

高等学校理工科
电子科学与技术类课程

学习辅导丛书

半导体物理学 学习辅导与典型题解 (第二版)

田敬民 张声良 编著

▶ 学习要点

▶ 习题分析

▶ 练习题及参考解答

▶ 考研试题详解

学习的帮手

考研的参谋



电子工业出版社
PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY

<http://www.phei.com.cn>

高等学校理工科电子科学与技术类课程学习辅导丛书

半导体物理学

学习辅导与典型题解

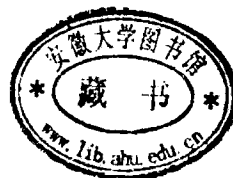
(第二版)

田敬民 张声良 编著

电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京·BEIJING



内 容 简 介

本书以国内高等院校广泛使用的由刘恩科、朱秉升、罗晋生编著的《半导体物理学》(第七版)为基础,根据教学与考研复习的实际要求,高度概括了各个章节的知识重点、难点及重要的物理概念,相应给出了一定数量的概念思考与练习题,在此基础上,精选了许多典型例题,并作了详细解答。

本书可作为高等院校电子科学与技术、微电子技术及相关专业学生的学习参考书,也可以作为报考相关专业方向的硕士学位研究生的复习资料。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。
版权所有,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

半导体物理学学习辅导与典型题解/田敬民,张声良编著. 第二版. —北京:电子工业出版社,2010.1
高等学校理工科电子科学与技术类课程学习辅导丛书
ISBN 978-7-121-10225-7

I. 半… II. ①田…②张… III. 半导体物理学—高等学校—教学参考资料 IV. O47

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 007294 号

责任编辑:陈晓莉

印 刷:北京市天竺颖华印刷厂

装 订:三河市鑫金马印装有限公司

出版发行:电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编 100036

开 本:787×980 1/16 印张:17 字数:380 千字

印 次:2010 年 1 月第 1 次印刷

印 数:4000 册 定价:29.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题,请向购买书店调换。若书店售缺,请与本社发行部联系。联系及邮购电话:(010)88254888。

质量投诉请发邮件至 zlts@phei.com.cn,盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线:(010)88258888。

再版前言

半导体物理学是高等院校微电子学、电子科学与技术、光电子技术、电子材料等专业学生必修的一门专业基础课,也是此类专业硕士学位研究生入学考试的专业课程之一。

由于本课程是一门理论性和系统性较强的课程,要学好这门课程,除了深刻理解书中所涉及的概念、理论和方法之外,还必须加强相关实验和习题方面的训练,从而加深对教学内容的理解、增强分析问题和解决问题的能力。

本书是编者在多年教学实践的基础上,为密切配合国内高等院校广泛使用的,由刘恩科、朱秉升、罗晋生等编著的《半导体物理学》(第七版)的教学而编写的,各章节的编排次序均与教材一致。根据教学和考研的要求,对各章节知识重点、难点及重要概念进行了分析与高度概括,形成本课程各章的理论要点及复习重点。

在2005年出版的本书第一版的基础上,新编入了一定数量的概念思考与练习题,试图让读者对所学的理论知识得以自我检查和评估,以达到进一步深入理解的目的。

作为本书的一个重要部分,编著者参考了国内外相关教材,收集并提炼了部分重点高等院校多届本科和研究生考研试题,加之编者在多年教学中的积累,选编了一定数量典型的、具有一定难度的、针对性和启发性较强的例题,并作出了详尽的解析。通过对这些解题过程的理解和学习,感受其对所学数学物理知识的灵活应用。相信对深化本课程的学习内容,提高读者观察问题、解决问题的能力,开拓知识境界和思路能起到积极的推动作用。

本书在出版过程中,得到了《半导体物理学》(第七版)的编著者刘恩科教授、朱秉升教授、罗晋生教授的热心鼓励和帮助,电子工业出版社陈晓莉编审提出了许多宝贵意见,对此表示诚挚的感谢。

