固物 2020 期末

Deschain

2022 年 6 月 9 日

1. 填空题（每空 1 分，共 45 分）

(1) 具有长程有序的固体结构，即原子按照一定的周期规律排列的固体物质，称为____，为了描述这种周期性结构，将这种空间排列称为____，周期性重复单元称为____，其中体积最小的称为 ____。

(2) Si 的晶体结构为________结构，Si 原子之间以____键结合，属于____（简单/复式）晶格，其对应的布拉菲格子为________格子，倒格子为________ 格子。布里渊区为在倒格子空间中，以某倒格点为中心，由中心格点到相邻格点的连线的垂直平分线所围成的多面体。

(3）单晶硅在常温下__导电，离子晶体在低温下____导电。(能/不能)

(4) 有效质量与电子质量可以有很大差别，这是由于有效质量包含了________________的作用。能带顶部的电子的有效质量为 __，此时在外场作用下，电子从外场获得的动量____（大于/小于）它交给晶体的动量。

(5）一般情况下，本征半导体的费米能级 E_{F_i} 可以近似认为位于________。N 型掺杂半导体的费米能级 E_{F_n} 向____靠近；P 型掺杂半导体的费米能级 E_{F_P} 向____靠近（导带/价带）。若 P 型掺杂浓度为 N_a，温度为 T，则有关系式 $E_{F_i}-E_{F_P}=k_BTln(\frac{N_a}{n_i})$。

(6）一般半导体材料中电子的迁移率__（> / < / =）空穴迁移率，这主要是由于____的有效质量更大。

(7) 经典电子论中，电子的功函数为电子真空能级与______的能量差，由材料本身的性质决定；而量子理论中电子的功函数为电子真空能级与________的能量差。

(8) 有一掺杂半导体，当温度从 0K 开始逐渐升高至其熔点时，半导体中的载流子浓度会经历先____，然后________，最后再____的过程。

(9) PN 结的形成。在 P 型半导体和 N 型半导体结合后，在其交界处产生了电子和空穴的浓度差，故电子会从 N 区向 P 区发生____ 运动。该运动的结果使得交界面出 P 区一侧失去____留下带__电的杂质离子，N 区同理。这些不能移动的带电粒子在交界面附近形成了__________，其中的电场方向为________________，电场强度在 ____________________，其宽度与掺杂浓度成____。另一方面，该电场使 P 区和 N 区的 ____（多数/少数）载流子向另一侧发生____运动。最后，这两种运动达到动态平衡。

(10）一般的 PN 结在正常导通工作时，正极应接在_（P/N）区。光电二极管也是由一个 PN 结组成的器件，当有特定频率的光入射到结区时，结区会产生大量电子——空穴对，若想将光生载流子引出形成光电流，还需要外加偏压，此时正极应接在_（P/N）区。

(11）如果要使金属和 N 型半导体形成肖特基接触，需要金属功函数__（> / < / =）半导体功函数，肖特基势垒高度等于金属功函数和半导体__________之差。

(12）简单晶格中的格波不存在______（声学波/光学波）；复式晶格的固体中格波存在光学波和声学波。从物理意义的角度看，长波极限时，复式晶格声学波的特征为原胞做整体运动，频率较__（高/低)；而光学波的特征为__________________________________，频率较__。

(13）某一维原子链中有 N 个原子，相邻原子间距为 a。考虑周期性边界条件，若为单原子链，则简约布

里渊区 $(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ 中格波波数的取值总数为_。若为交替排列的双原子链，简约布里渊区中格波波数的取值总数为__。

(14) 霍尔效应的实际应用。如图 1 所示，某沿 y,z 方向厚度皆为 1cm 的长方体未知掺杂半导体材料，沿 +x 方向通 50mA 的稳恒电流，沿 z 方向加磁感应强度为 0.5T 的静磁场，得到 y=0cm 和 y=0.1cm 面间的电势差为 +0.4mV。则该材料为_型掺杂，载流子浓度为______________。(洛伦兹力遵循左手定则)

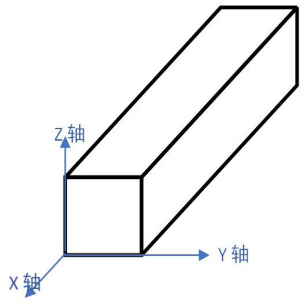


图 1

2. (12 分) 石墨烯是一种 C 原子按正六边形排列的二维晶体，如图 2 所示，图中黑点代表 C 原子。相邻两个 C 原子间距为 0.142nm（本题中长度相关单位量纲请用 nm，数值计算误差在 5% 以上视为错误。）

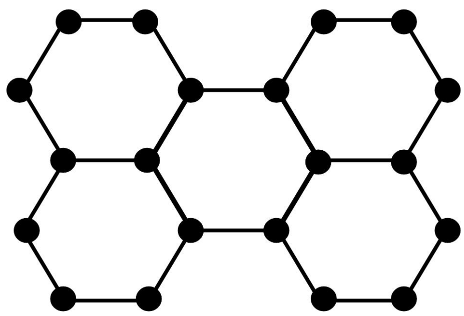


图 2

(1) 求石墨烯的晶格常数，原胞面积，以及倒格基矢的模长与夹角。

(2) 画出第一、二、三布里渊区，并计算这三个布里渊区各自的面积。

(3) 如果每个 C 原子有 4 个价电子，求自由电子费米圆半径，它会与第三布里渊区以外的布里渊区相交。如果考虑周期势场的微扰，请简单描述费米圆的形状应该如何修正（答对任意一点即可，无需画图)?

