

预备知识

复旦大学 微电子学系

13307130163

李琛

June 16, 2015

Contents

1	晶体结构	2
2	倒易点阵与晶体衍射	3
2.1	倒易点阵	3
2.2	晶体衍射	4
2.3	晶体结合	5
3	自由电子费米气体	5
3.1	一维情况	5
3.2	费米能	5
3.3	三维情况	6

1 晶体结构

- **晶体** 原子周期性排列，有周期性的物质
- **晶体结构** 原子排列的具体形式
- **布拉菲格子** 体现晶体结构周期性的格子称为布拉菲格子
- **基矢** 以原胞共顶点的三条边作为三个矢量 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ ，并以其中一个格点为原点，则布拉菲格子的格点可以表示为 $\vec{a} = L_1\vec{a}_1 + L_2\vec{a}_2 + L_3\vec{a}_3$ ，则称 $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ 为基矢
- **点阵** 让 u, v, w 取遍所有整数值，由 $\vec{r} = \vec{r}_0 + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ 所确定的一簇点 \vec{r} 就定义了一个点阵
- **晶列** 点阵中所有阵点都位于一系列相互平行的直线上，这些直线系称为晶列
- **晶向与晶向指数** 晶列的方向即为晶向，晶向指数 $[mnp]$ 为晶向矢量在晶轴上投影的互质整数，同类晶向记为 $\langle mnp \rangle$

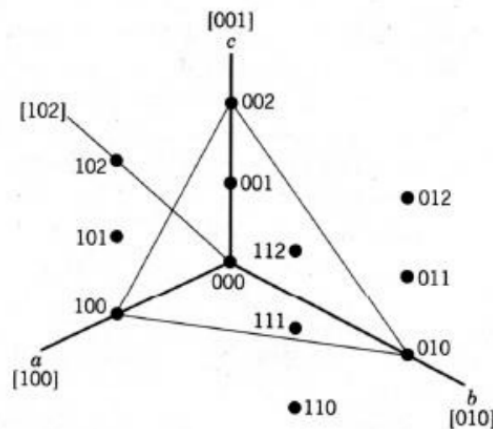


Figure 1: 晶格指数

- **晶面** 点阵中所有阵点全部位于一系列相互平行等距的平面上，这样的平面称为晶面
- **晶面指数** 晶面指数 h, k, l 是晶面与三晶轴截距 r, s, t 的倒数的互质整数，也称为密勒指数
- **简单与复式格子** 简单格子:基元只有一个原子的晶格 复式格子:基元包含两个或两个以上原子
如果晶体由一种原子组成，但在晶体中原子周围的情况不同，这样的晶格也是复式格子（如单晶Si）

- **晶体的对称性** 晶体具有平移对称性和点对称性，对称操作可使晶体结构完全同自身重合。
包括通过某一阵点轴的转动($2p, 2p/2, 2p/3, 2p/4, 2p/6$ 或称为（一重、二重、三重、四重、六重）、某一镜面的反映(m)、某一结点的反演(i)(n 重反演即为镜面反映后的 n 重转动)。
- **原胞与晶胞** 原胞(primitive cell), 固体物理元胞: 基矢 a, b, c 构成的平行六面体。最小的重复单元，只反映周期性的特征
晶胞，结晶学元胞: 能够最大限度反映晶格对称性质(周期性和对称性) 的最小单元，不一定最小。
- **金刚石结构与闪锌矿结构** 金刚石结构是一种由相同原子构成的复式晶格，它是由两个面心立方晶格沿立方对称晶胞的体对角线错开 $1/4$ 长度套构而成。常见的半导体中 $Ge, Si, \alpha-Sn$ （灰锡）都属于这种晶格。

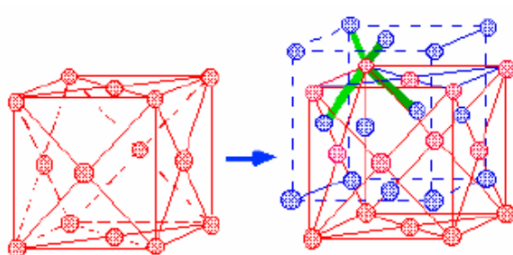


Figure 2: 金刚石结构

闪锌矿结构与金刚石结构的唯一区别是它含有两种不同的原子（ $GaAs, InSb, GaP$ 等化合物）。

2 倒易点阵与晶体衍射

2.1 倒易点阵

- 倒易点阵：与正点阵相对应的量纲为长度倒数的一个三维空间点阵。

•

$$\text{基矢 } \vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3 \quad \Omega = \vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$$

