固体物理知识点

Main points of solid state physics

冯 雪

x-feng@tsinghua.edu.cn

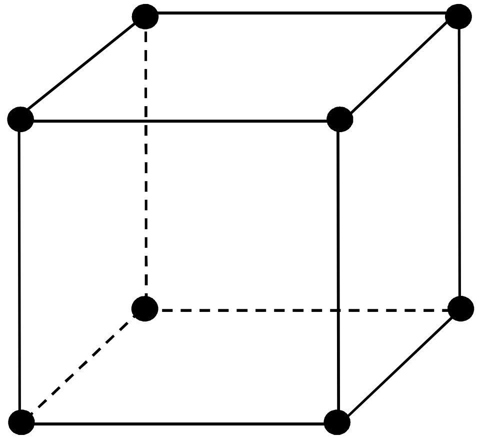
罗姆楼2-101B

第一部分：固体的结构

- 晶体的结构
  - 晶体是原子排列具有空间周期性的固体
  - 基元（basis）、晶格或点阵（lattice）、晶胞 （cell）
  - 惯用晶胞和原胞，基矢，布拉菲点阵
  - 描述晶体方向性的标志：晶向、晶面、密勒指数
  - 面间距、堆积比、晶面密度（每个晶面的独有的原子个数）
- 倒易点阵和布里渊区
  - X射线衍射、布拉格定律 $e^{i\vec{G}_h\cdot\vec{R}_n}=1$
  - 倒格矢和倒格空间（由原胞基矢定义）
  - 布里渊区边界的物理意义
- 无序固体的结构——了解，期末不要求
- 晶体中的缺陷和扩散——了解，期末不要求

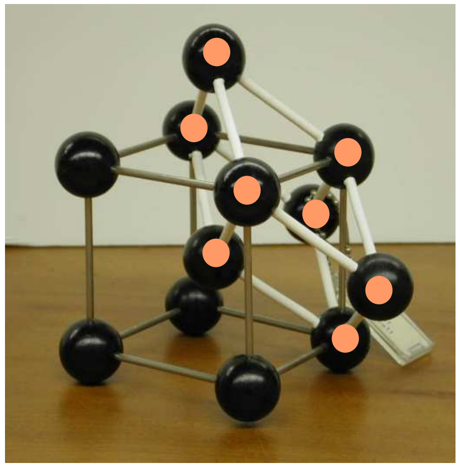
几种重要的晶格结构

- 简单立方



$$\begin{cases} \alpha_1 = a\vec{i} \\ \alpha_2 = a\vec{j} \\ \alpha_3 = a\vec{k} \end{cases}$$

- 体心立方

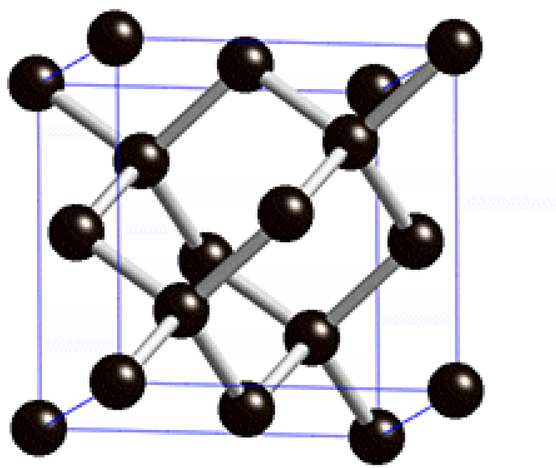


$$\alpha_1 = \frac{a}{2}\left(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}\right)$$

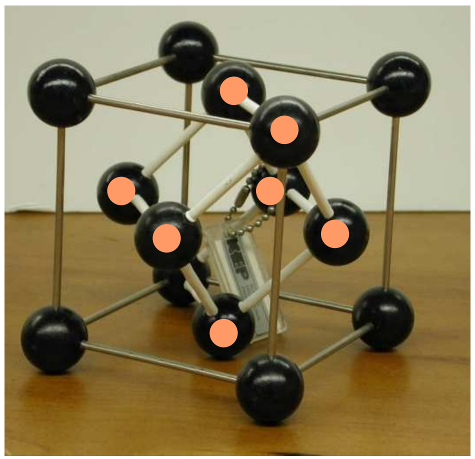
$$\alpha_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}\right)$$

