



普通高等教育“十一五”国家级规划教材
高等院校微电子专业丛书

半导体器件物理基础

(第二版)

曾树荣 编著

BANDAOTI QIJIAN WULI JICHU



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS



普通高等教育“十一五”国家级规划教材
高等院校微电子专业丛书

TN303

37=2

2002

半导体器件物理基础

(第二版)

曾树荣 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

内 容 简 介

本书内容大体可分为两个部分。前两章为第一部分,介绍学习半导体器件必须的知识,包括半导体基本知识和 pn 结理论;其余各章为第二部分,阐述主要半导体器件的基本原理和特性,这些器件包括:双极型晶体管、化合物半导体场效应晶体管、MOS 器件、微波二极管、量子效应器件和光器件。每章末均有习题,书后附有习题参考解答。

本书简明扼要,讨论深入,内容丰富,可作为大学有关专业半导体物理与器件方面课程的教材或参考书,分章节供本科生和研究生使用;也可供有关研究人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

半导体器件物理基础(第二版)/曾树荣编著. —北京:北京大学出版社,2007.1
ISBN 978-7-301-05456-7

I. 半… II. 曾… III. 半导体器件-半导体物理 IV. TN303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 001726 号

书 名: 半导体器件物理基础(第二版)

著作责任者: 曾树荣 编著

责任编辑: 沈承凤

标准书号: ISBN 978-7-301-05456-7/TP·0648

出版发行: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区成府路 205 号 100871

网 址: <http://www.pup.cn> 电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

电 话: 邮购部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62752038 出版部 62754962

印 刷 者: 北京大学印刷厂

经 销 者: 新华书店

787 毫米×1092 毫米 16 开本 24.5 印张 566 千字

2002 年 2 月第 1 版

2007 年 1 月第 2 版 2007 年 1 月第 1 次印刷

定 价: 36.00 元

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

举报电话: (010)62752024 电子信箱: fd@pup.pku.edu.cn

第二版前言

本书出版将近五年了,这次除改正公式和图形中的错误以及修改文字上的不妥以外,重写了许多章节,内容方面也有不少增删,力求把主要半导体器件的基本原理和特性叙述得更清楚、更充实些。此外,还补充了几类重要器件,包括非晶硅薄膜晶体管、发光二极管、太阳能电池和低维半导体器件。后者是当前半导体器件研究的热点。

书中的许多地方涉及量子力学,第二版附有三个专题,定性或半定量地介绍了这方面的一些基本概念和有关知识,为读者阅读本书提供方便。这些知识十分有限,甚至不能算做量子力学的入门介绍。但是,它们密切联系半导体物理与器件的实际,讲述新颖,对读者应该有一定参考价值。

第二版增加了习题部分,与所在章节的基本内容密切配合,可加深对有关内容的理解。有的习题有一定难度。书末附有习题解答,供参考。书中的基本公式均由国际单位制给出,焦耳和米在很多公式中需要使用。然而,在半导体领域,常用电子伏表示能量单位,厘米(或微米、纳米等)表示长度单位,所以,读者在解题时要特别注意这些单位之间的换算关系。

能够通过修订以更新本书内容,反映半导体器件领域新的进展,是作者十分高兴的事情。作者感谢北京大学出版社为再版本书所做的大量工作,感谢赵宝瑛、甘学温两位教授审阅全书并提出许多宝贵意见。

作者

2006年12月

前 言

人类已经进入 21 世纪,这将是社会高度信息化的世纪。计算机网络和通信技术的进步是信息化发展的标志。今天,无论何时何地,人们都可以高速交换信息,使区域性很强的政治、经济、文化国际化。但是,如果没有以晶体管为基础的微电子学的发展就谈不上个人计算机的高性能和多功能,没有以激光器和光探测器为主体的光电子学的发展就谈不上信息的高速传输,也就是说不可能有现代信息技术。本书介绍微电子学和光电子学领域主要半导体器件的基本原理,供将要从事或者正在从事电子信息专业特别是微电子学专业的人员阅读。

