量统 2016-2017 郭永期末

Deschain

2022 年 4 月 27 日

注：以上题目除特别指出外，温度为 300K。

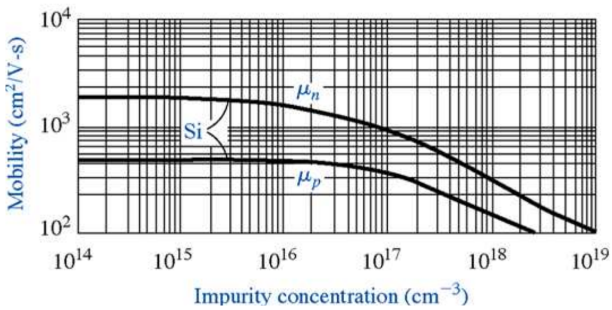
1　一、常用常数

玻尔兹曼常数 $k_B = 1.38 \times 10^{-23} J/K$；普朗克常数 $\hbar = 2.05 \times 10^{-34}$；自由电子质量 $m_0 = 0.91 \times 10^{-30}$；真空介电常数 $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-14} F/cm$；基本电荷电量 $q = 1.6 \times 10^{-19}$

二、材料参数

Si 材料：

带隙宽度 $E_g = 1.12eV$，本征载流子浓度 $n_i = 1.5 \times 10^{10}$



一、填空题

1. 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____________。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________。由若干个布拉菲格子相套而成的格子，叫做__________。其原胞中有______ 以上的原子。

2. 对于固体的能带，简约波矢 k 的取值范围要求在________________ 区域内，其取值总数等于______ 的总数。

3. 对于金属的能带，除填满电子的一系列能带后，还有部分被填充的能带，后者称为______；对于半导体材料的能带，最高填充的能带称为______，其上最低的空带称为______。

4. 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______；能带的表示有 ____________________、____________________、____________________ 三种图景。

5. 电子在三维周期性晶格中波函数的方程的解具有________________________ 的形式，式中________ 在晶格平移下保持不变（具有平移对称）。

6. 对于 4 族元素 Si，5 族元素 P 作为杂质，1 个 P 原子将可提供 1 个______，属于____ 主杂质，3 族

元素 B 作为杂质，1 个 B 原子将提供 1 个______，属于____ 主杂质。
7. 能带顶部电子的有效质量为____（填写正，或负）；能带底部电子的有效质量为____（填写正，或负）。
8. 温度升高，金属的导电率______，半导体的导电率______。对于金属，温度越高，金属中的晶格振动对电子的散射作用______，而在半导体中则是有更多的电子从______ 激发到______ 中。

二、简述题

1. 根据能带理论简述金属、半导体和绝缘体的导电性；并解释为什么半导体掺杂可以提高其导电能力？
2. 简述如何利用近自由电子近似模型得到能带图。

三、计算题

1. 一价金属具有体心立方结构，晶格常数 a 为 Å，试求费米面的半径和费米能量。
2. 有一补偿型非本征硅半导体，施主和受主杂质浓度均为 $2.5 \times 10^{-17} cm^{-3}$，试计算该材料的电导率。

一、填空题答案

1.①布拉菲格子　②倒格子　③复式格子　④两个

2.①第一布里渊区　②原胞

3.①导带　②价带　③导带

4.①禁带　②简约布里渊区图景　③周期布里渊区图景　②扩展布里渊区图景

5.①$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{R_n})=e^{i\vec{k}\cdot\vec{R_n}}u_{\vec{k}}(\vec{r})$　②$u_{\vec{k}}(\vec{r})$

6.①电子　②施　③空穴　④受

7.①负　②正

8.①减小　②增大　③越大　④导带　⑤价带

二、简述题答案

1.①金属：价带完全填充，导带部分填充，导带中的电子导电。

②绝缘体：价带完全填充，导带是空带，都不能导电。带隙宽，价带中的电子很难被激发到导带上。

③半导体：价带完全填充，导带是空带，但是带隙较窄。室温下，价带的一部分电子可以热激发到导带上，导带和价带都变成部分填充，可以导电。

④掺杂：杂质分为施主和受主。施主能级位于带隙中接近导带的位置，其电子在室温下可以被激发到导带中；受主能级位于带隙中接近价带的位置，价带电子在室温下可以被激发到受主能级上。因此，杂质可以改善半导体的导电性能。

2. 使用自由电子的波函数和周期势场的平均值 $\overline{V}$ 作为零级近似，周期势场的起伏量 $DeltaV=V-\overline{V}$ 作为微扰。在布里渊区边界，能级是简并的，使用简并微扰处理，能级劈裂成两个，即能带之间的带隙。

三、计算题

1. 设近自由电子浓度为 n，费米球半径为 k_F，费米能量为 E_F，则

$$n=\frac{2}{a^3}=\frac{2}{(3\times10^{-10})^3}=7.4\times10^{28}m^{-3}$$

$$k_F=(3\pi n)^{\frac{1}{3}}=1.3\times10^{10}m^{-1}$$

$$E_F=\frac{\hbar^2k_F^2}{2m_0}=1.02\times10^{-18}J=6.4eV$$

2. 对于完全补偿半导体，载流子浓度为本证载流子浓度，电子和空穴浓度相同，$n=5\times10^{17}cm^{-3}$，杂志总浓度为 $5\times10^{17}cm^{-3}$。电子迁移率为 $400cm^2/v\cdot s$，空穴迁移率为 $190cm^2/v\cdot s$。$\mu_n=400cm^{-3}/v\cdot cm^{-1}/s$，$\mu_p=178cm^{-3}/v\cdot cm^{-1}/s$，$n_i=1.5\times10^{10}cm^{-3}$。电导率为 $\sigma=en_i(\mu_n+\mu_p)=1.4\times10^{-6}(\Omega cm)$