由于编者水平所限,书中难免存在错误之处,恳请读者批评指正。

编著者
2009年12月

目 录

第 1 章 半导体中的电子状态	(1)
1.1 理论概要与重点分析	(1)
1.2 概念思考与练习题	(4)
1.3 典型例题解析	(6)
第 2 章 半导体中的杂质和缺陷能级	(27)
2.1 理论概要与重点分析	(27)
2.2 概念思考与练习题	(28)
2.3 典型例题解析	(29)
第 3 章 半导体中载流子的统计分布	(33)
3.1 理论概要与重点分析	(33)
3.2 概念思考与练习题	(38)
3.3 典型例题解析	(40)
第 4 章 半导体的导电性	(61)
4.1 理论概要与重点分析	(61)
4.2 概念思考与练习题	(64)
4.3 典型例题解析	(66)
第 5 章 非平衡载流子	(89)
5.1 理论概要与重点分析	(89)
5.2 概念思考与练习题	(92)
5.3 典型例题解析	(96)
第 6 章 pn 结	(118)
6.1 理论概要与重点分析	(118)
6.2 概念思考与练习题	(122)
6.3 典型例题解析	(123)
第 7 章 金属半导体接触	(139)
7.1 理论概要与重点分析	(139)
7.2 概念思考与练习题	(141)
7.3 典型例题解析	(142)
第 8 章 半导体表面与 MIS 结构	(152)

8.1	理论概要与重点分析	(152)
8.2	概念思考与练习题	(156)
8.3	典型例题解析	(159)
第 9 章	异质结	(183)
9.1	理论概要与重点分析	(183)
9.2	概念思考与练习题	(186)
9.3	典型例题解析	(187)
第 10 章	半导体的光学性质、光电和发光现象	(197)
10.1	理论概要与重点分析	(197)
10.2	概念思考与练习题	(201)
10.3	典型例题解析	(204)
第 11 章	半导体的热电性质	(220)
11.1	理论概要与重点分析	(220)
11.2	概念思考与练习题	(221)
11.3	典型例题解析	(222)
第 12 章	半导体磁和压阻效应	(237)
12.1	理论概要与重点分析	(237)
12.2	概念思考与练习题	(239)
12.3	典型例题解析	(242)
参考文献	(265)

第 1 章 半导体中的电子状态

主题词

晶体结构,单电子近似,能带(导带、价带、禁带及其宽度),布里渊区,有效质量,空穴,回旋共振,硅、锗、砷化镓的能带结构,二元及多元化合物半导体,宽禁带半导体。

1.1 理论概要与重点分析

(1) 固体可分为晶体、非晶体两大类。晶体是其原子按一定规律周期性重复排列而组成的,周期性是晶体结构的主要特征。半导体硅、锗是金刚石结构,它的晶胞是正立方体,可看成是由两个面心立方沿体对角线方向移动 $1/4$ 套构而成的。闪锌矿结构与金刚石结构相似,唯一差别是在体对角线 $1/4$ 处的 4 个原子和格点上其他原子不同,Ⅲ-V 族化合物半导体如 GaAs 即为此例。

(2) 晶体的周期性决定了晶体中电子势场的周期性,在周期性势场中电子的运动状态,可用单电子近似来描写,其薛定谔方程所决定的波函数为布洛赫函数,即

$$\psi_k(r) = u_k(r)e^{i2\pi k \cdot r} \quad (1.1)$$

式中

$$u_k(r) = u_k(r + na)$$

是与晶格周期相同的周期性函数。它反映了周期势场对电子运动的影响,晶体中的电子在某一原胞中的不同位置出现的概率不同,而在不同的原胞的各等价位置出现的概率相同。平面波因子 $e^{i2\pi k \cdot r}$ 表明晶体中的电子不再是局域化,而是扩展到整个晶体中。布洛赫函数表明了晶体中各原子层电子的共有化运动。

(3) 单电子近似结果直接表明孤立原子凝聚成为晶体时其中的电子状态形成能带,这就是通常所说的能带论。根据能带论的结果,晶体中电子能量随其电子波波矢 k 的不同而变化,即 $E(k)$ 关系。能量 E 在波矢 $k = \frac{n}{2a}$ 处出现不连续而发生阶跃,这部分不允许电子存在的能量范围,称为禁带。其他部分 E 随 k 连续变化,形成允带,晶体中的电子处在一系列的允带中。 $k = \frac{n}{2a}$ 处的界面把 k 空间分割成若干个相等的区域,这些区域称为布里渊区。对有限大的晶体,利用周期性边界条件,在布里渊区中 k 的取值是量子化的,其可能取值为

$$k_x = \frac{n_x}{L} \quad (n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

$$k_y = \frac{n_y}{L} \quad (n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (1.2)$$

$$k_z = \frac{n_z}{L} \quad (n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$$

式中, L 为立方晶体的边长, 因而能带中的能级是不连续或准连续的, 其能级的数目等于晶体中的原胞数。

(4) 由于实际晶体中其内部势场难以找出具体的表达形式, 因而整个能带中 $E(\mathbf{k})$ 关系难以确定。所幸的是导带中的电子和价带的空穴仅存在于能带底和能带顶附近。将 $E(\mathbf{k})$ 在导带极小和价带极大值附近展开, 取至二次项。由于晶体的各向异性, $E(\mathbf{k})$ 关系一般是各向不同的, 设导带极小值发生在 \mathbf{k}_0 点, 在三维 \mathbf{k} 空间中, $E(\mathbf{k})$ 关系近似表达为

$$E(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{(k_x - k_{0x})^2}{m_x^*} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{m_y^*} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{m_z^*} \right] \quad (1.3)$$

