

固物 2020 期末-第二版

Deschain

2022 年 6 月 11 日

1.

- (1) 堆积比最大的晶格结构有_____和_____。
- (2) 晶胞的两种定义方法：_____和_____。
- (3) 写出除 C 之外的两种金刚石结构的半导体材料：_____。
- (4) 计算晶体离子结合库仑势能要用到_____，它只与_____有关。
- (5) 无限大自由空间电子 $E-k$ 关系为_____，切线_____与 $\frac{1}{m}$ 成正比。(6) 一价正负离子交错排列，形成一维晶格，平衡间距为 a ，只计近邻原子的作用， $U(r) = -\frac{q^2}{r} + \frac{b}{r^n}$ ，则 $b =$ _____，刚性系数 $\beta =$ _____。
- (7) yz 厚度为 0.1cm 的 n 型材料，沿 x 轴方向通 50mA 电流，沿 z 轴方向加 0.5T 磁场，得到 0.4mV 的电场。材料的霍尔系数为_____，载流子浓度为_____。
- (8) PN 结形成是半导体中载流子_____与_____的动态平衡过程。内建电场在 PN 结_____处最强。空间电荷区宽度与掺杂浓度成_____。偏压电流主要与_____浓度变化有关。
- (9) 索末菲自由电子模型中，二维材料的面积为 S ，则 k 空间的点阵密度为_____，能量标度自由电子能态密度为_____。
- (10) 金属与 N 型半导体形成欧姆接触的条件是 ϕ_M _____ ϕ_N ，热平衡状态下，电子会流向_____。
- (11) 有效质量包含_____作用。在能带顶，电子的有效质量为_____（正/负）。能带顶的电子从外场得到的动量_____（大于/小于）交给金属的动量。
- (12) 与索末菲模型相比，布洛赫电子考虑了晶体中的_____对电子运动的影响。设简约波矢为 \vec{k} ，则 $\psi(\vec{r} + \vec{R}_n) =$ _____ $\psi(\vec{r})$ 。考虑一维情况， $\psi_k(x) = -i\cos(\frac{4\pi x}{a})$ ， a 是晶格常数，则简约波矢为_____。
- (13) 异质 PN 结若想获得更高电子注入比，需要 N 区带隙宽度_____P 区。
- (14) 一块金刚石晶体中有 $2N$ 个 C 原子，其包含_____支光学支色散曲线，_____支声学支色散曲线，每支有_____个色散模式。
- (15) 长光学支格波 B 和长声学支格波 A, B 反映了_____, A 反映了_____。
A 振动的频率比 B_____（高/低），平均声子数比 B_____（多/少）。
- (16) 常温下 1mol NaCl 热容为_____，低温时，NaCl 的热容随温度的_____次方减小。
- (17) 体心立方晶格，晶格常数为 a ，体积为 V ，倒格子是_____晶格。第一布里渊区体积为_____， k 的取值总数为_____。如果每个原子提供一个价电子，则 0K 时费米球半径为_____，费米能量_____。
- (18) 固体磁性分成_____、_____、_____、_____、_____。忽略核磁矩，则原子磁矩主要来源于电子的_____、电子的_____和_____。

2. NaCl 立方晶系, 摩尔质量 $58.5g/mol$, 室温下的密度为 $2.165g \cdot cm^3$ 。

- (1) 写出 NaCl 的晶体结构, 并求出晶格常数 a 。
- (2) 在晶格衍射实验中, 测得最小衍射角为 12 度, 求实验用的射线的波长。
- (3) 描述第一布里渊区的形状, 并求出第一布里渊区的体积。

3. 一维材料的 $V(x)$ 满足 $V(0) = V_1, V(\frac{a}{4}) = V_2, V(\frac{a}{8}) = V_3, \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} V(x)dx = 0$ 。 a 是晶格常数, $V(x)$ 是偶函数并且是周期函数, 第四级及以上的带隙为 0。

- (1) 使用近自由电子近似, 求第一、二、三条带隙的宽度。
- (2) 画出简约布里渊区的能带图。
- (3) 定性分析电子沿 x 轴正向受力为 F 时在 k 空间的运动, 并标注。

