



普通高等教育“十一五”电子信息类规划教材

半导体 物理与器件

裴素华 等编著

免费
电子课件



机械工业出版社
CHINA MACHINE PRESS

普通高等教育“十一五”电子信息类规划教材

半导体物理与器件

裴素华 黄萍 刘爱华 朱俊孔 修显武 编著



机械工业出版社

本书较系统全面地阐述了半导体物理的基础知识和典型半导体器件的工作原理、工作特性。具体内容包括：半导体材料的基本性质、PN 结机理与特性、双极型晶体管、MOS 场效应晶体管、半导体器件制备技术、Ga 在 SiO₂/Si 结构下的开管掺杂共 6 章。每章后附有内容小结、思考题和习题。书后有附录，附录 A 是本书的主要符号表，附录 B 是常用物理常数表，附录 C 是锗、硅、砷化镓主要物理性质表，附录 D 是求扩散结杂质浓度梯度的图表和方法。对本书各章内容可以单独选择或任意组合使用。

本书可作为半导体、微电子技术、应用物理等电子信息类专业本科生的必修教材，也可作为电子学相关专业本科生、研究生选修课教材，以及供信息技术领域人员参考。本书配有免费的教学课件，欢迎选用本书作为教材的老师索取，索取邮箱：llm7785@sina.com。

图书在版编目 (CIP) 数据

半导体物理与器件/裴素华等编著，—北京：机械工业出版社，2008.7

普通高等教育“十一五”电子信息类规划教材
ISBN 978-7-111-24731-9

I. 半… II. 裴… III. 半导体器件-半导体物理-高等学校-教材 IV. TN303

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 113519 号

机械工业出版社 (北京市百万庄大街 22 号 邮政编码 100037)

责任编辑：刘丽敏 责任校对：吴美英

封面设计：张 静 责任印制：邓 博

北京京丰印刷厂印刷

2008 年 9 月第 1 版 · 第 1 次印刷

184mm × 260mm · 21 印张 · 519 千字

标准书号：ISBN 978-7-111-24731-9

定价：35.00 元

凡购本书，如有缺页、倒页、脱页，由本社发行部调换

销售服务热线电话：(010) 68326294

购书热线电话：(010) 88379639 88379641 88379643

编辑热线电话：(010) 88379711

封面无防伪标均为盗版

前 言

20世纪50年代晶体管诞生以来,微电子学及其相关技术迅速发展,现已成为整个信息时代的标志与基础。以半导体器件为核心的电子工业,从1998年开始,已发展成为世界上规模最大的工业。发展电子工业是弱国变为强国的必由之路,显然培养该专业及相关专业的人才相当重要的。编著本书的目的正是为各高校近年来新增设的电子信息类专业及其相关的电子科学与技术等专业服务的。

《半导体物理与器件》可作为半导体、微电子学、微电子技术、应用物理等专业本科生的必修教材,也可作为其他相关专业如电子学、计算机、自动控制、电子信息与工程乃至文科各专业本科生、研究生的选修教材或自学参考书,同时也可供从事半导体器件设计、制造和应用等信息技术领域的科研与工程技术人员阅读与参考。

本书从系统性和相对独立性考虑,在内容的选取和编排上力求实用。第1、2章介绍了半导体的基本性质和PN结机理与特性,这是半导体物理的基本知识,可单独作为选修半导体物理教材使用,同时又是后续章节内容的基础。第3、4章主要介绍了双极型晶体管和MOS场效应晶体管,这是半导体器件中最典型、最普及和最具有代表性的器件,重点阐述了这两类器件的基本工作原理、特性和电学参数。为有助于初学者对半导体器件理论的理解和掌握,同时增强对微电子学领域的感性认识,培养学习兴趣,本书第5章介绍了半导体器件制备技术,并涵盖了新技术及发展趋势。第6章简明扼要地介绍了Ga在SiO₂/Si结构下的开管掺杂及其在半导体器件中的应用,这是作者希望通过本教材的出版,将多年从事微电子技术科研和应用方面的体会与大家交流,唤起业内人士对新成果的关注和应用。

本书本着突出重点、通俗易懂的原则,叙述的重点放在了基本概念、基本工作原理和性能参数的物理意义上,着重阐述半导体中载流子在各种不同工作条件下的运动过程和变化过程,尽可能地用浅显易懂的语言表述复杂的道理,而又不失其精髓。同时,省略了烦琐的数学推导,从而使内容更精练、重点更突出。在每章后附有本章小结和与内容相配套的思考题与习题。本书后有附录,附录A是本书的主要符号表,附录B是物理常数表,附录C是锗、硅、砷化镓主要物理性质表,附录D是求扩散结杂质浓度梯度的图表和方法。本书各章内容可以单独选择或任意组合使用。

本书参考学时为90学时,可根据具体情况由老师任意选择或相互组合使用。

本书由北京交通大学尹逊和博士担任主审,审阅了书稿,付出了大量的精力和劳动,并提出了许多宝贵的意见和建议,在此表示衷心的感谢。

在本书的编写过程中,参阅了许多的教材与著作,从中汲取了不少有益的内容和叙述方法,在此向作者们深表谢意。

由于作者水平有限,书中难免存在一些不足、不妥或有误之处,恳请有关专家和读者批评指正。

编 者

目 录

前言

第 1 章 半导体材料的基本性质 1

1.1 半导体与基本晶体结构 1	
1.1.1 半导体 1	
1.1.2 半导体材料的基本特性 1	
1.1.3 半导体的晶体结构 3	
1.1.4 晶面及其表示方法 5	
1.1.5 半导体材料简介 6	
1.2 半导体的能带 7	
1.2.1 孤立原子中电子能级 7	
1.2.2 晶体中电子的能带 9	
1.2.3 硅晶体能带的形成过程 10	
1.2.4 能带图的意义及简化表示 11	
1.3 本征半导体与本征载流子浓度 12	
1.3.1 本征半导体的导电机构 12	
1.3.2 热平衡状态与热平衡载流子浓度 13	
1.3.3 本征载流子浓度 14	
1.3.4 费米能级与载流子浓度的关系 17	
1.4 杂质半导体与杂质半导体的载流子浓度 18	
1.4.1 N 型半导体与 P 型半导体 19	
1.4.2 施主与受主杂质能级 20	
1.4.3 杂质半导体的载流子浓度 21	
1.4.4 杂质半导体的费米能级及其与杂质浓度的关系 22	
1.4.5 杂质半导体随温度的变化 25	
1.5 非平衡载流子 27	
1.5.1 非平衡载流子的产生 27	
1.5.2 非平衡载流子的寿命 28	
1.5.3 非平衡载流子的复合类型 29	
1.5.4 准费米能级 29	
1.6 载流子的漂移运动 31	
1.6.1 载流子的热运动与漂移运动 31	
1.6.2 迁移率 μ 32	
1.6.3 半导体样品中的漂移电流密度 34	
1.6.4 半导体的电阻率 ρ 35	