式中

$$\begin{cases} m_x^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x^2} \right)^{-1} \\ m_y^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_y^2} \right)^{-1} \\ m_z^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_z^2} \right)^{-1} \end{cases} \quad (1.4)$$

分别为三主轴方向的电子有效质量, 一般情况下 m_x^* 、 m_y^* 、 m_z^* 不等, 显示出它的各向异性。式(1.3)可改写为

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2}{\frac{2m_x^*(E - E_0)}{\hbar^2}} + \frac{(k_y - k_{0y})^2}{\frac{2m_y^*(E - E_0)}{\hbar^2}} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{\frac{2m_z^*(E - E_0)}{\hbar^2}} = 1 \quad (1.5)$$

式(1.5)为 \mathbf{k} 空间中的一椭球方程。

当 E 一定时, 所有 k_x 、 k_y 、 k_z 的可能取值构成一个能量为 E 的封闭椭球面, 称为等能面。

当 $m_x^* = m_y^* = m_t$, $m_z^* = m_l$ 时, 式(1.5)变为

$$\frac{(k_x - k_{0x})^2 + (k_y - k_{0y})^2}{\frac{2m_t(E - E_0)}{\hbar^2}} + \frac{(k_z - k_{0z})^2}{\frac{2m_l(E - E_0)}{\hbar^2}} = 1 \quad (1.6)$$

为旋转椭球等能面。

当 $m_x^* = m_y^* = m_z^* = m_n$, 且 $k_0 = 0$ 时

$$E - E_0 = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m_n^*} \quad (1.7)$$

为极值在原点各向同性的球形等能面。

由于晶体的对称性, 能带在某一方向上有极值点, 在其他对应方向的对应点也有极值

点,极值附近有相同的等能面。

(5) 在外加电场作用下,半导体中的电子除了受外电场的作用力 $f = -q|\epsilon|$ 的作用外,还受到内部势场的作用。但内部势场难以精确确定,可以引入有效质量的概念来概括晶体内部势场的总作用。这样就只需将外部电场力和电子的有效质量相结合,我们仍能用经典力学的方法来描写晶体中电子运动规律,即

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{f}{m_n^*} \quad (1.8)$$

式中, m_n^* 为电子的有效质量,它是由电子的 $E(k)$ 关系确定的,具体表达式如式(1.4)所示。可见在能带中能量极小值附近 $m_n^* > 0$, 在能量极大值附近 $m_n^* < 0$ 。

应用有效质量的概念不仅能像自由电子一样很方便地用牛顿定律讨论晶体中电子的运动规律,而且因它与能带结构有关,借此有助于对半导体能带结构进行研究。

有效质量可以通过回旋共振实验测得,并据此推出半导体的能带结构。

根据半导体中电子在磁场作用下的运动规律推出回旋共振频率与磁感应强度 B 和有效质量之间的关系为

$$\omega_c = \frac{qB}{m_n^*} \quad (1.9)$$

式中, m_n^* 为电子回旋共振有效质量,等能面为一般椭球情况,其表达式为

$$m_n^* = \left(\frac{m_x^* \alpha^2 + m_y^* \beta^2 + m_z^* \gamma^2}{m_x^* m_y^* m_z^*} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (1.10)$$

式中, α, β, γ 分别为磁感应强度 B 与三轴方向的方向余弦。对等能面为旋转椭球时,其表达式为

$$m_n^* = m_t \left(\frac{m_l}{m_t \sin^2 \theta + m_l \cos^2 \theta} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.11)$$

式中, m_t, m_l 分别为横向和纵向有效质量, θ 为 B 与椭球长轴的夹角。

实验中测出 B 在不同方向上半导体对电磁波共振吸收时的频率 ω 。代入式(1.9),算出 m_n^* ,再代入式(1.11)从而确定 m_t, m_l 。

将实验结果与理论分析相结合,即可了解半导体的能带结构,它包括能量极值点出现在布里渊区的位置,极值点附近等能面的形状,能量椭球的主轴方向,极值对称点出现的个数等。以 Si、Ge、GaAs 为例说明其导带,价带结构。

