



普通高等教育“十二五”规划教材



电子科学与技术专业规划教材

半导体物理学

简明教程

孟庆巨 胡云峰 敬守勇 等编著



电子工业出版社

PUBLISHING HOUSE OF ELECTRONICS INDUSTRY <http://www.phei.com.cn>

014042630

047-43
03

普通高等教育“十二五”规划教材
电子科学与技术专业规划教材

半导体物理学简明教程

孟庆巨 胡云峰 敬守勇 编著
陈 卉 张梅玲 曹亚安



047-43
03

电子工业出版社

Publishing House of Electronics Industry



北航 C1729061

082820210

内 容 简 介

本书以简明的形式介绍了半导体的基本物理现象、物理性质、物理规律和基本理论。内容包括：晶体结构与晶体结合、半导体中的电子状态、载流子的统计分布、电荷输运现象、非平衡载流子、半导体表面、PN结、金属-半导体接触、半导体的光学性质等。

本书可作为高等学校微电子学、光电子学等电子科学与技术各专业的教材，也可供有关专业研究生和从事微电子、光电子等专业的研究人员和工程技术人员参考。

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。

图书在版编目 (CIP) 数据

半导体物理学简明教程 / 孟庆巨等编著. —北京：电子工业出版社，2014.6
电子科学与技术专业规划教材
ISBN 978-7-121-22630-4

I. ①半… II. ①孟… III. ①半导体物理学—高等学校—教材 IV. ①047

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2014) 第 045285 号

责任编辑：韩同平 特约编辑：李佩乾

印 刷：涿州市京南印刷厂

装 订：涿州市京南印刷厂

出版发行：电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编：100036

开 本：787×1092 1/16 印张：15.25 字数：400 千字

印 次：2014 年 6 月第 1 次印刷

印 数：2 500 册 定价：45.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题，请向购买书店调换。若书店售缺，请与本社发行部联系，联系及邮购电话：(010) 88254888。

质量投诉请发邮件至 zltz@phei.com.cn，盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线：(010) 88258888。

前 言

半导体物理学是研究半导体的物理现象、物理规律、物理性质和理论的科学。高等学校本科生开设半导体物理学课程的目的是为学生后续学习半导体器件、微电子器件和光电子器件等课程准备必备的基础知识。半导体物理学也是从事电子科学与技术相关专业的工程技术人员和研究工作者必备的基础知识。打好或者说提供这两个基础，应该就是大学半导体物理学的课程目标。

本书编者通过多年来在不同院校讲授本科生和研究生半导体物理学课程的教学实践，以及对一些一、二、三本不同类型的高等院校半导体物理学课程教学情况的了解，深切地感觉到随着高等学校教学改革的不断深入，在本科生半导体物理学教学中，教师和学生越来越迫切地希望有一些能够适应教学和教改实际需要的、教师能够教得明白、学生能够学得懂的简明的半导体物理学教材出现。所谓简明：

第一，教材应该强调和突出对半导体的**基本物理现象、基本物理性质、基本物理规律和基本理论（四个基本）**的介绍。

第二，在内容选取上，应该求需而不求多，避免包罗万象；面对半导体物理学的教学学时日减（目前绝大部分院校该课程为 56~64 学时）的实际情况，在尊重传统的半导体物理学教材的知识系统性的同时，本书没有编入那些较为专题性的内容。这些内容对于很多院校的学生来说，将来在实际工作中很少涉及或基本上不涉及。有些内容将由专门的后续课程介绍，没有必要重复。

第三，应该便于教师教和学生学。“便于教师教”，就是便于教师确定“教什么和怎么教”，有助于教师确定全书乃至每一节的教学内容，明确教学重点。“便于学生学”就是便于学生明确“学什么和怎么学”，有助于学生明确每一节的学习内容和学习重点。还要有助于学生自学和检验学习效果。基于这一点考虑，本书每节开头提出了教学要求。教学要求以条目列出了本节的基本内容以及应该掌握的程度[分为了解、理解（熟悉）和掌握三个层次]。教师可以根据教学要求确定讲授的内容和教学重点，学生可以根据教学要求检查自己的学习质量（不同院校，不同专业可灵活确定教学要求的内容）。每节后面给出本节的小结。小结提炼出了本节的知识点，使本节所学内容和重点一目了然。在小结中基本上给出了教学要求中所列举的问题的答案，以便于学生检验学习效果。此外，教材结构应力求严谨、合理，表达应力求准确、正确。