$$\alpha_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}\right)$$

- 金刚石结构



- 面心立方



$$\alpha_1 = \frac{a}{2}\left(\vec{j} + \vec{k}\right)$$

$$\alpha_2 = \frac{a}{2}\left(\vec{k} + \vec{i}\right)$$

$$\alpha_3 = \frac{a}{2}\left(\vec{i} + \vec{j}\right)$$

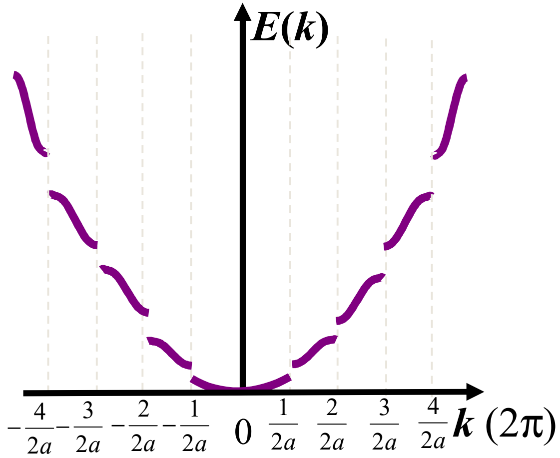
第二部分：固体的结合

- 晶体的结合能与内能
  - U(r)、平衡间距
- 晶体结合的量子理论——了解，期末不要求
  - 分子轨道、原子轨道线性组合法
  - 电离度
- 离子晶体
  - 马德隆常数
- 共价晶体
  - 轨道杂化
- 金属结合
- 范德瓦尔斯结合
- 原子负电性——电离能与亲和能

第三部分：固体能带理论

- 布洛赫定理 $$\psi(x+R_n)=e^{ik\cdot R_n}\psi(x)$$

- 一维近自由电子近似
  - 能带、带隙的形成
  - 三种布里渊区图景



- 布洛赫电子的准经典运动
  - 波包描述
  - 电子速度、加速度、有效质量、准动量

- 导体、绝缘体和半导体的能带解释
  - 满带不导电
  - 电子与空穴

第四部分：经典金属电子论

- 德鲁德模型
  - 独立自由电子近似——总能量=动能
  - 电子类似理想气体分子，遵循玻尔兹曼统计规律
  - 单位时间内电子发生碰撞的几率是1/τ，τ为弛豫时间