(6) 空穴是几乎被电子充满的能带中未被电子占据的少数空量子态,这少量的空穴总是处于能带顶附近。我们把半导体中的空穴看成一个带有电荷为 $+q$,并以该空穴状态相应电子的速度 $v(k)$ 运动的粒子,它具有正的有效质量,价带中大量电子的导电作用可用这少数空穴的导电作用来描写。因此半导体中有两种载流子,即导带中的电子和价带中的空穴,这是半导体导电最显著的特征。

(7) 禁带宽度是半导体性能的重要参数,它表示半导体导带能量极小值与价带能量极大值之间的能量差,也是价带电子激发到导带所需的最小能量,用 E_g 表示。各种半导

体其禁带宽度不同,一般认为 $E_g < 2.3\text{eV}$ 为窄禁带半导体,如研究最早、最成熟、应用也最为广泛的 Ge、Si、GaAs,在室温下其 E_g 分别为 0.67eV、1.12eV、1.43eV。如果 $E_g > 2.3\text{eV}$,就归为宽禁带半导体,如 3C-SiC、纤锌矿型的 GaN、AlN,其 E_g 分别为 2.36eV、3.39eV、6.2eV。

由于宽禁带半导体材料的禁带宽、热导率高、电子饱和漂移速度大等特点,用以制作高功率、高温、高密度集成等特种器件;制作从可见到紫外光的发光管及光探测器,显示出它的特有功能。

1.2 概念思考与练习题

【1-1】 原子中的电子和晶体中电子受势场作用情况以及运动情况有何不同?原子中内层电子和外层电子参与共有化运动有何不同?

【1-2】 在 N 个原子组成的晶体中,若由原来的一个原子能级分裂的能级数大于 N 或小于 N ,是否与泡利不相容原理矛盾?

【1-3】 如何理解能级“分裂”成能带?试以 NaCl(氯化钠)和 C^6 为例,说明孤立原子的能级和能带的对应情况。

【1-4】 晶体体积的大小对能级和能带有什么影响?

【1-5】 描述半导体中电子运动为什么要引入“有效质量”的概念?用电子的惯性质量 m_0 描述能带中电子运动有何局限性?

【1-6】 一般来说,对应于高能级的能带较宽,而禁带较窄,是否如此?为什么?

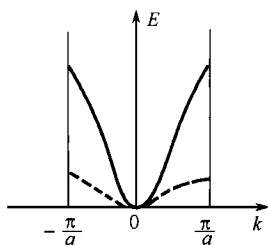


图 1-1 题 1-8 用图

【1-7】 通常,晶格势场对电子作用力 F_L 是不容易直接测定的,但可以通过它与外场力 F_e 的关系

$$F_L = \left(\frac{m_0}{m_n^*} - 1 \right) F_e$$

去求得。式中: m_0 表示电子质量; m_n^* 表示电子有效质量。试推导上述关系。

【1-8】 有两种晶体其能量与波矢的关系如图 1-1 所示。试问,哪一种晶体电子的有效质量大一些?为什么?

【1-9】 一维晶格能量 E 与波矢 k 的关系如图 1-2 所示。分别讨论下面几个问题:

(1) 如电子能谱和自由电子一样,写出与简约波矢 $k = \frac{\pi}{2a}$ 对应的 A(第 I 能带)、B(第 II 能带)、C(第 III 能带)三点处的能量 E 。

(2) 图中,哪个能带上的电子有效质量最小?

(3) 图中能带上是否有某些位置,外力对这些位置上的电子没有影响?

(4) 若能带 I、II 完全填满,而能带 III 是完全空着的,此时稍稍加热晶体,把少数电子从第 II 能带激发到第 III 能带,问第 II 能带中的空穴数是否等于第 III 能带中的电子数?

(5) 第Ⅱ能带上空穴的有效质量 $|m_p^*|$ 比第Ⅲ能带上的电子有效质量 $|m_n^*|$ 大还是小?

(6) 比较能带Ⅱ空穴占据的能量间隔 ΔE_2 和能带Ⅲ上电子占据的能量间隔 ΔE_3 ,哪一个大?

(7) 当 k 为何值时,能带Ⅰ和能带Ⅱ之间,能带Ⅱ和能带Ⅲ之间发生跃迁需要的能量最小?

【1-10】 有效质量能反映出能带的宽度吗?有人说:“有效质量越大,能态密度也越大,因而能带越窄。”是否如此?为什么?

【1-11】 简述有效质量与能带结构的关系。

【1-12】 对于自由电子,加速度方向与外力作用方向一致,这个结论是否适用于布洛赫电子?

【1-13】 从能带底到能带顶,晶体中电子的有效质量将如何变化?外场对电子的作用效果有什么不同?

