半导体物理问题与习题

田敬民　编著

国防工业出版社

半导体物理问题与习题

田敬民　　编著

国防工业出版社

（京）新登字 106 号

图书在版编目（CIP）数据

半导体物理问题与习题/田敬民编著．—北京：国防工业出版社，1995.5
ISBN 7-118-01345-5

Ⅰ．半…　Ⅱ．田…　Ⅲ．半导体物理-习题-参考资料　Ⅳ．047-44

中国版本图书馆 CIP 数据核字（94）第 10038 号

半导体物理问题与习题
田敬民　编著
*
国防工业出版社出版发行
（北京市[illegible]南路 23 号）
[redacted]
新华书店经[illegible]
北京[illegible]印刷厂印[illegible]

[illegible]开本 787×1092　1/[illegible]　印[illegible] 9 ½　213 千字
1995 年 5 月第[illegible]版　19[illegible]年 5 月北京[illegible] 1 次印刷　印数 1—2300 册

ISBN 7-118-01345-5/TN・214　定价：10.70 元

前　　言

半导体物理学是半导体器件与微电子技术，电子元件，激光与红外等专业的重要基础课。本习题集密切配合刘恩科，朱秉升，罗晋生等编写的《半导体物理学》内容，分章和编排次序都与教材一致。每章都编写了内容提要，对各章内容进行概括，尽量使其系统化，并对教材中重要概念作了进一步说明。编写的问题和习题力求体现教材中各章的基本内容，基本概念和基本要求，希望通过思考问题帮助读者对半导体物理中的主要内容和主要概念加深理解。每章都选排了有具体解题步骤的例题，培养读者综合解题的能力，融会贯通各章的内容。为了扩大思路，培养解决实际问题的能力，每章都编选了一部分难度较高的综合性题目，力求反映不同类型的物理问题。解题中所用的数据和曲线均以教材为准。考虑到某些物理量的使用习惯，仍然使用了 $\Omega\cdot cm$；$1/cm^3$ 等单位。

初稿写成后，朱秉升教授在百忙中予以审阅，并提出许多宝贵意见，在此致以衷心的感谢。

由于编者水平所限，尽管这次出版时作了不少订正与补充，但一定还会有许多不妥或错误，恳切希望读者批评指正。

编　者

内容简介

本书密切配合高等学校工科电子类规划教材《半导体物理学》的内容，分章和编排次序都与教材一致。共有十二章：半导体中的电子状态；半导体中杂质和缺陷能级；半导体中载流子的统计分布；半导体的导电性；非平衡载流子；p-n结；金属-半导体接触；半导体表面与MIS结构；异质结；半导体的光学性质和光电与发光现象；半导体的热电性质；半导体磁和压阻效应。每章都有内容提要、问题、解题示例和习题。

本书适合于高等学校半导体器件与微电子学专业的师生参考。

目　　录

第一章　半导体中电子状态 …… 1
内容提要 …… 1
问　题 …… 2
解题示例 …… 4
习　题 …… 12
第二章　半导体中杂质和缺陷能级 …… 16
内容提要 …… 16
问　题 …… 16
解题示例 …… 17
习　题 …… 19
第三章　半导体中载流子的统计分布 …… 20
内容提要 …… 20
问　题 …… 22
解题示例 …… 24
习　题 …… 33
第四章　半导体的导电性 …… 37
内容提要 …… 37
问　题 …… 38
解题示例 …… 41
习　题 …… 50
第五章　非平衡载流子 …… 54
内容提要 …… 54
问　题 …… 55
解题示例 …… 59
习　题 …… 67
第六章　p-n 结 …… 73
内容提要 …… 73
问　题 …… 74
解题示例 …… 76
习　题 …… 81
第七章　金属-半导体接触 …… 85
内容提要 …… 85
问　题 …… 85
解题示例 …… 86
习　题 …… 90

第八章　半导体表面与MIS结构 …… 93
内容提要 …… 93
问　　题 …… 94
解题示例 …… 96
习　　题 …… 110
第九章　异质结 …… 114
内容提要 …… 114
问　　题 …… 114
习　　题 …… 115
第十章　半导体的光学性质和光电与发光现象 …… 117
内容提要 …… 117
问　　题 …… 118
解题示例 …… 120
习　　题 …… 126
第十一章　半导体的热电性质 …… 129
内容提要 …… 129
问　　题 …… 130
解题示例 …… 130
习　　题 …… 132
第十二章　半导体磁和压阻效应 …… 133
内容提要 …… 133
问　　题 …… 135
解题示例 …… 138
习　　题 …… 142