1.7 载流子的扩散运动 37	
1.7.1 扩散方程的建立 37	
1.7.2 根据相应的边界条件确定 $\Delta p(x)$ 的特解 38	
1.7.3 扩散系数与迁移率的关系——爱因斯坦关系式 40	
1.7.4 扩散长度的物理意义 41	
1.7.5 连续性方程 41	
本章小结 42	
思考题和习题 43	
第 2 章 PN 结机理与特性 45	
2.1 平衡 PN 结的机理与特性 45	
2.1.1 PN 结的制备与杂质分布 45	
2.1.2 平衡 PN 结形成与能带 48	
2.1.3 平衡 PN 结的接触电势差 51	
2.1.4 平衡 PN 结的载流子浓度分布 53	
2.2 正向 PN 结机理与特性 55	
2.2.1 正向偏置与正向注入效应 55	
2.2.2 正向 PN 结边界少数浓度和少数浓度分布 55	
2.2.3 正向 PN 结电流-电压方程式 58	
2.2.4 PN 结正向电流的讨论 61	
2.2.5 PN 结的大注入效应 63	
2.2.6 正向 PN 结空间电荷区复合电流 64	
2.3 反向 PN 结的机理与特性 66	
2.3.1 反向偏置与反向抽取作用 66	
2.3.2 反向 PN 结边界少数浓度和少数浓度分布 67	
2.3.3 反向 PN 结电流-电压方程式 68	
2.3.4 反向 PN 结空间电荷区的产生电流 70	
2.3.5 PN 结表面漏电流 71	
2.3.6 PN 结的伏安特性 73	
2.4 PN 结空间电荷区的电场、电位分布和宽度 74	

2.4.1 突变结空间电荷区的电场、 电位分布和宽度	74	3.3.4 共发射极输出特性曲线的 讨论	138
2.4.2 线性渐变结空间电荷区的电场、 电位分布和宽度	78	3.4 晶体管的反向电流与击穿电压	141
2.5 PN 结击穿机理与击穿特性	80	3.4.1 晶体管的反向电流	141
2.5.1 PN 结击穿机理	81	3.4.2 晶体管的反向击穿电压	143
2.5.2 PN 结雪崩击穿电压	82	3.4.3 穿通电压	147
2.5.3 影响雪崩击穿电压的主要因素	87	3.5 晶体管的频率特性	148
2.5.4 几种不正常的击穿曲线	89	3.5.1 晶体管交流电流放大系数	149
2.6 PN 结的电容特性	90	3.5.2 晶体管频率特性参数	150
2.6.1 PN 结的势垒电容	90	3.5.3 交流电流放大系数随频率变化的 物理原因	151
2.6.2 PN 结的扩散电容	93	3.5.4 晶体管高频等效电路	153
2.7 晶体二极管特性与设计考虑	96	3.5.5 共基极交流电流放大系数 α 及 截止频率 f_c 的定量分析	155
2.7.1 晶体二极管的基本结构	97	3.5.6 共发射极交流电流放大系数 β 、 f_β 及 f_T 的定量分析	159
2.7.2 晶体二极管的伏安特性与 主要参数	98	3.5.7 高频功率增益和最高振荡频率	162
2.7.3 几种特殊二极管	99	3.5.8 晶体管的噪声	164
2.7.4 半导体二极管设计考虑与 制备范例	105	3.6 晶体管的功率特性	166
本章小结	107	3.6.1 晶体管集电极最大工作电流	166
思考题和习题	109	3.6.2 基区大注入效应对电流放大 系数的影响	167
第 3 章 双极型晶体管	111	3.6.3 基区扩展效应对 β_0 和 f_T 的 影响	171
3.1 晶体管的结构与工作原理	111	3.6.4 发射极电流集边效应	175
3.1.1 晶体管的基本结构	111	3.6.5 晶体管最大耗散功率与热阻	180
3.1.2 晶体管的制备工艺与杂质分布	112	3.6.6 晶体管的二次击穿与安全 工作区	183
3.1.3 晶体管的工作原理	114	3.7 晶体管的开关特性	186
3.1.4 晶体管的放大功能	115	3.7.1 晶体管的开关作用	186
3.2 晶体管的电流放大特性	116	3.7.2 晶体管的开关工作区域	188
3.2.1 晶体管的能带、浓度分布及 载流子的传输	116	3.7.3 晶体管的开关波形和开关时间	191
3.2.2 晶体管内的电流传输与各端 电流的形成	119	3.7.4 晶体管的开关过程和影响开关 时间的因素	191
3.2.3 晶体管的直流电流方程式	120	3.7.5 提高晶体管开关速度的途径	196
3.2.4 晶体管的直流电流放大系数	123	3.7.6 开关晶体管的正向压降与 饱和压降	197
3.2.5 晶体管电流放大系数的定量 分析	124	3.8 晶闸管	198
3.2.6 影响晶体管直流电流放大系数的 其他因素	129	3.8.1 晶闸管的基本结构与基本特性	198
3.3 晶体管的直流特性曲线	134	3.8.2 晶闸管的工作原理	200
3.3.1 共基极连接直流特性曲线	134	3.8.3 晶闸管几种主要派生器件	204
3.3.2 共发射极连接直流特性曲线	135	本章小结	208
3.3.3 共基极与共发射极输出特性 曲线的比较	137	思考题和习题	210

