

“十二五”国家重点图书出版规划项目

电子与通信工程系列

半导体物理与测试分析

Semiconductor Physics and Tesing Analysis

主 编 谭昌龙

副主编 吴丰民 王振华

“十二五”国家重点图书出版规划项目

电子与通信工程系列

半导体物理与测试分析

Semiconductor Physics and Tesing Analysis

主 编 谭昌龙

副主编 吴丰民 王振华

内容简介

本书较全面地介绍了半导体物理与测试分析的基础知识。主要包括:半导体的基本性质;半导体中杂质和缺陷能级,以及硅中位错和层错的观察;平衡态半导体中载流子的统计分布,杂质浓度及其分布的测量技术;载流子在外电场作用下的运动规律,以及霍尔系数和电导率的测量方法;非平衡载流子的运动规律及它们的产生和复合机制,少数载流子寿命的测量;pn 结形成的工艺过程及其电学特性,pn 结势垒电容的测量。

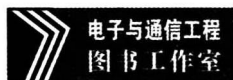
本书可作为高等学校微电子学、电子科学与技术、应用物理等专业本科生的教材,也可供理工类相关专业的本科生、研究生及科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

半导体物理与测试分析/谭昌龙主编. —哈尔滨:哈尔滨工业大学出版社,2012. 8
ISBN 978-7-5603-3648-0

I. ①半… II. ①谭… III. ①半导体物理
IV. ①O47

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 160475 号



责任编辑 许雅莹

封面设计 刘长友

出版发行 哈尔滨工业大学出版社

社 址 哈尔滨市南岗区复华四道街 10 号 邮编 150006

传 真 0451-86414749

网 址 <http://hitpress.hit.edu.cn>

印 刷 黑龙江省地质测绘印制中心印刷厂

开 本 787mm×1092mm 1/16 印张 10.25 字数 220 千字

版 次 2012 年 8 月第 1 版 2012 年 8 月第 1 次印刷

书 号 ISBN 978-7-5603-3648-0

定 价 20.00 元

(如因印装质量问题影响阅读,我社负责调换)

高等学校“十二五”规划教材

电子与通信工程系列

编委会

主任 吴 群

编委 (按姓氏笔画排序)

于晓洋	王艳春	史庆军	齐怀琴	刘 梅
孙道礼	邹 斌	何 鹏	杨明极	周 成
宗成阁	孟维晓	胡 文	姜成志	姚仲敏
赵志杰	赵金宪	童子权	冀振元	魏凯丰

总 序

电子信息与通信工程是当今世界发展最快的领域,该技术领域的新概念、新理论、新技术不断涌现,其知识更新速度也是令人吃惊。这就使得从事电子信息与通信工程技术的科技人员要不断学习,把握前沿动态,吸收最新知识。近年来,各高校通过教学改革,在引导学生将最新知识应用于社会实践,解决实际问题,培养学生实践动手能力、探索性学习能力和创新思维能力等方面取得了可喜成就。

为了培养国家和社会急需的电子信息与通信工程领域的高级科技人才,配合高等院校电子信息与通信工程专业的教学改革和教材建设,哈尔滨工业大学出版社组织哈尔滨工业大学、哈尔滨理工大学、齐齐哈尔大学、佳木斯大学、黑龙江科技学院等多所高校通过共同研讨和合作,相互取长补短,发挥各自的优势和特色,联合编写了这套面向普通高等院校“电子信息与通信工程系列”教材。

本系列教材的编写目标:结合新的专业规范,融合先进的教学思想、方法和手段,体现科学性、先进性和实用性,强调对学生实践能力的培养,以适应新世纪对通信、电子人才培养的需求。

本系列教材编写要求:专业基础课教材概念清晰、理论准确、深度合理、内容精炼,并注意与专业课教学的衔接;专业课教材覆盖面广、深度适中,体现相关领域的新发展和新成果,注重理论联系实际。

本系列教材的编委会阵容强大,编者都是教学工作第一线的骨干教师。他们具有多年丰富的教学和科研经历,掌握最新的理论知识,具有丰富的实践经验,是一支高水平的教材编写队伍。