第一章　半导体中电子状态

内容提要

(1)固体可以分为晶体和非晶体两大类。晶体是由原子或离子有规则排列而成，因此，晶体结构的周期性是其基本特征。半导体材料锗和硅是金刚石结构，它的一个晶胞是一个正立方体，可以看成是由两个面心与立方晶胞套构而成。闪锌矿结构与金刚石结构的唯一差别是体内对角线$\frac{1}{4}$处的四个原子和格点上其他原子不相同，化合物半导体 GaAs 即属此例。

(2)在周期性势场中，电子薛定谔方程的解为布洛赫函数，即波函数：

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

式中，

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

$u_k(r)$反映了周期势场对电子运动的影响，说明晶体中电子在原胞中不同位置出现的几率不同。平面波因子$e^{i2\pi k\cdot r}$表明晶体中电子不再是局域化的，扩展于整个晶体之中，反映了电子的共有化运动。$u_k(r)$的周期性说明了晶体中不同原胞的各等价位置上出现的几率相同。

(3)由于共有化运动，晶体中电子可以看成是整个晶体共有的，因此孤立原子的能级形成能带。能带通常只对有序的晶态物质而言，是关于晶体中电子运动的一种量子理论。它说明了晶体中电子能量限定在某些“带”中。这种情况下，电子能态是按照电子的准动量hk或电子波矢k分类的。即电子的$E(k)$-k关系。

(4)能带中电子可以用波矢k描写其状态。即电子能量E和速度v都是k的函数。即：

$$E(k) = \frac{h^2k^2}{2m_0}, v(k) = \frac{1}{h}\frac{dE}{dk}$$

晶体中电子的所有运动状态都可以由k空间一个有限的区域来描写，把k空间的这个区域叫做布里渊区。

(5)为了使半导体中的电子在外力作用下，也能够写出加速度与外力之间类似经典力学的简单关系，引入了有效质量概念。有效质量张量是能量对准动量二次导数的倒数，即：

$$m_n^* = \left(\frac{d^2E}{dp^2}\right)^{-1} = \left(\frac{1}{h^2}\quad\frac{d^2E}{dk^2}\right)^{-1}$$

在能量极小值附近$m_n^*>0$，在能量极大值附近$m_n^*<0$

应用有效质量概念不仅能像讨论自由电子一样讨论晶体电子的运动，而且由于m_n^*与能带结构有关，有助于对能带的研究。

(6)有效质量m_n^*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。根据能量极值出现在布里渊区的位置，极值附近等能面形状，以及能量椭球主轴的方向，极值

对称出现的个数说明了硅、锗和砷化镓的导带和价带结构。

回旋共振的频率由下式决定：

$$\omega_c = \frac{qB}{m_n^*}$$

式中，m_n^* 是电子的回旋有效质量。

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

m_x^*、m_y^*、m_z^* 分别为椭球等能面三个主轴方向上电子的有效质量；α、β、γ 分别是磁场 B 相对主轴方向的方向余弦。

(7)空穴是几乎充满的能带中未被电子占据的空量子态。用空穴的运动可近似描述近满带中电子集体的运动状态。因此，空穴为一准粒子，其物理特性可以用价带电子的性质来描述。可以把空穴视为一个携带正电荷，并以与该空状态相对应的电子速度 $v(k)$ 运动的粒子。空穴具有正的有效质量，空穴导电实质就是价带中大量电子的导电。

问　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 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？

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，但可以通过它与外力场 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 $k=\frac{1}{4a}$ 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，问空穴数是否等于电子数？

(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，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？

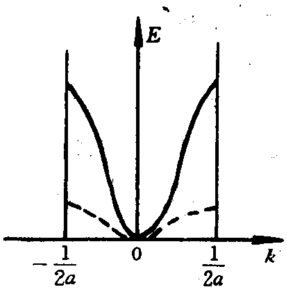


图 1-1

1—10　有效质量对能带的宽度有什么影响？有人说："有效质量愈大，能态密度也愈大，因而能带愈窄。"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。