4. 300K 时, $N-Al_xGa_{1-x}As$ 在左侧, $GaAs$ 在中间, $P-Al_xGa_{1-x}As$ 在右侧。左侧是 N 型重掺杂, 掺杂浓度 $N_D = 1.0 \times 10^{19}cm^{-3}$; 中间是本征半导体; 右侧是 P 型重掺杂, 掺杂浓度 $N_A = 5.0 \times 10^{19}cm^{-3}$ 。 $x = 0.3$ 时, $GaAs$ 和 $N-Al_xGa_{1-x}As$ 的禁带宽度分别为 1.42eV、1.8eV, 本征载流子浓度分别为 $2.1 \times 10^6cm^{-3}$ 、 $2.1 \times 10^3cm^{-3}$, 导带差 $\Delta E_C = 0.66\Delta E_g$ 。

- (1) 求 $N-Al_xGa_{1-x}As$ 和 $P-Al_xGa_{1-x}As$ 的费米能级相对于本征费米能级的位置。
- (2) 定量计算 $\Delta E_C, \Delta E_V$ 及接触电势差, 画出能带图。

5. 长度为 L 的一维双原子链, 刚性系数 β_1, β_2 , 晶格常数为 a , 质量为 m , 只考虑近邻原子的作用, 采用简谐近似。求出:

- (1) 运动方程;
- (2) 色散曲线的表达式;
- (3) 画出色散曲线示意图, 标注边界和中心频率;
- (4) 计算声学波波速的表达式和布里渊区中心的声学支格波的态密度。

答案:

1. 填空题

- (1) ①面心立方②六角密排
- (2) ①原胞②单胞
- (4) ①硅和锗
- (5) ①马德隆常数②晶体结构
- (6) ①抛物线型②斜率的变化率
- (7) ① $\frac{(n-1)q^2}{a^3}$ ② $\frac{(n-1)q^2}{a^3}$
- (8) ①扩散②漂移③界面④反比⑤少子
- (9) ① $\frac{S}{4\pi^2}$ ② $\frac{Sm}{\pi\hbar^2}$
- (10) ①<②半导体
- (11) ①周期势场②负③小于
- (12) ①周期势场② $e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n}$ ③ 0
- (13) ①大于
- (14) ①3②3③N
- (15) ①原胞内原子间的相对振动②所有原子的整体运动

(16) ① $N_a k_B$ ②3

(17) ①面心立方 ② $\frac{16\pi^3}{a^3}$ ③ $\frac{\hbar^2}{2ma^2}(6\pi^2)^{\frac{2}{3}}$

(18) ①抗磁性 ②顺磁性 ③铁磁性 ④亚铁磁性 ⑤反铁磁性 ⑥轨道磁矩 ⑦自旋磁矩 ⑧感生磁矩

2.

(1) 面心立方

$$a = \sqrt[3]{\frac{M}{\rho N_A}} = \sqrt[3]{\frac{58.5 \times 4}{2.165 \times 10^6 \times 6.02 \times 10^{23}}} = 5.64 \text{ \AA}$$

(2)

$$\theta = 6^\circ, d = \frac{a}{\sqrt{3}}, \lambda = 2d \sin \theta = 0.681 \text{ \AA}$$

(3)

立方体切去六角（切点为每条棱的中点）形成的十四面体。

$$V = \frac{32\pi^3}{a^3} = 5.53 \times 10^{30} m^{-3}$$

3.

(1)

$$V(x) = A \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + B \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right) + C \cos\left(\frac{6\pi x}{a}\right)$$

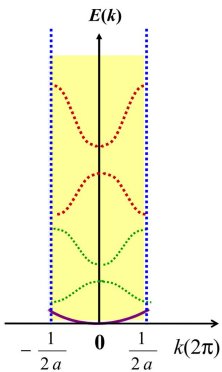
$$\begin{cases} A + B + C = V_1 \\ -B = V_2 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(A - C) = V_3 \end{cases}$$

$$\begin{cases} A = \frac{1}{2}(V_1 + V_2 + \sqrt{2}V_3) \\ B = -V_2 \\ C = \frac{1}{2}(V_1 + V_2 - \sqrt{2}V_3) \end{cases}$$

$$E_{g1} = |A| = \frac{1}{2}(V_1 + V_2 + \sqrt{2}V_3), E_{g2} = |B| = V_2, E_{g3} = |C| = \frac{1}{2}(V_1 + V_2 - \sqrt{2}V_3)$$