第4章 MOS 场效应晶体管	213	4.8.3 弱反型区(亚阈值)漏电流 变化	259
4.1 MOS 结构与基本性质	213	4.8.4 长沟道器件的最小沟道长度 限制	260
4.1.1 理想 MOS 结构及基本性质	213	本章小结	261
4.1.2 实际 MOS 结构及基本特性	219	思考题和习题	261
4.2 MOS 场效应晶体管的工作原理与 基本特性	221	第5章 半导体器件制备技术	263
4.2.1 MOS 场效应晶体管的基本 工作原理	221	5.1 晶体生长与外延	263
4.2.2 MOS 场效应晶体管的 转移特性	222	5.1.1 晶体基本生长技术	263
4.2.3 MOS 场效应晶体管的 输出特性	224	5.1.2 晶体外延生长技术	264
4.3 MOS 场效应晶体管的阈值电压	227	5.2 硅的热氧化	268
4.3.1 阈值电压	227	5.2.1 SiO ₂ 的结构、性质与作用	268
4.3.2 影响阈值电压的其他诸因素	231	5.2.2 硅热氧化形成 SiO ₂ 的机理	270
4.4 MOS 场效应晶体管的直流 伏安特性	233	5.2.3 SiO ₂ 的制备方法	271
4.4.1 伏安特性方程基本表示式	234	5.2.4 SiO ₂ 质量的宏观检验	272
4.4.2 亚阈区的伏安特性	236	5.3 光刻与刻蚀技术	273
4.4.3 击穿区的伏安特性与击穿机理	238	5.3.1 光刻过程简介	273
4.4.4 输出特性曲线与直流参数	239	5.3.2 新一代图形曝光技术	276
4.5 MOS 场效应晶体管的频率特性	241	5.3.3 刻蚀技术	278
4.5.1 MOS 场效应晶体管的交流小信号 参数	241	5.4 半导体中的杂质掺杂	279
4.5.2 MOS 场效应晶体管交流小信号 等效电路	244	5.4.1 杂质扩散机理与方法	279
4.5.3 MOS 场效应晶体管的 高频特性	246	5.4.2 离子注入原理与系统	284
4.6 MOS 场效应晶体管的开关特性	248	5.5 介质薄膜化学气相淀积技术	286
4.6.1 MOS 场效应晶体管的 开关作用	249	5.5.1 二氧化硅的化学气相淀积	286
4.6.2 MOS 场效应晶体管的 开关过程	250	5.5.2 氮化硅的化学气相淀积	287
4.6.3 MOS 场效应晶体管的开关 时间计算	251	5.5.3 多晶硅的化学气相淀积	288
4.7 MOS 场效应晶体管的温度特性	253	5.6 金属薄膜的物理气相淀积技术	288
4.7.1 迁移率随温度的变化	253	5.6.1 金属膜的蒸发	288
4.7.2 阈值电压的温度特性	253	5.6.2 金属膜的溅射	289
4.7.3 MOS 场效应晶体管几个主要参数 的温度特性	254	5.7 制备半导体器件工艺流程	290
4.8 MOS 场效应晶体管短沟道效应	256	5.7.1 硅平面晶体管工艺流程	290
4.8.1 阈值电压的变化	256	5.7.2 MOS 晶体管与 MOS 集成电路 工艺流程	292
4.8.2 漏特性及跨导的变化	258	5.7.3 P 阱硅栅 CMOS 工艺和元件的 形成过程	294
		本章小结	296
		思考题和习题	298
		第6章 Ga 在 SiO₂/Si 结构下的 开管掺杂	299
		6.1 Ga 在 SiO ₂ /Si 结构开管掺杂的 背景	299
		6.1.1 传统扩散杂质的选择	299

6.1.2 开管扩镓的出现及与其他工艺的 比较	300	6.4.2 Ga 基区晶体管的负阻效应	313
6.1.3 Ga 在 SiO_2/Si 结构下单温区开管 掺杂的产生	301	6.4.3 Ga 基区晶体管的完善与展望	315
6.2 开管扩镓原理	301	6.5 开管扩镓技术在电力电子器件中的 应用	316
6.2.1 扩散装置与系统内的化学 反应	301	6.5.1 Ga 阶梯式深结分布在普通晶闸管 中的应用	317
6.2.2 开管扩镓的主要步骤	302	6.5.2 Ga 的高斯分布在快速晶闸管中 的应用	319
6.2.3 Ga 在 SiO_2/Si 结构下的 扩散原理	303	本章小结	322
6.3 Ga 在 SiO_2/Si 结构下的分布规律	308	思考题和习题	322
6.3.1 开管扩镓模型的初步建立	308	附录	323
6.3.2 Ga 在 SiO_2/Si 结构下的 分布规律	309	附录 A 主要符号表	323
6.3.3 Ga 在 $\text{SiO}_2\text{-Si}$ 界面上的 分凝效应	309	附录 B 物理常数表	326
6.4 Ga 基区晶体管	312	附录 C 300K 时锗、硅、砷化镓主要 物理性质表	326
6.4.1 Ga 基区晶体管的制备及其 电学性能	312	附录 D 求扩散结杂质浓度梯度 a_j 的 图表及方法	327
		参考文献	328

第 1 章 半导体材料的基本性质

作为一名信息社会的大学生，尤其是应用物理、微电子学、微电子技术、计算机科学、电子工程与技术、材料科学、自动控制、电机工程、通信等专业的本科生和研究生，可能会问为什么要学习半导体物理与器件？答案很简单，其一，自 1998 年以来，以半导体器件为基础的电子工业已发展成为世界上规模最大的工业；其二，当你们拥有半导体器件最基本的知识后，对深入理解和应用电子学的相关课程帮助很大，从而使你们对现在这个由电子技术发展而来的信息时代贡献会更大。

半导体物理学是半导体器件物理的基础，为此本书首要概括叙述半导体物理学的基本内容，着重介绍半导体材料的基本特性及其与器件原理相关的概念和结论。本章以 3 种最重要的半导体材料：硅(Si)、锗(Ge)、砷化镓(GaAs)为对象，介绍半导体的晶体结构，在此基础上简要论述能带理论；求出热平衡条件下本征半导体的载流子浓度；介绍杂质半导体及其相关特性；叙述非平衡载流子的产生、复合与寿命；对半导体中载流子的漂移运动和扩散运动进行讨论，并建立起连续性方程，为第 2 章 PN 结及全书的内容奠定基础。

1.1 半导体与基本晶体结构

1.1.1 半导体

自然界中的物质大致可分为气体、液体、固体、等离子体 4 种基本形态。因晶体管、集成电路均为固体器件，所以我们关注的是固体材料。对于固体材料，若按结构形式可分为晶体与非晶体两类，而晶体又可分为单晶体和多晶体两种。目前用来制造半导体器件的典型半导体材料硅、锗、砷化镓还必须是单晶体。除此之外，对于固体材料，若按它们的导电能力则可以分为导体、绝缘体和半导体 3 种。我们知道，导体具有良好的导电能力，绝缘体不导电，而半导体呢？既不像导体那样容易导电，又不像绝缘体那样不容易导电。其导电能力介于导体与绝缘体之间的一些单晶体，就叫半导体。半导体的名称由此而来。固体材料的导电能力用电阻率 ρ 或电导率 σ 表示 ($\rho = 1/\sigma$)。图 1-1 列出一些重要导体、半导体和绝缘体材料的电阻率及相应的电导率的范围。

