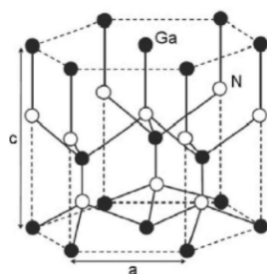


作业 1

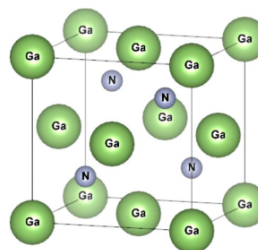
廖汶锋

2024 年 3 月 9 日

- 1.1. GaN 材料由 N 原子（原子量 14，80pm）和 Ga 原子（原子量 69.723，135pm）按原子数 1: 1 构成。GaN 晶体有两种类型，一种是纤锌矿型结构，其晶格常数的公认值为 $a = 0.3189\text{nm}$ ， $c = 0.5185\text{nm}$ ，其结构如下图所示；另一种是闪锌矿型结构，其晶格常数的公认值为 0.452nm 。分别计算二者的密度，并进行比较。



(a) 纤锌矿结构



(b) 闪锌矿结构

解. 对于纤锌矿结构，每一个晶胞包含 6 个 Ga 原子和 6 个 N 原子，所以利用密度公式【此处 $a = 0.3189\text{nm}$ 】

$$\begin{aligned}\rho_{\text{GaN}, \text{wurtzite}} &= \frac{6 \left(\frac{M_{\text{Ga}} + M_{\text{N}}}{N_A} \right)}{6 \cdot \frac{1}{2} a^2 \cdot \frac{\sqrt{3}}{2} \cdot c} \\ &= \frac{4}{\sqrt{3}} \cdot \frac{(M_{\text{Ga}} + M_{\text{N}}) / N_A}{a^2 c}\end{aligned}\quad (1.1-1)$$

解得 $\rho_{\text{GaN}, \text{wurtzite}} = 6.091\text{g/cm}^3$ 。

对于闪锌矿结构，每一个晶胞包含 4 个 Ga 原子和 4 个 N 原子，所以利用密度公式【此处 $a = 0.452\text{nm}$ 】

$$\rho_{\text{GaN}, \text{zincblende}} = \frac{4 \left(\frac{M_{\text{Ga}} + M_{\text{N}}}{N_A} \right)}{a^3}\quad (1.1-2)$$

解得 $\rho_{\text{GaN}, \text{zincblende}} = 6.024\text{g/cm}^3$ 。

对比两种结构的 GaN 晶体，纤锌矿结构的密度略大于闪锌矿结构。

- 1.2. 已知温度为 300K 时，Si 的晶格常数为 5.431\AA ，GaAs 的晶格常数为 5.653\AA 。分别计算 Si、GaAs 的 $\{100\}$ 、 $\{110\}$ 、 $\{111\}$ 面的面间距。

解. 因为 Si 是金刚石结构, 可以看成是两个面心立方沿着体对角线滑移 $1/4$ 嵌套而成, 所以 $\{100\}$ 和 $\{110\}$ 都是由单原子层所组成的晶面。

$$d_{100,\text{Si}} = a_{\text{Si}}/4 = 1.358\text{\AA} \quad (1.2-1)$$

$$d_{110,\text{Si}} = a_{\text{Si}}/2\sqrt{2} = 1.920\text{\AA} \quad (1.2-2)$$

但是 $\{111\}$ 是由一个 Si 原子及其滑移 $(1/4, 1/4, 1/4)$ 的 Si 原子所组成的双原子层, 所以其面间距刚好等于单个面心立方的 $\{111\}$ 面间距。

$$d_{111,\text{Si}} = a_{\text{Si}}/\sqrt{3} = 3.136\text{\AA} \quad (1.2-3)$$

另一方面, GaAs 是闪锌矿结构, 所以可以看成是由 Ga 原子和 As 原子分别组成的两个面心立方沿着体对角线滑移 $1/4$ 嵌套而成。因此, 其布拉菲格子就是面心立方。

$$d_{100,\text{GaAs}} = a_{\text{GaAs}}/2 = 2.8265\text{\AA} \quad (1.2-4)$$

$$d_{110,\text{GaAs}} = a_{\text{GaAs}}/2\sqrt{2} = 1.9986\text{\AA} \quad (1.2-5)$$

$$d_{111,\text{GaAs}} = a_{\text{GaAs}}/\sqrt{3} = 3.2638\text{\AA} \quad (1.2-6)$$