微电子学的主体是在以晶体管、二极管为单元的各种半导体器件的基础上构成的集成电路。1947 年半导体三极管(双极晶体管)诞生之后,半个世纪的时间内,半导体器件的理论和制造技术飞速发展。1958 年集成电路问世,标志着微电子学时代开始;1968 年 MOS 大规模集成电路产业化,从此集成电路的集成度一直以每三年 4 倍的惊人速度发展。今天,大部分的半导体器件是用硅做的,硅集成电路占据主导地位。就高速和功率应用而言,双极晶体管一直领先;但 MOS 场效应晶体管(MOSFET)易于小型化和功耗很小,在集成度方面占有明显的优势,所以 MOS 器件集成度的提高实际上代表了当今微电子学的进步。但是,随着电子装备向更高级发展,硅器件在许多领域不能适应,化合物半导体电子器件及集成电路成为重要的发展方向。1966 年,砷化镓肖特基栅场效应晶体管(GaAs MESFET)问世。其后,随着异质结技术和超薄外延生长技术的日趋成熟,相继出现了机理各异、结构新颖、性能优异的各种器件。除 GaAs MESFET 有了长足进步之外,又接连开发了异质结双极晶体管(HBT)和高电子迁移率晶体管(HEMT),这些器件已经成功地用于毫米波及超高速电路。已经或正在开发的还有新一代电子器件——量子电子学器件,包括共振隧穿器件和各种介观器件。微电子学发展的现状和趋势说明,这一领域生机勃勃,预期在本世纪上半叶器件的理论和制造技术仍将不断取得突破性进展。

光电子学是在电子学的基础上吸收了光技术而形成的一门高技术学科,主体是半导体光电子学。半导体激光器在 1962 年发明并在 1970 年实现室温下连续工作,以及后来各种半导体光电子器件的出现,逐渐形成了以半导体激光器和探测器为主体的光电子学。进入 20 世纪 80 年代以后,随着光通信等应用技术的迅猛发展,半导体光电产品的市场迅速扩大,光盘、激光打印机、光通信系统和家用摄像机等都是家喻户晓的产品。据测,到 2010 年,光电子产品市场将达到可以与集成电路市场相比的程度。由于光电子信息技术和产业具有强大的生命力,半导体光电子器件的研究和开发将更加受到重视。随着原子级薄膜生长和纳米级微细加工技术的发展,通过人工设计的材料如异质、超晶格及量子阱(线、点)材料来研制

新器件,将是半导体光电子学器件今后的发展趋势。

20 世纪 90 年代将近 10 年的时间内,我曾在北京大学计算机科学技术系为微电子学专业的三年级本科生和一年级硕士生讲授“半导体器件物理”课程,在上述认识的基础上,组织了这门课程的教学,最后编写了这本书。

本书远非包揽所有半导体器件。半导体器件的种类很多,广泛应用于社会、经济和军事的各个领域。本书只是以电子信息技术为主干线,选择一些用途最广和最具代表性的器件,讲述理解器件行为所需的一些基础知识,因此取名为“半导体器件物理基础”。在编写时,我特别注意物理图像清晰,尽力做到叙述上正确,既简明扼要地阐明学习器件必需的半导体知识及器件的基本特性,也用尽可能简化的模型讨论器件发展中新的物理效应和介绍新器件,力图使学生不仅能获得充足的基础知识,而且建立一些新的观念,能够适应半导体器件的现代发展。

本书应教材建设需要编写,得到了王阳元院士、韩汝琦教授和赵宝瑛教授的鼓励与关心。赵宝瑛、甘学温教授细致地审阅了全书,傅春寅、吴恩教授也阅读了部分章节,他们的热情帮助使作者受益颇多。北京大学出版社沈承凤老师和其他有关工作人员为本书的出版付出了辛勤劳动。在此,作者一并致谢。

