

固物 2020 期末

Deschain

2022 年 6 月 15 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 $E_{F_i} - E_{F_p} = k_B T \ln(\frac{N_a}{n_i})$ 。
- (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 $y=0\text{cm}$ 和 $y=0.1\text{cm}$ 面间的电势差为 $+0.4\text{mV}$ 。则该材料为__型掺杂，载流子浓度为_____。(洛伦兹力遵循左手定则)

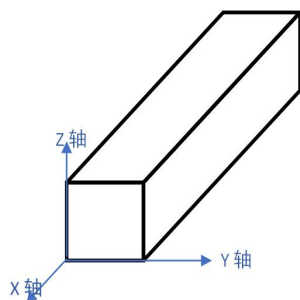


图 1

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。)

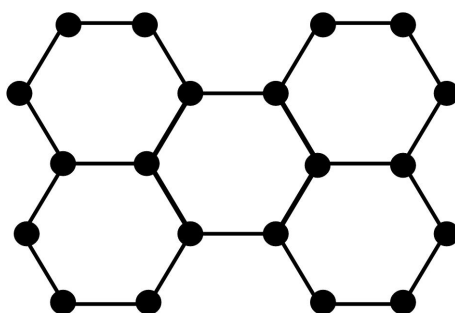


图 2

- (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 $2b$ 。

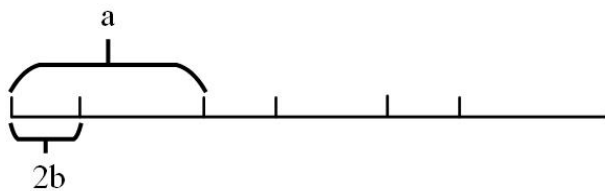


图 3

(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 $n_{iY} = 1.79 \times 10^6cm^{-3}$, 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金刚石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势阱底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界面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原胞内原子相对运动④高
- (13) ①N①N
- (14) ①P② $3.90625 \times 10^{22} m^{-3}$

2.

(1)

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

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

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, \sqrt{3}), \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, -\sqrt{3})$$

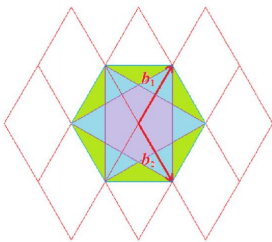
$$\|\mathbf{b}_1\| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} = 29.50nm^{-1}, \langle \mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2 \rangle = \frac{2\pi}{3}$$

(2)

紫色、蓝色、绿色部分依次为第一、二、三布里渊区。

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

$$(3) k_F = \sqrt{2\pi n} = 30.98nm^{-1}$$



3.

(1)

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

$$V_{g1} = |2V_1| = \frac{4V_0}{a} \cos\left(\frac{2b}{a}\pi\right), V_{g2} = |2V_2| = \frac{4V_0}{a} \cos\left(\frac{4b}{a}\pi\right)$$

(2) $a > 4b$ 不是导体, $a = 4b$ 是导体。

(3) $a = 8b$

4.

(1)

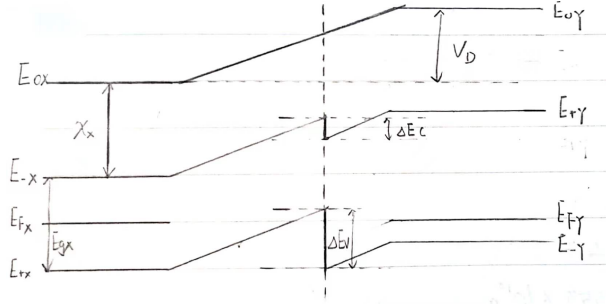
$$\Delta E_C = \chi_X - \chi_Y = 0.06 \text{ eV}, \Delta E_V = |(\chi_X + E_{gX}) - (\chi_Y + E_{gY})| = 0.7 \text{ eV}$$

(2)

$$E_{FX} = -(\chi_X + \frac{1}{2}E_{gX}) = -4.46 \text{ eV}, E_{FY} = -(\chi_Y + \frac{1}{2}E_{gY}) = -4.78 \text{ eV}$$

$$E_{FY} = E_{FiY} - k_B T \ln\left(\frac{N_a}{n_i}\right) = -5.36 \text{ eV}, V_D = \frac{E_{FX} - E_{FY}}{e} = 0.9 \text{ V}$$

(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)

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

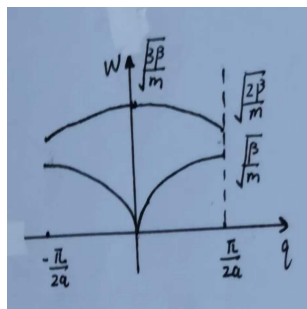
$$2m\ddot{\mu}_{2n+1} = \beta(\mu_{2n+2} + \mu_{2n} - 2\mu_{2n+1})$$

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

$$\Delta = (2\beta - m\omega^2)(2\beta - 2m\omega^2) - 4\beta^2 \cos^2(ka) = 0$$

$$\omega^2 = \frac{\beta}{2m} (3 \pm \sqrt{9 - 8\sin^2(aq)}) = \frac{(2n-1)q^2}{2ma^3} (3 \pm \sqrt{9 - 8\sin^2(aq)})$$

(4)



(5)

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