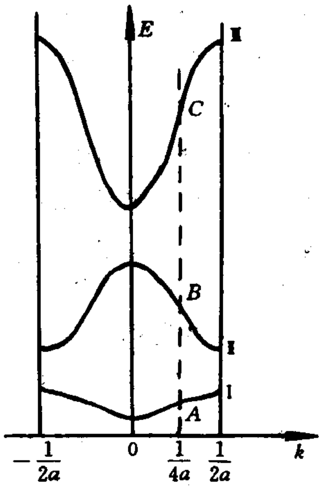


图 1-2

1—16　以硅的本征激发为例，说明半导体能带图的物理意义及其与硅晶格结构的联系？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正电荷和一定质量的空穴来描述？

1—18　试论证空穴具有下述的主要特征：

(1)空穴浓度等于价带中空状态浓度。

(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等于原空穴状态内电子能量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速度v与波矢k的关系？

1—20　有两块硅单晶，其中一块的重量是另一块重量的二倍。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：$n\cdot\left(k-\frac{n}{2a}\right)=0$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。画出第一、第二布里渊区的边界并简要说明画法的根据。

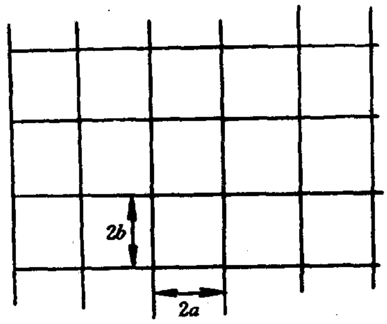


图 1—3

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　置于均匀磁场中的半导体中的电子受到的洛仑兹力 $F_L=qv\times B$；式中速度 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^* 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 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 $F=h\frac{dk}{df}$，而不等于电子真实动量的变化率？

解 题 示 例

例 1　某半导体晶体价带顶附近能量 E 可表示为：$E(k)=E_{max}-10^{26}k^2$(erg)，现将其中一波矢 $k=10^7$i/cm 的电子移走，试求此电子留下的空穴的有效质量，波矢及速度。

〔解〕　由题中条件可知：$E(k)=E_{max}-10^{26}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)$，显然价带顶附近等能面为球面，则有效质量为各向同性，即是一标量。

$$\frac{1}{m_n^*}=\frac{1}{h^2}\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

$$\therefore\quad m_p^*=-m_n^*=-h^2\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right)^{-1}=(6.62\times10^{-27})^2\times\left(-\frac{1}{2\times10^{-26}}\right)$$

$$=2.2\times10^{-27}(\text{g})$$

由速度 $v(k)=\frac{1}{h}\frac{\partial E}{\partial k}$ 可得：

$$v_x=\frac{1}{h}\frac{\partial E}{\partial k_x}=\frac{1}{h}\times(-2\times10^{-26})k_x$$

$$v_y=\frac{1}{h}\frac{\partial E}{\partial k_y}=\frac{1}{h}\times(-2\times10^{-26})k_y$$

$$v_z=\frac{1}{h}\frac{\partial E}{\partial k_z}=\frac{1}{h}\times(-2\times10^{-26})k_z$$

当 $k=10^7\mathrm{i/cm}$ 时：

$$v(k)=-\frac{1}{h}\times(-2\times10^{-26})\times10^7\mathrm{i}$$
$$=3.02\times10^7\mathrm{i(cm/s)}$$

∵空穴的波矢 $k_p=-k_n$　　∴$k_p=-10^7\mathrm{i/cm}$

例 2　在各向异性晶体中，其能量 E 可用波矢 k 的分量表示成：

$$E(k)=Ak_x^2+Bk_y^2+Ck_z^2$$

试求出能代替牛顿方程　$F=m_0\dfrac{\mathrm{d}^2r}{\mathrm{d}t^2}$ 的电子运动方程。

〔**解**〕　因为电子的运动速度可表示成：

$$v=\frac{1}{h}\ \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}$$

∴电子加速度为：

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}\right)=\frac{1}{h}\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}\right)$$