【1-14】 试述在周期性势场中运动的电子具有哪些一般属性。

【1-15】 为什么说,通常有效质量是一个张量?何时出现负值?其物理意义如何?有什么比较直接的方法可以研究半导体中电子的有效质量?简要说明实验原理。

【1-16】 以硅的本征激发为例,说明由价带导带构成的半导体能带图的物理意义、价带和导带中能级与硅晶格结构中价键上电子和自由运动电子有何联系?为什么电子从其价键上挣脱出来所需的最小能量就是半导体的禁带宽度?

【1-17】 为什么半导体满带中的少量空状态可以用具有与电子电荷相等的正电荷和一定的有效质量的空穴来描述?

【1-18】 试论证空穴具有下述的主要特征:

- (1) 空穴数等于价带中空状态数;
- (2) 空穴所带的正电荷等于电子电荷;
- (3) 空穴的有效质量 $|m_p^*|$ 等于原空状态内电子有效质量的负值,即 $m_p^* = -m_n^*$;
- (4) 空穴的波矢 k_p 等于原状态内电子波矢 k_n 的负值,即 $k_p = -k_n$;
- (5) 空穴的能量 E_p 等于原空状态内电子能量 E_n 的负值,即 $E_p = -E_n$ 。

【1-19】 讨论晶体中电子在能带极值点附近速度 v 与波矢 k 的关系?

【1-20】 有两块硅单晶,其中一块的质量是另一块质量的2倍。这两块晶体价带中的能级数是否相等?彼此有何联系?

【1-21】 解释布里渊区边界方程: $\mathbf{K}_n \cdot \left(k - \frac{\mathbf{K}_n}{2}\right) = 0$ 的几何意义和物理意义。

【1-22】 对三维晶体来说,布里渊区边界面上发生能量的不连续,这种界面上能量的不连续是否意味着一定有禁带存在?

【1-23】 如果能量极值并不在 k 空间的原点,而是位于 k_x 轴上某点处,则对应于同

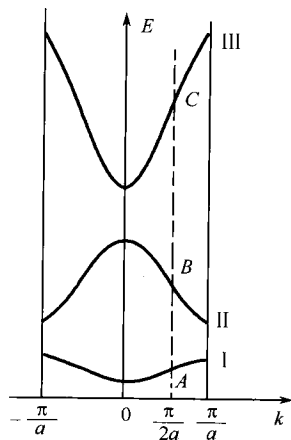


图 1-2 题 1-9 用图

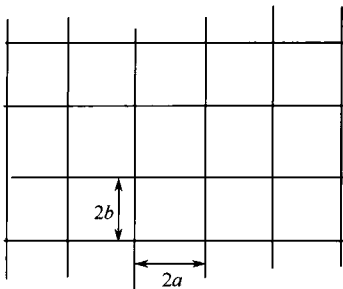


图 1-3 题 1-25 用图

一能量极值有多少个状态？如果能量极值是位于体对角线上的一点，情况又如何？

【1-24】说明布里渊区和 k 空间等能面这两个物理概念的不同。

【1-25】二维平面晶体如图 1-3 所示。晶格常数已注于图上。画出第 1、第 2 布里渊区的边界并简要说明画法的根据。

【1-26】简述 Ge、Si 和 GaAs 能带结构的主要特征。分别画出 k 空间 $[100]$ 和 $[111]$ 方向的一维能带图，标出导带极小值和价带极大值在 k 空间中的位置。分别给出能带极值附近电子和空穴等能面形状。

【1-27】置于均匀磁场半导体中的电子受到的洛伦兹力 $F_L = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ ，式中速度 \mathbf{v} 是由什么决定的？为什么说回旋共振实质上也是一种光吸收现象？

【1-28】为什么极值附近的等能面是球面的半导体，当改变磁场方向时只能观察到一个共振吸收峰？

【1-29】如何理解回旋共振有效质量 m_n^* 不仅通过 m_x^* 、 m_y^* 和 m_z^* 而与能带结构有关，而且还与磁场和等能面主轴之间的相对方位有关。

【1-30】布洛赫函数中的波矢 \mathbf{k} 有什么物理意义？什么是电子的准动量？它是否就是布洛赫电子的动量？为什么在运动方程中外力等于电子准动量的变化率 $\mathbf{F} = \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt}$ ，而不等于电子真实动量的变化率？

【1-31】已知某一半导体导带上两个电子的波矢， $k_1 > 0, k_2 > 0$ （一维情况），且 $k_1 > k_2$ ，能否让第一个电子的平均速度 v_1 大于第二个电子的平均速度 v_2 ？为什么？