以上几点就是编者编写本教材所遵循的原则和追求的目标，也正是为了贯彻上述指导思想，本书命名为《半导体物理学简明教程》。

本教材中安排了较多的例题。这些例题的目的在于帮助学生对“四个基本”的理解和训

练。每章给出的思考题和习题的目的也是如此，不求难度和深度。

本书由吉林大学（电子科技大学中山学院）孟庆巨，电子科技大学中山学院胡云峰、陈卉，深圳大学敬守勇，兰州理工大学张梅玲，南开大学曹亚安编著，全书由孟庆巨教授统编定稿。

参加本书部分编写工作的还有：空军航空大学孟庆辉教授，吉林大学张大明教授、刘海波教授、孙彦峰副教授、陈长鸣博士、吴国光博士和五邑大学李阳副教授等。

由于本书编写时间仓促，许多细节尚需推敲，加之编者水平所限，书中难免有错、漏之处，恳请读者和有关专家不吝指正。

本书编写过程中，吉林大学电子科学与工程学院张宝林教授提出了很好的建议，电子科技大学中山学院副院长刘常坤教授给予了热情的鼓励和支持，电子科技大学中山学院教务处周艳明、池挺钦、沈慧、符宁，电子信息学院副院长杨健君等同志为本书的编写提供了良好的条件，在此一并表示衷心的感谢。

编著者

本书文字符号说明

A	面积, 复振幅	\mathcal{E}_{ox}	绝缘体内的电场强度
a	晶格常数	F	力
a_1, a_2, a_3	元基矢量	$f(E)$	费米-狄拉克分布函数
C	真空中的光速, 电容	G	载流子产生率, 光电导增益因子, 电导
C_D	扩散电容	g_A	受主能级的基态简并度
C_{FB}	归一化平带电容	g_D	施主能级的基态简并度
C_n	电子的俘获系数	g_k	k 空间状态密度
C_{ox}	绝缘层电容	G_L	光生电子-空穴对的产生率
C_p	空穴的俘获系数	G_n	电子产生率
C_s	半导体表面电容	G_p	空穴产生率
C_T	耗尽层电容、势垒电容或过渡电容	H	哈密顿算符
D	扩散系数	h	普朗克常数
D_n	电子的扩散系数	$\hbar \left(= \frac{h}{2\pi} \right)$	约化普朗克常数
D_p	空穴的扩散系数	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$	动能算符
E	能量	$\frac{\hbar}{i} \nabla$	动量算符
E_A	受主能级	I	电流, 光强
E_c	导带底能量	I_d	扩散电流
E_D	施主能级	I_D	太阳能电池暗电流
E_{exc}^n	激子能级	I_0	饱和电流
E_F	费米能级	I_F	PN 结正向电流
E_{FM}	金属费米能级	I_{FP}	P^+N 结正向空穴扩散电流
E_{Fn}	电子准费米能级	I_G	空间电荷区产生电流
E_{Fp}	空穴准费米能级	I_L	短路光电流
E_{FS}	半导体费米能级	I_n	电子电流强度
E_g	禁带宽度	I_p	空穴电流强度
E_{g0}	0K 时的 E_g 值	I_R	正偏复合电流
E_i	本征费米能级, 禁带中央能量	j	电流密度矢量
E_{i0}	半导体体内本征费米能级	j_n	电子电流密度
ΔE	电离能	j_p	空穴电流密度
ΔE_A	受主电离能	j_{pdif}	空穴扩散电流密度
ΔE_D	施主电离能	j_{pdrf}	空穴漂移电流密度
E_i	复合中心杂质能级	j_{ndif}	电子扩散电流密度
E_v	价带顶能量	j_{ndrf}	电子漂移电流密度
\mathcal{E}	电场强度矢量	k	波矢量
\mathcal{E}_m	PN 结中的最大电场强度		
\mathcal{E}_s	半导体表面附近的电场强度		