本系列教材理论性与工程实践性紧密结合,旨在引导读者将电子信息与通信工程的理论、技术与应用有机结合,适合于高等学校电子、信息、通信和自动控制等专业使用。我深信:这套教材的出版,对推动电子信息与通信工程领域的教学改革、提高人才培养质量必将起到积极的推动作用,并以其内容的先进性、实用性和系统性为特色而获得成功。

吴群

哈尔滨工业大学教授

2010年4月

前 言

PREFACE

半导体物理学是研究半导体物理性质及其普遍规律的一门学科,是微电子学、电子科学与技术、应用物理等专业的基础理论课程。编者在半导体物理教学实践中发现,为适应有关学科专业教学需要,非常有必要将半导体理论知识与半导体实际,尤其是半导体测试与分析联系起来,为此编写了《半导体物理与测试分析》一书。本书的特点是:通过结合半导体实际,介绍理论知识,突出半导体的物理图像,更有利于读者构建半导体物理的知识体系。本书重在基础,突出与半导体实际的联系,编写力求内容精简、重点突出、通俗易懂。

本书较全面地介绍了半导体物理及半导体测试与分析的基础知识。此外,从系统性和相对独立性考虑,在内容的选取和编排上力求突出理论联系实际。第1章介绍了半导体的基本性质,包括半导体的晶体结构、半导体中电子的状态及其运动规律和重要半导体材料的性质。第2章介绍了半导体中杂质和缺陷能级,以及硅中位错和层错的观察。第3章阐述了平衡态半导体中载流子的统计分布,介绍了杂质浓度及其分布的测量技术。第4章讨论载流子在外电场作用下的运动规律,并以硅为例介绍了霍尔系数和电导率的测量方法。第5章讨论了非平衡载流子的运动规律及它们的产生和复合机制,同时介绍了少数载流子寿命的测量。第6章主要介绍pn结形成的工艺过程及其电学特性,并介绍了pn结势垒电容的测量。

本书由谭昌龙主编并统稿,吴丰民、王振华任副主编。第1章、第2章由谭昌龙编写,第3章、第4章由王振华编写,第5章、第6章由吴丰民编写。

本书可作为微电子学、电子科学与技术、应用物理等专业本科生的教材,也可作为理工类其他相关专业的本科生、研究生的选修教材或自学参考书,同时亦可供在微电子学、材料科学与工程以及应用物理等领域从事实际工作的工程技术人员和研究人员参考。

由于作者水平有限,书中难免存在缺点和不足之处,殷切希望读者指正。

作 者

2012年5月

目 录

CONTENTS

第 1 章 半导体的基本性质	1
1.1 半导体特征与晶体结构	1
1.1.1 半导体	1
1.1.2 半导体材料的基本特性	2
1.1.3 半导体的晶体结构	3
1.1.4 化合物半导体的极性	5
1.2 半导体的能带	6
1.2.1 原子的能级和晶体的能带	6
1.2.2 半导体中电子的状态和能带	9
1.3 半导体中电子的运动	10
1.4 典型半导体的能带结构	13
1.4.1 硅和锗的能带结构	13
1.4.2 砷化镓的能带结构	15
1.5 半导体材料简介	16
1.5.1 元素半导体	17
1.5.2 III-V 族化合物半导体	19
1.5.3 II-VI 族化合物半导体	20
1.5.4 IV-VI 族化合物半导体	21
1.5.5 IV-IV 族化合物半导体	22
1.5.6 氧化物半导体	22
1.5.7 多元化合物半导体	23
第 2 章 半导体中杂质和缺陷能级	24
2.1 硅、锗晶体中的杂质能级	24
2.1.1 间隙式杂质和替位式杂质	24
2.1.2 施主杂质和施主能级	25
2.1.3 受主杂质和受主能级	27
2.1.4 杂质的补偿作用	28
2.1.5 深能级杂质	29
2.2 III-V 族化合物中的杂质能级	30