$$\frac{dp}{dt} = -eE - \frac{p}{\tau}$$

电子运动方程

$$J = (\frac{ne^2\tau}{m})E$$

电流密度方程

- 索末菲模型
  - 自由电子费米气体（free electron Fermi gas）

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/k_BT} + 1}$$

- 基于能带理论的晶体电子输运过程

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau\left(E_F\right)}{m^*}$$

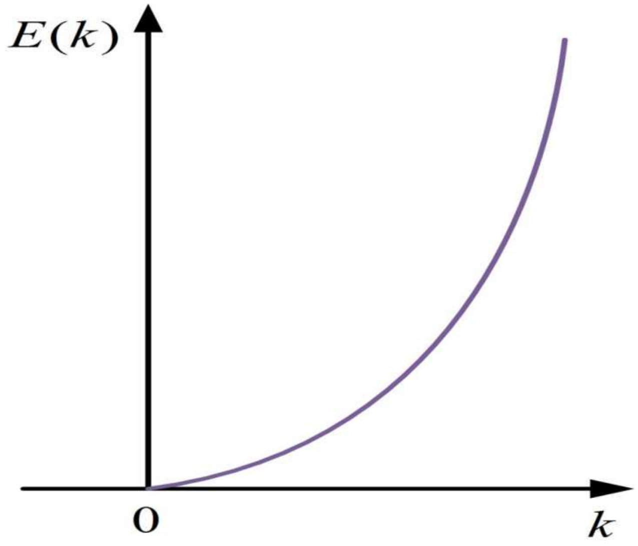
自由电子的运动模型

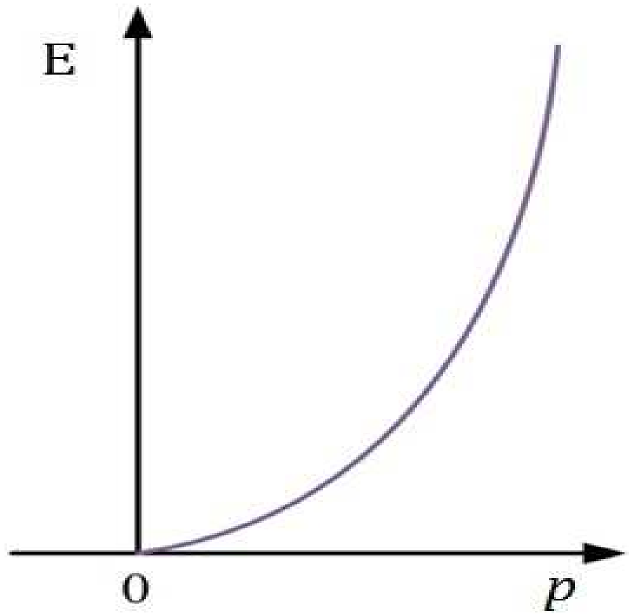
量子力学： $$E(\boldsymbol{k})=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

电子质量： $$\frac{1}{m}=\frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2E}{dk^2}$$

经典力学： $$E(p)=\frac{p^2}{2m}$$

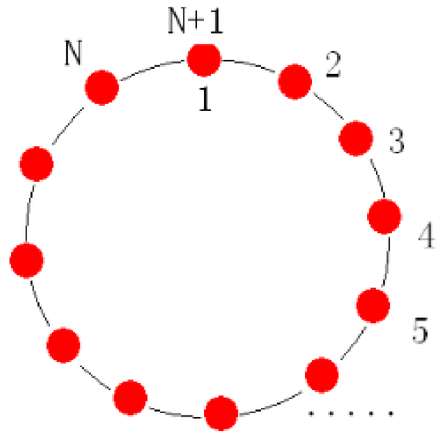
电子质量： $$\frac{1}{m}=\frac{d^2E}{dp^2}$$

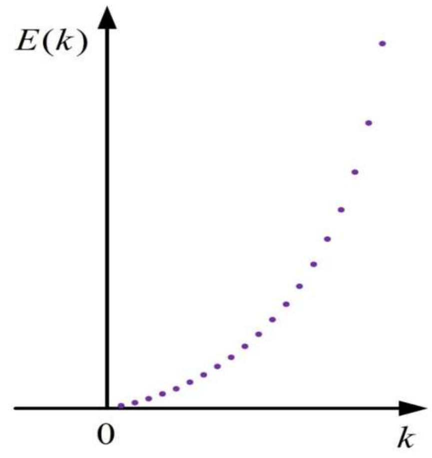




重要的概念

- 费米统计分布
  - 费米能级E_F由系统中电子总数N决定
  - 费米能级E_F并不是单个电子的能量本征值
- 周期性边界条件（波恩-卡门条件)
  - 物理实质——忽略边界的影响
- 状态密度
  - k 标度下的能态分布密度g_k
  - 能量标度下的态密度$g(E)$
  - 费米球、费米动量（费米球半径）、费米温度
  - 索末菲展开——不要求





第五部分：固体的电特性

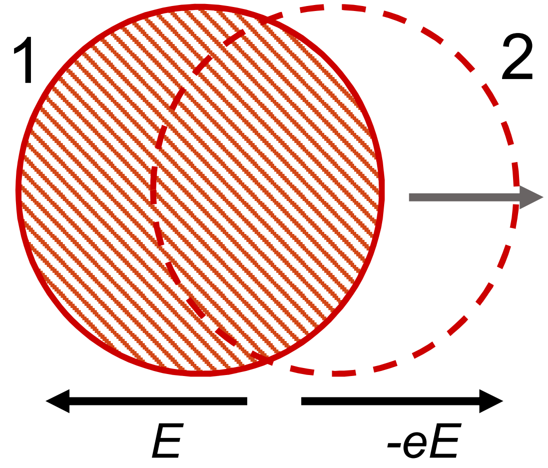
- 自由电子的输运问题——金属的导电性
  - 非(热)平衡状态下的分布函数
  - 半满带中的准经典运动
  - 波尔兹曼方程——漂移和碰撞

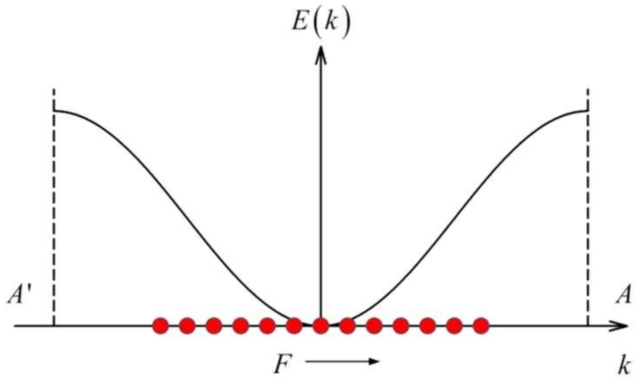
$$\frac{df}{dt}=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{漂移}+\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{碰撞}=0$$