对我来说,写这样一本书的确是一项艰巨的工作,为之耗费了难以置信的时间。我也深感学识浅薄,本书肯定有许多不足、不妥和错误,诚恳希望有关方面的专家和读者指正。

作 者

2001 年 9 月

主要符号表

a	晶格常数	I_B	基极电流
A	面积	I_{ph}	光电流
A^*	里查孙常数	J	电流密度
c	真空中的光速	J_{th}	阈值电流密度
C	电容;声速	J_n	电子电流密度
d	厚度	J_p	空穴电流密度
D	扩散系数	k_B	玻尔兹曼常量
D_n	电子扩散系数	k, k	电子波矢
D_p	空穴扩散系数	l	长度
E	能量	L	扩散长度;长度
E_c	导带底的能量	L_D	德拜长度
E_F	费米能级	L_n	电子扩散长度
E_{Fn}	电子准费米能级	L_p	空穴扩散长度
E_{Fp}	空穴准费米能级	m	有效质量
E_i	本征费米能级	m_d	态密度有效质量
E_g	禁带宽度(禁带隙)	m_l	纵向有效质量
E_v	价带顶的能量	m_n	电子有效质量
$\mathcal{E}, \mathcal{E}$	电场	m_p	空穴有效质量
$\mathcal{E}_c$	临界电场,最大击穿电场	m_{ph}	重空穴有效质量
$\mathcal{E}_m$	最大电场	m_{pl}	轻空穴有效质量
f	频率	m_t	横向有效质量
$f(E)$	费米-狄拉克分布函数;占有几率	m_0	自由电子质量
$f_n(E)$	电子占有几率	m_s	电导有效质量
$f_p(E)$	空穴占有几率	n	电子浓度
g	态密度;电导	$\bar{n}$	实折射率
G	产生率;增益系数	$\bar{n}$	复折射率
h	普朗克常数	n_i	本征载流子浓度
I	电流强度	n_q	波矢为 q 的声子数
I_C	集电极电流	n_s	表面电子浓度
I_E	发射极电流	N	杂质浓度

N_A	受主杂质浓度	W	中性基区宽度
N_c	导带有效态密度	α	吸收系数;共基极电流增益
N_D	施主杂质浓度	α_c	线宽增益因子
N_v	价带有效态密度	α_i	腔内损耗系数
p	空穴浓度;动量	α_m	端面损耗系数
P	散射几率,功率	β	共发射极电流增益
q	电子电荷	γ	发射效率;衬偏系数
q	声子波矢	δ	间隙宽度
Q_b	耗尽层电荷面密度	Γ	光限制因子
Q_g	栅电荷面密度	ϵ_0	真空介电常数
Q_i	反型层电荷面密度	ϵ_{ox}	氧化物介电常数
Q_0	有效界面电荷面密度	ϵ_s	半导体介电常数
Q_s	半导体表面层电荷面密度	τ	寿命或弛豫时间
R	电阻;反射率	η	转换效率;量子效率
t	时间;厚度	θ	角度;渡越角
T	绝对温度	λ	波长;平均自由程
v, v	速度	ν	光的频率
v_c	热发射速度	μ_n	电子迁移率
v_n	电子漂移速度	μ_p	空穴迁移率
v_p	空穴漂移速度	ρ	电阻率;电荷密度
v_s	饱和速度	σ	电导率;俘获截面
v_{th}	热运动速度	σ_G	微分增益系数
V	电压	ϕ_F	费米势
V_{bi}	内建电势	ϕ_{Bn}	n型半导体的肖特基势垒高度
V_{BE}	基极-发射极电压	ϕ_m	金属功函数
V_{BC}	基极-集电极电压	ϕ_s	半导体功函数
V_B	击穿电压	χ	电子亲和势
V_{FB}	平带电压	ψ	电势;电子波函数
V_T	阈值电压	ω	角频率

目 录

主要符号表	(1)
第一章 半导体基本知识	(1)
1.1 半导体材料和载流子模型	(1)
1.1.1 半导体晶格	(1)
1.1.2 半导体的能带	(4)
1.1.3 载流子平衡浓度	(10)
1.2 晶格振动	(17)
1.2.1 晶格振动和格波	(18)
1.2.2 声子	(20)
1.2.3 晶格散射	(21)
1.3 载流子输运现象	(22)
1.3.1 载流子漂移	(23)
1.3.2 载流子扩散	(29)
1.3.3 电流密度方程(漂移-扩散方程)	(30)
1.3.4 过剩载流子及其产生与复合	(32)
1.3.5 连续性方程和泊松方程	(39)
1.3.6 强电场效应	(40)
1.3.7 非稳态输运效应: 速度过冲	(43)
1.4 半导体的光学性质	(45)
1.4.1 引言	(45)
1.4.2 辐射跃迁和光吸收	(46)
1.4.3 直接禁带半导体中带间跃迁的自发发射和载流子寿命	(48)
1.4.4 直接禁带半导体中的光吸收和光增益	(50)
1.4.5 光在半导体中的传播	(52)
第二章 pn 结	(58)
2.1 热平衡状态	(58)
2.2 耗尽区和耗尽层电容	(61)
2.2.1 热平衡情形	(61)
2.2.2 非平衡情形	(65)
2.2.3 耗尽层电容(势垒电容)	(65)