2.3	缺陷和位错能级	31
2.3.1	缺陷	31
2.3.2	位错	33
2.4	硅单晶中位错、层错的观察*	34
2.4.1	位错	34
2.4.2	层错	35
2.4.3	位错和层错的观察	35
第3章	平衡态半导体中载流子的统计分布	37
3.1	费米能级及载流子的统计分布	37
3.1.1	费米分布函数	37
3.1.2	玻耳兹曼分布函数	39
3.1.3	半导体载流子统计分布	40
3.1.4	半导体载流子浓度	43
3.1.5	载流子浓度乘积	46
3.2	本征半导体的载流子浓度	46
3.3	杂质半导体的载流子浓度	48
3.3.1	杂质能级上的量子态	48
3.3.2	载流子浓度	49
3.3.3	多数载流子浓度与少数载流子浓度	53
3.4	费米能级随温度的变化关系	54
3.4.1	杂质半导体载流子浓度与温度的关系	54
3.4.2	杂质半导体费米能级与温度及杂质浓度的关系	55
3.5	简并半导体	56
3.5.1	简并半导体中载流子浓度	56
3.5.2	简并化的条件	57
3.5.3	禁带变窄效应	58
3.6	杂质浓度及其分布的测量*	58
第4章	半导体的导电性	63
4.1	载流子的运动	63
4.1.1	欧姆定律	63
4.1.2	漂移运动和迁移率	64
4.1.3	电导率和迁移率	65
4.1.4	载流子散射	66
4.1.5	半导体的主要散射机构	67
4.1.6	其他因素引起的散射	70
4.2	杂质浓度、温度对迁移率和电阻率的影响	72
4.2.1	平均自由时间和散射几率的关系	72
4.2.2	电导率、迁移率与平均自由时间的关系	72

4.2.3	迁移率与杂质浓度和温度的关系	74
4.2.4	电阻率与杂质浓度和温度的关系	76
4.3	玻耳兹曼方程、电导率的统计理论	79
4.3.1	玻耳兹曼方程	79
4.3.2	弛豫时间近似	80
4.3.3	弱电场近似下玻耳兹曼方程的解	81
4.3.4	球形等能面半导体的电导率	82
4.4	强电场下的效应、热载流子	84
4.4.1	欧姆定律与电场强度关系	84
4.4.2	平均漂移速度与电场强度的关系	85
4.5	多能谷散射和耿氏效应	89
4.5.1	多能谷散射、体内负微分电导	89
4.5.2	高场畸变及耿氏振荡	91
4.6	硅的霍尔系数和电导率测量*	91
第5章	非平衡载流子运动规律	96
5.1	非平衡载流子的产生与复合 准费米能级	96
5.1.1	非平衡载流子的产生	96
5.1.2	非平衡载流子的复合和寿命	97
5.1.3	准费米能级	98
5.2	非平衡载流子的寿命与复合	100
5.2.1	复合机理	100
5.2.2	直接辐射复合	103
5.2.3	直接俄歇复合	106
5.3	连续性方程	108
5.3.1	载流子的流密度和电流密度	108
5.3.2	爱因斯坦关系	110
5.3.3	连续性方程	111
5.3.4	少数载流子的连续性方程	113
5.4	载流子的扩散与漂移	113
5.4.1	少子的扩散	114
5.4.2	少子的漂移	116
5.4.3	少子的扩散和漂移	116
5.5	光电导衰退测量少数载流子的寿命*	118
5.5.1	实验目的	118
5.5.2	实验原理	118
5.5.3	实验方法	119
5.5.4	实验步骤	121
第6章	pn结	123
6.1	pn结形成和能带图	123

6.1.1	pn 结平面工艺*	123
6.1.2	pn 结能带图及载流子分布	127
6.2	pn 结电流电压特性	131
6.2.1	加偏压的 pn 结能带图	131
6.2.2	少数载流子的注入与输运	131
6.2.3	理想 pn 结的直流电流-电压特性	133
6.3	pn 结电容特性	137
6.3.1	突变结空间电荷区宽度	137
6.3.2	线性缓变结空间电荷区宽度	141
6.3.3	pn 结的势垒电容	141
6.3.4	pn 结的扩散电容	144
6.4	pn 结击穿	145
6.4.1	雪崩击穿	145
6.4.2	热电击穿	145
6.4.3	齐纳击穿(隧道击穿)	146
6.5	pn 结势垒电容的测量*	146
6.5.1	实验目的	146
6.5.2	实验原理	146
6.5.3	测量方法	149
6.5.4	实验步骤	150
参考文献		151