绝缘体如熔融石英和玻璃具有很高的电阻率，介于 $10^8 \sim 10^{18} \Omega \cdot \text{cm}$ 之间；导体如银、铜、铝具有很低的电阻率，介于 $10^{-4} \sim 10^{-8} \Omega \cdot \text{cm}$ 之间，而半导体的电阻率则介于两者之间，大约为 $10^{-4} \sim 10^8 \Omega \cdot \text{cm}$ 。尤为重要的是半导体的导电能力容易受温度、光照、电场、磁场及微量杂质的掺杂而发生明显改变。

1.1.2 半导体材料的基本特性

从半导体的导电能力介于导体与绝缘体之间定义了它的概念，而半导体材料还具有一系列特殊性质。

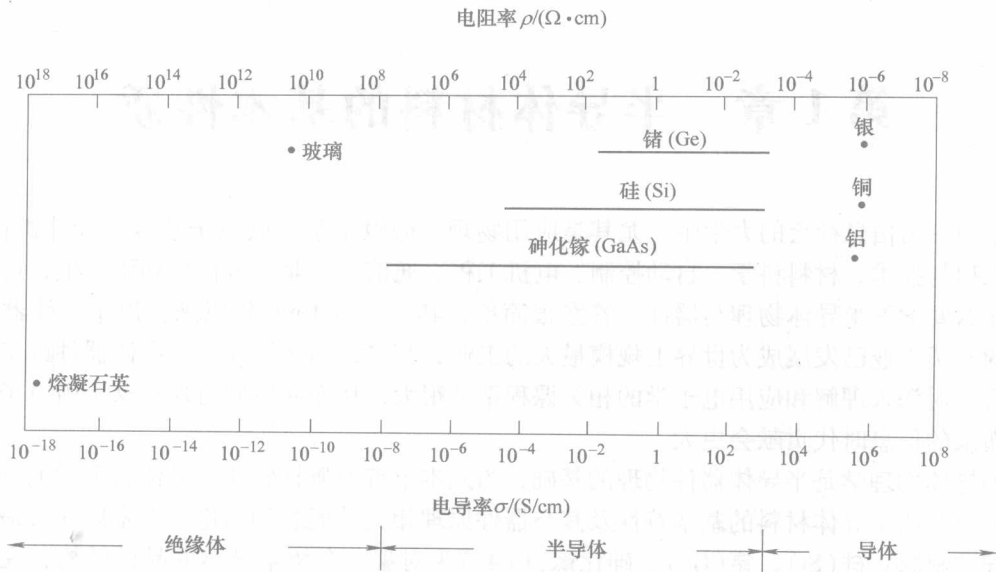


图 1-1 典型绝缘体、半导体、导体导电能力范围

1. 杂质敏感性

对于一般的固体材料来说，当纯度高达 99.9% 及以上时，含量低于 0.1% 的杂质并不会影响其物质的导电性质。而半导体却不同，微量杂质可以显著改变它的导电特性。例如，在纯净的硅单晶中，以每百万个硅原子掺入一个杂质原子的比例掺入一个磷原子，此时硅的纯度为 99.9999%，但室温下的电阻率却从未掺杂前的大约 $214000 \Omega \cdot \text{cm}$ ，一下子降低到 $0.2 \Omega \cdot \text{cm}$ ，降低到百万分之一。我们把硅随含微量杂质使其导电能力显著变化的现象称之为半导体杂质敏感性。人们利用该特性，通过控制杂质类别和数量，可以制备出不同类型、不同电阻率水平的各种半导体材料与各种半导体器件。

2. 负温度系数

半导体的导电能力随温度的升高而迅速增强。例如室温下的纯净硅 (Si)，温度每增加 10°C ，电阻率 ρ 相应降低 $1/2$ 左右，这与金属导体相比恰好相反，金属随温度的升高电阻率会增大。温度升高，半导体电阻率随之而下降的性质称为半导体的负温度系数 (即电阻率温度系数是负值)。而金属电阻率温度系数则是正值，即具有正温度系数。利用半导体电阻率随温度变化的敏感性，可制备出一系列的温敏器件，亦称为热敏电阻。

3. 光敏性

光的辐照可以显著改变半导体的导电能力。例如在一块绝缘衬底上，沉积一层硫化镉薄膜 (硫化镉是半导体材料的一种)，然后选择适当波长的光进行照射，其光电阻可从无光照射下的暗电阻几十兆欧，降低到了几十千欧，阻值改变了几百倍。类似硫化镉薄膜，利用光辐照改变其电阻值的器件就是光敏电阻。

4. 电场、磁场效应

半导体的导电能力还会随电场、磁场的作用而发生改变，我们把这种现象分别称作电场效应和磁场效应，将在以后的章节中陆续介绍。

综上所述，半导体就是这样一种有时导电，有时又不能很好导电，容易受温度、光照、电场、磁场和微量杂质掺入等外界因素的影响而改变导电特性的固体材料。而正是半导体这些多

变的特性使其在电子工业得到了日益广泛的应用,制备出了各种二极管、晶体管、热敏器件、光敏器件、场效应器件和集成电路芯片等。目前硅(Si)和砷化镓(GaAs)是半导体器件和集成电路生产中用量最多的半导体材料,其中硅占电子工业所消耗半导体材料的95%左右。

为什么半导体会具有这样一些特殊的电学性能呢?物质的导电性来源于其内部的原子结构。

1.1.3 半导体的晶体结构

晶体具有规则的外形,固定的熔点,其内部原子是按一定规律整齐地排列在一起。而非晶体却没有规则的外形,也没有固定的熔点,其内部原子的排列也没有一定的规则。晶体又分多晶体和单晶体两种,具体地说,晶体是由许多小晶粒组成,每个小晶粒中的原子都按同一序列排列。若晶粒与晶粒是杂乱堆积在一起,它们之间的排列取向没有规则,这样的晶体称为多晶体。若晶粒与晶粒之间都按同一序列整齐地排列起来,也就是说,在整个晶体中原子是由一种规则排列方式所贯穿,其整个结构可用一个晶粒所代表,这样的晶体称为单晶体。自然界中虽然也有天然的单晶,但绝大多数情况下,需要人工在专门的装置中,严格控制各种条件下,才能拉制出大体积的硅单晶锭,如图1-2所示。