  - 考虑能带以后金属的导电率

$$\sigma_0=\frac{ne^2\tau\left(E_F\right)}{m^*}$$

$$\tau\left(-\frac{eE}{\hbar}\right)$$

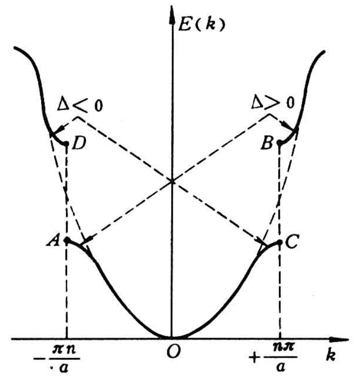




第五部分：固体的电特性

- 半导体中输运过程

1.半导体中的载流子浓度和费米能级



- 能态密度抛物线近似

$$g(E)=\frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2}E^{1/2}$$

- 导带底和价带顶附近的能态密度

$$N_-(E)=\frac{4\pi(2m_-^*)^{3/2}}{h^3}\sqrt{(E-E_-)}\qquad N_+(E)=\frac{4\pi(2m_+^*)^{3/2}}{h^3}\sqrt{(E_+-E)}$$

$$E_\pm=\begin{cases}\overline{V}+T_n+|V_n|+\Delta^2T_n\left(\dfrac{2T_n}{|V_n|}+1\right)\\ \overline{V}+T_n-|V_n|-\Delta^2T_n\left(\dfrac{2T_n}{|V_n|}-1\right)\end{cases}$$

- 载流子浓度与有效能级密度——玻尔兹曼近似

$$p=N_+e^{-(E_F-E_+)/k_BT}\qquad n=N_-e^{-(E_--E_F)/k_BT}$$

$$N_+=\frac{2(2\pi m_+^*k_BT)^{3/2}}{h^3}\qquad N_-=\frac{2(2\pi m_-^*k_BT)^{3/2}}{h^3}$$

第五部分：固体的电特性

- 半导体中输运过程

2.本征激发

- 本征载流子浓度
- 本征费米能级

$$n_i = n = p = \left(N_- N_+\right)^{1/2} e^{-E_g/2k_BT}$$

$$E_{Fi} = \frac{1}{2}(E_- + E_+) + \frac{3}{4} k_B T \ln(m_+^* / m_-^*)$$

3.杂质激发

费米能级 $E_F = E_{Fi} + k_B T \ln(n / n_i)$

N型半导体：

载流子浓度： $n \approx \left\langle \begin{matrix} (N_- N_D)^{1/2} e^{-E_i/2k_BT}, low\ T \\ N_D, \quad high\ T \end{matrix} \right\rangle, \quad p = n_i^2 / n$

费米能级 $E_F = E_{Fi} - k_B T \ln(p / n_i)$

P型半导体：

载流子浓度： $p \approx \left\langle \begin{matrix} (N_A N_+)^{1/2} e^{-E_i/2k_BT}, low\ T \\ N_A, \quad high\ T \end{matrix} \right\rangle, \quad n = n_i^2 / p$

补偿半导体：

N型： $n_0 = \frac{(N_d - N_a)}{2} + \sqrt{\left(\frac{(N_d - N_a)}{2}\right)^2 + n_i^2}$ 总的杂质浓度:$N_{doping} = N_A + N_D$

第五部分：固体的电特性

- 半导体中输运过程

4.载流子的迁移

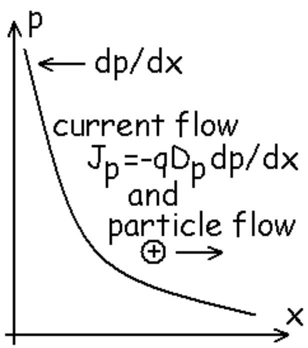
$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m^*} = nq\frac{q\tau}{m^*} = nq\mu \qquad \sigma = nq\mu_- + pq\mu_+$$

