

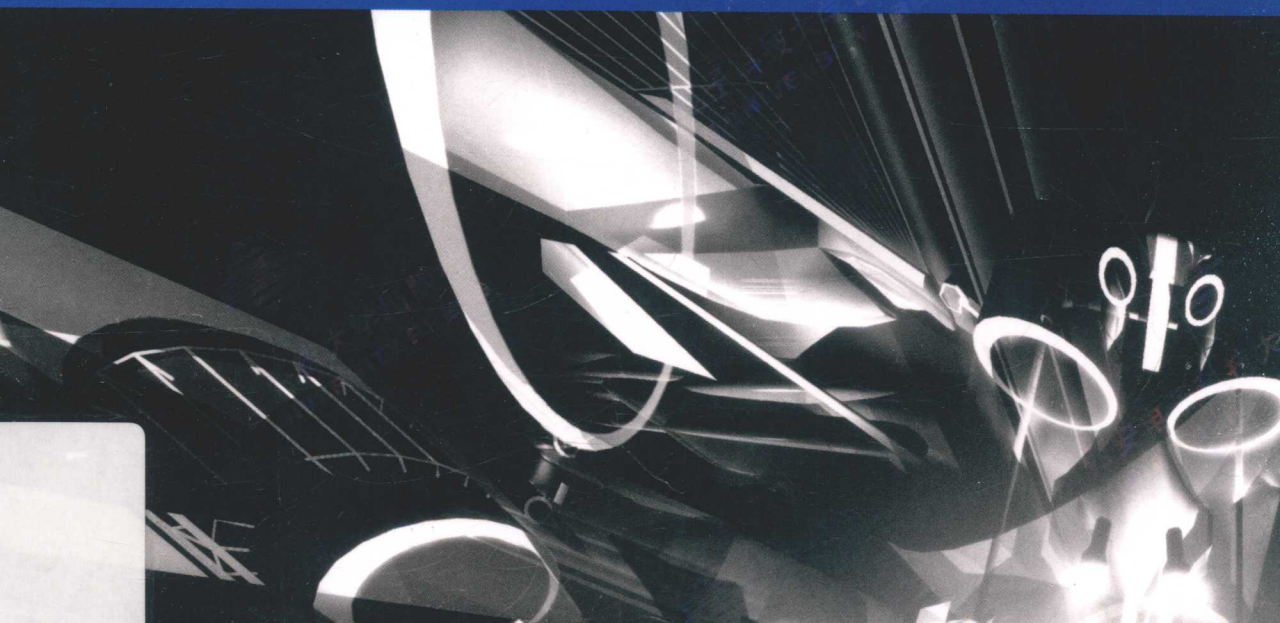
高等学校电子信息类专业
“十三五”规划教材

ELECTRONIC
INFORMATION SPECIALTY

半导体物理与器件

吕淑媛 刘崇琪 罗文峰 编著

 西安电子科技大学出版社
<http://www.xduph.com>



高等学校电子信息类专业“十三五”规划教材

半导体物理与器件

吕淑媛 刘崇琪 罗文峰 编著

西安电子科技大学出版社

内容简介

本书涵盖了量子力学、固体物理及半导体器件等内容。全书包括 8 章内容,可以分为三部分。第一部分为半导体基本属性,包括第 1 章晶体中的电子运动状态、第 2 章平衡半导体中的载流子浓度、第 3 章载流子的输运、第 4 章过剩载流子。第二部分为半导体器件基础,包括第 5 章 PN 结、第 6 章金属半导体接触和异质结、第 7 章 MOS 结构及 MOSFET 器件。第三部分讨论专用半导体器件,只有一章,即第 8 章半导体中的光器件。本书突出物理概念、物理过程和物理图像,在重点内容后均有例题,并编写了一些利用计算机仿真实现的例题和习题。

本书既可作为高等学校电子科学与技术、光电信息工程、微电子技术等专业本科生的教材,也可作为相关领域工程技术人员的参考资料。

图书在版编目(CIP)数据

半导体物理与器件/吕淑媛,刘崇琪,罗文峰编著.

—西安:西安电子科技大学出版社,2017.1

高等学校电子信息类专业“十三五”规划教材

ISBN 978-7-5606-4392-2

I. ① 半… II. ① 吕… ② 刘… ③ 罗… III. ① 半导体物理 ② 半导体器件

IV. ① O47 ② TN303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 013995 号

策划编辑 云立实

责任编辑 杨 璠

出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路 2 号)

电 话 (029)88242885 88201467 邮 编 710071

网 址 www.xduph.com 电子邮箱 xdupfxb001@163.com

经 销 新华书店

印刷单位 陕西华沐印刷科技有限责任公司

版 次 2017 年 2 月第 1 版 2017 年 2 月第 1 次印刷

开 本 787 毫米×1092 毫米 1/16 印张 14.5

字 数 341 千字

印 数 1~3000 册

定 价 26.00 元

ISBN 978-7-5606-4392-2/O

XDUP 4684001-1

* * * 如有印装问题可调换 * * *

前 言

在过去的六十多年里，以半导体集成电路为基础的微电子技术的迅速发展，使人类进入信息时代，影响和改变着我们生活的各个方面，微电子技术越来越受到人们的重视。半导体物理和半导体器件是微电子技术的基础知识，也是电子科学与技术、微电子学、光电信息工程等专业的一个重要基础课。本书是作者在多年的教学实践基础上编写而成的，编写中，作者力图使整个内容系统化。