由于单位时间内能量增加等于力在单位时间内所做的功：

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t}=F\cdot\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t}=F\cdot v=F\cdot\frac{1}{h}\ \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}$$

$$\therefore\ \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{h^2}F\cdot\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}=\frac{1}{h^2}\ \frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\cdot F$$

令　$\dfrac{1}{h^2}\ \dfrac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}=\dfrac{1}{m_{ni}^*}$ 按题中所给条件：$E(h)=Ak_x^2+Bk_y^2+Ck_z^2$ 得

$$\frac{1}{m_{nx}^*}=\frac{2A}{h^2}\qquad\frac{1}{m_{ny}^*}=\frac{2B}{h^2}\qquad\frac{1}{m_{nz}^*}=\frac{2C}{h^2}$$

于是：

$$\frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t}=\frac{2A}{h^2}F_x\qquad\frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t}=\frac{2B}{h^2}F_y\qquad\frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t}=\frac{2C}{h^2}F_z$$

或者写成：

$$F_x=\frac{h^2}{2A}\ \frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t}\qquad F_y=\frac{h^2}{2B}\ \frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t}\qquad F_z=\frac{h^2}{2C}\ \frac{\mathrm{d}v_z}{\mathrm{d}t}$$

上式即为各向异性晶体中电子的运动方程。

例 3　证明：对于能带中的电子，$\boldsymbol{k}$ 状态和 $-\boldsymbol{k}$ 状态的电子速度大小相等，方向相反。即：$v(\boldsymbol{k})=-v(-\boldsymbol{k})$

并解释为什么无外场时，晶体总电流等于零。

〔**解**〕　$\boldsymbol{k}$ 状态电子的速度为：

$$\boldsymbol{v}(\boldsymbol{k})=\frac{1}{h}\left[\frac{\partial E(\boldsymbol{k})}{\partial k_x}i+\frac{\partial E(\boldsymbol{k})}{\partial k_y}j+\frac{\partial E(\boldsymbol{k})}{\partial k_z}\boldsymbol{k}\right]\tag{1}$$

同理，$-\boldsymbol{k}$ 状态电子的速度则为：

$$v(-\boldsymbol{k})=\frac{1}{\boldsymbol{h}}\left[\frac{\partial E(-k)}{\partial k_x}i+\frac{\partial E(-k)}{\partial k_y}j+\frac{\partial E(-k)}{\partial k_z}k\right]\tag{2}$$

从一维情况容易看出：

$$\frac{\partial E(-k)}{\partial k_x}=-\frac{\partial E(k)}{\partial k_x}\tag{3}$$

同理有：

$$\frac{\partial E(-k)}{\partial k_y}=-\frac{\partial E(k)}{\partial k_y} \tag{4}$$

$$\frac{\partial E(-k)}{\partial k_z}=-\frac{\partial E(k)}{\partial k_z} \tag{5}$$

将式(3)、(4)、(5)代入式(2)后得：

$$v(-k)=-\frac{1}{h}\left[\frac{\partial E(k)}{\partial k_x}i+\frac{\partial E(k)}{\partial k_y}j+\frac{\partial E(k)}{\partial k_z}k\right] \tag{6}$$

利用(1)式即得：$v(-k)=-v(k)$

因为电子占据某个状态的几率只同该状态的能量有关，即：

$E(k)=E(-k)$故电子占有 k 状态和 $-k$ 状态的几率相同，且

$v(k)=-v(-k)$，故这两个状态上的电子电流相互抵消，晶体中总电流为零。

例 4 已知一维晶体的电子能带可写成：

$$E(k)=\frac{h^2}{m_0a^2}\left(\frac{7}{8}-\cos 2\pi ka+\frac{1}{8}\cos 6\pi ka\right)$$