3.（15 分）在绝对零度条件下，设一维晶体由 N 个双原子分子组成，如图 3 所示。晶体长度 L=Na，a 为相邻分子间距，每个分子中两个原子的间距为 2b。

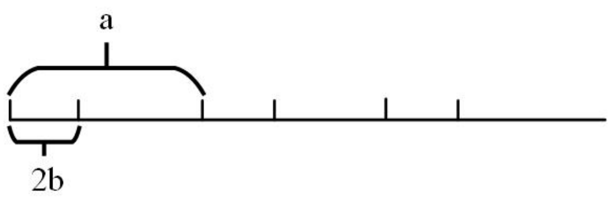


图 3

（1）若电子的势能函数可以表示为 δ 函数之和

$$W(x) = -V_0 \sum_{n=0}^{N-1} [\delta(x - na + b) + \delta(x - na - b)]$$

V_0 为大于零的常数，请分别通过计算傅里叶系数得到第一、二布里渊区上的带隙宽度。
（2）在第（1）问的基础上，如果每个原子只有一个价电子，当 $a > 4b$ 时，晶体是否为导体？特殊地，当 $a = 4b$ 时，晶体是否为导体？请叙述理由。
（3）设 $a > 4b$，在第（1）问的基础上，如果每个原子有两个价电子，想要通过调控每个分子中两个原子的间距来使该一维晶体导电，请问 a 和 b 应该满足怎样的关系？

4.（13 分）室温 $300K$ 时本征半导体 X 和 p 型掺杂半导体材料 Y 形成异质结，已知 X 和 Y 的禁带宽度分别为 $E_{gX} = 0.66eV$ 和 $E_{gY} = 1.42eV$, 电子亲和能分别为 $\chi_X = 4.13eV$ 和 $\chi_Y = 4.07eV$，本征载流子浓度分别为 $n_{iX} = 2.4 \times 10^{13} cm^{-3}$ 和 $n_{iY} = 1.79 \times 10^{6} cm^{-3}$，Y 的掺杂浓度为 $N_a = 10^{16} cm^{-3}$。
（1）求导带能级差 ΔE_C 和价带能级差 ΔE_V。
（2）求 X 和 Y 费米能级 E_{FX} 和 E_{FY} 的位置，以及它们之间的接触电势差 V_D。
（3）画出平衡时该异质结的能带图，并在图中标注真空能级、费米能级、导带底和价带顶的位置，以及禁带宽度、电子亲和能、ΔE_C、ΔE_V、V_D。（画出大致趋势即可，作图不要求数值比例严格）

5.（15 分）有一长度为 L 的一价正负离子交错构成的一维晶格，平衡时正负离子间距为 a，正负离子质量分别为 2m 和 m，只计近邻两离子的相互作用势：

$$U(r) = -\frac{q^2}{r} + \frac{b}{r^{2n}}$$

其中，q 为电子电荷，b 和 n 为参量常数，求：
（1）参数 b（用 q、n 和 a 表示）；
（2）已知简谐近似时，在平衡位置附近有 $U(r) = U(a) + \frac{1}{2}\beta(r-a)^2$，求恢复力系数 β。
（3）写出相邻的第 2n 和第 2n+1 两个离子的运动方程。考虑周期性边界条件，并分别代入简谐振动试解，根据方程解存在的条件，求出可能发生的格波频率解 ω。
（4）画出简约布里渊区中格波色散关系曲线示意图，标出驻波点。
（5）求长波极限时，光学波的频率 ω_0 和声学波的频率 ω_A。

答案:

1. 填空题

（1）①晶体②晶格③晶胞④原胞

（2）①面心立方②共价③复式④体心立方

（3）①能②不能

（4）①晶格的周期性势场②负③小于

（5）①带隙中央②导带③价带

（6）①>②空穴

（7）①导带底②费米能级

（8）①增大②基本不变③增大

（9）①扩散②空穴③负④空间电荷区⑤从 N 区指向 P 区⑥空间电荷区中间某位置⑦反比 ⑧少数⑨漂移

（10）①P②N

（11）①>②电子亲和能

（12）①光学波②低③相邻原子位相相反，同种原子位相相同④高

（13）①N①$2N$

（14）①P②$3.90625 \times 10^{21} m^{-3}$

2.

