



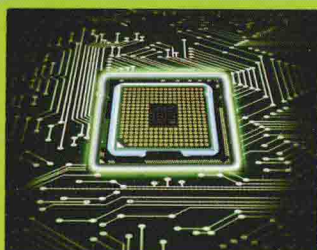
普通高等教育“十一五”国家级规划教材

电子材料及其应用技术系列规划教材

半导体 物理导论

INTRODUCTION TO
SEMICONDUCTOR PHYSICS

刘 诺 钟志亲 张桂平 陈金菊 编著



科学出版社

普通高等教育“十一五”国家级规划教材
电子材料及其应用技术系列规划教材

半导体物理导论

刘 诺 钟志亲 张桂平 陈金菊 编著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

本书是微电子技术领域内的半导体物理基础教程,系统介绍了半导体物理的基本概念、原理和应用。全书内容简明扼要、层次分明、示例与习题丰富、图解清晰、写作风格简约,既重视基础知识的讲解,又重视新知识的介绍,如异质结/能带工程、石墨烯、低维半导体的量子输运等。本书在内容安排上考虑到了前期“固体物理”、“量子力学”和后续“微电子器件/晶体管原理”教学的需要。

本书可作为电子科学与技术专业,特别是微电子科学与工程、微电子学、集成电路与集成系统等专业的半导体物理教材或参考书,可供相应专业的高年级本科生和研究生使用,也可作为相关研究人员的参考用书。

图书在版编目(CIP)数据

半导体物理导论 / 刘诺, 钟志亲, 张桂平, 陈金菊编著.

—北京: 科学出版社, 2014.6

电子材料及其应用技术系列规划教材

ISBN 978-7-03-040671-2

I. ①半… II. ①刘… ②钟… ③张… ④陈…

III. ①半导体—高等学校—教材 IV. ①047

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 102036 号

责任编辑: 杨 岭 黄明冀 / 责任校对: 杨悦蕾

责任印制: 余少力 / 封面设计: 墨创文化

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

成都创新包装印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014年6月第一版 开本: 787×1092 1/16

2014年6月第一次印刷 印张: 17

字数: 400千字

定价: 42.00元

前 言

本书系统介绍了微电子技术中的重要物理基础——半导体物理的基本概念、原理和基本应用。本书分为三篇，共9章。前两章为第一篇，介绍半导体物理的基础知识，包括半导体的晶体结构与价键模型、半导体的电子结构；第二篇由第3~6章组成，分别定性、定量地阐述半导体中的载流子，以及三维半导体的电输运和低维半导体的量子输运；第三篇由最后三章组成，从基础应用的角度系统阐述金属-半导体的接触、半导体表面效应、MIS结构及半导体的光吸收、光发射和光电效应。考虑到半导体物理近几十年的发展，本书所涉及的内容既有传统的以杂质工程为主体的半导体物理，又有涉及能带工程和低维半导体的量子输运的半导体物理，将经典与学科发展相结合。

本书既重视半导体物理的基础知识，又在第2章和第6章新增了半导体物理领域内的异质结/能带工程、石墨烯及低维半导体的量子输运等新进展和新概念。内容安排上考虑到部分专业对固体物理和量子力学的基础知识以及后续微电子器件/晶体管原理教学的需要，每章附有重点提示、相应的例题和习题，章末均附有小结、重要术语一览和参考文献，书后附有部分习题的答案。读者通过对本书内容的学习和掌握，既可以比较全面和深入地了解传统半导体物理的原理和应用，又能够结合具体的知识点学习半导体物理领域内的能带工程以及低维半导体的量子输运等新进展和新概念。本书作为半导体物理课程的教材和参考书，适合电子科学与技术学科的微电子科学与工程、微电子学、集成电路与集成系统等专业的半导体物理课程，或其他类似课程。参考学时为50~80学时。可分章节供相应专业的本科生和研究生使用，也可供有关研究人员参考。

本书由刘诺主编，负责全书的选题立项、编写实施、编辑出版等主要工作。其中，刘诺负责编写第1~5章，钟志亲负责编写第7、8章，张桂平负责编写第6章，陈金菊负责编写第9章。郑禄达、黄文俊、白海银等同学在绘制和处理图片上提供了帮助。

在本书编著过程中，李言荣院士从立题之初就一直给予关心和支持，李平教授对一些章节提出了宝贵意见和建议，并且在本书出版过程中给予了大力支持；恽正中教授也对本书的编写提出了宝贵意见；本书量子输运部分的编写得益于南京大学物理系熊诗杰教授在张桂平研究生学习阶段所给予的悉心指导；是德科技公司及和创联合科技(北京)有限公司在本书编写过程中也给予了帮助与支持，在此一并表示感谢。同时，本书的出版得到了国家自然科学基金委项目(项目批准号：11305029)、教育部特色专业“集成电路与集成系统”和四川省科技厅项目(项目批准号：2012HH0027)的支持。

