \quad \text{则:} \quad N = \frac{L^2 m \varepsilon_F}{\pi \hbar^2}$$

能量 $\leq \varepsilon$ 下，
$$N = \frac{L^2 m \varepsilon}{\pi \hbar^2}$$

则，能态密度：
$$D = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{mL^2}{\pi \hbar^2} = \frac{mS}{\pi \hbar^2}$$

(b) μ 的选择原则: 总能正确计算出系统中粒子的总数, 即等于 N ($=nS$) .

则有:

$$nS = \int_0^\infty Df(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^\infty \frac{m}{\pi \hbar^2} \frac{1}{e^{(\varepsilon - \mu)/kT} + 1} d\varepsilon$$

$$\Rightarrow n = \frac{m}{\pi \hbar^2} \ln(e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1)$$

得:

$$\mu(T) = kT \ln[\exp(\frac{\pi n \hbar^2}{mkT}) - 1]$$

5、第一布里渊区中自由电子的能量

- (a) 对于二维简单正方点阵，证明第一布里渊区角隅上的自由电子的动能比该区侧边中点处的电子的动能大一倍；
- (b) 对于三维简单立方点阵，上述的倍数是多少？
- (c) 上述 (b) 的结果和二价金属的电导率可能有什么关系？

(a) 点阵常数为 a 的二维简单正方点阵的倒易点阵仍为简单正方点阵，其对应的点阵常数为 $2\pi/a$ 。角隅上的自由电子动能：

$$\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{\pi^2}{a^2} + \frac{\pi^2}{a^2} \right)}{2m_0}$$

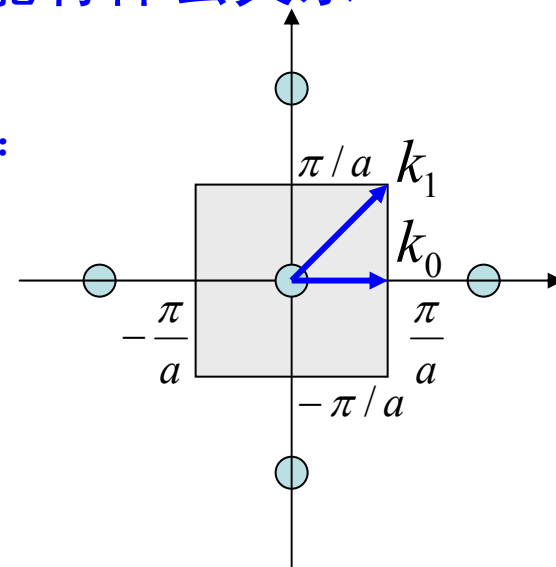
侧边中点处的电子动能： $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 \frac{\pi^2}{a^2}}{2m_0}$

显然 ε_1 比 ε_0 大一倍

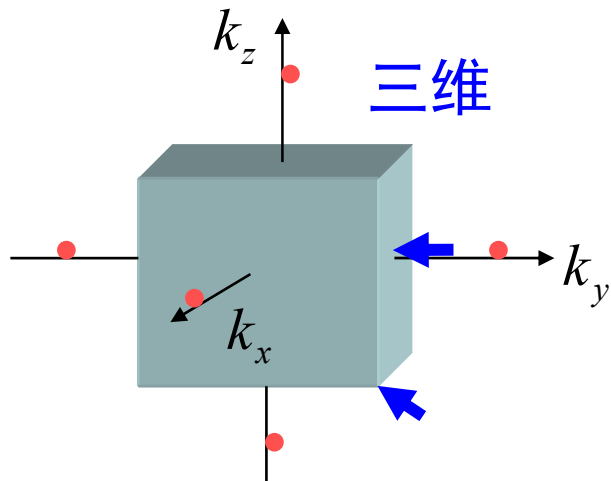
(b) 与二维计算关系相似， ε_0 不变，但三维情况下，角隅上的波矢是从布里渊区原点出发的体对角线，因此易得此处自由电子动能：

$$\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 \left(\frac{\pi^2}{a^2} + \frac{\pi^2}{a^2} + \frac{\pi^2}{a^2} \right)}{2m_0}$$

显然 ε_1 比 ε_0 大两倍

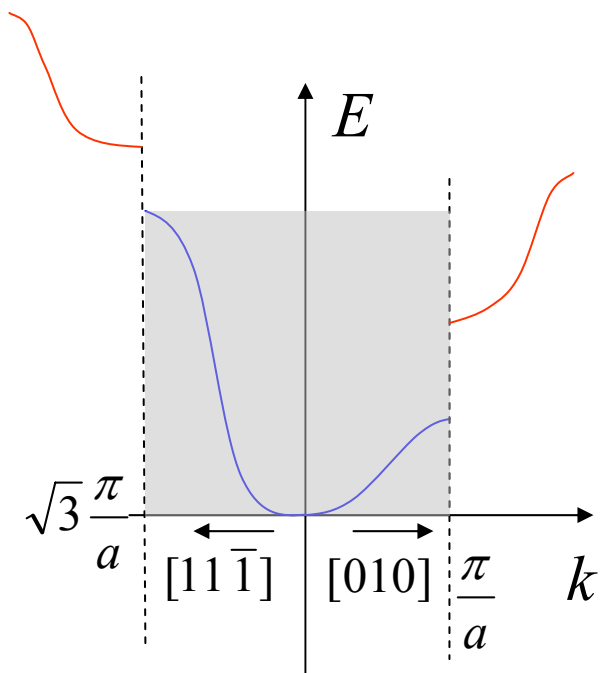


三维



(c) 明确以下概念：

- 1、第一布里渊区贡献第一个允许能带，第二布里渊区贡献第二个允许能带。。。依此类推。在每个布里渊区的边界处出现相邻能带间的禁带，即能量的不连续变化。
- 2、在每个布里渊区内的所有允许波矢都对应一个确定的能量态，这些能量态都体现在该布里渊区贡献的能带上，即E—k关系图上。



于是角隅上的波矢对应的能量比侧边中点处波矢对应的能量高很多，如图中灰色区域（第一布里渊区）所示。当[010]方向的波矢跨越第一布里渊区边界进入第二布里渊区时，能带出现禁带后变为在[010]方向的第二允许能带，如图中右侧红线所示。但，沿 $[11\bar{1}]$ 方向的波矢此时在第一布里渊区内对应的能量可能比沿[010]方向的波矢对应的第二布里渊区内的能量还高，于是第一允许能带和第二允许能带就要发生能量上的交叠了。因此，碱土金属虽然是二价的，具备成为绝缘体的必要条件，但是能带上存在一定程度的交叠，使它们表现出不太好的金属性。