本书既讲述了半导体物理的基础知识，也分析讨论了半导体基本器件的工作原理及工作特性，具有一定的深度和广度。本书力求突出器件的物理概念、物理过程和物理图像，理论分析透彻，重点突出。本书在重点内容后均有例题，在每章最后均有习题，并提供了大量利用计算机实现的例题与练习题。

本书共分三部分。第一部分介绍了晶体中的电子状态，包括半导体材料的种类、半导体的晶格结构、半导体的能带、半导体中的载流子、平衡半导体的载流子浓度、载流子的输运及非平衡半导体。第二部分介绍了半导体器件基础，包括 PN 结、金属半导体接触、异质结、MOS 结构及 MOSFET 器件。第三部分专门介绍半导体中的光器件，包括光电检测器和太阳能电池等。

本书由吕淑媛、刘崇琪和罗文峰共同编写。其中第 1 章和第 4 章由刘崇琪编写；第 2 章、第 3 章、第 5 章、第 6 章和第 7 章由吕淑媛编写，第 8 章由罗文峰编写，全书由吕淑媛统稿。

由于编者水平有限，书中难免存在疏漏之处，热切希望读者批评指正。

编 者
2017 年 1 月

目 录

第 1 章 晶体中的电子运动状态	1
1.1 固体的晶格结构	1
1.1.1 半导体材料	1
1.1.2 固体晶格	2
1.1.3 金刚石结构	6
1.1.4 固体的缺陷与杂质	8
1.2 量子力学初步	9
1.2.1 量子力学的基本原理	9
1.2.2 薛定谔方程及其波函数的意义	10
1.2.3 自由电子与束缚态电子	12
1.2.4 单电子原子中电子的状态	17
1.2.5 多电子原子中电子的状态	20
1.3 晶体中电子的运动状态	21
1.3.1 能带的形成	21
1.3.2 一维无限晶体的能带	23
1.3.3 半导体中的载流子	28
1.3.4 三维无限晶体的能带	34
习题	36
第 2 章 平衡半导体中的载流子浓度	38
2.1 状态密度函数和费米分布函数	38
2.1.1 状态密度函数	38
2.1.2 费米-狄拉克分布函数	40
2.2 平衡载流子浓度	44
2.2.1 平衡半导体中的载流子浓度的公式	46
2.2.2 本征半导体中的载流子浓度	48
2.2.3 载流子浓度的乘积	50
2.2.4 本征费米能级位置	51
2.3 只含一种杂质的杂质半导体中的载流子浓度	51
2.3.1 施主杂质和受主杂质	51
2.3.2 施主杂质能级上的电子和受主杂质能级上的空穴	54
2.3.3 电中性条件	56
2.4 补偿半导体的载流子浓度	60
2.5 费米能级的位置	61

2.6	简并半导体	66
2.6.1	简并半导体的载流子浓度	67
2.6.2	禁带变窄效应	68
	习题	68
第3章	载流子的输运	70
3.1	载流子的漂移运动	70
3.2	载流子的散射和迁移率	73
3.2.1	载流子的散射	73
3.2.2	载流子的迁移率随温度和掺杂浓度的变化	74
3.2.3	电阻率	77
3.2.4	饱和速度和强场迁移率	79
3.3	载流子的扩散运动	80
3.4	爱因斯坦关系	82
	习题	84
第4章	过剩载流子	85
4.1	载流子的产生和复合	85
4.1.1	产生和复合的概念	85
4.1.2	产生率和复合率	85
4.1.3	载流子的产生源	86
4.1.4	影响载流子复合的因素	86
4.1.5	热平衡状态下载流子的产生和复合	86
4.1.6	非热平衡状态下载流子的复合	87
4.2	过剩载流子的性质	90
4.2.1	载流子的连续性方程	91
4.2.2	与时间有关的扩散方程	91
4.3	双极输运及其输运方程	92
4.3.1	双极输运的概念	93
4.3.2	双极输运方程	93
4.3.3	小注入条件下的双极输运方程	94
4.3.4	双极输运方程应用	95
4.4	准费米能级	97
	习题	99
第5章	PN结	100
5.1	PN结的形成及其基本结构	100
5.1.1	合金法及其形成的PN结的杂质分布	100