【1-32】半导体的禁带宽度是如何定义的？为了得到不同禁带宽度的半导体，可以有哪些选择和方法？

【1-33】宽禁带半导体相对窄禁带半导体有哪些特殊性质，因而在使用上显示出了哪些优越性？

【1-34】以 SiC 晶体为例说明什么叫做同质多象变体。

1.3 典型例题解析

【例 1-1】平面正三角形晶格的相邻间距是 a （见图 1-4）。（1）试求其正格子基矢和倒格子基矢；（2）画出其第一布里渊区，并求此区域的内切圆半径。

解：

（1）由于每个原子周围的情况完全相同，所以格点可以取原子本身。这种结构的布拉伐格子是二维六角格子。选取图 1-4(a) 所示的直角坐标系，正格子基矢 \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 可写为

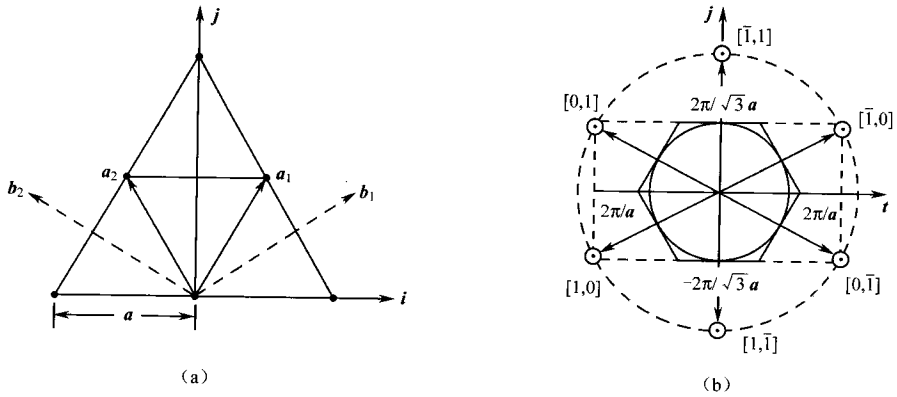


图 1-4 例 1-1 题用图

$$\begin{cases} \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}) \\ \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\mathbf{i} + \sqrt{3}\mathbf{j}) \end{cases}$$

为了确定倒格子基矢,我们假设 $\mathbf{a}_3 = \mathbf{k}$ 。于是

$$\begin{cases} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}\mathbf{i} + \mathbf{j}) \\ \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}\mathbf{i} + \mathbf{j}) \end{cases}$$

正格子的原胞体积为

$$\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) = \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$

其倒格子的基矢

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

(2) 倒格矢 $\mathbf{K}_n = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2$ 及其长度为

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_n &= -[(n_1 + n_2)2\pi/a]\mathbf{i} + [(n_2 - n_1)2\pi/\sqrt{3}a]\mathbf{j} \\ |\mathbf{K}_n| &= 4\pi(n_1^2 + n_2^2 + n_1n_2)^{1/2}/\sqrt{3}a \end{aligned}$$

最短倒格矢长度为 $|\mathbf{K}_n|_{\min} = 4\pi/\sqrt{3}a$, 最近邻倒格点共 6 个, 它们的 $[n_1, n_2]$ 值分别是

$$[1, 0], [\bar{1}, 0], [0, 1], [0, \bar{1}], [1, \bar{1}], [\bar{1}, 1]$$

相应的最短倒格矢为

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{10} &= -\frac{2\pi}{a}\mathbf{i} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j}, & \mathbf{K}_{\bar{1}0} &= \frac{2\pi}{a}\mathbf{i} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j} \\ \mathbf{K}_{01} &= -\frac{2\pi}{a}\mathbf{i} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j}, & \mathbf{K}_{0\bar{1}} &= \frac{2\pi}{a}\mathbf{i} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j} \\ \mathbf{K}_{\bar{1}\bar{1}} &= -\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{i}, & \mathbf{K}_{11} &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\mathbf{j} \end{aligned}$$

由以上最短倒格矢的中垂线围成的正六边形即为第一布里渊区,如图 1-4(b)所示。

显然,第一布里渊区的内切圆半径是最短倒格矢的 $1/2$,即 $2\pi/\sqrt{3}a$ 。

【例 1-2】 一个二维正方格子:

- (1) 能量的极小值在第一布里渊区的中心;
- (2) 能量的极大值在第一布里渊区的顶角上。

试在以上两种情况下,分别画出极值附近的等能线,并求出在单位面积的晶体中,能量在 $E \sim (E+dE)$ 范围内的状态数 $N(E)dE$ 。

解:

二维正方格子的倒格子和第一布里渊区如图 1-5 所示。

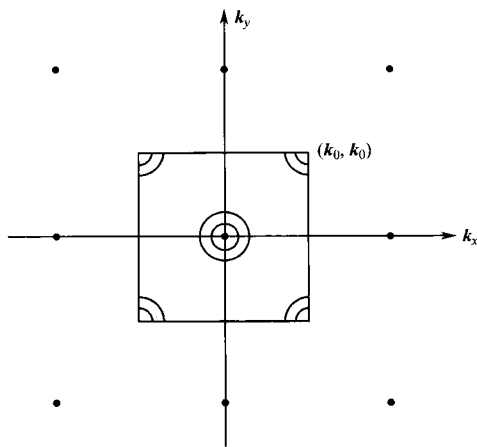


图 1-5 例 1-2 题用图

考虑到电子的自旋可以有两种不同的取向,因而,在单位面积的晶体中, \mathbf{k} 空间的状态密度为 $2/(2\pi)^2$ 。

(1) 极小值在布里渊区中心,在极值附近的等能线是圆,其方程为

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} \quad (1)$$

式中, m_n 是电子的有效质量(标量)。在单位面积的晶体中,在 $k \sim (k+dk)$ 范围内的状态数

$$N(k)dk = \frac{2}{(2\pi)^2} \times 2\pi k dk$$

由式(1)可得出

$$dE = \frac{\hbar^2 k}{m_n} dk$$

或

$$k dk = \frac{m_n}{\hbar^2} dE$$

所以

$$N(E)dE = \frac{m_n}{\pi\hbar^2} dE \quad (2)$$

(2) 极大值在布里渊区顶角上。根据正方格子的对称性,彼此对称的极大值有 4 个,但是它们相互之间只差一个倒格矢,所以独立的极大值只有一个。在极值附近的等能线是圆,其方程为

$$E(\mathbf{k}) = E_v - \frac{\hbar}{2m_p} [(k_x - k_0)^2 + (k_y - k_0)^2] \quad (3)$$

设

$$k'_x = k_x - k_0, \quad k'_y = k_y - k_0$$

则

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}') &= E_v - \frac{\hbar^2 (k')^2}{2m_p} \\ dE &= -\frac{\hbar^2 k'}{m_p} dk' \end{aligned} \quad (4)$$

式(4)前面的负号表明,随着 k' 的增加能量减小,在考虑间隔 dE 和 dk' 之间的状态数目时,可以把它去掉。

在单位面积的晶体中,在 $k' \sim (k' + dk')$ 范围内的状态数为

$$N(k')dk' = \frac{2}{(2\pi)^2} \times 2\pi k' dk'$$

利用式(4),则得

$$N(E)dE = \frac{m_p}{\pi\hbar^2} dE \quad (5)$$

由式(2)和式(5)两式可以看出,在二维情况下,单位能量间隔的状态数与能量 E 无关。

【例 1-3】 试求面心立方晶体的第一布里渊区。

解: 面心立方晶格基矢为

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{i} + \mathbf{j})$$

其倒格子基矢为

$$\mathbf{b}_1 = \frac{1}{a}(-\mathbf{i} + \mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{1}{a}(\mathbf{i} - \mathbf{j} + \mathbf{k}), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{1}{a}(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$$

倒格矢为

$$\mathbf{K}_n = \frac{1}{a} [(-n_1 + n_2 + n_3)\mathbf{i} + (n_1 - n_2 + n_3)\mathbf{j} + (n_1 + n_2 - n_3)\mathbf{k}]$$

由 $\mathbf{K}_n \cdot \left(k - \frac{\mathbf{K}_n}{2}\right) = 0$ 得布里渊区边界方程为

$$\begin{aligned} & (-n_1 + n_2 + n_3)k_x + (n_1 - n_2 + n_3)k_y + (n_1 + n_2 - n_3)k_z \\ &= -\frac{1}{2a} [(-n_1 + n_2 + n_3)^2 + (n_1 - n_2 + n_3)^2 + (n_1 + n_2 - n_3)^2] \end{aligned}$$

离原点最近的倒格点为

$$(111), (11\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), (\bar{1}\bar{1}\bar{1}), (1\bar{1}\bar{1}), (\bar{1}1\bar{1}), (\bar{1}\bar{1}1), (\bar{1}\bar{1}\bar{1})$$