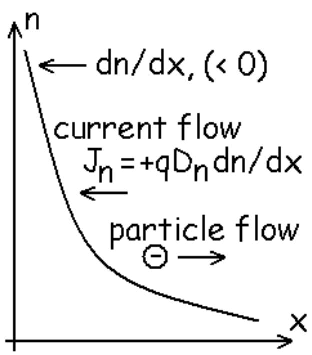
- 载流子的迁移率
- 影响电导率和迁移率的因素，金属与半导体导电率的对比

5.载流子的漂移和扩散

- 非平衡载流子（产生原因） $n=n_0+\delta n$，$p=p_0+\delta p$，$np>n_i^2$
- 准费米能级 $n_0+\Delta n = n_i \exp(\frac{E_{Fn}-E_{Fi}}{kT}),\ p_0+\Delta p = n_i \exp(\frac{E_{Fi}-E_{Fp}}{kT})$
- 复合过程 $\Delta n = (\Delta n)_0 \exp(-t/\tau)$
- 载流子的扩散运动
- 载流子扩散和复合 $\frac{d}{dx}\left(D\frac{dN}{dx}\right) - \frac{N}{\tau} = 0$

扩散流密度 $= -D\frac{dN}{dx} = N_0\frac{D}{L}e^{-x/L}$





第五部分：固体的电特性

- 固体接触的输运过程

1.功函数与接触电势

- 经典理论和量子理论对功函数的解释

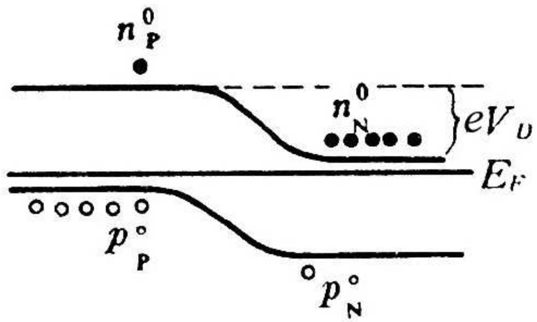
$$W = \chi \qquad W=\chi-E_F$$

- 接触电势：$V_A-V_B=(W_B-W_A)/q$

2.PN结

- PN结形成的物理过程和能带图