5.1.2	扩散法及其形成的PN结的杂质分布	101
5.2	平衡PN结及其能带	102
5.2.1	平衡PN结	102
5.2.2	平衡PN结的能带	103
5.3	平衡PN结的参数	104
5.3.1	内建电势差	104
5.3.2	平衡PN结的内建电场强度及电势分布函数	108
5.3.3	空间电荷区宽度	112
5.3.4	空间电荷区的载流子浓度	114
5.4	正偏PN结	115
5.5	反偏PN结	122
5.5.1	反向偏压时的相关公式	123
5.5.2	影响PN结偏离理想电流-电压方程的因素	129
5.6	PN结的电容效应	131
5.6.1	PN结的势垒电容	131
5.6.2	PN结的扩散电容	133
5.7	PN结的击穿	134
5.7.1	雪崩击穿	135
5.7.2	隧道击穿(齐纳击穿)	135
5.7.3	热电击穿	136
5.8	隧道二极管	136
	习题	138
第6章 金属半导体接触和异质结		140
6.1	金属半导体接触	140
6.1.1	金属和半导体的功函数	140
6.1.2	理想的金属半导体接触	141
6.1.3	理想金属半导体接触的特性	144
6.1.4	金属半导体接触的电流-电压关系	146
6.1.5	欧姆接触	148
6.2	异质结	149
6.2.1	异质结的分类及其能带图	149
6.2.2	突变反型异质结的内建电势差和空间电荷区宽度	151
6.2.3	突变同型异质结	154
6.3	异质结的电流-电压特性	154
6.3.1	突变反型异质结中的电流运输模型	155
6.3.2	突变同型异质结中的电流运输模型	157
	习题	157

第 7 章 MOS 结构及 MOSFET 器件	158
7.1 理想 MOS 结构	158
7.1.1 MOS 结构的构成	158
7.1.2 热平衡时的 MOS 结构	158
7.1.3 外加偏压时的 MOS 结构	159
7.1.4 理想 MOS 结构的电容-电压特性	164
7.1.5 金属与半导体的功函数差对 MOS 结构 $C-U$ 特性曲线的影响	167
7.1.6 氧化层中的电荷对 MOS 结构 $C-U$ 特性曲线的影响	168
7.2 MOSFET 基础	169
7.2.1 MOSFET 的结构和分类	169
7.2.2 MOSFET 的工作机理	171
7.2.3 MOSFET 的电流-电压关系	173
习题	175
第 8 章 半导体中的光器件	177
8.1 半导体中的光过程	177
8.1.1 光吸收	177
8.1.2 光发射	179
8.2 光电探测器	181
8.2.1 光电探测概述	181
8.2.2 光电池	187
8.2.3 PIN 光电探测器	192
8.2.4 雪崩光电二极管 APD	194
8.3 发光二极管	197
8.4 激光二极管	203
8.5 固体图像传感器	211
8.5.1 电荷耦合器件图像传感器 (CCD)	212
8.5.2 MOS 图像传感器 SSPA	217
习题	222
附录	223
参考文献	224

第 1 章 晶体中的电子运动状态

从物质形态上分, 半导体属于固体。固体的结构决定了其性质, 所以首先考虑固体中原子排列规律, 即固体的晶格结构。其次, 半导体中的电子运动状态难以用经典力学来描述, 而量子力学波理论却能很好地描述半导体中电子的运动状态, 所以需要量子力学有初步了解, 并学习它的分析方法。最后, 用量子力学方法对晶体中的电子运动状态进行分析, 得到晶体的 $E-k$ 关系图, 利用 $E-k$ 关系图讨论电子的有效质量, 并引入空穴的概念, 同时也为计算晶体中电子的量子态密度打下基础。

1.1 固体的晶格结构

半导体所具有的电学特性与组成半导体材料的元素或化合物有关, 也与原子或分子的排列规律有关, 所以需要量子力学对半导体材料和其晶格结构有一定了解。

1.1.1 半导体材料

物质按导电性能可分为导体、半导体和绝缘体。用电导率(电阻率的倒数)来表示物质的导电性能, 导体、半导体和绝缘体的电阻率、电导率如图 1.1 所示。半导体材料的电阻率一般为 $10^{-3} \sim 10^6 \Omega \cdot \text{cm}$, 介于导体($10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$)与绝缘体($10^{12} \Omega \cdot \text{cm}$)之间。从图 1.1 可以看出, 导体和绝缘体材料的电阻率是确定的, 如银的电阻率约为 $10^{-6} \Omega \cdot \text{cm}$, 而半导体材料的电阻率是在一定范围内, 如硅的电阻率为 $10^{-3} \sim 10^4 \Omega \cdot \text{cm}$ 。正是由于半导体导电性能的这种弹性, 才使其得到更广泛的应用。