2.3	直流特性	(66)
2.3.1	理想伏-安特性	(66)
2.3.2	产生-复合效应	(71)
2.3.3	大注入效应	(72)
2.3.4	温度效应	(73)
2.4	交流小信号特性;扩散电容	(74)
2.5	电荷存储和反向恢复时间	(77)
2.5.1	存储电荷	(77)
2.5.2	瞬态特性和反向恢复时间	(77)
2.6	结的击穿	(79)
第三章	双极型晶体管	(85)
3.1	基本原理	(85)
3.1.1	基本结构	(85)
3.1.2	放大工作状态	(86)
3.1.3	电流增益	(87)
3.2	双极型晶体管的直流特性	(89)
3.2.1	理想晶体管的电流	(89)
3.2.2	电流基本方程	(91)
3.2.3	放大状态	(92)
3.2.4	非理想现象分析	(94)
3.2.5	输出特性	(101)
3.3	双极型晶体管模型	(103)
3.3.1	E-M模型	(103)
3.3.2	G-P模型	(104)
3.4	双极型晶体管的频率特性	(108)
3.4.1	小信号交流等效电路	(108)
3.4.2	电流增益随频率的变化	(108)
3.4.3	频率参数	(110)
3.4.4	基区渡越时间	(111)
3.4.5	功率-频率限制	(113)
3.5	双极型晶体管的开关特性	(113)
3.5.1	晶体管的开关作用	(113)
3.5.2	关断和导通阻抗	(114)
3.5.3	导通时间和存储延迟时间	(115)
3.6	异质结双极晶体管(HBT)	(118)

3.6.1	异质结的能带图	(118)
3.6.2	HBT 电流放大的基本理论	(121)
3.6.3	几类常见的 HBT	(122)
3.7	多晶硅发射极晶体管(PET)	(123)
3.7.1	能带图和物理参数	(124)
3.7.2	少子分布和电流密度	(125)
3.7.3	注入发射区的空穴电流密度 J_{pi}	(127)
3.7.4	电流增益	(127)
3.8	pnpn 结构	(128)
第四章	化合物半导体场效应晶体管	(134)
4.1	肖特基势垒和欧姆接触	(134)
4.1.1	肖特基势垒	(134)
4.1.2	肖特基势垒二极管	(139)
4.1.3	欧姆接触	(142)
4.2	GaAs MESFET	(142)
4.2.1	基本结构	(143)
4.2.2	夹断电压和阈值电压	(143)
4.2.3	电流-电压特性	(144)
4.2.4	截止频率	(148)
4.3	高电子迁移率晶体管(HEMT)	(149)
4.3.1	器件结构及特点	(149)
4.3.2	2DEG 浓度(面密度)	(150)
4.3.3	量子霍尔效应	(152)
4.3.4	HEMT 的基本性质	(157)
第五章	MOS 器件	(162)
5.1	MOS 结构的基本性质	(162)
5.1.1	基本结构和能带图	(162)
5.1.2	氧化层及界面陷阱电荷	(163)
5.1.3	平带电压	(164)
5.1.4	表面势	(167)
5.1.5	电势平衡和电荷平衡	(167)
5.1.6	半导体表面状态	(168)
5.1.7	表面层电荷和表面势的关系	(169)
5.1.8	表面势和栅压的关系	(170)
5.1.9	表面反型状态	(170)