1.3. 近年来, 硅烯、磷烯等新型材料备受关注。与石墨烯类似, 硅烯也为单层蜂窝状网格结构, 设晶格常数为 a 。

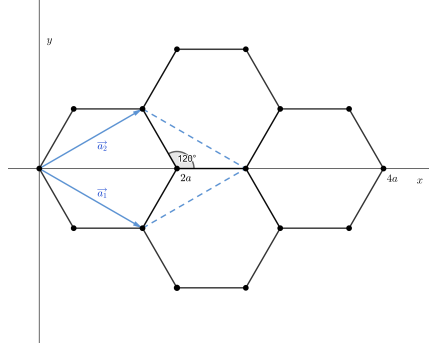
- 晶体的二维晶格为布拉菲格子还是复式格子? 画出其原胞的一种示意图, 并给出原胞基矢的向量表示。规定: x 轴正方向为水平向右, y 轴正方向为竖直向上。
- 计算倒格子基矢, 观察倒格子对应的格点图, 你有什么结论?
- 画出第一布里渊区, 并求其面积。
- 假设相邻硅原子间的键长为 1.69\AA , 计算其面密度。

解. (a) 单层蜂窝状网格结构就是复式格子。题目所求的原胞示意图如图 2a 所示。此时, 原胞基矢为

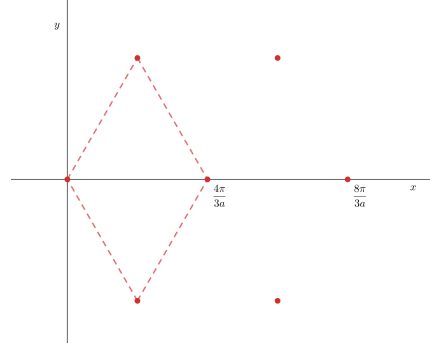
$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \sqrt{3}a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \vec{i} - \frac{1}{2} \vec{j} \right) \\ \vec{a}_2 = \sqrt{3}a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \vec{i} + \frac{1}{2} \vec{j} \right) \end{cases} \quad (1.3-1)$$

(b) 不妨设 $\vec{a}_3 = \vec{k}$ ，所以倒格子基矢为

$$\begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{1}{2} \vec{i} - \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{j} \right) \\ \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)} = \frac{4\pi}{3a} \left(\frac{1}{2} \vec{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} \vec{j} \right) \end{cases} \quad (1.3-2)$$



(a) 硅烯的二维晶格结构和原胞示意图



(b) 硅烯的倒格子点阵

对比硅烯的正格子点阵和倒格子点阵，可以发现倒格子点阵逆时针旋转 90° 后，与正格子点阵相似。

(c) 题目所求的第一布里渊区如图 3 所示，为倒格子点阵的维格纳-赛茨 (W-S) 原胞。其面积为等于原胞面积 $= \|\vec{b}_1 \times \vec{b}_2\| = \frac{8\sqrt{3}\pi^2}{9a^2}$

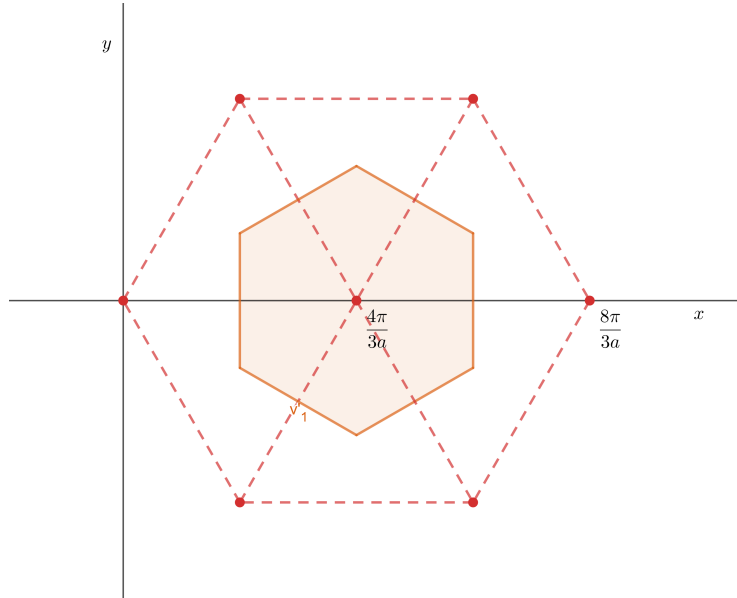


图 3: 硅烯的第一布里渊区

- (d) 硅烯的原胞包含 2 个 Si 原子，原胞面积 $= ||\vec{a}_1 \times \vec{a}_2|| = \frac{3\sqrt{3}}{2}a^2$ 。
所以硅烯的原子面密度

$$\sigma_{silicene} = \frac{2}{\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{4\sqrt{3}}{9a^2} = 2.6953 \times 10^{15} \text{cm}^{-2} \quad (1.3-3)$$

质量面密度

$$\rho_{silicene} = \frac{M_{Si}}{N_A} \cdot \sigma_{silicene} = 1.2575 \times 10^{-7} \text{g/cm}^2 \quad (1.3-4)$$