•

$$\text{定义} \begin{cases} \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\Omega} \\ \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\Omega} \\ \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\Omega} \end{cases}$$

$$\text{则倒格矢 } K_h = h_1 \vec{b}_1 + h_2 \vec{b}_2 + h_3 \vec{b}_3$$

- 对于周期函数 $n(x) = n(x+a)$ ，进行傅里叶变换，得

$$n(x) = n_0 + \Sigma [C_p \cos(2\pi p x/a) + S_p \sin(2\pi p x/a)]$$

$$n(x) = \Sigma n_p \exp(i2\pi p x/a)$$

倒点阵是正点阵的傅立叶变换

- 倒易点阵范例

简单立方的倒易点阵仍是简单立方，第一布里渊区是立方体

体心立方的倒易点阵仍是面心立方，第一布里渊区是正菱形十二面体

面心立方的倒易点阵仍是体心立方，第一布里渊区是截角八面体

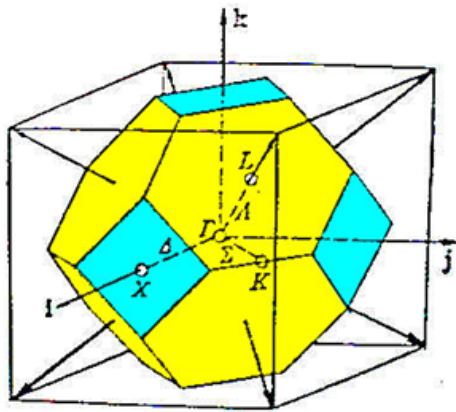


Figure 3: 面心立方第一布里渊区

2.2 晶体衍射

- 布拉格定律 $2d \sin \theta = n\lambda$
- 衍射条件 $2\vec{k} \cdot \vec{G} + \vec{G}^2 = 0$

- **布里渊区** 布里渊区定义为倒易点阵中的维格纳-赛茨晶胞在倒易点阵的中央晶胞称为第一布里渊区

2.3 晶体结合

- **离子晶体** 结合力为正负电子间的静电库仑力
- **金属晶体** 结合力为原子实和电子云之间的静电库仑力
- **共价晶体** 结合力为具有很强方向性的共价键
- **分子晶体** 依靠范德华相互作用结合，键力源于瞬时电偶极矩的感应作用

3 自由电子费米气体

自由电子费米气体 是指自由的、无相互作用的、遵从泡利不相容原理的电子气。

3.1 一维情况

- **哈密顿算符** $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$,
 \hat{T} 为动能项, $\hat{T} = \frac{p^2}{2m}$, p 为动量算子, $p = -i\hbar \frac{d}{dx}$, $\therefore \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$
 \hat{V} 为势能项, 一般定态情况下可以忽略

- **薛定谔方程** $\hat{H}\psi = \varepsilon\psi$

- **一维情况下**

$$\hat{H}\psi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} = \varepsilon\psi_n(x)$$

$$\text{解为 } \psi_n(x) = A \sin\left(\frac{2\pi}{\lambda_n}x\right), L = \frac{1}{2}n\lambda_n$$

$$\therefore \varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi^2}{L}\right)$$

- **简并度** 具有相同能量的轨道数目为简并度，一维情况下的简并度为2

3.2 费米能

- **费米能** ε_F 基态下最高被充满能级的能量

- 费米-狄拉克分布函数给出了理想气体处于热平衡状态时能量为 ε 的轨道被占据的几率

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1}$$

μ 为化学势， μ 的选择需要总能计算出系统中粒子的总数，即等于 N

- 当 $\varepsilon - \mu \gg kT$ 时，简化为玻尔兹曼分布 $f(\varepsilon) \approx e^{-\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}$

3.3 三维情况

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \varepsilon_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) = \exp[i(k_x x + k_y y + k_z z)]$$

$$\therefore \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

- 三维情况下 N 个电子处在基态时，每个被占据轨道可看做 k 空间内一个球内的点
- 球面的能量为费米能，费米面上波矢的大小为 k_F ，最小体积元为 $\frac{2\pi^3}{L^3}$ ，即这个体积中只有一个允许波矢
- 轨道总数

$$N = 2 \times \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \div \left(\frac{2\pi^3}{L^3} \right) \right) = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3, V = L^3$$

$$\therefore k_F = \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}, \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 N}{V} \right)^{\frac{2}{3}}, \text{仅与粒子浓度有关}$$

- 能态密度 单位能量间隔内的轨道数目

$$\text{能量} \leq \varepsilon \text{下，包含的轨道总数 } N = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\text{能态密度 } D(\varepsilon) = \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}$$