从本书的策划到最后完稿付梓，科学出版社给予了很多支持和帮助，特别感谢贵社的黄明冀编辑对本书所做的大量工作。

由于作者水平有限，书中难免存在不足与不当之处，殷切希望广大读者批评、指正。

作者

2014年5月于成都

目 录

第一篇 半导体基础概要	1
第 1 章 半导体的晶体结构与价键模型	1
1.1 材料和晶体的分类	1
1.2 晶面、晶向和密勒指数	8
1.3 原子价键	10
1.4 三维晶体结构的定性描述	14
1.5 π 电子晶体结构简介	18
1.6 本章小结	21
第 2 章 半导体的电子结构	25
2.1 量子力学初步概要	25
2.2 晶体能带模型	31
2.3 金属、半导体和绝缘体	33
2.4 半导体的带隙结构	35
2.5 部分半导体的能带结构	43
2.6 有效质量	48
2.7 能带工程简介	53
2.8 本章小结	57
第二篇 半导体中的载流子	61
第 3 章 半导体中载流子的定性描述	61
3.1 热平衡态与非平衡态	63
3.2 杂质与杂质能级	64
3.3 载流子的产生	64
3.4 载流子的复合与俘获	70
3.5 本章小结	76
第 4 章 半导体中载流子的定量统计描述	79
4.1 载流子浓度	79

4.2	本征半导体	88
4.3	非本征半导体的载流子	92
4.4	非平衡载流子	105
4.5	陷阱	114
4.6	准费米能级	116
4.7	本章小结	118
第5章	三维半导体中载流子的电输运	122
5.1	漂移运动与漂移电流	122
5.2	扩散运动与扩散电流	138
5.3	电流密度方程与爱因斯坦关系	140
5.4	连续性方程	142
5.5	本章小结	146
第6章	低维半导体中载流子的量子输运	151
6.1	量子输运的基本概念和流守恒	152
6.2	电子紧束缚近似模型和周期结构中电子波函数	154
6.3	无序和安德森局域化	156
6.4	量子输运的常用计算方法	158
6.5	石墨烯和石墨烯纳米带的电学性质	160
6.6	本章小结	168
第三篇	半导体的结与光电效应	172
第7章	金属-半导体的接触	172
7.1	金属-半导体接触的能带图	172
7.2	肖特基势垒的整流特性	178
7.3	肖特基势垒的电流输运	180
7.4	势垒电容	186
7.5	肖特基二极管的应用	188
7.6	金属-半导体欧姆接触	189
7.7	本章小结	192
第8章	半导体表面效应和 MIS 结构	197
8.1	理想 MIS 结构的能带图以及电荷分布	197
8.2	空间电荷区	201
8.3	理想 MIS 结构的 C-V 特性	208
8.4	非理想 MIS 结构的 C-V 特性	218
8.5	场效应和表面电导	228

8.6	MOS 电容器的发展状况	229
8.7	本章小结	229
第 9 章	半导体的光吸收、光发射及光电效应	238
9.1	半导体与光的相互作用	238
9.2	直接带隙与间接带隙跃迁	241
9.3	半导体的光吸收	242
9.4	半导体的光发射	246
9.5	半导体的光电效应	251
9.6	本章小结	256
部分习题	参考答案	259
附录		261

第一篇 半导体基础概要

第1章 半导体的晶体结构与价键模型

目标:

- (1)描述材料和晶体的分类。
- (2)认识和理解晶体的基本特征——周期性和方向性。
- (3)理解晶列、晶面、正格子、布里渊区的意义。
- (4)理解和掌握基本的晶体结构的特征。
- (5)理解和掌握常见的原子价键模型：共价键、离子键及 π 键。

要分析、设计和制造高性能的半导体器件和集成电路，必须理解材料基本的物理和化学性质。本章主要阐述半导体的结构属性和价键模型。首先介绍材料和半导体的分类。半导体的电学特性不仅与其化学组成有关，也与其结构组成密切相关，特定的原子集合倾向于特定的晶体结构。所以，了解晶体结构非常重要。其次，阐述晶体的结合力——化学键。化学键可以帮助我们生动形象地定性理解原子与原子是如何结合形成晶体的，将其与第2章介绍的能带模型相结合，就能够形象地理解半导体中的各种跃迁，为进一步研究半导体中的电输运奠定基础。

1.1 材料和晶体的分类

金属、半导体和绝缘体是制造半导体集成电路的材料。对它们进行基本分类有助于读者了解材料的基本特点和基本知识，认识其独特性能的来源并展望新性能的材料。传统上，人们习惯按照固体、液体和气体将材料分为三态，即物质三态。对物质更深入的分类则是按照组成物质的原子和分子的排列方式的规律性来加以划分。