由原点指向上述倒格点的倒格矢的垂直平分面为

$$\pm k_x \pm k_y \pm k_z = \frac{3}{2a}$$

因为这 8 个倒格矢的中垂面围成的正八面体的体积比倒格原胞体积大。所以再考虑邻近的倒格点：

$$(2, 0, 0), (0, 2, 0), (0, 0, 2), (-2, 0, 0), (0, -2, 0), (0, 0, -2)$$

到次邻近倒格点的倒格矢的中垂面的 6 个方程为

$$k_x = \pm \frac{1}{a}, k_y = \pm \frac{1}{a}, k_z = \pm \frac{1}{a}$$

这 6 个中垂面和前面 8 个中垂面围成截角八面体(十四面体)。所以面心立方晶体的第一布里渊区为一截角八面体,如图 1-6 所示。

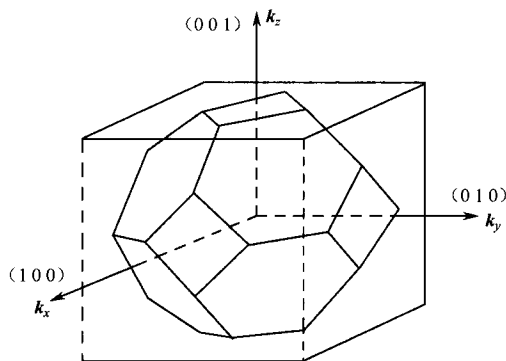


图 1-6 例 1-3 题用图

【例 1-4】 试证明面心立方晶格的第一布里渊区的六边形界面起因于(111)原子平面的布喇格反射,四边形界面则起因于(200)原子平面的布喇格反射。

证明: 布里渊区界面方程为

$$\mathbf{K}_n \cdot \left(\mathbf{k} + \frac{\mathbf{K}_n}{2}\right) = 0$$

它代表能量的不连续面,这些面垂直平分倒格矢 \mathbf{K}_n ; 当波长 $\lambda = 1/|k|$ 的电子波入射到该面时,遭受到全反射。由于倒格矢 \mathbf{K}_n 与对应的面系的晶面间距 d 存在着如下关系

$$d = \frac{1}{|\mathbf{K}_n|}$$

故由 $|\mathbf{K}_n|$ 的值便可求得 d 值。

面心立方晶格的倒格子是一个边长为 $2/a$ 的体心立方格子,它的第一布里渊区是一个由8个六边形面和6个正方形面所围成的十四面体(见例1-3),布里渊区中心到六边形面的距离等于

$$\frac{|\mathbf{K}_n|}{2} = \frac{\sqrt{3}}{4} \left(\frac{2}{a} \right) = \frac{\sqrt{3}}{2a}$$

即

$$|\mathbf{K}_n| = \frac{\sqrt{3}}{a}$$

于是

$$d = \frac{1}{|\mathbf{K}_n|} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

在立方晶系中,面间距公式为

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

而且,在面心立方晶格中,只有面指数 h, k, l 全为奇数或全为偶数才可能产生反射,因此,当

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} = \frac{a}{\sqrt{3}}$$

时,对应的晶面族为 $\{111\}$ 。

同理,对于正方形的界面, $|\mathbf{K}_n| = 2/a, d = a/2$,它对应于 $\{200\}$ 面簇的布喇格反射。

【例1-5】 试证明:若只计及最近邻的相互作用,用紧束缚近似方法导出体心立方晶格的 s 态电子的能带为

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - A - \delta J (\cos\pi a k_x \cos\pi a k_y \cos\pi a k_z)$$

式中, J 为交叠积分。

解:如只计及最近邻的相互作用,采用紧束缚近似处理晶体中的 s 态电子时,其能量由下式确定

$$E(\mathbf{k}) = E_0 - A + \sum_{\mathbf{R}_n}^{\text{最近邻}} \exp(i2\pi\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_s)) J_{sn} \quad (1)$$

式中, \mathbf{R}_s 和 \mathbf{R}_n 分别是参考原子及其各个最近邻的位矢。在体心立方晶格中,每个原子有8个最近邻。若取参考原子为坐标原点,即 $\mathbf{R}_s = 0$,则8个最近邻的坐标分别为

$$\begin{aligned} & \frac{a}{2}(1, 1, 1), \quad \frac{a}{2}(1, 1, \bar{1}), \quad \frac{a}{2}(1, \bar{1}, 1), \quad \frac{a}{2}(\bar{1}, 1, 1), \\ & \frac{a}{2}(1, \bar{1}, \bar{1}), \quad \frac{a}{2}(\bar{1}, \bar{1}, 1), \quad \frac{a}{2}(\bar{1}, 1, \bar{1}), \quad \frac{a}{2}(\bar{1}, \bar{1}, \bar{1}) \end{aligned}$$