第 1 章

半导体的基本性质

半导体具有诸多独特的物理性质,这与半导体的晶体结构、电子状态及其运动特点密切相关。为了学习半导体的物理性质,本章主要介绍半导体的特征与晶体结构、半导体中的电子状态及其运动规律。此外,鉴于半导体材料的重要性,本章还简述了几类重要半导体材料的性质。

1.1 半导体特征与晶体结构

1.1.1 半导体

自然界中的物质可分为气体、液体、固体、等离子体四种基本形态。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,若按结构形式分可分为晶体与非晶体两类,而晶体又分为单晶体和多晶体两种;若按导电能力分则可分为导体、绝缘体和半导体。导体具有良好的导电能力,绝缘体不导电,而半导体的导电能力介于导体与绝缘体之间,半导体的名称也由此而来。固体材料的导电能力用电阻率或电导率表示。

图 1.1 示出了一些重要导体、半导体和绝缘体材料的电阻率及相应的电导率范围。

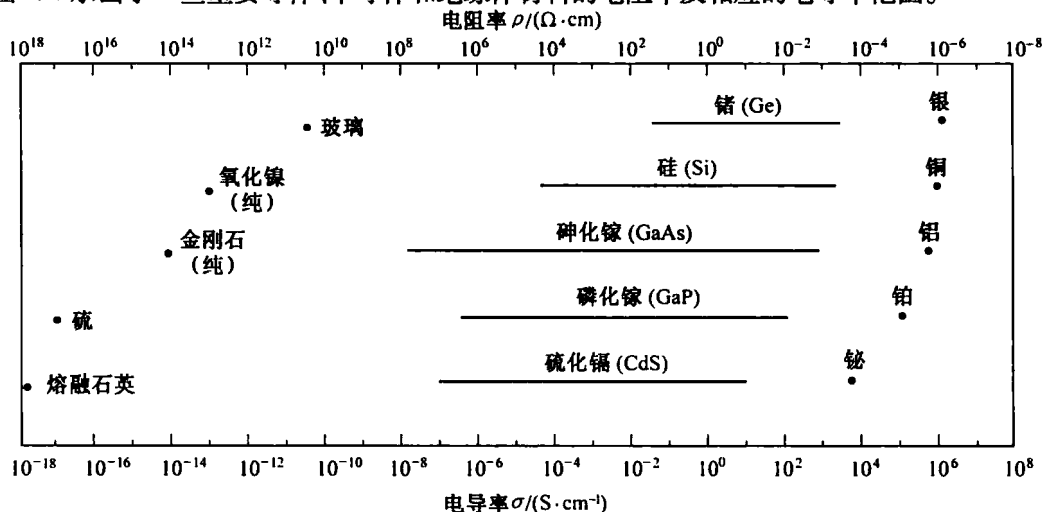


图 1.1 典型导体、半导体、绝缘材料的导电能力范围

半导体材料是信息产业的基础,是微电子和光电子等工业的基石。半导体材料有很多种,按化学成分可分为元素半导体和化合物半导体两大类。除晶态半导体外,还有非晶态的有机物半导体等。目前用来制造半导体器件的典型半导体材料主要有硅、锗等元素半导体和Ⅲ - V 族等化合物半导体。半导体有如此广泛的应用,主要源于其独特的性质。尤为重要的是,半导体的导电特性容易受温度、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

半导体材料的基本特性包括:杂质敏感性、热敏性、光敏性和电场、磁场效应。

1. 杂质敏感性

杂质敏感性是指半导体的导电能力因掺入适量杂质而发生很大的变化。对于一般的固体材料,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,在半导体硅中,只要掺入亿分之一的硼,电阻率就会下降到原来的几万分之一。所以,利用这一特性,通过控制杂质类别和数量,可以制造出不同性能、不同用途的半导体材料和器件。

2. 热敏性

半导体的导电能力随温度的升高而迅速增强。半导体的电阻率对温度的变化十分敏感,例如室温下的纯净硅,温度每增加10℃,电阻率相应降低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),而金属的电阻率温度系数则是正值,即有正温度系数。利用半导体电阻率随温度变化的敏感性,可以制备出一系列的温敏器件,亦称为热敏电阻。