在常用的3种半导体材料中,Si和Ge称元素半导体,GaAs称化合物半导体。Si和Ge半导体的晶体结构为金刚石晶格结构。我们所说的晶体

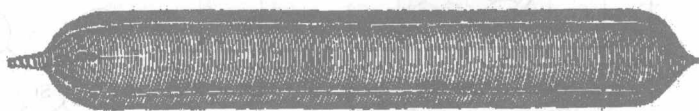


图 1-2 人工拉制的硅单晶锭

结构是指原子在三维空间中周期性排列着的单晶体。首先要明确3个概念:

1) 晶胞,单晶体结构可以用任意一个最基本的单元所代表,称这个最基本的单元叫晶胞(或单胞、元胞)。

2) 晶格,单晶体是由晶胞在三维空间周期性重复排列而成,整个晶体就像网络一样,称为晶格。

3) 格点与点阵,组成晶体的原子重心所在的位置称为格点,格点的总体称点阵。图1-3画出了3种常见的立方晶格结构晶胞的原子排列,立方晶体就是由这些最基本的结构重复排列而成。

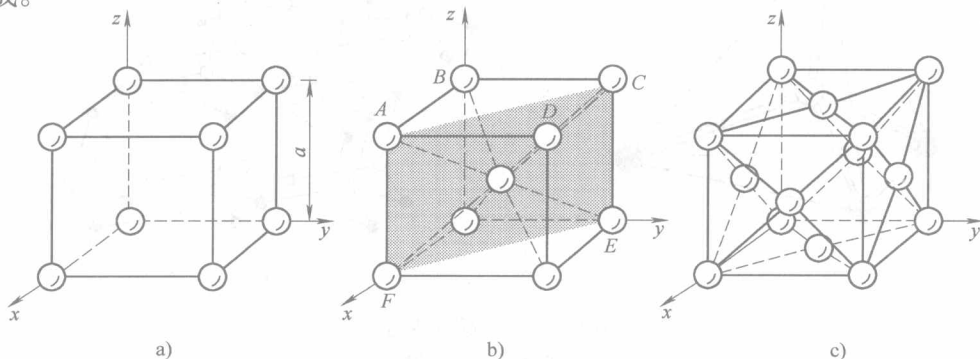


图 1-3 3种常见的立方晶体的晶胞

a) 简单立方 b) 体心立方 c) 面心立方

硅与锗金刚石晶格结构的晶胞如图 1-4a 所示。该结构属于面心立方晶格结构，但它的结构形式比较复杂，可视为两个面心立方晶胞沿空间对角线相互平移 $1/4$ 的空间对角线长度套构而成。这种结构的特点是：每个原子周围都有 4 个最近邻的原子，而且是等距离的，组成一个如图 1-5a 所示的正四面体结构。这 4 个原子分别处于正四面体的顶角上，任一个顶角上的原子和中心原子均形成共价键结合（依靠共有、自旋方向相反配对的价电子所形成的原子之间的结合力，叫共价键）。这样每个原子和周围 4 个原子组成 4 个共价键，图 1-4b 形象地说明硅原子靠共价键结合成晶体的一个平面示意图。图 1-5a 所示的正四面体的 4 个顶角原子又可以各通过 4 个共价键组成 4 个正四面体结构，即组成一个硅、锗晶体结构的晶胞。如此推广，将许多正四面体累积起来就得到如图 1-5b 所示的金刚石型结构。这种靠共价键结合而成的晶体称共价晶体，因此 Si 与 Ge 都是典型的共价晶体。金刚石结构的晶胞也是一个正方体，正方体的边长称为晶格常数，用 a 表示（如图 1-4a 所示）。硅原子在晶胞中排列的情况是：8 个原子位于立方体的 8 个顶角上，6 个原子位于 6 个面中心位上，晶胞内部还有 4 个完整原子。