K	玻耳兹曼常数	n_t	复合中心能级上的电子浓度
K_n	倒格矢	Δn	非平衡电子浓度
L	长度	p	空穴浓度
L_D	非本征德拜 (Debye) 长度	p	电子的准动量
L_n	电子扩散长度	p_0	热平衡状态空穴浓度
L_p	空穴扩散长度	p_A	中性受主杂质上的空穴浓度, 中性受主浓度
M	雪崩倍增因子	p_{n0}	N 区热平衡少子空穴浓度
m	真空自由电子质量	p_n	N 区少子空穴浓度
m_c	电导有效质量	p_p	P 区多子空穴浓度
m_{dn}	导带能态密度有效质量	p_{p0}	P 区热平衡多子空穴浓度
m_{dp}	价带能态密度有效质量	Δp	非平衡空穴浓度
m_l	纵有效质量	Q_B	空间电荷区体电荷
m_n^*	电子的有效质量	Q_{ox}	二氧化硅层等效面电荷
m_n	各向同性电子有效质量	Q_f	氧化物固定电荷
m_p^*	空穴的有效质量	Q_i	反型层中单位面积下的可动电荷
m_{pl}	轻空穴有效质量	Q_{it}	界面陷阱电荷
m_{ph}	重空穴有效质量	Q_m	可动离子电荷
m_r^*	电子和空穴的有效折合质量	Q_M	金属表面空间电荷区单位面积下的电荷
m_t	横有效质量	Q_{ot}	氧化物陷阱电荷
N	晶体总原胞数	Q_s	半导体表面单位面积下的空间电荷
N_1, N_2, N_3	沿 a_1, a_2, a_3 三个方向的原胞数	Q_{sp}	N 区少子空穴存储电荷
N_A	受主浓度	Q_{sn}	P 区少子电子存储电荷
N_A^-	电离受主浓度	q	电荷
N_c	导带有效能态密度	q	格波波矢量, 声子的波矢
$N_c(E)$	导带能态密度	$q\phi_b$	肖特基势垒高度
N_D	施主浓度	$q\phi_m$	金属功函数
N_D^+	电离施主浓度	$q\phi'_m$	金属修正功函数
N_t	复合中心杂质浓度	$q\phi_s$	半导体功函数
N_v	价带有效能态密度	$q\phi'_s$	半导体修正功函数
$N_v(E)$	价带能态密度	$q\psi_0$	空间电荷区势垒高度
n	电子浓度, 折射率, 主量子数	R	电阻, 反射系数, 复合率, 反射率, 理查森 (Richardson) 常数, 霍尔系数
n_0	热平衡状态电子浓度	R^*	有效理查森常数
n_D	中性施主杂质上的电子浓度, 中性施主浓度	R_m	晶格矢量
n_i	本征载流子浓度	R_n	N 型半导体的霍尔系数, 电子的俘获率
n_n	N 区多子电子浓度	R_p	P 型半导体的霍尔系数, 空穴的俘获率
n_{n0}	N 区热平衡多子电子浓度	r	复合系数
n_p	P 区少子电子浓度	S	表面复合速度
n_{p0}	P 区热平衡少子电子浓度	S_n	电子激发概率
n_s	半导体表面电子密度		

s_n 电子流密度
 s_{ndif} 电子扩散流密度
 s_{ndrf} 电子漂移流密度
 s_p 空穴流密度
 s_{pdif} 空穴扩散流密度
 s_{pdrf} 电子漂移流密度
 S_p 空穴激发概率
 T 热力学温度, 透射率
 U 净复合率, 净俘获率
 U_{max} 最大复合率
 U_n 电子的净俘获率
 U_p 空穴的净俘获率
 U_s 表面复合率
 u 位移
 V 电压, 体积
 V_R 反向偏压
 V_n 半导体的体电势
 V_{oc} 开路电压
 V_{FB} 平带电压
 V_G 外加电压, MOS 栅压
 V_T 热电势, $V_T = KT/q$
 $V(r)$ 势能函数, 势能算符
 V_{ox} 氧化层的电压
 V_{TH} 阈值电压
 V 静电势
 V_D 内建电势差
 V_s 表面势
 V_{si} 强反型表面势
 v 速度
 v_n 平均漂移速度
 v_{th} 电子的平均热运动速度
 W 空间电荷区 (耗尽区) 宽度
 x_d 耗尽层宽度
 x_{dm} 耗尽层最大宽度
 x_l 反型层宽度
 x_{ox} 绝缘层厚度
 α 吸收系数
 $\alpha(x)$ 电子的电离系数
 β 禁带宽度的温度系数, 量子产额
 $\beta(x)$ 空穴的电离系数
 ϵ 介电常数

ϵ_0 真空介电常数
 ϵ_r 相对介电常数
 ϵ_{ox} 二氧化硅介电常数
 ϵ_s 半导体的介电常数
 θ_n 电子的霍尔角
 θ_p 空穴的霍尔角
 κ 消光系数
 λ 波长
 μ 载流子迁移率
 μ_c 电导迁移率
 μ_l 纵向迁移率
 μ_n 电子迁移率
 μ_p 空穴迁移率
 μ_t 横向迁移率
 ν_p 声子频率
 ν 光波频率
 σ 电导率
 σ_n 电子的电导率
 σ_p 空穴的电导率
 τ 弛豫时间, 寿命
 τ_a 平均自由时间
 τ_d 介电弛豫时间
 τ_n 电子寿命
 τ_p 空穴寿命
 τ_s 表面复合寿命
 τ_v 体内复合寿命
 $1/\tau$ 散射概率 复合概率
 ϕ 费米势
 ϕ_f 半导体的体费米势
 ϕ_n 电子的准费米势
 ϕ_p 空穴的准费米势
 ϕ_m 金属的功函数电势
 ϕ_s 半导体的功函数电势
 χ 电子亲和能
 χ_s 半导体的电子亲和能
 χ' 修正电子亲和能
 $\psi(r)$ 电子的波函数
 Ω 晶体原胞的体积, 电阻单位
 ω 角频率