1.1.1 固体分类

晶体管是构成集成电路的重要组成单元，是由固体材料构成的。因此，固体物质在集成电路中扮演了至关重要的角色。固体物质可以从以下几个方面来进行分类。

1. 固体的几何分类

从几何形态上, 固体分为非晶、多晶和单晶三种基本类型, 如图 1-1 所示。其基本差异在于有序化区域的大小, 即原子在周期性晶格位置上的位移程度。周期性空间点阵是一个三维点阵。单晶材料具有几何上有序的周期性。多晶材料是在多个原子或分子尺度内作有序分布, 其有序化区域称为单晶区域, 又称晶粒。晶粒与晶粒取向随机地结合在一起, 晶粒与晶粒之间的边界叫晶粒间界。非晶材料是无定型的材料, 它只在几个原子或分子尺度内作有序分布, 不能形成晶粒。因为没有晶粒间界, 所以单晶材料的电学性能比非单晶的好。

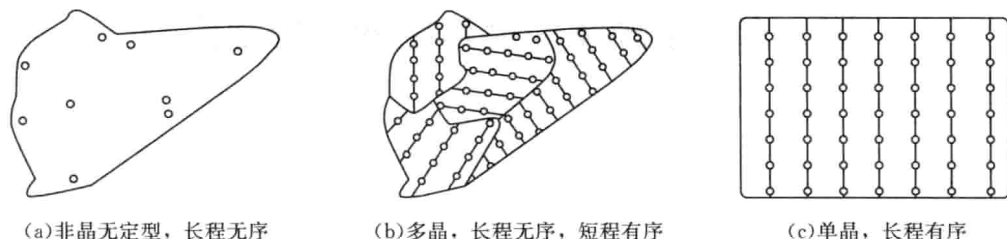


图 1-1 晶体的三种几何类型示意图

当单晶中出现杂质、位错和缺陷时, 会使晶体发生畸变, 周期性遭到破坏。单晶中出现的人为或非人为引入的其他元素原子被称为杂质。杂质工程是通过掺入特定杂质来调控半导体的导电类型和电导能力的工程, 它在半导体中具有极其重要的意义。

从晶体维度的角度而言, 除了经典的三维结构材料(bulk), 在最近几十年, 晶体又发展出了二维结构(two dimensional, 2D)的超晶格、纳米面, 一维结构(one dimensional, 1D)的纳米线、纳米管、纳米带, 以及零维结构(zero dimensional, 0D)的量子点等(图 1-2)。组成元素相同但几何维度不同的材料呈现出不同的电学性质。以硅纳米线为例, 虽然组成元素相同, 但其电子性质会因彼此的晶体取向、半径、长度、横截面的形貌、应力等因素不同而不同。它们的电学性质也各具特点。本书重点论述的是三维结构的微电子半导体。

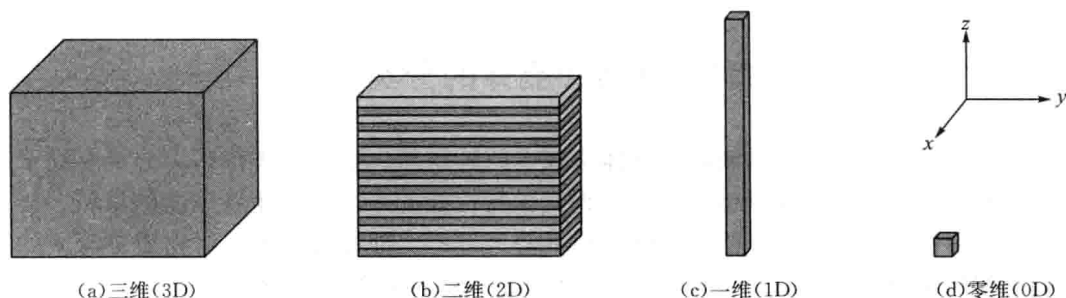


图 1-2 4 种维度结构的晶体

2. 固体的纯度分类

当单晶中出现替位原子、间隙原子等外来原子时, 单晶的纯度发生变化, 单晶原子的周期性势场被改变。外来的原子称为杂质, 它们将改变单晶的电学性质。因此, 从纯度分类的角度来说, 固体可分为本征和非本征两类, 前者指理想的、无杂质缺陷的、由

周期性晶格构成的材料；后者则是指纯度被破坏、有杂质的材料。半导体杂质工程正是利用了特定杂质能够施予或获得电子的作用，达到了调制半导体的导电类型和电导率的目的，赋予了本征半导体生命力。掺杂半导体有两种导电类型，一种是以电子导电为主的 n 型半导体，另一种则是以空穴导电为主的 p 型半导体。

半导体还可分为无机半导体和有机半导体。有机半导体是 20 世纪末开始发展起来的新型半导体，其学科是一个年轻、重要且发展充满生机的学科分支。本书将主要讨论无机微电子半导体物理。