式中，a 为晶格常数。试求：

(1)能带的宽度；

(2)电子的波矢 k 状态时的速度；

(3)能带底部和顶部电子的有效质量。

〔解〕 (1)由 $E(k)$关系得：

$$\begin{aligned}\frac{dE}{dk}&=\frac{\pi h^2}{m_0a^2}\left(2\sin 2\pi ka-\frac{3}{4}\sin 6\pi ka\right)\\&=\frac{\pi h^2}{m_0a}\left[2\sin 2\pi ka-\frac{3}{4}(3\sin 2\pi ka-4\sin^3 2\pi ka)\right]\\&=\frac{\pi h^2}{m_0a}\left(3\sin^3 2\pi ka-\frac{1}{4}\sin 2\pi ka\right)\end{aligned} \tag{1}$$

$$\frac{d^2E}{dk^2}=\frac{\pi^2h^2}{m_0}\left(18\sin^2 2\pi ka\cos 2\pi ka-\frac{1}{2}\cos 2\pi ka\right) \tag{2}$$

令 $\quad \frac{dE}{dk}=0 \quad$ 得：$\sin^2 2\pi ka=\frac{1}{12}$

$$\therefore \cos 2\pi ka=\pm\left(\frac{11}{12}\right)^{\frac{1}{2}}$$

当 $\cos 2\pi ka=\sqrt{\frac{11}{12}}$时，代入(2)得：

$$\begin{aligned}\frac{d^2E}{dk^2}&=\frac{\pi^2h^2}{m_0}\left[18\times\frac{1}{12}\times\sqrt{\frac{11}{12}}-\frac{1}{2}\times\sqrt{\frac{11}{12}}\right]\\&=\sqrt{\frac{11}{12}}\frac{\pi h^2}{m_0}>0\end{aligned}$$

对应 $E(k)$的极小值。

当 $\cos 2\pi ka=-\sqrt{\frac{11}{12}}$时，代入(2)得：

$$\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}=\frac{\pi h^2}{m_0}\left(-18\times\frac{1}{12}\times\sqrt{\frac{11}{12}}+\frac{1}{2}\times\sqrt{\frac{11}{12}}\right)$$

$$=-\sqrt{\frac{11}{12}}\frac{\pi^2h}{m_0}<0$$

对应 $E(k)$ 极大值。

根据上述结果，求得 E_{min} 和 E_{max} 即可求得能带宽度。

$$\because\qquad E(k)=\frac{h^2}{m_0a^2}\left(\frac{7}{8}-\cos2\pi ka+\frac{1}{8}\cos6\pi ka\right)$$

$$=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}-\cos2\pi ka+\frac{1}{8}(4\cos^3\pi ka-3\cos2\pi ka)\right]$$

$$=\frac{h^2}{m_0a^2}\left(\frac{7}{8}-\frac{11}{8}\cos2\pi ka+\frac{1}{2}\cos^32\pi ka\right)$$

将 $\cos2\pi ka=\sqrt{\frac{11}{12}}$ 代入得：

$$E_{min}=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}-\frac{11}{8}\left(\sqrt{\frac{11}{12}}\right)^3\right]$$

$$=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}-\left(\frac{11}{12}\right)^{\frac{3}{2}}\right]$$

将 $\cos2\pi ka=-\sqrt{\frac{11}{12}}$ 代入得：

$$E_{max}=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}+\frac{11}{8}\sqrt{\frac{11}{12}}-\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{11}{12}}\right)^3\right]$$

$$=\frac{h^2}{m_0a^2}\left[\frac{7}{8}+\left(\frac{11}{12}\right)^{\frac{3}{2}}\right]$$

故：能带宽度 $\quad \Delta E=E_{max}-E_{min}=2\left(\frac{11}{12}\right)^{\frac{3}{2}}\cdot\frac{h^2}{m_0a^2}$

(2)由题中可给 $E(k)$ 关系可得电子在波矢 k 状态时的速度为：

$$v(k)=\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}k}=\frac{1}{h}\frac{\pi h^2}{m_0a^2}\left(3\sin^32\pi ka-\frac{1}{4}\sin2\pi ka\right)$$

$$=\frac{\pi h}{m_0a^2}\left(3\sin^32\pi ka-\frac{1}{4}\sin2\pi ka\right);$$

(3)能带底部和顶部电子有效质量：

$$(m_n^*)_{带底}=\left[\frac{1}{h^2}\left(\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\right)_{底}\right]^{-1}$$

$$=\left[\frac{1}{h^2}\sqrt{\frac{11}{12}}\frac{\pi^2k^2}{m}\right]^{-1}$$

$$=4\left(\frac{12}{11}\right)^{\frac{1}{2}}m_0=4.18m_0$$

$$(m_n^*)_{顶}=\left[\frac{1}{h^2}\left(\frac{\mathrm{d}^2E}{\mathrm{d}k^2}\right)_{顶}\right]^{-1}$$