目 录

第 1 章 晶体结构与晶体结合	(1)
1.1 晶体结构	(2)
1.1.1 晶格和晶胞	(2)
1.1.2 原胞 原基矢量 晶格平移矢量	(4)
1.2 晶列与晶面	(6)
1.2.1 晶向指数	(6)
1.2.2 晶面指数	(7)
1.3 倒格子	(9)
1.4 晶体结合	(10)
1.4.1 固体的结合形式和化学键	(10)
1.4.2 离子结合 (离子键)	(11)
1.4.3 共价结合 (共价键)	(11)
1.4.4 金属结合 (金属键)	(11)
1.4.5 范德瓦尔斯结合 (范德瓦尔斯键)	(12)
1.5 典型半导体的晶体结构	(12)
1.5.1 金刚石型结构	(12)
1.5.2 闪锌矿型结构	(14)
1.5.3 纤锌矿型结构	(14)
思考题与习题	(14)
第 2 章 半导体中的电子状态	(16)
2.1 周期性势场	(16)
2.2 布洛赫 (Bloch) 定理	(17)
2.2.1 单电子近似	(17)
2.2.2 布洛赫定理	(18)
2.2.3 布里渊区	(19)
2.3 周期性边界条件 (玻恩·冯-卡曼 Born.von-Karman 边界条件)	(21)
2.4 能带	(24)
2.4.1 周期性势场中电子的能量谱值	(24)
2.4.2 能带图及其画法	(26)
2.5 外力作用下电子的加速度 有效质量	(28)
2.5.1 外力作用下电子运动状态的改变	(29)
2.5.2 有效质量	(31)
2.6 等能面、主轴坐标系	(35)
2.7 金属、半导体和绝缘体的区别	(36)
2.8 导带电子和价带空穴	(38)
2.9 硅、锗、砷化镓的能带结构	(40)
2.9.1 导带能带图	(40)
2.9.2 价带能带图	(41)

2.10	半导体中的杂质和杂质能级	(43)
2.10.1	替位式杂质和间隙式杂质	(43)
2.10.2	施主杂质和施主能级 N 型半导体	(44)
2.10.3	受主杂质和受主能级 P 型半导体	(44)
2.10.4	III-V 族化合物中的杂质能级	(45)
2.10.5	等电子杂质 等电子陷阱	(46)
2.11	类氢模型	(47)
2.12	深能级	(48)
2.13	缺陷能级	(50)
2.14	宽禁带半导体的自补偿效应	(50)
	思考题与习题	(51)
第 3 章	载流子的统计分布	(53)
3.1	能态密度	(53)
3.1.1	导带能态密度	(53)
3.1.2	价带能态密度	(54)
3.2	分布函数	(55)
3.2.1	费米-狄拉克(Fermi-Dirac)分布与费米能级	(55)
3.2.2	玻耳兹曼分布	(56)
3.3	能带中的载流子浓度	(58)
3.3.1	导带电子浓度	(58)
3.3.2	价带空穴浓度	(59)
3.4	本征半导体	(61)
3.5	杂质半导体中的载流子浓度	(64)
3.5.1	杂质能级上的载流子浓度	(64)
3.5.2	N 型半导体	(65)
3.5.3	P 型半导体	(66)
3.6	杂质补偿半导体	(68)
3.7	简并半导体	(70)
3.7.1	简并半导体杂质能级和能带的变化	(70)
3.7.2	简并半导体的载流子浓度	(71)
	思考题与习题	(72)
第 4 章	电荷输运现象	(74)
4.1	格波与声子	(74)
4.1.1	格波	(74)
4.1.2	声子	(76)
4.2	载流子的散射	(77)
4.2.1	平均自由时间与弛豫时间	(78)
4.2.2	散射机构	(79)
4.3	漂移运动 迁移率 电导率	(81)
4.3.1	平均漂移速度与迁移率	(81)
4.3.2	漂移电流 电导率	(84)
4.4	多能谷情况下的电导现象	(86)