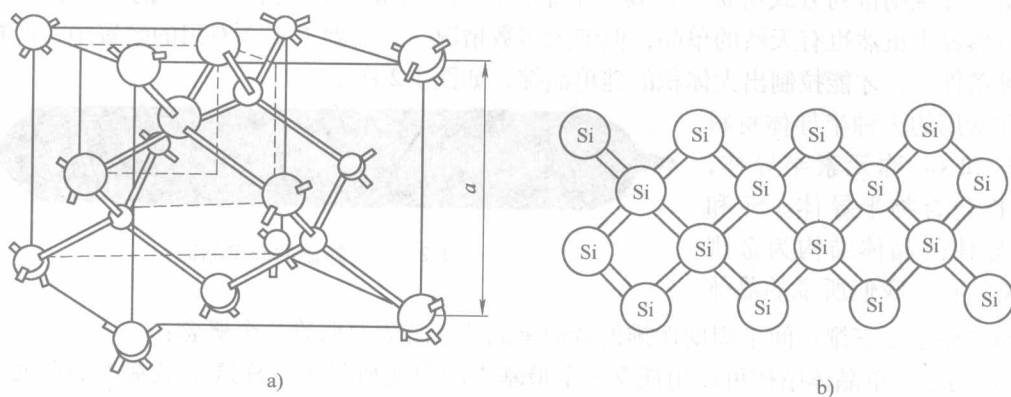


图 1-4 金刚石结构的晶胞与平面示意图

a) 金刚石型结构的晶胞 b) 硅晶体的平面结构示意图

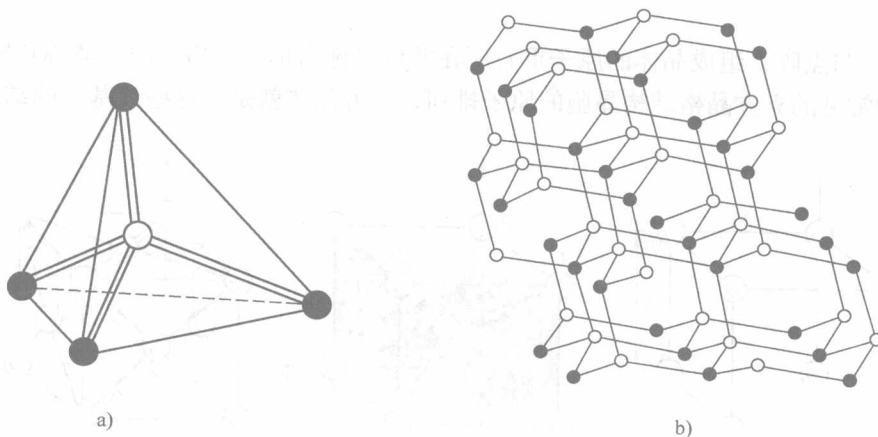


图 1-5 金刚石型结构

a) 正四面体 b) 结构

新兴的重要化合物半导体材料砷化镓, 具有闪锌矿晶型结构, 如图 1-6 所示。它是由 III 族元素的 Ga 和 V 族元素的 As 化合而成。闪锌矿结构也属于面心立方晶体结构。它与金刚石型的结构完全类似, 所不同的是, 它是由两类原子各自组成的面心立方晶格, 沿空间对角线彼此位移 $1/4$ 空间对角线长度套构而成。因此每个原子的周围被 4 个异原子所包围。即每个 III 族 Ga 原子(图 1-6 中的白圆球)的近邻为 4 个 V 族 As 原子(图 1-6 中的黑圆球), 每个 V 族 As 原子的近邻为 4 个 III 族 Ga 原子。

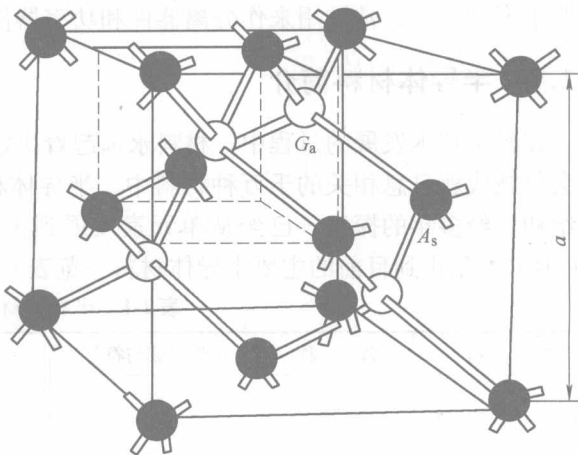


图 1-6 砷化镓闪锌矿晶型结构的晶胞

1.1.4 晶面及其表示方法

从图 1-3 ~ 图 1-5 中可以发现, 沿晶格的不同方向, 原子排列的周期和疏密情况是不完全相同的。例如图 1-3b 中, $ABCD$ 平面中有 4 个原子, 而在 $ACEF$ 平面中有 5 个原子, 这表明两平面的原子空间不同。沿晶体的不同方向, 晶体的机械强度、物电特性以及所制备出的器件特性不同, 这叫做晶体的各向异性。密勒指数是界定晶体中不同平面的简单方法, 这些指数可按以下步骤确定: ①找出晶面在 3 个直角坐标轴的截距值(以晶格常数为计量单位); ②取这 3 个截距值的倒数, 将其换算成最小的整数比; ③把结果用圆括号括起来 (hkl) , 即为该晶面的密勒指数。晶体的晶面是应用半导体材料时首先要确定的一个参数。

下面举例说明, 图 1-7 所示晶面在 3 个坐标轴上的截距分别为 a 、 $2a$ 、 $2a$, 取这些截距的倒数得到 1 、 $1/2$ 、 $1/2$ 。将其换算成最小的整数比为 $2:1:1$, 因此该平面为 (211) 晶面。最常用的晶面有 3 个, 即 (100) 晶面、 (110) 晶面、 (111) 晶面, 这些重要晶面的密勒指数如图 1-8 所示。

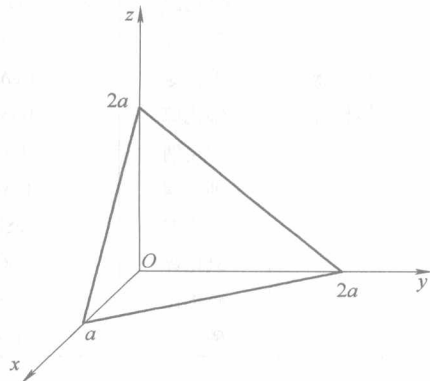
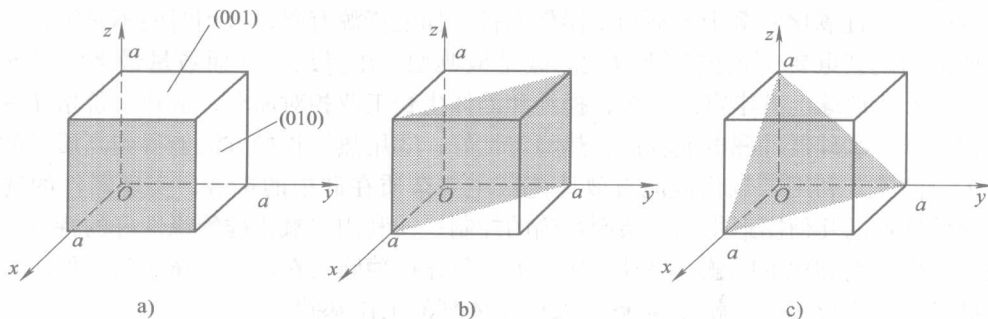
图 1-7 (211) 晶面

图 1-8 最常用晶面的密勒指数

a) (100) b) (110) c) (111)

其中(100)晶面上的原子密度最小,常被用来制备集成电路。(110)晶面与(111)晶面上的原子密度最大,常被用来作分离器件和功率器件。

1.1.5 半导体材料简介

在科学技术发展的过程中,材料永远起着决定一代社会科技水平的关键作用,在与信息社会科技成就息息相关的千万种材料中,半导体材料尤其如此。半导体材料的研究始于19世纪初,经多年的探索,已经从单元素发展到了二元、三元和四元化合物半导体材料。表1-1给出了截止到目前的主要半导体材料一览表。

表 1-1 半导体材料一览表

类 别	名 称	化学组成与符号	类 别	名 称	化学组成与符号	
单元素半导体材料	硅	Si	二元化合物 半导体材料	碲化锌	ZnTe	
	锗	Ge		硫化镉	CdS	
二元化合物 半导体材料	碳化硅	SiC		硒化镉	CdSe	
	磷化铝	AlP		碲化镉	CdTe	
	砷化铝	AlAs		碲化汞	HgS	
	锑化铝	AlSb		硫化铅	PbS	
	氮化镓	GaN		硒化铅	PbSe	
	磷化镓	GaP		碲化铅	PbTe	
	砷化镓	GaAs		三元化合物 半导体材料	砷化镓铝	$AlGa_{1-x}As$
	锑化镓	GaSb			砷化铟铝	$AlIn_{1-x}As$
	磷化铟	InP			磷化砷镓	$GaAs_{1-x}P_x$
	砷化铟	InAs			砷化铟镓	$Ga_xIn_{1-x}As$
	锑化铟	InSb			磷化铟镓	$Ga_xIn_{1-x}P$
	氧化锌	ZnO		四元化合物 半导体材料	锑化砷镓铝	$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$
	硫化锌	ZnS			磷化砷铟镓	$Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$
	硒化锌	ZnSe				