3. 固体的键合力性质分类

从原子束缚的原子力的角度来看，晶体可以分为 5 类：惰性气体晶体、离子晶体、共价晶体、金属晶体和氢键晶体(表 1-1)。

表 1-1 晶体按键合力性质的分类

晶体	键能/eV	举例
惰性气体晶体	>10	低温固体
离子晶体	8~10	NaCl
共价晶体	0.5~5	Si、Ge、C
金属晶体	—	Mg、Al、Cu
氢键晶体	0.1	H ₂ O, DNA

4. 固体的电学性质分类

电导率和电阻率是固体的电子学应用最重要的参数，它表征物质中电流流过的难易程度，其单位分别是 S/m 和 $\Omega \cdot m$ 。从电流流过物质的难易程度来说，固体可以分为超导体、良导体、导体、半导体、半绝缘体和绝缘体。金属是导体，在温度升高时，其电阻变大，而半导体的电阻则变小，这是它们在电导能力方面的基本差异。表 1-2 所示为超导体、良导体、导体、半导体、半绝缘体和绝缘体的电导率范围。

表 1-2 导体、半导体和绝缘体的电导率范围

材料类别	电导率/(S · cm ⁻¹)
超导体	∞
良导体	$10^6 \sim 10^5$
导体	$10^5 \sim 10^2$
半导体	$10^{-9} \sim 10^2$
半绝缘体	$10^{-14} \sim 10^{-10}$
绝缘体	$10^{-22} \sim 10^{-14}$

5. 半导体的组分分类

根据组成元素，半导体可按图 1-3 所示来分类。其中无机半导体可分为元素半导体和化合物半导体。前者由一种元素构成，后者由两种或两种以上元素构成。所以，化合物半导体又进一步划分为二元化合物、三元合金、四元合金等。由Ⅲ族元素和Ⅴ族元素

结合得到Ⅲ-V族化合物半导体，如GaAs；Ⅱ族元素与Ⅵ族元素结合得到Ⅱ-Ⅵ族化合物半导体，如ZnTe；Ⅳ族元素与Ⅵ族元素结合就得到Ⅳ-Ⅵ族化合物半导体，如PbS。两种Ⅲ族元素和一种Ⅴ族元素结合还能得到Ⅲ-V族合金半导体，如AlGaAs。

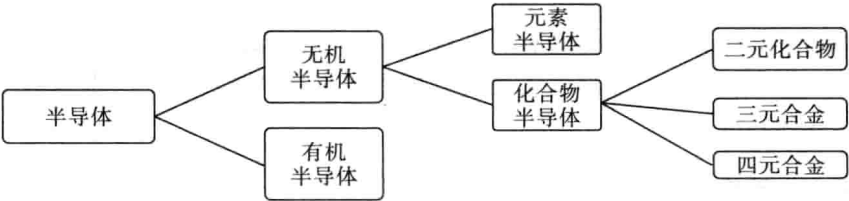


图 1-3 半导体分类

从半导体材料的发展阶段来看，半导体材料又可分为第一代半导体、第二代半导体、第三代半导体及各种低维半导体(表 1-3)。第一代半导体指 Ge、Si 元素半导体。第二代半导体如 GaAs、InP 等是伴随着 IT 技术的飞速发展而诞生的，其载流子具有比第一代半导体更高的迁移率，适用于高速、高频以及发光电子器件，是高性能微波、毫米波及发光器件的重要的优良材料。第三代半导体材料又被称为宽禁带半导体材料(禁带宽度大于 3.2 eV)，如 SiC、GaN 等，它们也叫做高温半导体材料。其特点在于具有宽的禁带宽度、高的击穿电场、高的热导率、高的电子饱和速率及更高的抗辐射能力，适用于高温、高频、抗辐射及大功率的器件。

表 1-3 半导体材料

名称		类型及元素	归属族	禁带宽度/eV
第一代 半导体	元素半导体	Ge	ⅣA族	0.66
		Si	ⅣA族	1.12
第二代 半导体	化合物半导体	GaAs	ⅢA-ⅥA族	1.46
		InSb	ⅢA-ⅥA族	0.18
		GaAsAl	ⅢA-ⅥA族	低于 2.2
		GaAsP	ⅢA-ⅥA族	低于 2.2
		ZnSe	ⅡB-ⅥA族	2.58
		ZnTe	ⅡB-ⅥA族	2.28
		CdS	ⅡB-ⅥA族	2.41
		CdSe	ⅡB-ⅥA族	1.74
		CdTe	ⅡB-ⅥA族	1.44
		HgS	ⅡB-ⅥA族	2.5
		HgSe	ⅡB-ⅥA族	0.15
		HgTe	ⅡB-ⅥA族	0.15
		CuI	I B-ⅦA族	3.1
		固溶体半导体 (Ge-Si、GaAs-GaP)		
		非晶态半导体		
		有机半导体 (酞菁、酞菁铜、聚丙烯腈)		