4.5	电流密度和电流	(89)
4.5.1	扩散流密度与扩散电流	(89)
4.5.2	漂移流密度与漂移电流	(89)
4.5.3	电流密度与电流	(90)
4.6	非均匀半导体中的内建电场	(90)
4.6.1	半导体中的静电场和势	(90)
4.6.2	爱因斯坦关系	(91)
4.6.3	非均匀半导体中的内建电场	(92)
4.7	霍尔(Hall)效应	(94)
4.7.1	霍尔系数	(95)
4.7.2	霍尔角	(96)
	思考题与习题	(98)
第5章	非平衡载流子	(100)
5.1	非平衡载流子的产生与复合	(100)
5.1.1	非平衡载流子的产生	(100)
5.1.2	非平衡载流子的复合	(101)
5.1.3	非平衡载流子的寿命	(102)
5.2	直接复合	(104)
5.3	通过复合中心的复合	(106)
5.3.1	载流子通过复合中心的产生和复合过程	(106)
5.3.2	净复合率	(107)
5.3.3	小信号寿命公式——肖克利-瑞德公式	(108)
5.3.4	金在硅中的复合作用	(109)
5.4	表面复合和表面复合速度	(111)
5.5	陷阱效应	(112)
5.6	准费米能级	(113)
5.6.1	准费米能级	(113)
5.6.2	修正欧姆定律	(114)
5.7	连续性方程	(115)
5.8	电中性条件 介电弛豫时间	(118)
5.9	扩散长度与扩散速度	(119)
5.10	半导体中的基本控制方程	(122)
	思考题与习题	(122)
第6章	半导体表面	(124)
6.1	表面态和表面空间电荷区	(124)
6.2	表面电场效应	(125)
6.2.1	表面空间电荷区的形成	(125)
6.2.2	表面势与能带弯曲	(126)
6.3	载流子积累、耗尽和反型	(127)
6.3.1	载流子积累	(128)
6.3.2	载流子耗尽	(128)
6.3.3	载流子反型	(129)

6.4	理想 MOS 电容	(133)
6.5	实际 MOS 电容的 $C-V$ 特性	(139)
6.5.1	功函数差的影响	(139)
6.5.2	界面陷阱和氧化物电荷的影响	(141)
6.5.3	实际 MOS 的 $C-V$ 曲线和阈值电压	(143)
	思考题与习题	(144)
第 7 章	PN 结	(146)
7.1	热平衡 PN 结	(148)
7.1.1	PN 结空间电荷区	(148)
7.1.2	电场分布与电势分布	(149)
7.2	偏压 PN 结	(153)
7.2.1	PN 结的单向导电性	(153)
7.2.2	少数载流子的注入与运输	(154)
7.3	理想 PN 结二极管的直流电流-电压 ($I-V$) 特性	(157)
7.4	空间电荷区复合电流和产生电流	(162)
7.4.1	正偏复合电流	(162)
7.4.2	反偏产生电流	(163)
7.5	隧道电流	(164)
7.6	PN 结电容	(165)
7.6.1	耗尽层电容	(166)
7.6.2	扩散电容	(167)
7.7	PN 结击穿	(170)
7.8	异质结	(172)
7.8.1	热平衡异质结	(172)
7.8.2	加偏压的异质结	(174)
	思考题与习题	(175)
第 8 章	金属-半导体接触	(178)
8.1	理想的金属-半导体整流接触 肖特基势垒	(178)
8.2	界面态对势垒高度的影响	(182)
8.3	欧姆接触	(183)
8.4	镜像力对势垒高度的影响——肖特基效应	(184)
8.5	理想肖特基势垒二极管的电流-电压特性	(186)
	思考题与习题	(189)
第 9 章	半导体的光学性质	(191)
9.1	半导体的光学常数	(191)
9.2	本征吸收	(192)
9.2.1	直接跃迁	(193)
9.2.2	间接跃迁	(195)
9.3	激子吸收	(197)
9.4	其他光吸收过程	(198)
9.4.1	自由载流子吸收	(198)
9.4.2	杂质吸收	(199)

9.5	PN 结的光生伏打效应	(200)
9.6	半导体发光	(202)
9.6.1	直接辐射复合	(202)
9.6.2	间接辐射复合	(203)
9.6.3	浅能级和主带之间的复合	(204)
9.6.4	施主-受主对 (D-A 对) 复合	(204)
9.6.5	通过深能级的复合	(205)
9.6.6	激子复合	(205)
9.6.7	等电子陷阱复合	(205)
9.7	非辐射复合	(207)
9.7.1	多声子跃迁	(208)
9.7.2	俄歇 (Auger) 过程	(208)
9.7.3	表面复合	(209)
9.8	发光二极管 (LED)	(209)
9.9	高效率的半导体发光材料	(211)
	思考题与习题	(211)
	模拟试卷 (一)	(213)
	模拟试卷 (二)	(214)
	模拟试卷 (三)	(216)
	附录 A 单位制、单位换算和通用常数	(224)
	附录 B 半导体材料物理性质表	(225)
	参考文献	(230)