$$= \left[\frac{1}{\hbar^2} \left(-\sqrt{\frac{11}{12}} \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_0} \right) \right]^{-1}$$

$$= -4 \left(\frac{12}{11} \right)^{\frac{1}{2}} m_0 = -4.18 m_0$$

例 5 设有一平面六角晶格(如图 1-4),基矢为:

$$\boldsymbol{a}_1 = \frac{a}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a\boldsymbol{j}$$

$$\boldsymbol{a}_2 = -\frac{a}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a\boldsymbol{j}$$

式中,a 为六角形平行对边的距离。

(1)证明倒格子原胞的面积等于正格子原胞面积的倒数;

(2)试画出此晶格的第一、二、三布里渊区。

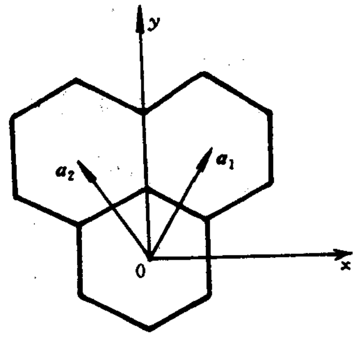


图 1-4

〔**解**〕 (1)引进一个与六角平面垂直的单位矢量 $\boldsymbol{k}$。则

$$\Omega = \boldsymbol{a}_1 \cdot (\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{k})$$

$$= \left(\frac{a}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a\boldsymbol{j} \right) \cdot \left[\left(-\frac{a}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a\boldsymbol{j} \right) \times \boldsymbol{k} \right]$$

$$= \left(\frac{a}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a\boldsymbol{j} \right) \cdot \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a\boldsymbol{i} + \frac{a}{2}\boldsymbol{j} \right) = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2$$

根据倒格子基矢定义:

$$b_1 = \frac{\boldsymbol{a}_2 \times \boldsymbol{k}}{\Omega} = \frac{1}{a}\boldsymbol{i} + \frac{1}{\sqrt{3}a}\boldsymbol{j}$$

$$b_2 = \frac{\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{a}_1}{\Omega} = -\frac{1}{a}\boldsymbol{i} + \frac{1}{\sqrt{3}a}\boldsymbol{j}$$

显然: $|b_1| = |b_2| = \dfrac{2}{\sqrt{3}a}$

正格子原胞的面积:

$$S = |a_1 \times a_2| = \left| \left(\frac{a}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a\boldsymbol{j} \right) \times \left(-\frac{a}{2}\boldsymbol{i} + \frac{\sqrt{3}}{2} a\boldsymbol{j} \right) \right| = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2$$

倒格子原胞的面积:

$$S^* = |b_1 \times b_2| = \left| \left(\frac{1}{a} i + \frac{1}{\sqrt{3}a} j \right) \times \left(-\frac{1}{a} i + \frac{1}{\sqrt{3}a} j \right) \right| = \frac{2}{\sqrt{3}} a^{-2}$$

故 $s^* = \dfrac{1}{s}$

(2)由 $\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2$ 可得到倒格子矢为:

$$\boldsymbol{k}_n = n_1 \boldsymbol{b}_1 + n_2 \boldsymbol{b}_2 = (n_1 - n_2) \frac{1}{a}\boldsymbol{i} + (n_1 + n_2) \frac{1}{\sqrt{3}}\boldsymbol{j}$$

式中,n_1、n_2 为整数。将 $\boldsymbol{k}_n$ 代入布里渊区边界方程

$$k_n \cdot \left(k + \frac{k_n}{2} \right) = 0$$

得：$(n_1-n_2)k_x+\frac{1}{\sqrt{3}}(n_1+n_2)k_y=-\frac{1}{a}\left[\frac{(n_1+n_2)^2}{2}+\frac{(n_1+n_2)^2}{6}\right]$ (1)

若 n_1、n_2 取(1,0)，($\bar{1}$,0)，(0,1)，(0,$\bar{1}$)得：

$$\pm k_x \pm k_y = \frac{2}{3} \quad \frac{1}{a} \tag{2}$$

若 n_1，n_2 分别取(1,$\bar{1}$)，($\bar{1}$,1)得：

$$\pm k_y = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad \frac{1}{a} \tag{3}$$