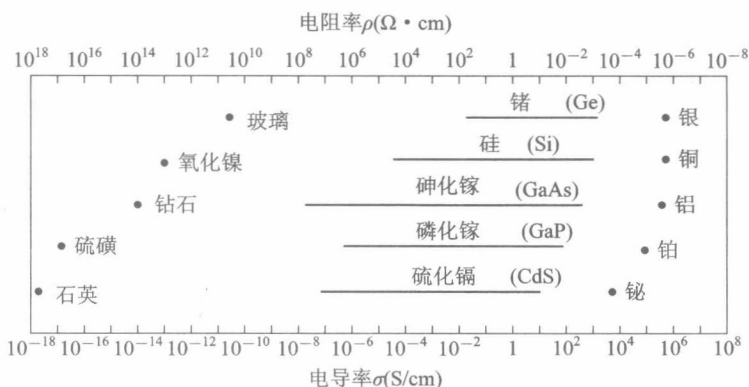


图 1.1 部分材料的电导率和电阻率

材料的物理性质与组成材料的元素或化合物有关, 也与由这些元素组成的结构有关。半导体材料包括元素半导体和化合物半导体。元素半导体是由单一元素构成的。元素半导体主要包括硅、锗等四族元素, 它们的微观结构决定了由它们组成单质时可能形成半导体材料。除此之外, 材料结构的形成, 还受其形成过程中的外部因素, 例如温度等的影响。石墨和金

金刚石都是由碳元素组成的单质，但二者的原子排列结构却完全不同，当然，表现出的物理性质也相去甚远。

化合物半导体是由两种及两种以上的元素组成的。化合物包括二元(即两种元素)、三元(即三种元素)和多元化合物。二元化合物半导体可以是由三族元素与五族元素组成化合物，如 GaAs 或 GaP。二族元素与六族元素也可以组成二元化合物半导体。三元化合物半导体由三种元素组成，如 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ，其中下标 x 是原子序数低的元素的组分。当然还可以制造更复杂的半导体材料。

物质按形态可以分为固体、液体和气体。目前使用的半导体材料主要是固体。

按照原子排列的有序化程度，固体可以分为单晶、多晶和无定形三种类型。无定形材料仅在几个原子或分子的尺度内呈现出周期性的排列结构。多晶材料则由若干个在很多个原子或分子尺度内呈现出周期性排列结构的区域组成，且各区域的大小和排列结构各不相同。单晶材料在整个区域呈现出周期性的排列结构。图 1.2 是单晶、无定形和多晶材料的结构示意图。

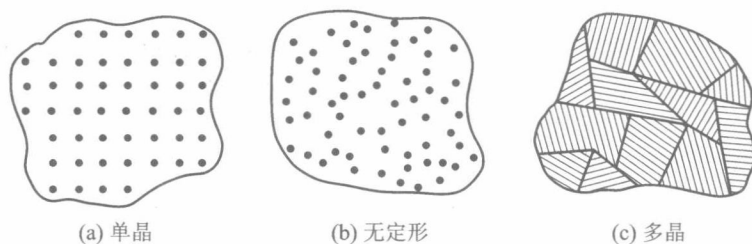


图 1.2 固体类型

固体材料的性质主要由组成材料的元素及其原子或分子的排列结构所决定，而排列的周期性是描述单晶材料结构的核心。

1.1.2 固体晶格

为了描述具有周期排列的晶格的特征，可以用下面的一些方法来描述晶体结构。

1. 格点和晶格

若用一点来描述原子所在的平衡位置，则晶体的结构就可用点阵来表示。这些点被称为格点。对单晶材料而言，其整个点阵结构(称为晶格)呈现周期性，因此，可以用能反映其周期性的部分点阵(对应于一小块晶体)来复制整个晶体。从数学描述晶体的排列结构上来看，所谓的晶格，就是这些格点组成的点阵结构。从物理上看，晶格是对应的这些原子按格点位置排列的实体。

2. 格矢与格基矢

如果在晶格中选择一个格点作为坐标原点，则晶格中的每一个格点都可以用一个矢量来描述，这个矢量被称为格矢量，简称格矢，用 \mathbf{r} 来表示：

$$\mathbf{r} = s\mathbf{a} + t\mathbf{b} + p\mathbf{c} \quad (1.1)$$

式中： s 、 t 和 p 为常数； \mathbf{a} 、 \mathbf{b} 和 \mathbf{c} 为三个基矢量。基矢量的方向为选择的坐标方向，大小为相应方向的最小格点间距，因此，基矢量又称格基矢。确定了所有格点的格矢，就确定了整个

晶格的格点分布情况。因此，完全可以用格矢来描述晶格，只不过这种描述格矢太多，太过复杂，而且不能直观反映格点的排列规律，在实际中，不用格矢对晶格进行整体描述。

3. 晶胞与原胞

对于单晶晶格，原子在整个晶体中排列有序，这种有序可以用晶格空间中各方向上的周期性来描述。通常选取能反映周期性的部分格点作为对象进行描述，选取的这部分格点，可以通过平移的方法复制出整个晶格。这一小部分格点对应一小部分晶体，并被称为晶胞。所以，用晶胞可以复制出整个晶体。对于一个晶格，其晶胞选择并不唯一，但都要反映其周期性。通常，先选择一组基矢量，每一基矢量的大小为各自方向上格点的排列周期，然后用这一组基矢量围成一个空间，该空间即为晶胞，晶胞内分布的格点反映了晶胞的结构。显然，选择不同的基矢量组，就有不同的晶胞结构。二维晶格的晶胞对应的二维空间，形状为一平行四边形。如图 1.3 所示，晶胞 A、B 和 C 由 (a_1, b_1) 、 (a_1, b_2) 和 (a_2, b_3) 三组基矢量分别围成。