$$\frac{n_P^0}{n_N^0} = e^{-qV_D/k_BT}$$



- 画能带图的三个要点

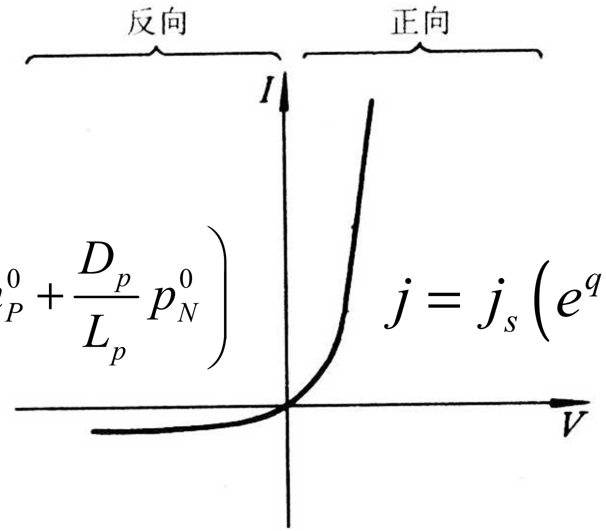
（1）接触电势差确定

（2）空间电荷区比例确定；

（3）分别用抛物线型画出电位变化线

- 外场作用下PN的导电特性

$$j \approx -q\left(\frac{D_n}{L_n}n_P^0 + \frac{D_p}{L_p}p_N^0\right)$$



$$j = j_s\left(e^{qV/K_BT} - 1\right)$$

第五部分：固体的电特性

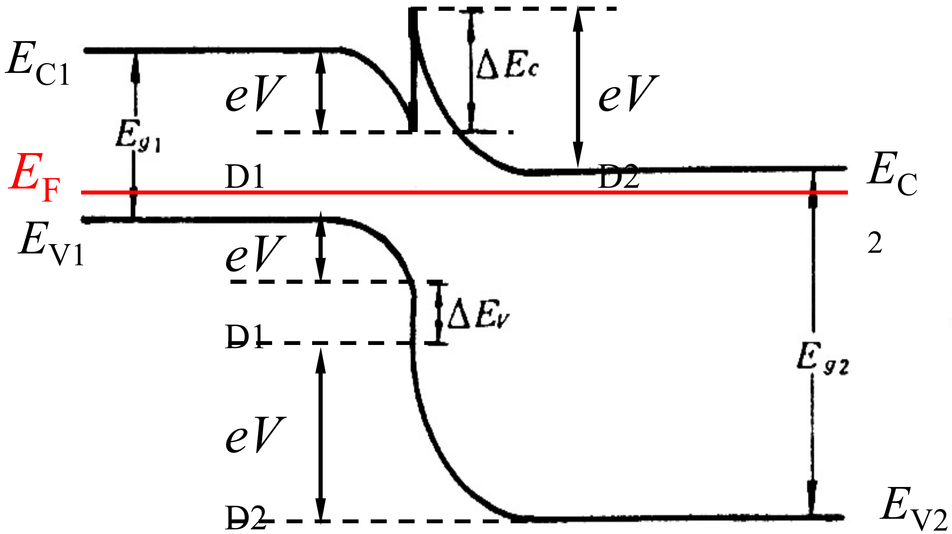
- 固体接触的输运过程

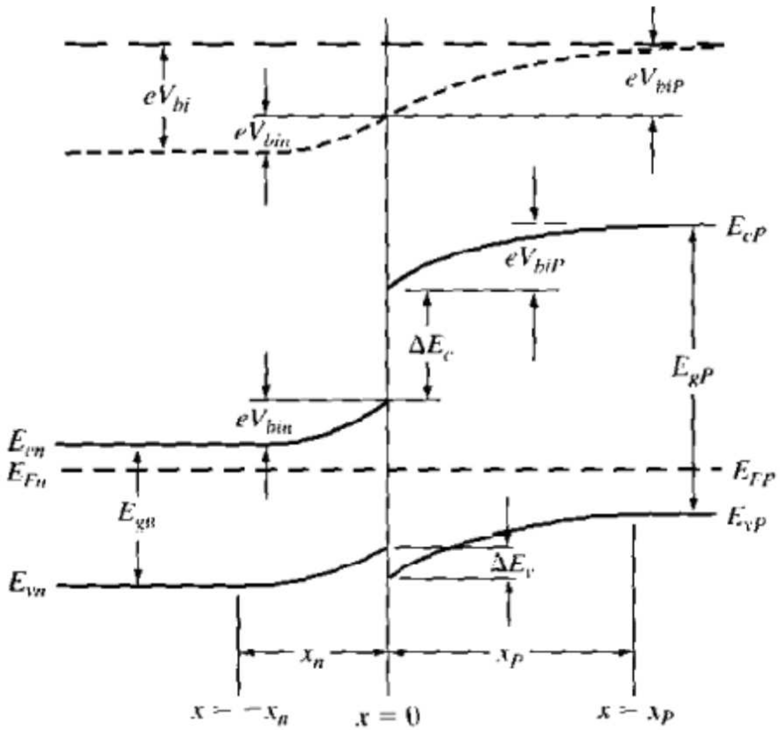
3.异质结

- 能带图
- 注入比

- 导带能级差: $\Delta E_C = \chi_1 - \chi_2$
- 价带能级差: $\Delta E_V = E_{g2} - E_{g1} - \Delta E_C$
- 导带能级差+价带能级差 =带隙宽度差

$$\frac{J_n}{J_p} = \frac{D_n n_P^0}{L_n} \Bigg/ \frac{D_p p_N^0}{L_p} = \frac{D_n L_p N_D}{D_p L_n N_A} e^{\frac{E_{gN} - E_{gP}}{k_B T}}$$