由(2)和(3)两式决定的六条边界线围成的最小闭合区域为第一布里渊区，紧邻第一区；由上述六条界线围成的六个分立的闭合区域为第二布里渊区。

若 n_1，n_2 取(1,$\bar{1}$)，($\bar{1}$,1)得：$\pm k_x=\frac{1}{a}$ (4)

若 n_1，n_2 取(1,2)，(2,1)，($\bar{1}$,$\bar{2}$)，($\bar{2}$,$\bar{1}$)则得：

$$\pm k_x \pm \sqrt{3}k_y = \frac{2}{a} \tag{5}$$

由(4)、(5)两式决定的六条边界线和前面边界线构成第三布里渊区(如图 1-5 所示)。

例 6 晶格常数为 2.5Å 的一维晶格，当外加 10^2V/m 和 10^7V/m 电场时，试分别计算电子自能带底运动到能带顶所需时间。

〔**解**〕 设电场强度为 E

$\because F=h\frac{dk}{dt}=qE$ （取绝对值）

$\therefore dt=\frac{h}{qE}dk$

$\therefore t=\int_0^t dt=\int_0^{\frac{1}{2a}}\frac{h}{qE}dk$

$=\frac{h}{qE}\ \frac{1}{2a}$

代入数据得：

$$t=\frac{6.62\times10^{-34}}{2\times1.6\times10^{-19}\times2.5\times10^{-10}\times E}$$

$$=\frac{8.3\times10^{-6}}{E}(s)$$

当 $E=10^2$V/m 时，$t=8.3\times10^{-8}$(s)

$E=10^7$V/m 时，$t=8.3\times10^{-13}$(s)

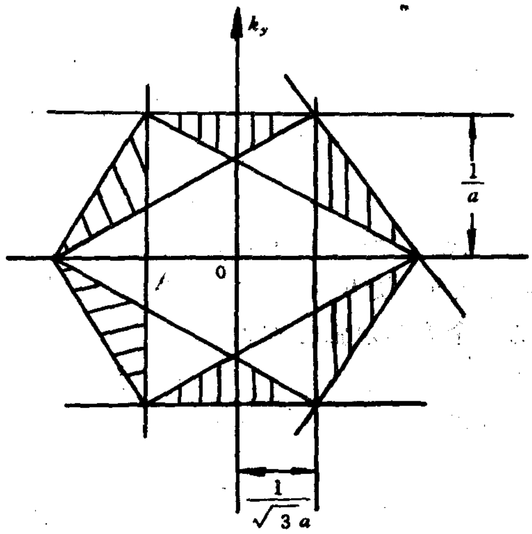


图 1-5

例 7 硅的导带沿<100>方向共有六个极小值，在极小值附近等能面为旋转椭球面(图 1-6(a))。其横向和纵向有效质量各为 $m_t\approx0.19m_0$，$m_l\approx0.98m_0$，m_0 为自由电子静质量。

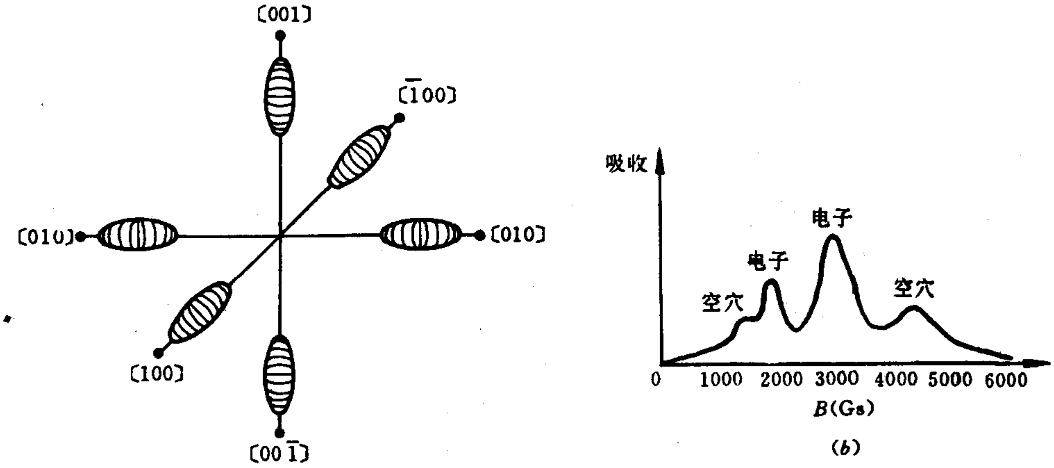
当外磁场在(110)平面内并与〔001〕方向成 30°角时，测得的硅单晶的回旋共振信号如图 1-6(b)所示，电子的两个共振吸收峰的位置在 0.2950T 和 0.19T 处，试对照图 1-6：