（1）

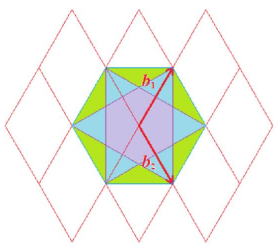
$$a = 0.142\sqrt{3} = 0.2460nm$$

$$S = 6 \times \frac{\sqrt{3}}{4} \times 0.142^2 = 5.239 \times 10^{-2} nm^2$$

$$\boldsymbol{b_1} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, \sqrt{3}), \boldsymbol{b_2} = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, -\sqrt{3})$$

$$\|\boldsymbol{b_1}\| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} = 29.50nm^{-1}, <\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}> = \frac{2\pi}{3}$$

（2）



紫色、蓝色、绿色部分依次为第一、二、三布里渊区。

$S_1 = S_2 = S_3 = (\frac{4\pi}{3a})^2 \times \frac{\sqrt{3}}{4} \times 6 = 753.6nm^{-2}$

（3）$k_F = \sqrt{2\pi n} = 30.98nm^{-2}$

3.

（1）

$$W(x) = \sum V_n e^{j\frac{2\pi n}{a}x}, V_n = \frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} W(x)e^{-j\frac{2\pi n}{a}x}dx = \frac{2V_0}{a}cos(\frac{2\pi nb}{a})$$

$$V_{g_1} = |2V_1| = \frac{4V_0}{a}cos(\frac{2b}{a}\pi), V_{g_2} = |2V_2| = \frac{4V_0}{a}cos(\frac{4b}{a}\pi)$$

（2）$a > 4b$ 不是导体，$a = 4b$ 是导体。

（3）$a = 8b$

4.

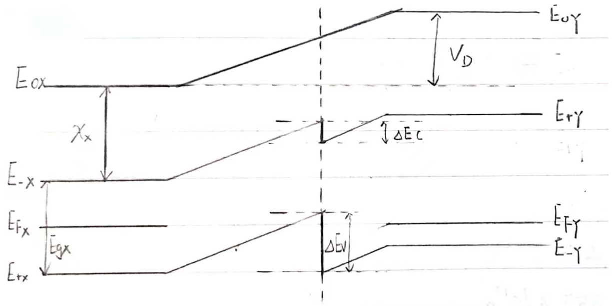
(1)

$\Delta E_C = \chi_X - \chi_Y = 0.06eV, \Delta E_V = |(\chi_X + E_{gX}) - (\chi_Y + E_{gY})| = 0.7eV$

(2)

$$E_{FX} = -(\chi_X + \frac{1}{2}E_{gX}) = -4.46eV, E_{FiY} = -(\chi_Y + \frac{1}{2}E_{gY}) = -4.78eV$$
$$E_{FY} = E_{FiY} - k_B T ln(\frac{N_a}{n_i}) = -5.36eV, V_D = \frac{E_{FX} - E_{FY}}{e} = 0.9V$$

(3)



5.

(1)

$$\left.\frac{dU}{dr}\right|_a = \frac{q^2}{r^2} - \frac{2nb}{r^{2n+1}} = 0, b = \frac{q^2}{2n}a^{2n-1}$$

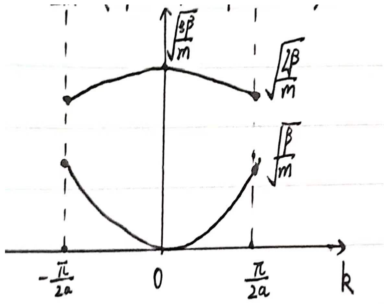
(2)

$$U(r) = U(a) + \left.\frac{dU}{dr}\right|_a (r-a) + \frac{1}{2}\left.\frac{d^2U}{dr^2}\right|_a (r-a)^2 = U(a) + \frac{(2n-1)q^2}{2a^3} = U(a) + \frac{1}{2}\beta(r-a)^2$$
$$\beta = \frac{(2n-1)q^2}{a^3}$$

(3)

$$m\ddot{\mu}_{2n} = \beta(\mu_{2n+1} + \mu_{2n-1} - 2\mu_{2n})$$
$$m\ddot{\mu}_{2n+1} = \beta(\mu_{2n+2} + \mu_{2n} - 2\mu_{2n+1})$$
$$\mu_{2n} = Ae^{i(\omega t - 2nka)}, \mu_{2n+1} = Be^{i(\omega t-(2n+1)ka)}$$
$$\Delta = (2\beta - m\omega^2)(2\beta - 2m\omega^2) - 4\beta^2 sin(ka)cos(ka) = 0$$
$$\omega^2 = \frac{\beta}{2m}(3 + \sqrt{1 + sin(2ka)}) = \frac{(2n-1)q^2}{2ma^3}(3 + \sqrt{1 + sin(2ka)})$$

(4)



(5)

$$\omega_A = 0, \omega_0 = \sqrt{\frac{3\beta}{m}} = \sqrt{\frac{3(2n-1)q^2}{ma^3}}$$