续表

名称		类型及元素	归属族	禁带宽度/eV
第三代 半导体	宽禁带半导体 ($E_g \geq 3.2\text{eV}$)	SiC	Ⅳ A 族	2.36, 3.05, 3.23
		GaN	Ⅲ A-Ⅴ A 族	3.4
		ZnO	Ⅱ B-Ⅵ A 族	3.24
		AlN	Ⅲ A-Ⅴ A 族	6.42
		金刚石	Ⅳ A 族	5.47
		ZnS	Ⅱ B-Ⅵ A 族	3.54, 3.8

1.1.2 晶格 —— 正格子、倒格子与布里渊区

1. 晶格

晶体的原子是一种周期性分布的点阵，这就是空间点阵，又叫晶格或者正格子。晶体的物理、化学和电学性质都由空间点阵的分布状况和组成元素来决定。格点是描述原子排列的点。图 1-4 分别给出了一种无限二维和三维晶格中的格点、基元与空间点阵的排列。晶体点阵中的格点代表基元中某个原子的位置或基元质心的位置，也可以是基元中的任意一个等价的点。

➤ 晶体的原子是一种周期性分布的点阵，这就是晶格(正格子)。

➤ 能复制整个晶体的一小部分晶体称为晶胞。晶胞不是唯一的。最小的晶胞称为原胞。

当晶格点阵中的格点被具体的基元代替后就形成实际的晶体结构。晶格点阵与实际晶体结构的关系可总结为：晶格点阵+基元=实际晶体结构。晶格由一组原子周期性重复排列而成，能复制整个晶体的一小部分晶体称为晶胞。晶胞可以有多重结构，它不是唯一的，图 1-4(a)中给出了一种二维晶格中的 4 种可能的晶胞。任一晶胞平移即构成整个晶格。最小的晶胞称为原胞，原胞周期性重复就形成了晶格。对三维晶格也类似。图 1-4(b)中的每个格点在某个方向上平移 $\mathbf{a}_1$ ，在另一个方向上平移 $\mathbf{a}_2$ ，就形成无限二维晶格；若在第三个方向上平移 $\mathbf{a}_3$ ，形成的就是无限三维晶格。原胞的基矢 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 和 $\mathbf{a}_3$ 由直角(cartesian)坐标中的 (x, y, z) 得到，它们可以是非正交的矢量。晶格中的每个等效的格点矢量 $\mathbf{R}$ 均可用基本矢量 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 和 $\mathbf{a}_3$ 得到，其中， n_1 、 n_2 和 n_3 是整数。

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$$

(1-1)

对于三维晶格，原胞具有最小的体积；对于二维晶格，原胞的面积最小；对于一维晶格，原胞具有最短的长度。基元内所含的原子数等于晶体中原子的种类数。

晶格中格子的每个格点的情况是完全相同的。晶格又分为单式格子和复式格子。由一种原子组成的晶格称为单式格子；当晶格由几种原子组成，每种原子组成了一个子格子，晶格由几个子格子套构而成，就称为复式格子。

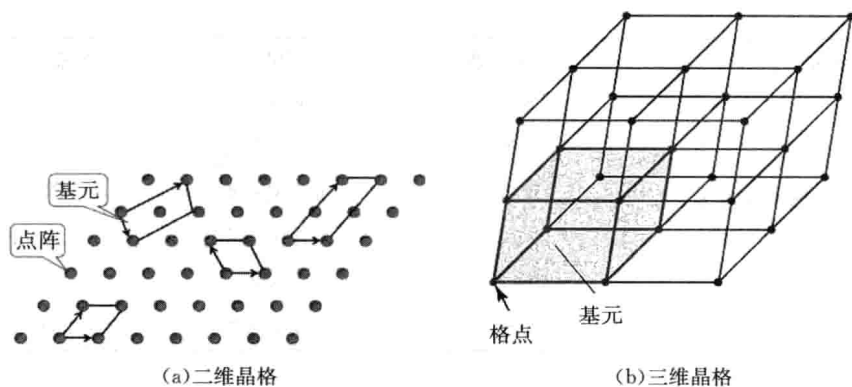


图 1-4 格点、基元与空间点阵的排列

2. 倒格子

因为晶格的周期性特征, 所以其物理量也具有周期性。由正格子的基矢($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$)定义三个新的称为倒格子的矢量($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$):

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)} \end{aligned} \quad (1-2)$$

其中, $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ 是晶格原胞的体积。倒格子与正格子之间有如下关系:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (1-3)$$

显然, 倒格子与正格子之间有一一对应关系。

晶面之间的面间距则为

$$d = \frac{2\pi}{h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3} \quad (1-4)$$

由该式可知, 晶面指数(hkl)小的晶面系, 相邻晶面之间间距较大。

设 $V(\mathbf{r})$ 为以($\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$)为周期的三维周期函数, 即