3. 光敏性

半导体的导电能力随光照的变化有显著改变的特性称为光敏性。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),然后选择适当的波长进行照射,其光电阻可从无光照射的暗电阻几十兆欧,降低到几千欧。用于自动控制的光电二极管和光敏电阻,就是利用半导体材料的光敏特性制成。而金属导体在阳光下或在暗处其电阻率一般无明显变化。

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,把这种现象分别称为电场效应和磁场效应。

总之,半导体容易受温度、光照、电场、磁场和微量杂质掺入等外界因素的影响从而改变其导电特性。正是半导体的这些特性使其在电子工业中得到日益广泛的应用,制备出

如二极管、晶体管、热敏器件、光敏器件、场效应器件和集成电路芯片等。目前硅是半导体器件和集成电路生产中使用最多的半导体材料。

1.1.3 半导体的晶体结构

半导体具有的上述独特性质与其微观结构密切相关。众所周知,固态晶体具有多种晶体形态,分属7大晶系14种类型。结晶半导体大多数属于立方晶系和六角晶系,而且都是四面体结构,只有少数半导体具有其他结构。

1. 金刚石型结构

元素半导体硅、锗、金刚石和灰锡的晶体结构都属于金刚石型结构。由同一种元素的原子按正四面体结构构成的立方点阵为金刚石结构,其结晶学原胞(晶胞)如图1.2所示。金刚石结构可以看做两个面心立方晶胞沿立方体的空间对角线相互位移 $1/4$ 空间对角线长度套构而成。原子在金刚石晶胞中的排列情况是:8个原子位于立方体的8个角顶上,6个原子位于6个面的中心,晶胞内部有4个原子。立方体顶角和面心上的原子与这4个原子周围情况不同,所以它是由相同原子构成的复式晶格。

实验测得硅和锗的晶格常数 a 分别为0.357 nm和0.357 nm,从而求得每立方厘米体积内,硅有 5.0×10^{22} 个原子,锗有 4.421×10^{22} 个原子;两原子间最短距离硅为0.235 nm,锗为0.245 nm,因而它们的共价半径分别为0.117 nm和0.122 nm。

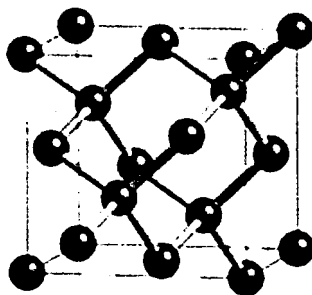


图 1.2 金刚石型结构晶胞

2. 闪锌矿和纤锌矿型结构

由化学元素周期表中的Ⅲ族元素硼、铝、镓、铟和Ⅴ族元素氮、磷、砷、锑合成的Ⅲ-Ⅴ族化合物,都是半导体材料,它们绝大多数具有闪锌矿型结构,但某些氮化物还可以按纤锌矿型结构结晶。

闪锌矿是一种锌的硫化物,是锌的主要矿石形态。在结晶学中,把由两种元素的原子按正四面体结构构成的立方系晶体点阵称为闪锌矿结构。闪锌矿结构与金刚石结构的几何形态完全相同,不同之处仅在于最邻近原子分属两种不同的元素,如图1.3所示。在闪锌矿结构的四面体原胞中,两种元素的原子分别占据着体心和顶角的位置。这种晶格可以看做由两个分别用不同原子构成的面心立方晶格沿 $[111]$ 方向相互位移 $1/4$ 空间对

线长度套构而成的复式格子。其晶胞的顶点和面心原子是同类原子,而晶胞内部所包含的是 4 个异类原子,即一个闪锌矿结构的晶胞包含两种原子。

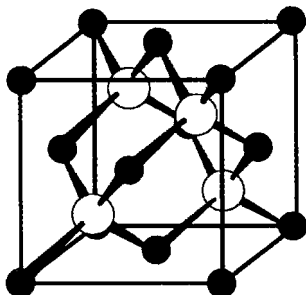


图 1.3 闪锌矿型结构晶胞

由化学元素周期表中的 II 族元素锌、镉、汞和 VI 族元素硫、硒、碲合成的 II - VI 族化合物,除硒化汞、碲化汞是半金属化合物外,其余都是半导体,它们大部分具有闪锌矿型结构,但是其中有些也可具有六角晶系纤锌矿型结构。

