

# 预备知识

复旦大学 微电子学系

13307130163

李琛

June 9, 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 . . . . .	4
3	自由电子费米气体	4
3.1	一维情况 . . . . .	4
3.2	费米能 . . . . .	5
3.3	三维情况 . . . . .	5

# 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 $\vec{r} = \vec{r} + u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$ 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 $\langle mnp \rangle$
- **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 $GeSi\alpha - Sn$ （灰锡）都属于这种晶格。

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

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

$$n(x) = \Sigma n_p \exp(i 2\pi p x / a)$$

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

## 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 $\epsilon_F$ 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 $\epsilon$ 的轨道被占据的几率

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

$\mu$ 为化学势， $\mu$ 的选择需要总能计算出系统中粒子的总数，即等于 $N$

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

### 3.3 三维情况

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

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

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

- 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

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

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

- 能态密度 单位能量间隔内的轨道数目

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

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