第 1 章 晶体结构与晶体结合

半导体是指常温下导电性能介于导体与绝缘体之间的材料。半导体按元素组成为元素半导体和化合物半导体。由一种元素构成的半导体叫做元素半导体，由二种或两种以上元素构成的半导体叫做化合物半导体。现在发现的具有半导体性质的元素大多位于元素周期表中从金属到非金属的过渡区(见图 1.1)，如IV族元素硅(Si)和锗(Ge)。

	IA																		0
1	1																		2
	H	IIA																	He
2	3	4																	
	Li	Be																	
3	11	12																	
	Na	Mg	IIIB	IVB	VB	VIB	VII B	VIII	IB	II B	IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA				
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
	K	Ca	Sc	Ti	Y	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
	Cs	Ba	*La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113						
	Fr	Ra	+Ac	Rf	Ha	Sg	Ns	Hs	Mt	110	111	112	113						

图 1.1 元素周期表

硅是集成电路中最常用的半导体材料，而且应用越来越广泛。由于人们对硅和锗认识最早、使用最广泛，因此称之为第一代半导体材料。

化合物半导体主要有三种组成形式：III-V族化合物，如砷化镓(GaAs)、磷化铟(InP)、氮化镓(GaN)；II-VI族化合物，如硫化锌(ZnS)、氧化锌(ZnO)；IV-VI族化合物，如碳化硅(SiC)等(见表 1.1)。GaAs 是其中应用最广泛的一种化合物半导体材料。20 世纪 70 年代，随着砷化镓单晶制备技术的成熟，其良好的光学性能使其在光学器件中获得广泛应用，同时也应用在需要高频、高速器件的特殊场合。GaAs 被称为第二代半导体材料。

进入 20 世纪 80 年代，宽禁带半导体材料，尤其是氮化镓(GaN)开始日益受到人们的重视，制造出了蓝光发光二极管和激光器。以氮化镓为代表的宽禁带半导体材料被称为第三代半导体材料。

表 1.1 半导体分类和应用

元素半导体	IV族化合物半导体	III-V族二元化合物半导体	II-VI族二元化合物半导体	三元化合物半导体
Si、Ge	SiC、SiGe	AlP、AlAs、AlSb、GaP、GaAs、GaSb、InP、InAs、InSb	ZnS、ZnSe、ZnTe、CdS、CdSe、CdTe、ZnO	GaAs-P、InAs-P、Ga-InSb、Ga-InAs、Ga-InP、Cd-HgTe
主要用于集成电路和大多数半导体器件	新兴的半导体材料，用于高温半导体器件、异质结器件等	主要用于高速器件，高速集成电路，发光，激光，红外探测等	主要用于高速器件，高速集成电路，发光，激光，红外探测等	主要用于异质结，超晶格和远红外探测器

半导体物理学主要研究半导体的物理现象、物理规律、物理性质和理论。研究的对象是固体半导体。按照构成固体的粒子在空间的排列情况，固体主要分为晶体和非晶体两类。晶体又有单晶体和多晶体之分。

单晶体的基本特点是原子排列长程有序，具有内部结构的周期性。单晶 Si 就是典型的单晶半导体材料(见图 1.2(a))。

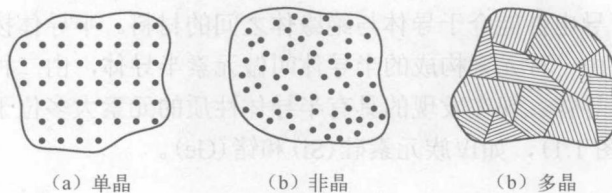


图 1.2 单晶、非晶和多晶二维示意图

多晶体中构成固体的原子在局域空间内有序排列，但在不同区域间又无序排列，典型材料如多晶硅等。在局域空间内类似单晶有序排列的部分，称为晶粒；不同的晶粒间的界面称为晶界。