5.1.10	电容和电压的关系(C - V 特性)	(171)
5.2	MOS 场效应晶体管的基本理论	(174)
5.2.1	基本结构和工作原理	(174)
5.2.2	非平衡状态	(176)
5.2.3	阈值电压	(177)
5.2.4	电流基本特性	(178)
5.2.5	瞬态特性	(187)
5.2.6	短沟道效应	(192)
5.2.7	CMOS(互补型 MOSFET)结构	(209)
5.3	短沟道 MOSFET	(211)
5.3.1	器件小型化的规则	(212)
5.3.2	结深 x_j	(213)
5.3.3	栅氧化层厚度 d_{ox}	(215)
5.3.4	耗尽层宽度 $W_{s,D}$	(216)
5.3.5	最短沟道长度 L_{min}	(218)
5.4	SOI MOSFET	(219)
5.4.1	概述	(219)
5.4.2	阈值电压	(220)
5.4.3	电流特性	(222)
5.4.4	亚阈值斜率(摆幅)	(224)
5.4.5	短沟道效应	(224)
5.5	非晶硅薄膜晶体管(a -Si:H TFT)	(226)
5.5.1	非晶硅中的电子态	(226)
5.5.2	a -Si:H TFT 导电性质的简单分析	(227)
5.6	电荷耦合器件(CCD)	(230)
5.6.1	表面深耗尽状态和电荷存储	(230)
5.6.2	基本的 CCD 结构	(232)
5.6.3	转移效率和频率响应	(234)
第六章	微波二极管,量子效应器件	(239)
6.1	IMPATT 二极管	(239)
6.1.1	里德二极管	(240)
6.1.2	雪崩延迟和渡越时间效应(小信号分析)	(241)
6.1.3	功率和效率(大信号分析)	(244)
6.2	转移电子器件	(247)
6.2.1	电子转移和负微分迁移率	(247)

6.2.2	偶极畴和基本工作原理	(249)
6.2.3	器件工作状态	(253)
6.3	隧道二极管	(254)
6.3.1	隧道输运过程	(254)
6.3.2	隧道二极管	(259)
6.4	共振隧穿二极管(RTD)	(263)
6.4.1	共振隧穿效应	(264)
6.4.2	电流-电压特性	(268)
6.2.3	微波性能	(269)
6.5	一维 MOSFET	(269)
6.5.1	沟道的量子效应	(269)
6.5.2	一维电子理论	(270)
6.5.3	1D MOSFET 的电流-电压特性	(275)
6.6	单电子晶体管	(277)
6.6.1	概述	(277)
6.6.2	库仑阻塞	(278)
6.6.3	单电子晶体管和库仑振荡	(280)
第七章	半导体光器件	(283)
7.1	半导体激光器	(283)
7.1.1	基本结构和工作原理	(283)
7.1.2	半导体激光器的工作特性	(289)
7.1.3	双异质结(DH)激光器	(298)
7.1.4	量子阱(QW)激光器	(303)
7.2	发光二极管(LED)	(310)
7.2.1	概述	(310)
7.2.2	基本特性	(313)
7.3	光电二极管	(318)
7.3.1	pn 结的光电流	(318)
7.3.2	pin 光电二极管和雪崩光电二极管	(320)
7.3.3	光电二极管的特性参数	(322)
7.4	太阳能电池	(328)
7.4.1	概述	(328)
7.4.2	pn 结太阳能电池	(330)
7.4.3	几种典型的太阳能电池	(332)
附录 A	单位制和半导体常用数表	(337)

附录 B 量子力学基础	(342)
附录 C 单矩形势垒隧穿	(355)
附录 D 对称双势垒透射系数	(360)
附录 E 习题参考解答	(362)

第一章 半导体基本知识

作为理解各类半导体器件性质的基础,本章概述半导体的能带、载流子浓度、输运现象和光学性质。在标准的半导体物理学或固体物理学的教科书中,这些课题都得到了详细的论述,我们这里只是以比较直观的论证方式介绍一些基本概念和重要结论。

1.1 半导体材料和载流子模型

目前广泛使用的半导体都是单晶材料。在单晶半导体中,原子在三维空间中规则排列,形成一种周期性结构。此外,还有无定形(非晶)半导体和多晶半导体,前者的原子排列不存在长程有序,即不存在周期性;后者的原子排列形成许多取向、形状和大小都不同的小单晶体(晶粒)。非晶和多晶材料也得到了一定的应用,例如,非晶硅薄膜晶体管被用来制造驱动大面积液晶显示的电路,多晶硅被用来制作 MOS 场效应晶体管的栅极。但是,半导体器件的大部分仍然要用单晶材料,因此本书涉及的半导体都是单晶材料。而且,在前言中已经说明,硅在半导体材料中目前占据主导地位,而化合物半导体(例如 GaAs)具有比硅优越的电子输运性质和光学性质,所以本书主要论述硅和砷化镓器件。