对三维晶格的晶胞，基矢量组中包含三个三维空间的基矢量，围成的空间为平行六面体，如图 1.4 所示。 a 、 b 和 c 为三维空间一组基矢量，它们可以是正交基矢量，也可以不是正交基矢量。晶胞的三个边长分别为 a 、 b 、 c 的长度 a 、 b 和 c ，它们称为晶格常数。除了这三个晶格常数之外，三个基矢量之间的夹角也是描述晶格的常数。

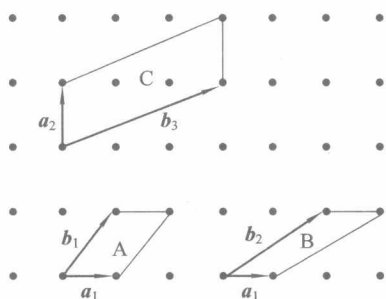


图 1.3 几个可能的二维晶胞

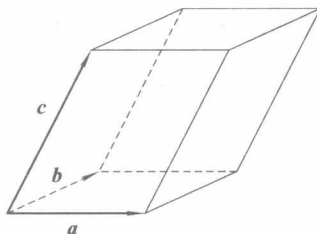


图 1.4 三维晶胞示意图

原胞是用于复制整个晶体的最小晶胞。原胞的结构也不唯一，图 1.3 中的晶胞 A 和 B 都是原胞。由于原胞是最小的晶胞，选出正交边原胞的可能性要小于选出正交边晶胞的可能性。所以，在很多时候，使用晶胞比原胞更为方便。

4. 基本晶格结构

当晶格的晶胞为立方体时，晶格属于立方晶系。晶格可以用直角坐标系来描述，且有

$$a = b = c \quad (1.2)$$

即描述晶格的三个晶格常数大小相同。立方晶系有三个基本的晶格结构，分别是简立方、体心立方和面心立方。

简立方的晶格结构如图 1.5(a) 所示，在立方体晶胞的八个顶角各有一个格点。体心立方的晶格结构如图 1.5(b) 所示，立方晶胞除八个顶角各有一个格点外，立方体的中心，即四个体对角线的交点处还有一格点。面心立方的晶格结构如图 1.5(c) 所示，立方晶胞除八个顶角各有一个格点外，立方体的六个表面中心处还各有一个格点。

根据晶格的结构和晶格常数可以计算晶体的原子体密度。原子体密度是指单位体积内原子的数目，可以用一个晶胞内所含原子数除以晶胞的体积来计算。在计算过程中，原子的个

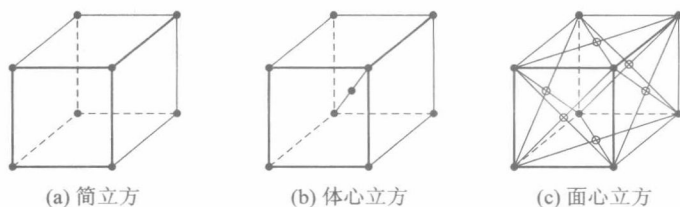


图 1.5 基本晶格结构

数是以原子体积的百分比来计算的。如位于晶胞顶角格点对应的原子，其体积的 $1/8$ 在该晶胞内，所以计算时，只能计算为 $1/8$ 个原子。

[例 1.1] 计算简立方、体心立方和面心立方的原子体密度。

解：若晶格常数为 a ，则简立方、体心立方和面心立方的一个晶胞所含的原子数分别为

$$\text{简立方：} 8 \times \frac{1}{8} = 1$$

$$\text{体心立方：} 8 \times \frac{1}{8} + 1 = 2$$

$$\text{面心立方：} 8 \times \frac{1}{8} + 6 \times \frac{1}{2} = 4$$

所以，简立方、体心立方和面心立方的原子体密度分别为 $1/a^3$ 、 $2/a^3$ 和 $4/a^3$ 。

5. 晶面和米勒指数

晶体的晶格既可以看成是由一个个点组成的点阵结构，也可以看成是由分布在一系列平行平面上的点组成的，这些平面被称为晶面。平行平面可以有不同的取法，即表示有不同的晶面。