(1)解释虽然硅沿<100>方向有六个极值椭球却只有两个电子回旋共振吸收峰。

(2)证明图 1-6(b)给出的吸收峰位置与上面给出的 m_t、m_l 值及公式：

$$\omega_C=\frac{eB}{m^*} \qquad m^*=\frac{m_1m_2m_3}{m_1\alpha^2+m_2\beta^2+m_3\gamma^2} \tag{1}$$

是相符的。式中，m_1、m_2、m_3 是椭球等能面三个主轴方向有效质量；α、β、γ 是磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 相对于椭球主轴的三个方向余弦。



(a)　　(b)

图 1-6

〔解〕 (1)因磁感应 $\boldsymbol{B}$ 在(110)平面内并与〔001〕方向成 30°角，故 $\boldsymbol{B}$ 在 x、y、z 轴的投影分量各是 $B\sin30°\cos45°$，$B\sin30°\cos45°$，$B\cos30°$，即 $\boldsymbol{B}$ 的单位矢量 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 在 x、y、z 轴上分量为：

$$\hat{\boldsymbol{B}}=\left(\frac{1}{2}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2},-\frac{1}{2}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2},\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{8}}(1,-1,\sqrt{6}) \qquad (2)$$

取 k_1、k_2、k_3 为三个直角坐标轴，并令 k_3 轴沿椭球长轴方向(即沿〔100〕方向)，再适当选取 k_1 轴方向，使 $\boldsymbol{B}$ 位于(k_1，k_3)平面内并与椭球长轴交角为 θ，则在(k_1、k_2、k_3)直角坐标系中，$\boldsymbol{B}$ 的三个方向余弦分别为：

$$\alpha=\sin\theta \quad \beta=0 \quad \gamma=\cos\theta$$

再令 $m_1=m_2=m_t\cdot m_3=m_l$ 则式(1)化为：

$$m^*=\left(\frac{m_1m_2m_3}{m_1\alpha^2+m_2\beta^2+m_3\gamma^2}\right)^{½}=\left(\frac{m_t^2m_l}{m_t\sin^2\theta m_l\cos^2\theta}\right)^{½} \qquad (3)$$

对于沿 x 轴方向(〔100〕和〔$\bar{1}$00〕)的一对旋转椭球，由式(2)知 $\cos\theta=\hat{\boldsymbol{B}}_x=\pm1/\sqrt{8}$，得 $\cos^2\theta=1/8$，$\sin^2\theta=7/8$，代入式(3)得：

$$m_1^*=\left(\frac{m_t^2m_l}{7m_t/8+m_l/8}\right)^{½} \qquad (4)$$

对于沿 y 轴方向(〔010〕和〔0$\bar{1}$0〕)的一对旋转椭球，由式(2)知 $\cos\theta=\hat{\boldsymbol{B}}_y=\pm1/\sqrt{8}$，也得 $\cos^2\theta=1/8$，$\sin^2\theta=7/8$，代入式(3)得 $m_2^*=m_1^*$。

对于沿 Z 轴方向(〔001〕和〔00 $\bar{1}$〕)的一对旋转椭球，由式(2)知 $\cos\theta=\hat{\boldsymbol{B}}_z=\pm\sqrt{3}/2$，得 $\cos^2\theta=3/4$，$\sin^2\theta=1/4$，代入式(3)得：

$$m_3^*=\left(\frac{m_t^2m_l}{m_l/4+3m_t/4}\right)^{1/2} \qquad (5)$$