单元素半导体材料 Si、Ge 位于化学周期表的第 IV 族,是由单一原子组成。其中锗是最早实现提纯和完美晶体生长的半导体材料,在 20 世纪 50 年代初期已用于晶体管的制作。但由于锗本身固有的物理与化学特性的原因,使器件在不太高的温度下漏电流较大,造成器件热稳定性变差。且氧化锗溶于水不利于器件制备,加之资源有限,应用时间不是很长,就在电子工业的初期其重要位置被硅所取代。硅是最典型、用量最广泛而数量最多的半导体材料,理由是:①地球上丰富的资源,提纯和晶体生长工业相对简单、成熟,价格便宜,可降低器件成本;②硅器件漏电流较低,热稳定性好;③用热生长的方法能得到高质量的二氧化硅(SiO_2)薄膜,利用二氧化硅能有效地掩蔽主要杂质在硅中的扩散,实现器件的选择掺杂,从而使器件的几何图形得到复杂而精确的控制;④利用二氧化硅绝缘性好的特点,较容易地解决器件表面钝化的问题。另外,还可把二氧化硅薄膜夹在硅与金属之间,形成金属—二氧化硅—硅结构形式,这就是 MOS 场效应晶体管的工作基础。

近年来一些化合物半导体材料已被应用于各种器件的制作中。许多化合物半导体具有与硅不同的光电特性。其中砷化镓是研究得最深入、应用最广泛的化合物半导体之一。与硅相

比, 砷化镓的电子迁移率很高, 约是硅的6倍, 因此砷化镓晶体管必然有较高的工作频率, 主要用于高速光电器件。另外, 砷化镓的禁带宽度比硅稍大, 有利于制作较高温度下工作的器件, 但其热导率较低, 不适合制作电力电子器件。由于砷化镓比较全面地满足航空航天与军事工业的需求, 因此这成为研究与开发砷化镓材料的巨大动力。

总之, 半导体已经发展成为种类繁多的大科门类材料。从单元素到化合物及固溶体, 从晶体到非晶体, 从无机材料到有机材料, 从自然结构的晶体到人工生长的晶体..., 到处都能找到半导体家族的重要成员。

1.2 半导体的能带

1.2.1 孤立原子中电子能级

对于一个孤立的单原子来说, 电子的能级是分离的。以氢原子为例, 氢原子是一个最简单的原子, 它的原子核带一个正电荷, 核外有一个电子绕核运动。如果把电子刚好脱离原子核的束缚成为自由电子时的能量取为能量的零点, 即为 0eV (eV 是能量单位, 相当于一个电子其电位增加 1V 时所增加的能量), 则孤立氢原子中电子能量(eV)为

$$E_n = -\frac{m_0 q^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13.6}{n^2}, \quad n=1, 2, 3, \dots \quad (1-1)$$

式中, m_0 是自由电子的惯性质量; q 为电子电荷; ε_0 为真空介电常数; h 为普朗克常数; n 为主量子数取正整数。根据式(1-1)可以得到如图1-9所示的氢原子能级图。

对于主量子数 $n=1$ 时, $E_1 = -13.6\text{eV}$; $n=2$ 时, $E_2 = -3.4\text{eV}$; $n=3$ 时, $E_3 = -1.5\text{eV}$; $n=4$ 时, $E_4 = -0.85\text{eV}$; $n=5$ 时, $E_5 = -0.54\text{eV}$; ...; $n \rightarrow \infty$, $E_\infty = 0\text{eV}$ 。从氢原子的能级图中可以得到如下结论:

1) 氢原子中电子的能量是分离的, 它的能量只能取一系列不连续的特定值, 每一个这样的特定值称为能级。电子可以处在能级 E_1 上, 也可以处在 E_2 、 E_3 或 E_4 上, 然而在 $E_1 \sim E_2$ 之间, 或 $E_2 \sim E_3$ 之间, ..., 以此类推, 没有另外的能级存在。

2) 正常状态下, 氢原子的电子一般就处在能量最低的 E_1 能级上, E_1 能级的状态称为基态。当外界以一定方式给电子能量时, 电子可以吸收能量, 从低能级跃迁到高能级上去, 电子处在高能级的状态成为激发态。处在激发态上的电子是不稳定的, 在一定的条件下, 它可以放出能量, 重新跃迁到低能级上来。若电子从基态跃迁到 $n = \infty$, 变成自由电子状态的跃迁, 成为电离。

3) 具有多个电子组成的原子, 其电子所具有的能量即能级同样是不连续的。

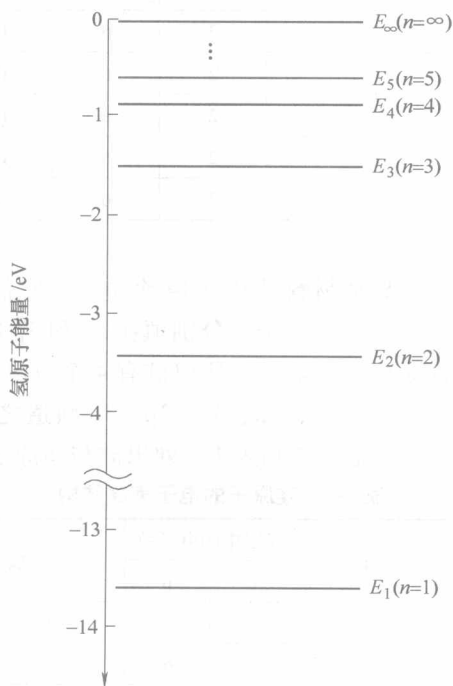


图 1-9 氢原子的能级图

一个具有多个电子的复杂原子，由于它的每一个电子除了受原子核的作用之外，还受其他电子的作用，因此其能级分布情况与只有一个电子的氢原子不同。在复杂原子中电子可取的能级除了与主量子数有关外，还与轨道角动量、轨道在空间的取向以及电子的自旋方向等因素有关。因此在一个系统中（例如一个原子，或由原子结合成的分子、晶体等）不允许有在主量子数、轨道角动量、轨道在空间的取向和电子的自旋方向 4 个方面都相同的电子。这一原理表明，在任何一个系统的每一个能级中，最多只能容纳两个自旋方向相反的电子。当然属于同一量子数的一些能级彼此是靠得比较近的。