纤锌矿是闪锌矿加热到 1 020 °C 时的六角对称型变体。纤锌矿和闪锌矿的结构相似,也以正四面体结构为基础,由于双原子层的堆垛重复顺序不同而具有六角对称性,而不是立方对称性,如图 1.4 所示。固体物理学指出,六角密集的单原子曾有两种最紧密的层层堆垛方法。一种是每两层一个重复周期,另一种是每三层一个重复周期,即所谓 ABAB 堆垛顺序和 ABCABC 堆垛顺序,前者堆成六角对称结构,而后者则堆成立方对称结构。双原子层的堆垛结构与此相似,按 ABAB 顺序堆成六角对称的纤锌矿结构,按 ABCABC 顺序堆成立方对称的闪锌矿结构。硫化锌、硒化锌、硫化镉、硒化镉等都可以闪锌矿型和纤锌矿型两种方式结晶。例如,实验测得纤锌矿型结构的硫化镉单晶,其晶格常数为 $a = 0.4136 \text{ nm}$, $c = 0.6713 \text{ nm}$ 。

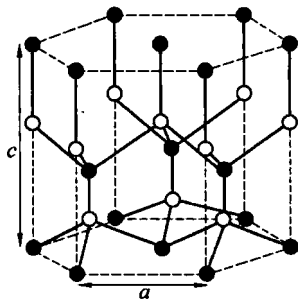


图 1.4 纤锌矿型结构晶胞

3. 具有正四面体结构的其他结晶类型

具有正四面体结构的结晶类型还有黄铜矿型。黄铜矿是典型的三元系化合物半导体,其原子排列的基本重复单元虽仍是四面体,但已不再像金刚石或闪锌矿结构那样具有立方体对称性。在黄铜矿结构中,铜为 1 价,铁为 3 价,合起来共提供 4 个外层电子,与两

个硫原子的12个外层电子一起构成两个各含8个电子的封闭壳层。可以将这种三元系结构看成是两个Ⅱ-Ⅵ族化合物分子之中的Ⅱ族原子分别被一个Ⅲ族原子和一个Ⅰ族原子取代之后的结果。按此规则可形成一系列Ⅰ-Ⅲ-Ⅵ₂族三元系化合物。

同样,如果用一个Ⅱ族原子和一个Ⅳ族原子分别取代两个Ⅲ-Ⅴ族化合物分子中的Ⅲ族原子,也会得到一系列Ⅱ-Ⅳ-Ⅴ₂族三元系化合物。所有这些三元系化合物都具有与黄铜矿类似的晶体结构,因此人们常将其统称为黄铜矿型化合物半导体。

4. 非四面体结构型半导体

也有一些重要半导体的晶体结构不属于四面体型,这主要是Ⅳ-Ⅵ族化合物半导体中的硫化铅(PbS)、硒化铅(PbSe)、碲化铅(PbTe)以及氧化物半导体中的氧化镉(CdO)等,其晶体结构为氯化钠(岩盐)型。氯化钠晶格也属立方晶系,但与闪锌矿结构不同,它是典型的离子晶体而非共价晶体。实际上可把这种晶格看成是一种由两个面心立方体晶格沿[100]方向位移1/2晶胞边长套构而成的复式格子,每一个立方体晶格分别由一种组分原子构成。

1.1.4 化合物半导体的极性

如果化合物半导体由电负性不同的两种元素的原子组成,则共价电子会向电负性强的原子一方偏移,从而使这种共价晶体带有一定比例的离子键成分,成为像离子晶体那样的极性晶体,其极性的强弱与离子键成分所占比例,即两种元素电负性之差有关。电负性差越大,离子键成分的比例就越高,晶体的极性也就越强。Ⅱ-Ⅵ族化合物和氧化物半导体的组成元素之间的电负性相差较大,因而极性很强,常被称为极性半导体。Ⅲ-Ⅴ族化合物也具有不同程度的极性,其中4种氮化物因为氮元素的电负性极性很强而具有较强的极性,几乎可与Ⅱ-Ⅵ族化合物相当;而砷化物和锑化物的极性较弱,砷化硼则无极性。