1.1.1 半导体晶格

单晶中原子的周期排列称为晶格。任何晶格都可以用一个我们称之为晶胞的基本单元周期性地重复得到。晶胞的划分有一定的任意性,有实际意义的选取方法有两种:一种是选取最小的重复单元,即使得晶胞中包含的原子数最少,我们把这种最小的周期重复单元称

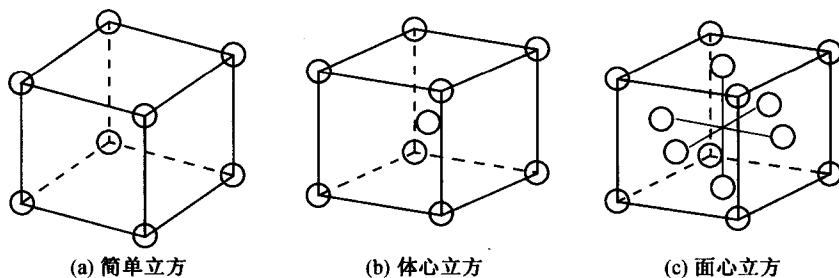


图 1.1 三种立方晶格单胞

为元胞；另一种选取能够最大限度反映晶格对称性质的最小单元，通常称为晶体学单胞，单胞各个边的实际长度称为晶格常数。图 1.1 画出了三种简单晶格(简单立方、体心立方和面心立方)的单胞。对于这些具有立方对称性的晶格，晶格常数只有一个。显然，晶格常数不一定等于近邻原子间的距离。所谓简单晶格，是指实际晶格本身和它的布拉维格子(体现晶格周期性的格子，它的每一个格点对应一个元胞)完全相同，每个元胞只有一个原子，所有原子都是等价的。

金刚石结构和闪锌矿结构

许多重要的半导体是具有立方对称性的晶体，元素半导体硅(Si)和锗具有金刚石晶格结构，如图 1.2(a) 所示，这种结构也属于立方晶系，并可看成由两个面心立方子晶格沿立方对称晶胞的体对角线错开 $1/4$ 长度套构而成，两个子晶格的原子相同，但仔细观察以后不难看出，位于体对角线上的原子(被涂黑)与位于顶角或面心的原子几何上不等价，它们伸“爪”的方向相反。这种含有不等价原子的晶格称为复式晶格，其布拉维格子的每个元胞中包含两个不等价的格点。砷化镓(GaAs)等大多数 III-V 族化合物半导体具有闪锌矿晶格结构，如图 1.2(b) 所示。闪锌矿晶格和金刚石晶格相比较，除去其中一个面心立方子晶格由 III 族元素(Ga)组成、而另一个子晶格由 V 族元素(As)所组成外，二者是相同的。

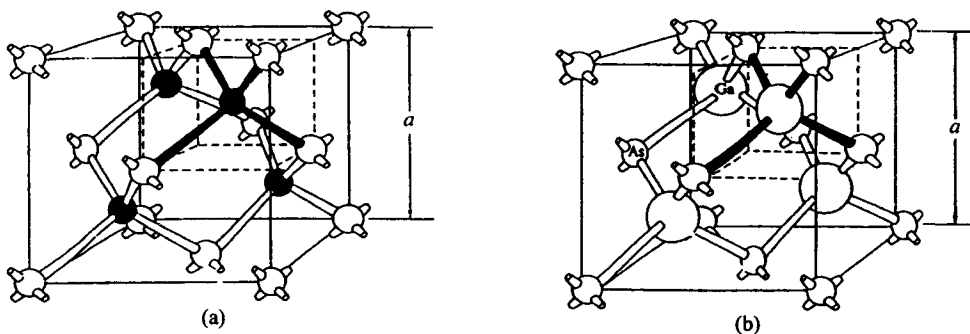


图 1.2 (a) 金刚石晶格结构；(b) 闪锌矿晶格结构

晶向和晶面的标志

提到晶向或晶面，并不指某个个别的晶向或晶面，而是指符合晶格的平移对称性而完全等价的一簇平行直线或平行等距平面。而不同的晶向和晶面上，原子排列的情况一般是不同的，晶体的性质也就不同，所以实际工作要求对不同的晶向和晶面作出标志(只需用组成实际晶格的任一简单晶格做基础来进行标志，例如对立方晶系用简单立方晶格)。用米勒指数可以做到这一点。具体做法如下，选一格点作为原点并作出沿元胞三个基矢 a, b, c 的轴线，因为所有格点都在晶面上，必然有一晶面通过原点，其他晶面因互相平行等距而均匀切割各轴。这样，从原点算起的第一个晶面在矢量 a, b, c 上的截距必然分别为 $a/h, b/k, c/l$ 。 h, k, l 为正的或负的整数，这是因为任意两格点间所通过的平行晶面总是整数个。平常