在一个具有多个电子的复杂原子中，电子不能同时都处在同一能级上。对于原子的基态来说，它的电子必然首先填充能量最低的能级。当能量最低的能级已经填满后，按能量由小到大的次序，依次填满其他能级。与此相对应，从电子的运动轨道来看，它将首先填满距核较近的各个轨道。电子轨道按主量子数的不同，分成各个壳层，在每一个壳层中又按轨道角动量的不同分成几个亚壳层。具体来说， $n=1$ 的第一层电子只能有一个能级称 $1s$ 能级，因此最多只能容纳 2 个电子。 $n=2$ 的第二层有一个 $2s$ 能级和 3 个 $2p$ 能级，因此可容纳 8 个电子。 $n=3$ 的第三层可容纳 18 个电子。 $n=4$ 的第四层可容纳 32 个电子。把各层所包含亚壳层数、电子状态和电子数目列在表 1-2 中。

表 1-2 电子壳层的电子数

主量子数壳层	亚壳层的电子数							总 数
	s	p	d	f	g	h	i	
1	2							2
2	2	6						8
3	2	6	10					18
4	2	6	10	14				32
5	2	6	10	14	18			50
6	2	6	10	14	18	22		72
7	2	6	10	14	18	22	26	98

半导体材料硅共有 14 个电子，它们依次填满第一层 $1s$ 、第二层 $2s$ 、 $2p$ 轨道之后，在第三层还有 4 个电子，分别填在 $3s$ 和 $3p$ 能级上。由于原子最外层电子的数目决定此元素的化学性质称为价电子，所以硅有 4 个价电子，是第 IV 族的元素。锗原子有 32 个电子，它们依次填满 $1s$ 、 $2s$ 、 $2p$ 、 $3s$ 、 $3p$ 、 $3d$ 轨道之后，在 $4s$ 和 $4p$ 轨道上还有 4 个价电子，也是第 IV 族的元素。表 1-3 和表 1-4 列出硅与锗原子的电子壳层结构。

表 1-3 硅原子的电子壳层结构

主量子数	亚层中的电子数		总 数
	s	p	
1	2		2
2	2	6	8
3	2	2	4

表 1-4 锗原子的电子壳层结构

主量子数	亚层中的电子数			总 数
	s	p	d	
1	2			2
2	2	6		8
3	2	6	10	18
4	2	2		4

1.2.2 晶体中电子的能带

上节简要讨论了一个单原子中电子能级的状况，目的是要研究半导体晶体的能带，因此这一节重点讨论有原子结合成晶体时电子的运动规律。

1. 晶体中电子的共有化运动

当原子与原子相距较远时，电子分布在各个原子核周围的轨道上，分别属于各个原子。然而，当原子结合成晶体时，原子与原子靠得非常近，例如硅晶体，两个相邻原子间的中心距离约有几个埃。由于晶体中各原子靠得如此之近，引起的一个重要现象是各原子外层价电子的运动区域相互重叠起来，使价电子的运动区域在晶格中连成了一片，如图 1-10 所示。

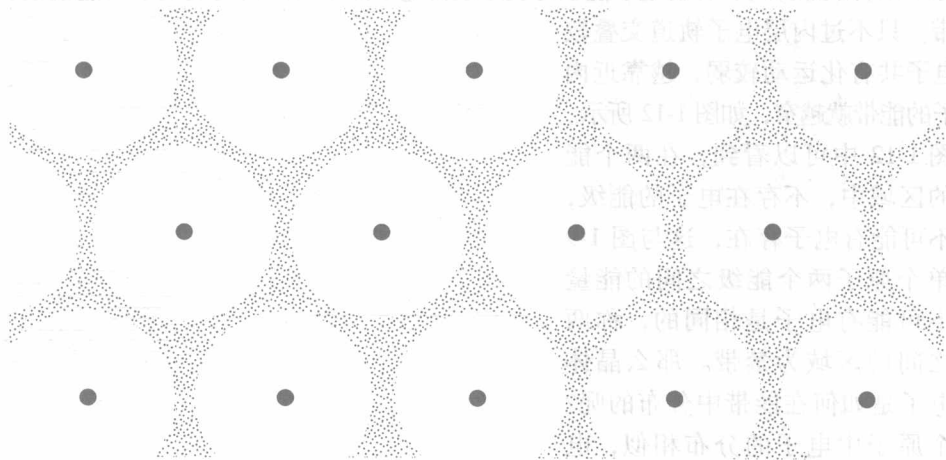


图 1-10 价电子轨道重叠运动区域连成一片示意图

当原子组成晶体时，其外层价电子的运动就从原来束缚于某一个原子的情形变为可以在整个晶体中运动，这些电子就不再属于某一个原子所专有，而成为整个晶体所共有，该现象称为价电子的共有化运动。价电子的共有化这一特点使晶体中电子与单个孤立原子中的电子产生了一个根本差别，正是这一差别，才表现出了单个原子结合成晶体时所具有的集体特性。当原子结合成晶体时不但价电子的轨道连成一片，形成共有化，其内层电子的轨道也有可能发生一定程度的交叠，只不过交叠程度较少，而且愈是内层，轨道的交叠就愈少，电子的共有化程度就愈差。因此，在考虑晶体中电子的共有化运动时，主要考虑价电子的共有化运动。

2. 晶体中电子能带的形成

晶体由很多单原子组成，随着晶体中价电子的共有化运动的形成，这些电子运动情况的能量状态要发生什么变化呢？用什么样的形式去表征呢？我们先考虑两个相同原子，当彼此距离很远时，价电子分别处在各个原子的能级中。对同一个主量子数而言，其能级为双重简并。但当两个原子接近时，由于两个原子间的相互作用，会使得双重简并能级一分为二。可以想象，若有 N 个原子排列起来形成一个固态晶体时，分别属于各个原子的分立能级不存在了，取而代之的是 N 重简并能级分裂成为 N 个彼此分离而又挨得很近的能级，这些能级分布在一定的能量区域中，通常把这 N 个互相靠得很近的能级所占据的能量区域称为能带，如图 1-11 所示。