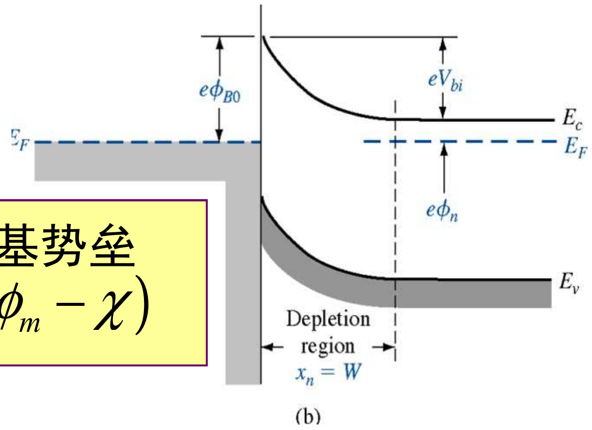
第五部分：固体的电特性

- 固体接触的输运过程

4.肖特基结和欧姆接触

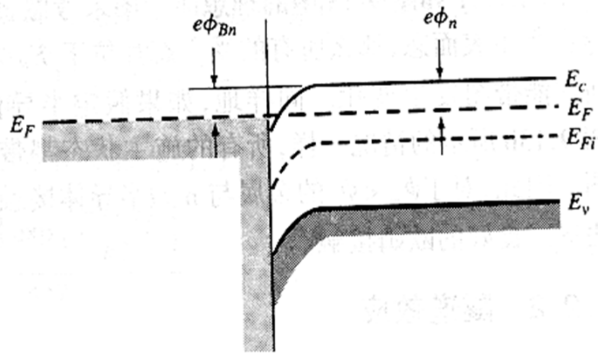
- 肖特基结：金属-(p)-n型半导体$\phi_m > \phi_s$

肖特基势垒
$$\phi_{B0} = (\phi_m - \chi)$$

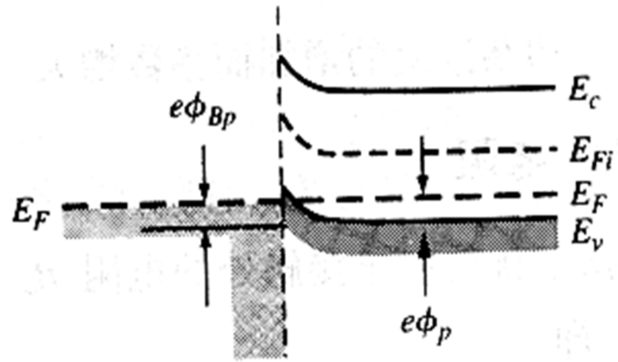


- 欧姆接触：

金属-n型半导体$\phi_m < \phi_s$

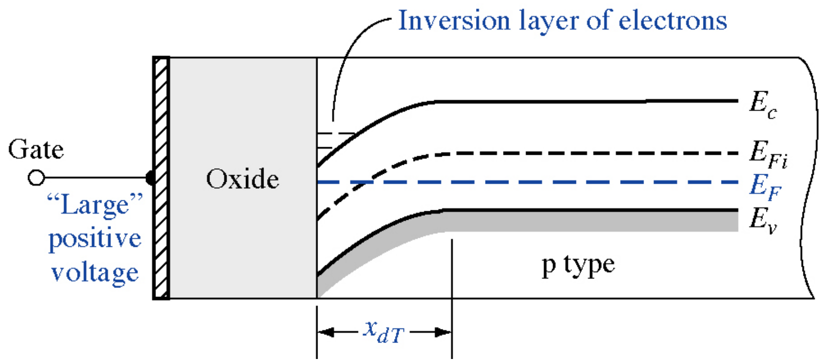


金属-p型半导体$\phi_m > \phi_s$



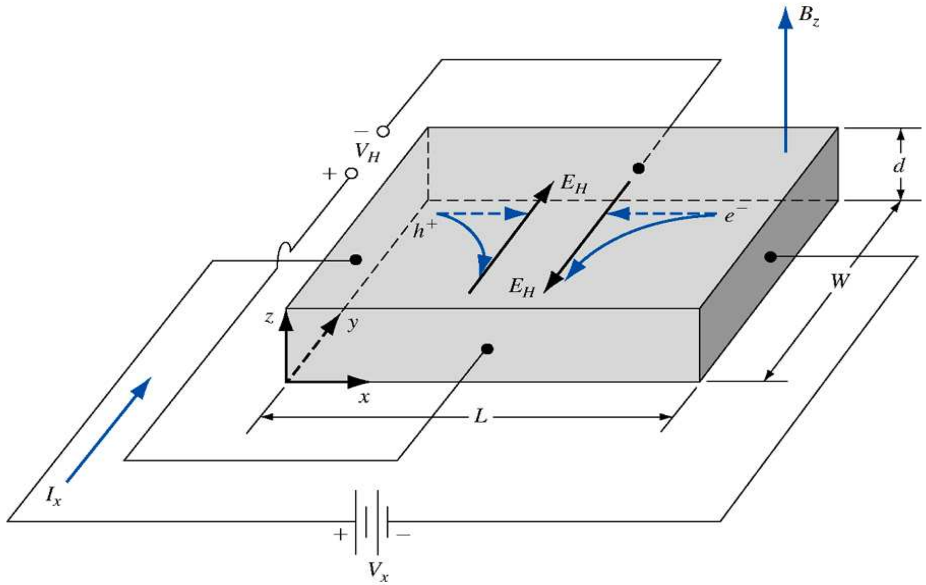
5.MIS和MOS——不要求

- 反型层的形成——沟道
- 二维电子气
- 对比调制掺杂形成量子阱
- 场效应管和CMOS



第五部分：固体的电特性

- 霍尔效应



霍尔系数： $R = \dfrac{1}{pq} = -\dfrac{1}{nq}$

霍尔电压$V_H = E_H * W$，W：样品宽度

第六部分：固体的磁特性和超导

- 固体的磁特性——不要求
  - 原子的磁矩——电子轨道磁矩，电子自旋磁矩，感生磁矩
  - 拉莫进动
  - 磁化率，磁性的类别——抗磁性，顺磁性，铁磁性，反铁磁性，亚铁磁性
- 超导体——不要求