为了区分不同的晶面，可以对其进行命名。用平面与描述晶格的坐标轴的截距来表示就是其命名方法之一。

[例 1.2] 用截距描述如图 1.6 所示的阴影平面。

解：如图 1.6 所示的阴影平面与三个坐标轴的截距分别是 3、2、5，所以可以用 3、2、5 这一组数表示这个平面。

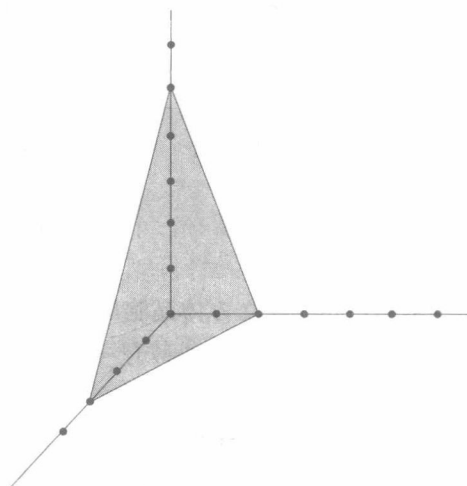


图 1.6 例 1.2 晶面图

[例 1.3] 用截距描述如图 1.7 所示的阴影面。

解：如图 1.7 所示的阴影平面与三个坐标轴的截距分别是 ∞ 、4、 ∞ ，所以可以用 ∞ 、4、 ∞ 这一组数表示这个平面。

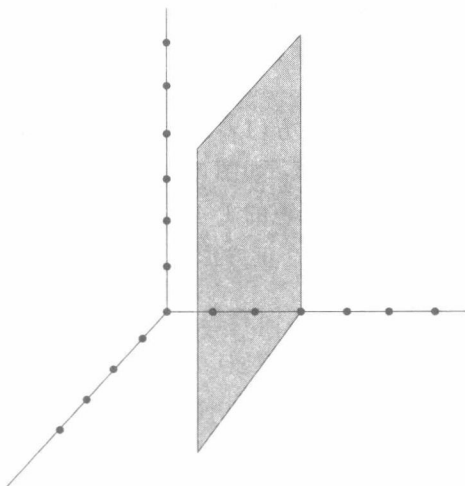


图 1.7 例 1.3 晶面图

由例 1.3 可以看出，用截距描述平面时，若平面与某一轴平行，则与该轴的截距为无穷大。

为了避免描述中出现无穷大，可以用米勒指数来描述平面。对平面的三个截距取倒数，再乘以分母的最小公倍数，得到的三个数，即米勒指数。最后，把这三个数用小括号括起来作为平面的名称。米勒指数是命名平面的通用方法。

[例 1.4] 用米勒指数描述例 1.3 所要描述的平面。

解：(1) 图 1.7 阴影面在坐标轴的三个截距分别是 ∞ 、4、 ∞ 。

(2) 分别取三个截距的倒数，得

$$0, 1/4, 0$$

(3) 乘以分母的最小公倍数，得

$$0, 1, 0$$

(4) 用圆括号将(3)中的三个数括起来，即

$$(0 \ 1 \ 0)$$

所以，图 1.7 中阴影面的米勒指数为 $(0 \ 1 \ 0)$ 。

[例 1.5] 试证明平行平面的米勒指数是相同的。

证明：设任意两平行平面在坐标轴的截距分别为 m 、 n 、 p 和 sm 、 sn 、 sp ，其中 m 、 n 、 p 、 s 均为整数。

(1) 两个平面截距的倒数分别为

$$1/m, 1/n, 1/p \text{ 和 } 1/sm, 1/sn, 1/sp$$

(2) 分别乘以分母的最小公倍数，得

$$np, mp, mn \text{ 和 } np, mp, mn$$

(3) 用圆括号将(2)中的三个数括起来，即

$$(np \ mp \ mn) \text{ 和 } (np \ mp \ mn)$$

所以，两平行平面的米勒指数是相同的。

若某平面通过某轴，则在该轴的截距数目不唯一，此时，可以通过另一平行平面来确定米勒指数。同样，当某平面通过原点时，也可选择另一平行平面来确定其米勒指数。

原子的面密度是晶体的一个重要特征参数。原子面密度是单位面积内原子的个数，可以用晶胞中一个晶面内所含原子数除以晶胞中晶面的面积来计算。在计算过程中，原子的个数是以原子切面的百分比来计算的。

[例 1.6] 计算晶格常数为 a 的简立方(1 0 0)晶面的原子面密度。

解：该晶胞的(1 0 0)晶面为一正方形，如图 1.8 所示。

位于晶面顶角格点对应的原子，其面积的 1/4 在该晶胞的(1 0 0)晶面内，所以计算时，只能计算为 1/4 个原子。正方形面积为 a^2 。

原子的面密度为

$$\frac{4 \times 1/4}{a^2} = \frac{1}{a^2}$$

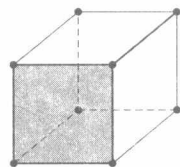


图 1.8 例 1.6 晶面图

6. 晶向

晶体的晶格还可以看成是由分布在一系列平行线上的点组成的。平行线可以有不同的取法，即平行线有不同的取向。平行线的取向被称为晶向。晶体的晶向，可以用该方向的一矢量来描述。通常，把矢量在坐标轴的三个分量 h 、 k 、 l (整数)用中括号括起来作为晶向的标记，即 $[h k l]$ ，该标记也称晶向指数。若三个分量不为整数，则可乘以分母的最小公倍数，化为整数。