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3) \quad (1-5)$$

引入倒格子, 则可以将 $V(\mathbf{r})$ 展开为傅里叶级数。

倒格子组成的空间实际上是状态空间, 在晶体的 X 射线衍射照片上的斑点, 实际上就是倒格子所对应的点子。

3. 基本的晶体结构

图 1-5 显示了三种基本晶体结构的晶胞和六角密排结构。晶胞的长度就是晶格常数。简立方(simple cubic)结构的 8 个顶角各有一个原子, 每个顶角上的原子为相邻的 8 个晶格所共有, 所以简立方晶胞含有一个原子。没有实际晶体是简立方结构。体心立方(body-centered cubic)和面心立方(face-centered cubic)结构能在简立方的基础上表示。体心立方结构在简立方的基础上, 其立方中心还有一个原子, 则其原胞含有两个原子

(图 1-6(b)); Li、Na、K、Rb、Cs、Fe 等金属都是体心立方。对于面心立方结构, 每个面上只含有 $1/2$ 个原子, 所以其晶胞由 4 个原子构成(图 1-6(c))。Cu、Ag、Au、Al 都是面心立方结构。体心立方和面心立方的立方单元都不是最小的周期性单元。六角密排结构的上下两个底面是相同的, 中间的三个原子为另一层, 这是一种密排结构, 其晶格常数为 a 、 b 和 c , 且 $a=b$ (图 1-5(d))。Be、Mg、Zn、Cd 等都属于这种结构。图 1-6 给出了三种基本晶体结构中单胞的有效原子数。

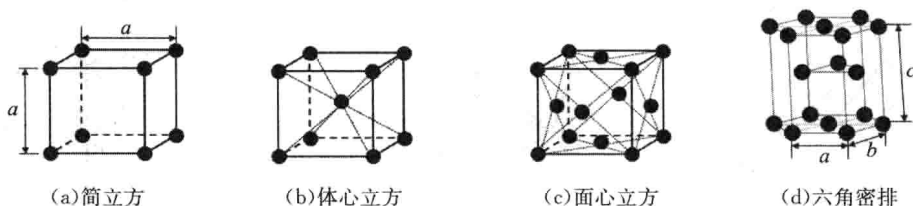


图 1-5 三种基本的晶体结构及六角密排

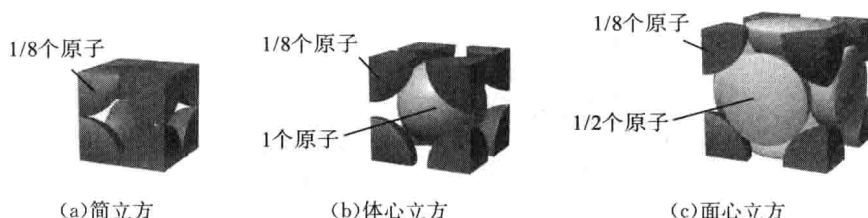


图 1-6 三种基本晶体结构中单胞的有效原子数

例 1: 计算简立方原胞的原子体密度。

解: 原子体密度 $= \frac{1}{a^3} = a^{-3}$

4. 布里渊区

晶体是周期性结构, 其电子的哈密顿(Hamiltonian)量的势能 $V(\mathbf{r})$ 也是晶格矢的周期性函数, 对一维晶格,

$$V(x) = V(x + na) \quad (1-6)$$

式中, a 为晶格常数; n 为整数。晶体中的电子遵循的薛定谔(Schrödinger)方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1-7)$$

布洛赫(Bloch)定理证明, 满足薛定谔方程的电子的波函数具有如下形式:

$$\psi_k(x) = u_k(x)e^{i2\pi kx} \quad (1-8)$$

其中, k 为波矢, 且

$$u_k(x) = u_k(x + na) \quad (1-9)$$

布里渊区(Brillouin zone)定义为倒格子基矢 $\mathbf{b}$ 构成的基胞(又称为 wigner-seitz 基胞)。

由于 $E(\mathbf{k})$ 是随 $\mathbf{k}$ 周期性重复的函数, 周期性的单元就由布里渊区决定。第一布里渊区的意义在于, 其他布里渊区, 如第二布里渊区、第三布里渊区等布里渊区的电子能量状态都可以通过周期性移动合并到第一布里渊区。因此, 第一布里渊区又名简约布里渊区。此外, 各个布里渊区的形状都不相同, 且每个布里渊区的体积都不相等。晶体结构

的布拉菲点阵虽然相同,但其布里渊区的形状却不会相同。

图 1-7 给出的是面心立方、体心立方、简立方、六方及石墨烯的第一布里渊区。图中同时标出了高对称点和对称线。例如, Γ 点表示布里渊中心($k=0$)的点, L 点表示沿 $[111]$ 轴的边缘点, X 点表示沿 $[010]$ 轴的边缘点。