就用 (hkl) 来标记这个晶面系,称为米勒指数, $|h|$, $|k|$, $|l|$ 实际表明等距的晶面分别把基矢 a (或 $-a$), b (或 $-b$), c (或 $-c$)分割成多少等份,它们也是以 $|a|$, $|b|$, $|c|$ 为各轴的长度单位所求得的晶面截距的倒数值。如果晶面系和某一个轴平行,截距将为 ∞ ,所以相应的指数将为0,立方晶系中一些重要晶面的米勒指数如图1.3所示。

为了全面了解米勒指数,还需要注意以下几点:① 如果晶面与坐标轴的截距是负数,则在这个数的上面加负号表示负截距;② 由于旋转对称性,某些非平行的平面按旋转对称性可能是等价的,这时用同一组米勒指数来概括,并用花括号表示,例如在立方晶系中,指数 $\{100\}$ 表示6个晶面: (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$, $(00\bar{1})$;③ 在立方晶系中,晶向和晶面互相垂直时,晶向指数和晶面的米勒指数相同,例如晶向 $[100]$ 沿 x 轴,它垂直于 (100) 面。总结上述,我们得到下述符号表示的意义:

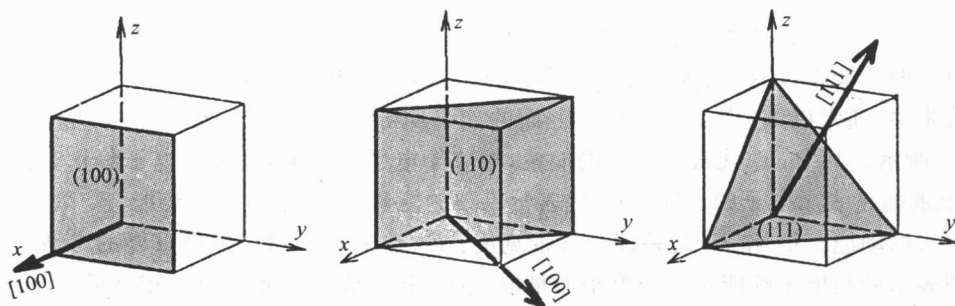


图 1.3 立方晶系中一些重要晶面的米勒指数及晶向

$(\bar{h}kl)$: 表示晶面与 x 轴的截距在原点的负方向。

$\{hkl\}$: 等价晶面。

$[hkl]$: 与晶面 (hkl) 垂直的晶向。

$\langle hkl \rangle$: 等价晶向。

价键模型

在图1.2中我们注意到,无论是金刚石结构或闪锌矿结构,晶体中的每个原子都有4个属于不同子晶格的最近邻原子,它们位于一个正四面体的顶点(图中粗黑线条所连接的那些小球)。金刚石晶格中每个原子有4个价电子,同4个最近邻原子共有,形成4个双电子键(即共价键)。但是在具有闪锌矿结构的GaAs晶体中,每个As原子(有5个价电子)的最近邻是4个Ga原子,而每个Ga原子有3个价电子;同样,每个Ga原子的4个最近邻是As原子。这些Ga-As原子对互相结合成键,本质上主要是共价性,但也有部分是离子性的(Ga^- 离子和 As^+ 离子之间的静电吸引)。当一个键被打破后,自由的电子离开原子,并留下一个空位,可以被相邻键的电子填补,结果形成晶格内空位的移动。空位可以看作是与电子相似的粒子,在即将叙述的能带模型中,这种虚拟的粒子就是价带中的空穴。空穴带正电,并在外电场作用下运动,运动的方向与电子相反。形象地讲,空穴的概念和液体中的气泡类