[例 1.7] 试确定简立方晶胞体对角线晶向的晶向指数。

解：简立方体的对角线在坐标轴的分量为 1、1、1，则其晶向指数为 $[1 1 1]$ 。

1.1.3 金刚石结构

硅是最常用的半导体材料，具有金刚石结构，其晶格结构比前述的基本晶格结构要复杂得多。如图 1.9 所示，硅的晶胞为立方体，格点分布是在面心立方的基础上又增加了晶胞内的四个格点。晶胞内的四个格点的位置确定方法为：把晶胞分割成八个相同的小正方体，上层和下层各四个小正方体，若上层一个对角方向的两个小正方体中心各有一个格点，则下层另一对角方向的两个小正方体中心也各分布一个格点。

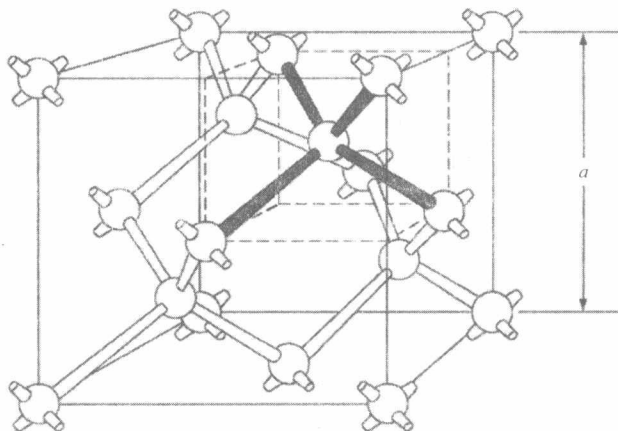


图 1.9 金刚石结构晶胞

金刚石的晶胞结构也可以看做是由面心立方通过适当平移叠加重构而成的，即面心立方按统一方法平移时，其中四个格点会移入晶胞体内，为晶胞内四个格点，其余的格点则被移出晶胞，这样原面心立方及其移入的四个格点就构成了金刚石的晶胞结构。平移的方法是：沿晶胞三个边依次平移 $1/4$ 晶胞边长，即沿对角线方向平移 $1/4$ 对角线长度。

[例 1.8] 面心立方晶胞依次向右、向后和向上各平移 $1/4$ 晶胞边长，则

- (1) 平移的面心立方的哪些格点会离开原晶胞？哪些格点进入原晶胞内部？
- (2) 移入原晶胞的格点的位置在哪里？

解：如图 1.9 所示金刚石晶胞涉及的原子为面心立方的八个顶角原子和六个面心原子，再加上体内四个原子，总共 18 个原子。面心立方涉及的原子数目为 14 个。

(1) 如图 1.5(c)所示面心立方，当向右平移 $1/4$ 晶胞边长时，晶胞右表面五个原子离开原晶胞；当向后平移 $1/4$ 晶胞边长时，晶胞后表面三个原子离开原晶胞；当向上平移 $1/4$ 晶胞边长时，晶胞上表面两个原子离开原晶胞。这样总共有 10 个原子离开原晶胞。移入原子的数目为 $14 - 10 = 4$ ，即四个原子移入原晶胞体内。

(2) 移入原晶胞体内的原子是原面心立方的左下前顶角原子和前表面、左表面及下底面的三个面心原子。把原晶胞等分成八个小的立方体，边长为 $a/2$ ，上层四个，下层四个。原晶胞左下角原子位于下层左前方小正方体的左下前角，平移后进入下层左前小正方体内的中心；原晶胞下底面中心原子位于下层右后方小正方体的左下前角，平移后进入下层右后小正方体内的中心；原晶胞左表面中心原子位于上层左后方小正方体的左下前角，平移后进入上层左后小正方体内的中心；原晶胞前表面中心原子位于上层右前方小正方体的左下前角，平移后进入上层右前小正方体内的中心。

金刚石中每一个原子都有四个与它最近的原子，并构成缺四个顶角原子的体心立方结构，如图 1.10 所示，中心原子与四个顶角原子距离最近。这也是金刚石晶格的一种基本结构，按这种方式扩展出每个原子最近的四个原子就可以构造出整个晶格。

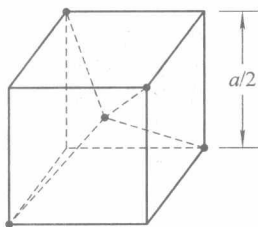


图 1.10 金刚石结构

[例 1.9] 试确定金刚石一个晶胞所含原子数目。

解：面心立方晶胞所含原子为 $8 \times 1/8 + 6 \times 1/2 = 4$ ，再加体内 4 个原子，所以，金刚石一个晶胞所含原子数目为 8 个。

闪锌矿结构与金刚石结构相同，区别在于其晶格中有两类原子。如 GaAs，为闪锌矿结构。在闪锌矿晶胞中，晶胞内为一种原子，晶胞顶角和面心则为另一种原子；闪锌矿中任一原子，离它最近的原子一定是四个另一类原子，即每一个原子都被另一类原子包围着。