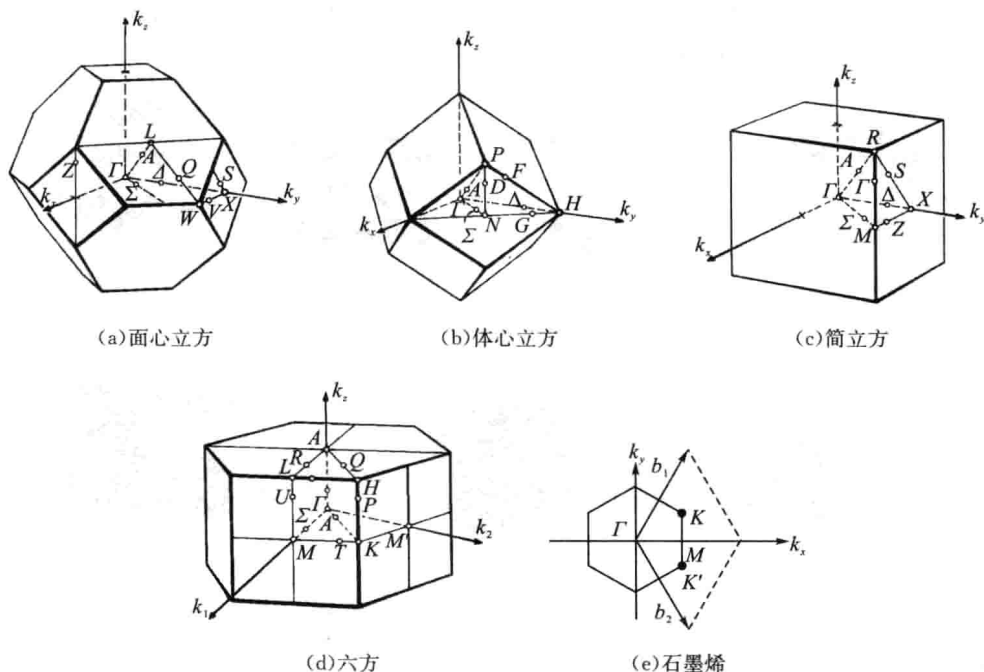


图 1-7 第一布里渊区

1.2 晶面、晶向和密勒指数

➤ 方向性是晶体的重要特性。三维晶体的晶向和晶面用密勒指数标记。

方向性是晶体的一个基本而重要的特征,晶体在不同的方向具有不同的性质,这就是晶体的各向异性性质。密勒(Miller)指数是用来标记晶体的晶向和晶面的,分别是晶面指数(hkl)、晶向指数 $[hkl]$ 、等效晶向指数 $\langle hkl \rangle$ 和等效晶面指数 $\{hkl\}$ 。

1.2.1 晶面指数

采用晶面在三个坐标轴上截距(x, y, z)的倒数($1/x, 1/y, 1/z$)来确定晶面指数的确立方法如下:

(1)在晶面与坐标轴相交的情况下,以晶格常数为单位,确定晶面在三个坐标轴上的截距(x, y, z)的数值。

(2)分别取截距的倒数($1/x, 1/y, 1/z$)。

(3)将($1/x, 1/y, 1/z$)乘以最小公分母,换算为三个最小的整数值。

例如, 图 1-8(a)中的简立方的阴影面在三个坐标轴上的截距是 $(1, \infty, \infty)$, 其晶面指数就是 (100) 。

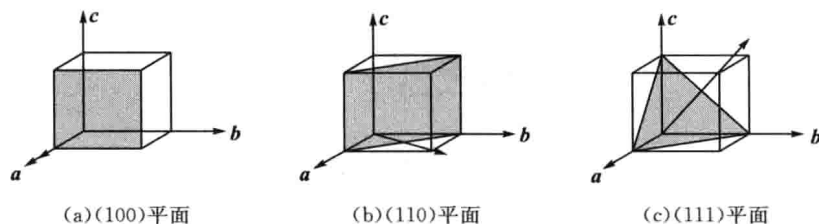


图 1-8 简立方的三种晶面

常用的晶面指数 (100) 、 (110) 和 (111) 都是很重要的晶面。对于体心立方和面心立方晶格, 它们的晶面、晶向指数都是以立方基胞为基矢, 采用简立方晶格的结果。图 1-9给出了金刚石结构的 (100) 、 (110) 、 (111) 面。图中显示, 晶面指数小的晶面系, 晶面之间的间距较大; 由于原子体密度不变, 所以这种晶面上的原子面密度比晶面指数大的晶面上的原子面密度要大。图 1-9(c)中的 (111) 面是一个双层密排面, 双层密排面的间距较小, 表明这两层内部有较强的相互作用。Si (110) 面是一个很重要的晶面。