极性差别直接导致晶体结构的差别。共价性占优势的化合物趋向于闪锌矿结构,而极性强的化合物则趋向于纤锌矿结构,甚至趋向于典型的离子晶体岩盐结构。极性还会改变晶体的对称性。图1.5所示为闪锌矿晶格在其(110)面上的投影,它不但反映了(111)双原子层沿[111]方向按ABCABC顺序重复堆积的情况,更反映了极性对晶体对称性的改变。图中,若以上表面为(111)面,则下表面即为($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)面;若黑原子代表电负性强的原子,则(111)面相对($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)有富裕负电荷,二者性质不同。这时,<111>轴两端极性各异,是一根极性轴。若黑、白原子为同一种原子,就像金刚石晶格那样,则(111)面和($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)面为毫无差别的对称晶面,[111]方向和 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 也为对称晶向,是极性改变了它们的对称性。

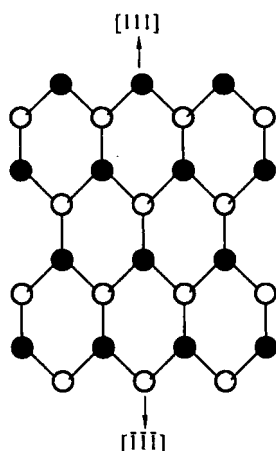


图 1.5 闪锌矿晶格在(110)面上的投影

极性还会对材料的性能带来其他影响。譬如,金刚石晶格的(111)面因为面间距最大、单位面积面间键数最少而成为解理面;而闪锌矿晶格的(111)面则因为相邻双原子层间有正、负电荷的库仑引力相维系而难以解理,反而是面距较小的(110)面,因为每个层面都包含等量的不同原子而不带极性,易于分离,是比较理想的解理面。此外,极性材料的电负性较强的原子面化学活性较强,更易于氧化。在含氧化剂的腐蚀液中,电负性较强的原子面(A面)比电负性较弱的原子面(B面)的腐蚀速率更高,这种差别可用来区分极性材料的A面和B面。更重要的是,在晶体生长过程中,A面和B面的生长速率及长成晶体的品质也可能不同。一般认为沿A面的生长速率较高,且容易获得缺陷密度较低的优质晶体。

1.2 半导体的能带

半导体与导体、绝缘体相比具有很多独特的性能,这些独特的性能不仅与半导体晶体的微观结构有关,而且还与半导体中的电子状态,包括能量状态和运动状态有直接关系。制造半导体器件所采用的材料大多是单晶体。单晶体是由靠得很紧密的原子周期性重复排列而成,相邻原子间距只有零点几纳米的数量级。因此,半导体中的电子状态和原子中的不同,特别是外层电子会有显著变化。但是,晶体是由分立的原子凝聚而成,两者的电子状态势必存在某种联系。下面以原子结合成晶体的过程定性说明半导体中的电子状态。

1.2.1 原子的能级和晶体的能带

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单原子,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 0 eV,则孤立氢原子中电子能量为

$$E_n = -\frac{m_0 q^4}{8\varepsilon_0^2 h^2 n^2} = -\frac{13.6}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.1)$$

式中 m_0 ——自由电子的惯性质量;

q ——电子电荷;

ε_0 ——真空介电常数;

h ——普朗克常量;

n ——主量子数。

根据式(1.1)可以得到氢原子能级图。

一个具有多电子的复杂原子,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量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。

在一个具有多个电子的复杂原子中,电子不能同时都处于同一个能级上。对于原子的基态来说,它的电子必然首先填充能量低的能级。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。与之对应,从电子运动轨道来看,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,在每个壳层中又按轨道角动量的不同分成几个不同的亚壳层。

上面讨论了一个单原子中电子能级的状况,而由大量原子结合成的半导体晶体中电子的运动规律又是怎样的呢?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(1 埃 = 10^{-10} m)。由于晶体中各个原子靠得如此之近,引起的一个重要现象是各个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 1.6 所示。

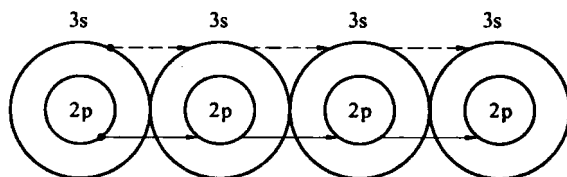


图 1.6 价电子轨道重叠运动示意图