非晶体中原子排列完全无序。非晶体有时又称为过冷液体。玻璃、塑料等都是非晶体。

在半导体物理中所涉及的晶体主要是单晶体，后面所说的晶体指的就是单晶体。

晶体的性质主要决定于它们的化学组成和内部结构。由不同化学成分组成的晶体，其性质固然是不同的。但化学成分相同，内部结构不同的晶体，性质也不相同。例如金刚石和石墨，虽然都是由碳原子组成的晶体，但由于晶体结构不同，两者的性质差别很大。这说明晶体的内部结构对其性质有着决定性的影响。因此，为了了解半导体的物理性质，有必要首先介绍一些有关晶体结构和晶体结合的基础知识。

1.1 晶体结构

教学要求

1. 掌握空间点阵、晶格、晶胞和原胞等概念，了解描述晶体结构的三种方法及其相互关系。
2. 了解晶体结构和晶格的区别。
3. 正确画出面心立方格子的晶胞和原胞。
4. 了解晶体的平移对称性。

晶体的主要特点是原子的排列是长程有序的，或者说原子的排列具有周期性。按照晶体的定义，晶体只能是一个理想的概念。因为晶体的定义意味着：晶体中原子是固定不动的；晶体中不存在杂质和缺陷；晶体是无穷大的，没有边界。否则就不能满足原子排列的“长程有序”的条件。实际上，在一定温度下，实际晶体中的原子都在其平衡位置附近振动着；实际晶体中也不可避免地存在着杂质和缺陷；此外实际晶体的大小总是有限的，不可能是无穷大的。考虑到这些实际因素(非理想因素)，晶体只是一个理想的概念。但是这种理想的假设抓住了晶体结构的主要方面——原子排列的周期性，使得易于搞清晶体结构。这些非理想因素的影响可以在搞清晶体结构的基础上进行讨论。

1.1.1 晶格和晶胞

晶体中的原子是规则地、周期地排列起来的，因此整个晶体可以看做是由构成晶体的原子、

离子、分子或某些基团等基本的结构单元沿三个不同的方向周期性地重复堆积的结果。这些“构成晶体的基本结构单元”简称为基元。经过长期的研究，在 19 世纪提出了布拉维空间点阵学说。空间点阵学说认为晶体的内部结构可以概括为一些相同的点子——阵点在空间有规则地做周期性的无限分布。阵点就是基元的代表点。每个基元的代表点，必须选择在基元中的同类原子上，也可以选择在基元的重心上。阵点的总体称为空间点阵。点阵中的每个阵点与一个结构的基元相对应：阵点是基元的代表点，基元是阵点的内容物。图 1.3 分别画出空间点阵、基元和实际晶体的示意图。

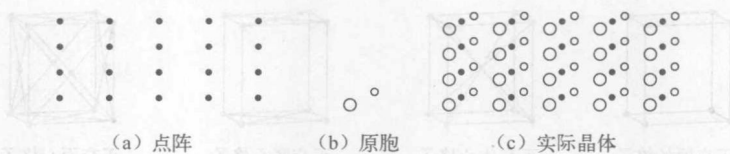


图 1.3 晶体组成示意图

通过点阵中的阵点画任意三组平行直线就可以得到一个空间格子，称为布拉维格子 (Bravais lattice) 或简称为晶格 (为了方便，在有些书中不区分点阵和晶格，通称为晶格)。在晶格的概念中，阵点称为结点或格点。空间点阵或晶格完全反映了晶体内部结构的周期性。

值得注意的是，晶格和晶体结构是两个不同的概念。晶体结构是指晶体中的原子排列，而晶格则是指基元的代表点在空间的分布。

在晶格中，一个以结点为顶点，以三个独立方向上的周期 (称为晶格常数) 为边长构成的平行六面体叫做晶胞 (亦称为单胞)。晶胞是晶体中的一个小体积。它是晶体中的一个周期性重复单元，是晶体内部结构的一个缩影。晶胞的无限、无缝、重复堆积就可以得到整个晶体。可见，一个晶胞包含了有关原子排列的全部信息，因而也可以用晶胞来描绘晶体结构。

晶胞的三个棱线叫做晶轴，用 x 、 y 、 z 轴表示，如图 1.4 所示。晶轴的单位矢量叫做基矢量，简称为基矢。基矢的长度分别等于晶胞的三个边长。三个轴之间的夹角分别用 α 、 β 、 γ 表示。 a 、 b 、 c 、 α 、 β 、 γ 为单胞的六个参数。线度 a 、 b 、 c 称为晶格常数。

对晶体的分析研究表明，根据晶体的六个参数可以将晶体分为七个晶系：

- (1) 立方 (等轴) 晶系 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- (2) 正方 (四方) 晶系 $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- (3) 正交晶系 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- (4) 三角 (菱形) 晶系 $a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
- (5) 六角 (六方) 晶系 $a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ$
- (6) 单斜晶系 $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
- (7) 三斜晶系 $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