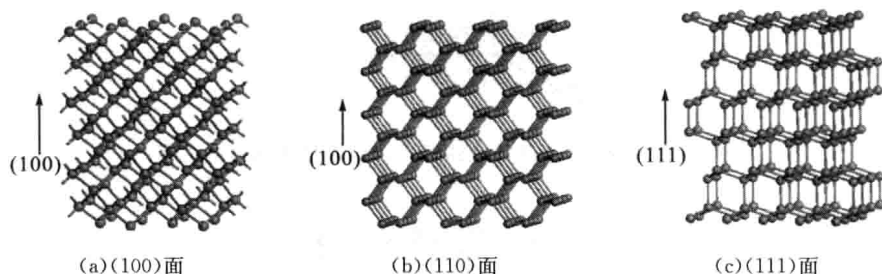


图 1-9 金刚石结构的三个晶面

1.2.2 晶向指数

晶向指数描述特定的晶向, 采用三个整数表示该方向的某个矢量的分量。以简立方为例, 图 1-8(a)中阴影面的晶向指数为 $[100]$, 图 1-8(b)的晶向指数为 $[110]$, 图 1-8(c)的则为 $[111]$ 。对于简立方结构, 因为晶格的对称性, $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 、 $[\bar{1}00]$ 、 $[0\bar{1}0]$ 和 $[00\bar{1}]$ 这 6 个晶面的性质完全相同, 则用 $\langle 100 \rangle$ 来统称这些等效的晶向; 简立方沿体对角线的 8 个晶向也是等效的, 标为 $\langle 111 \rangle$ 晶向; $\langle 110 \rangle$ 则表示了面对角线上的 12 个等效晶向。简立方的晶向 $[hkl]$ 与晶面 (hkl) 是垂直的关系, 但对于其他结构则不一定。

例 2: 对于一个立方晶格,

- (1) 晶面和方向矢量如图 1-10 所示, 求其密勒指数。
- (2) 画出晶面为 (101) 、晶向为 $[101]$ 的晶面和方向矢量。

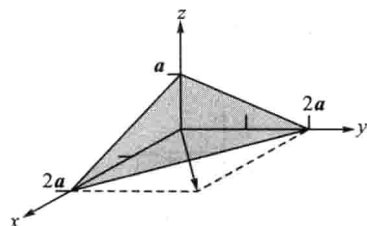
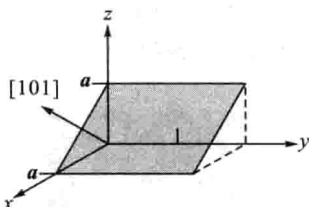


图 1-10 某立方晶格的晶面和方向矢量

解：(1)晶面在三个坐标轴上的截距为 $(x, y, z) = (2, 2, 1)$ ，分别取截距的倒数为 $(1/2, 1/2, 1)$ ；将 $(1/x, 1/y, 1/z)$ 乘以最小公分母 2，换算为三个最小的整数值，即得到其晶面的密勒指数为 (112) 。

(2) (101) 截距的倒数为 $(1, 0, 1)$ ，则晶面在三个坐标轴上的截距 $(x, y, z) = (1, \infty, 1)$ 。此晶面平行于 y 轴，在 a 点与 x 轴相交，在 a 点与 z 轴相交，其方向矢量是 $[101]$ ，如图 1-11 所示。

图 1-11 晶面为 (101) 、晶向为 $[101]$ 的晶面和方向矢量

1.3 原子价键

特定的原子结合在一起形成特定的晶体结构。热平衡下的系统的总能量是最小的。原子间的相互作用的类型就是原子价键。原子之间的相互作用趋于形成满价壳层，如共价键和离子键。这种相互作用需要用量子力学来加以描述。原子价键模型更多地被用于化学领域，它是直观、清晰而生动的图像，与第 2 章将要介绍的能带模型结合，读者就能够形象、直观地理解半导体中的载流子的跃迁。限于本书的讨论范畴，这里从定性的角度来理解原子价键。主要的原子价键分类见图 1-12。原子价键模型在化学中被广泛使用，其特点在于能够从定性的角度直观、形象地描述原子的结合，给出原子与空间的有关描述。键的强度能说明固体中原子与原子之间结合力的强弱。主要的原子价键有共价键、离子键、 π 键和金属键。实际晶体的结合以这几种价键为基础，一种晶体可以是几种价键的混合结果，具有复杂的性质。在混合键中，不同的价键之间相互关联。实际晶体的价键可以具有两种价键之间的过渡和耦合性质。原子的结合形式与其结构、物理性质和化学性质彼此关联。

由定量理论可以得到电子的势能分布，从而得到能带模型。能带模型将在第 2 章作详细叙述。因为键模型没有给出电势和电场的空间分布，所以，它的应用范围有限，不能作为发展定量理论的起点。作为一种理想化的模型，键模型对于理解能带模型有一定的帮助，它的特点是直观、易于理解。