(2,3)

在图中的某一条能带上，作 k 空间 (k 正向) 的匀速运动，并且是循环运动，从 $-\frac{\pi}{a}$ 移出，从 $\frac{\pi}{a}$ 移入。



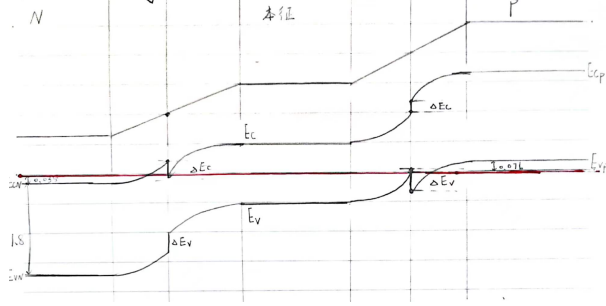
4.

(1)

$$E_{Fn} = E_{Fi_2} + k_B T \ln\left(\frac{N_D}{n_{i2}}\right) = E_{Fi_2} + 0.935eV$$

$$E_{Fp} = E_{Fi_2} - k_B T \ln\left(\frac{N_A}{n_{i2}}\right) = E_{Fi_2} - 0.976eV$$

(2)



$$\Delta E_C = 0.66 \Delta E_g = 0.66 \times (1.80 - 1.42) = 0.251eV$$

$$\Delta E_V = E_{g1} - E_{g2} - \Delta E_C = 0.34 \times (1.80 - 1.42) = 0.129eV$$

$$V_{Dn} = E_{Fn} - E_{Fi1} = 0.996eV, V_{Dp} = E_{Fi1} - E_{Fp} = 0.915eV$$

5.

(1)

$$m\ddot{\mu}_{2n} = -\beta_1(\mu_{2n} - \mu_{2n-1}) - \beta_1(\mu_{2n} - \mu_{2n+1})$$

$$m\ddot{\mu}_{2n+1} = -\beta_2(\mu_{2n+1} - \mu_{2n}) - \beta_1(\mu_{2n+1} - \mu_{2n+2})$$

(2)

$$\mu_{2n} = Ae^{i(\omega t - 2nqa)}, \mu_{2n+1} = Be^{i(\omega t - (2n+1)qa)}$$

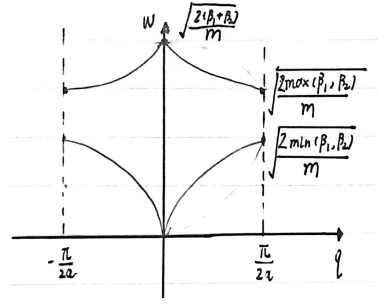
$$-m\omega^2 A = -\beta_2(A - Be^{iaq}) - \beta_1(A - Be^{-iaq})$$

$$-m\omega^2 B = -\beta_1(B - Ae^{iaq}) - \beta_2(B - Ae^{-iaq})$$

$$(m\omega^2 - \beta_1 - \beta_2)^2 - [\beta_1^2 + \beta_2^2 + \beta_1\beta_2(e^{2iaq} + e^{-2iaq})] = 0$$

$$\omega = \sqrt{\frac{1}{m}[\beta_1 + \beta_2 \pm \sqrt{\beta_1^2 + \beta_2^2 + 2\beta_1\beta_2\cos(2aq)}]}$$

(3)



(4)

$$v_a = \frac{d\omega}{dq} \Big|_{q=0} = a \sqrt{\frac{\beta_1 \beta_2}{2m(\beta_1 + \beta_2)}}$$

$$D(\omega) = \frac{L}{\pi v_a} = \frac{L}{\pi a} \sqrt{\frac{2m(\beta_1 + \beta_2)}{\beta_1 \beta_2}}$$