第七部分：固体的热特性和声子

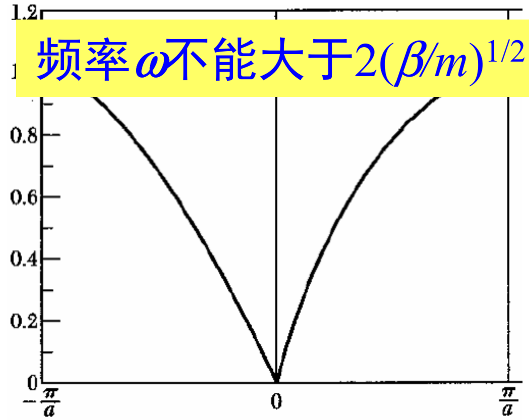
- 绝热近似——核的运动与电子的运动可以分离
- 一维原子链的振动

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

  - 简谐近似
  - 格波波矢的取值仅在第一布里渊区——对比布洛赫波
  - 色散关系

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\sin\left(\frac{aq}{2}\right)\right|$$

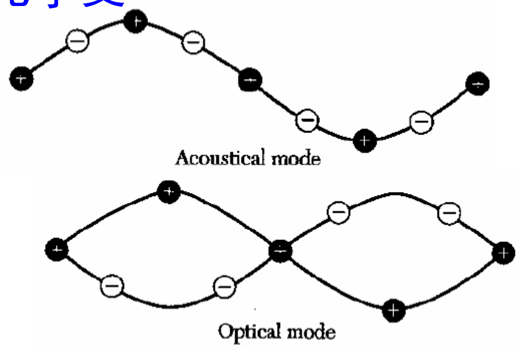
频率ω不能大于$2(\beta/m)^{1/2}$

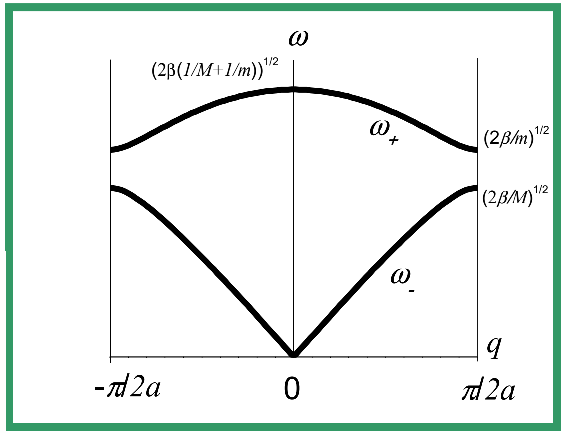


λ>>a时(长波极限)，$q\to 0$：

$$\omega \approx 2\sqrt{\frac{\beta}{m}}\left|\frac{1}{2}aq\right| = a\sqrt{\frac{\beta}{m}}q$$

- 一维双原子链的振动
  - 色散关系——声学支和光学支
  - 长波极限
  - 带隙的形成
  - 三维晶格中的格波





第七部分：固体的热特性和声子

- 离子晶体中的长光学波——不要求
  - 极化激元
  - 表面等离子基元
- 声子与热特性
  - 声子——晶格振动的能量子
  - 平均声子数——波色-爱因斯坦分布
  - 单个声子模式的热容

$$Cv \begin{cases} \approx k_B \\ \approx k_B \left(\dfrac{\hbar\omega_q}{k_B T}\right)^2 e^{-\hbar\omega_q/k_B T} \end{cases}$$

  - 爱因斯坦模型和德拜模型——了解，不要求

$$C_V \approx 3Nk_B\left(\frac{\theta_E}{T}\right)^2 e^{-\frac{\theta_E}{T}} \qquad C_V = \frac{12\pi^4}{5}Nk_B\left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3$$

  - 声子气的热传导
  - 声子的碰撞
  - 晶格的热膨胀