1.1.4 固体的缺陷与杂质

理想的晶体结构是由特定的原子或分子按照理想的结构排列而成的。在实际的晶体中，一是实际结构与理想结构存在差异，即存在结构缺陷，二是构成晶体的原子混入其他杂质，即存在杂质缺陷。结构缺陷或杂质缺陷改变了晶体的组成结构，也必然改变晶体的性质，因此，也可以人为地通过它们实现所需要的某些晶体特性。

1. 固体中的结构缺陷

晶体中实际原子的位置与理想结构中的格点分布不一致都属于结构缺陷。热振动使原子无规则运动，从而导致原子排列规律性的破坏，这种结构缺陷是始终存在的。当然，也可以把热振动导致的缺陷当作晶体的热特性来处理。除此之外，晶体的结构缺陷都是由晶体生长过程中的各种因素造成的。按照形成缺陷的维度不同可以分为点缺陷、线缺陷和面缺陷三大类。

点缺陷可以分成两类：一类是原子空位缺失，即格点位置原子缺失，如图 1.11(a)所示；另一类是填隙缺陷，即非格点位置有原子填充，如图 1.11(b)所示。无论是空位还是填隙，可以是一个原子，也可以是多个原子。

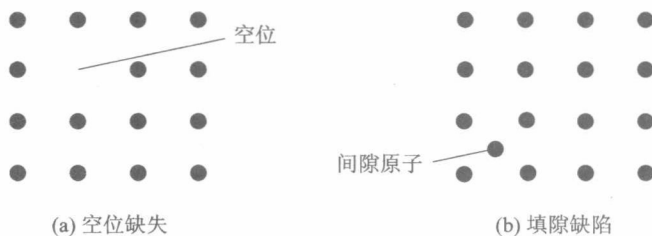


图 1.11 晶体中的点缺陷

图 1.12 是二维晶体的线缺陷的示意图，另外，还有错位、扭转等结构变形。

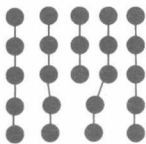


图 1.12 二维晶体中的线缺陷

2. 固体中的杂质缺陷

实际晶体中，杂质原子可以占据正常格点位置，也可以填充在非正常格点位置，前一种称为替位杂质，后一种称为填隙杂质，如图 1.13(a)、(b)所示。

杂质的出现会改变晶体的结构，从而改变晶体的性质。一般来说，当杂质原子的半径比半导体材料的基本原子小得多时，杂质会以填隙的形式存在于半导体中；当杂质原子的半径和半导体材料的基本原子相当时，会以替位的形式存在于半导体中。晶体中的杂质有人为有意掺入的，也有工艺过程中其他因素产生的。半导体中用来改变其电学特性的杂质均是有意掺入的。

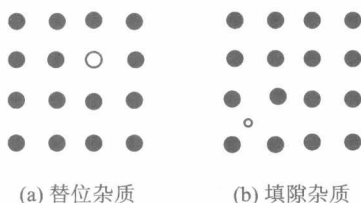


图 1.13 半导体中的杂质

1.2 量子力学初步

半导体的电特性与晶体中的电子运动状态有关。描述电子运动状态所用的理论是量子力学，所以量子力学也是半导体物理与器件的基础之一。

1.2.1 量子力学的基本原理

量子力学的三个基本原理的具体内容如下。

1. 能量量子化

1900年，普朗克提出热辐射能量不连续的假设，即热辐射能量是以所谓的量子的能量为单位的，辐射能量是量子能量的整数倍。量子的能量为 $E=h\nu$ ，其中 ν 为辐射的频率， $h=6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ 为普朗克常数。根据这一假设，普朗克成功地解决了热辐射问题。

1905年，爱因斯坦提出了光波也是由分立粒子组成的，即光波的能量也是以光量子（简称光子）能量为单位的，光能量也是光量子能量的整数倍。光子的能量也为 $E=h\nu$ 。根据这一假设，爱因斯坦成功地解释了光电效应。光的能量量子化，揭示了光的粒子性。

2. 波粒二象性

1923年，德布罗意提出了物质波这一概念，认为一切微观粒子均伴随着一个波，即一个微观粒子的行为也可以看做是波的传播。这种波就是所谓的德布罗意波，其波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.3)$$

式中： h 为普朗克常数； p 为粒子动量。式(1.3)描述了微观粒子的动量和其对应的德布罗意波的波长之间的关系，即反映了微观粒子的粒子性和波动性的联系，这就是所谓的波粒二象性。

对于光波，光子的动量也可表示为

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (1.4)$$

式中， λ 为光波的波长。式(1.4)反映的是光的波粒二象性。

[例 1.10] 电子的速度为 10^6 cm/s ，计算其对应的德布罗意波长。

解：电子的动量为

$$p = mv = 9.11 \times 10^{-31} \times 10^6 = 9.11 \times 10^{-25} \text{ (kg} \cdot \text{m/s)}$$

德布罗意波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{9.11 \times 10^{-25}} = 7.27 \times 10^{-10} \text{ (m)}$$