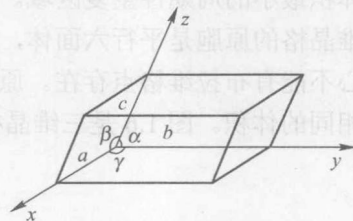


图 1.4 晶轴

在七个晶系的晶胞中，原子存在于晶胞的顶点上。但是原子也可以存在于晶胞的侧面中心、底中心或体中心。把这些情况考虑在内，七个晶系则有简立方、体心立方、面心立方；简正方、体心正方；三角；六角；简正交、面心正交、底心正交、体心正交；简单斜、底心单斜；简三斜等 14 种空间格子即 14 种布拉维格子，如图 1.5 所示。

布拉维格子是空间格子的基本组成单位，只要知道了格子形式和单位平行六面体的参数，就能够确定整个空间格子的一切特征。

一些半导体的基本结构是立方晶系晶体结构，其中，简立方体的八个角顶各有一个原子，

体心立方是在简立方的中心加进一个原子，面心立方则是在简立方的六个面的中心各加有一个原子。

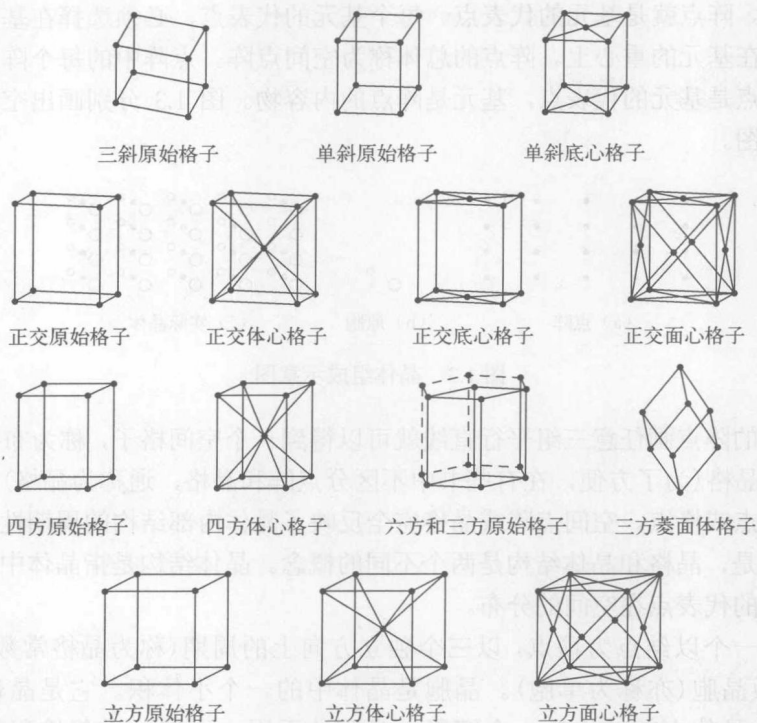


图 1.5 14 种布拉维格子

1.1.2 原胞 原基矢量 晶格平移矢量

晶体内部结构的周期性也叫做晶体的平移对称性。为了充分地、细致地描述晶体的平移对称性，引入原胞的概念。原胞也是单胞，只不过是体积最小的单胞。也就是说，原胞是晶体中体积最小的周期性重复区域。所以，原胞能更充分、更细致地描述晶体内部结构的周期性。三维晶格的原胞是平行六面体，每个原胞只含有一个格点，且格点位于原胞的角顶上，体心和面心不能有布拉维格点存在。原胞的取法不是唯一的，但无论如何选取，同一晶格的原胞都具有相同的体积。图 1.6 是三维晶格原胞的示意图。

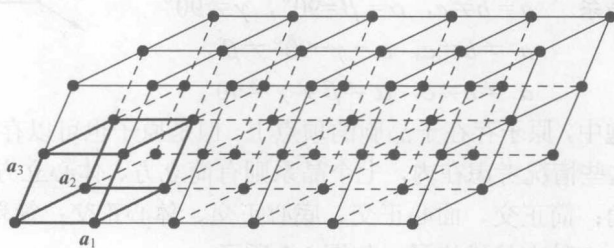


图 1.6 三维晶格原胞示意图

图 1.7 为二维晶格中的原胞的选取。在二维晶格中，原胞是平行四边形。平行四边形 C 和 D 包含两个格点。A 和 B 包含一个格点。因此平行四边形 A 和 B 是二维晶格的原胞。