

 电子信息与电气学科规划教材 · 电子科学与技术专业

固态电子论

主编 刘晓为 王蔚 张宇峰 等

电子工业出版社

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

电子信息与电气学科规划教材·电子科学与技术专业

固态电子论

主编 刘晓为 王 蔚 张宇峰 等



电子工业出版社
Publishing House of Electronics Industry
北京·BEIJING

内 容 简 介

本教材涵盖了固体物理基础知识与半导体物理学两部分内容,全书由9章组成:第1、2章阐述了固体物理基础知识,包括晶体结构及其结合、振动、缺陷的相关理论;第3~8章系统阐述了半导体物理学基本理论,包括半导体晶体能带论、平衡载流子的统计分布、电传导特性、非平衡载流子、接触理论及表面与界面理论;第9章阐述了半导体光电效应。各章的引言部分介绍了本章主要内容、重点应掌握知识点,以及学习难点;章后附有习题。在附录中还介绍了为半导体物理学重点理论内容设置的5个实验指导。

本教材思路清晰,物理概念突出,尽量避免繁杂的数学公式推导,易于读者理解和掌握。而且无须先修固体物理学课程就可以直接使用本教材学习半导体物理学知识。

本书是理工科高等院校电子类专业的本科教材,也是“微电子学与固体电子学”学科的考研用书。

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

固态电子论 / 刘晓为等主编. — 北京: 电子工业出版社, 2013.2

电子信息与电气学科规划教材·电子科学与技术专业

ISBN 978-7-121-19546-4

I. ①固… II. ①刘… III. ①固体物理学—高等学校—教材②半导体物理学—高等学校—教材 IV. ①048②047

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 025517 号

策划编辑: 陈晓莉

责任编辑: 陈晓莉 文字编辑: 周宏敏

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: 20.25 字数: 720 千字

印 次: 2013 年 2 月第 1 次印刷

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”是微电子及其相关专业的专业基础课程，支持微电子器件原理、集成电路设计等后续课程的教学。学习半导体物理学之前，必须具备相关的固体物理学基础知识。考虑到学生基础课时数的精简，以及保证半导体物理学知识的系统性与完整性，哈尔滨工业大学结合十余年的教学实践经验，将原本各自独立开设的“固体物理学基础”与“半导体物理学”有机地融合为一门课程，为本校微电子及相关专业的本科生开设，课程定名为“固态电子论”。同时将课堂教学与实践教学相结合，还开设了“固态电子论实验”。本书正是在编者多年讲授的“固态电子论”课程教案的基础上编写的一本适合理工科高等院校电子类专业使用的教材。学生可以在完成“大学物理”学习的基础上，直接使用本教材学习“半导体物理学”课程。授课参考学时数为 72 学时，实验学时数为 20 学时。

本书的核心内容是介绍半导体晶体内电子的运动规律。全书主要由 9 章组成。第 1、2 章介绍固体物理基础知识：第 1 章主要阐述理想晶体的微观几何结构及相关理论；第 2 章阐述实际原子构成的晶体，及其结合、振动及缺陷方面的相关理论。在这两章中突出介绍了半导体硅、砷化镓的结构特征、结合类型，及其晶格振动与晶体缺陷的特点。第 3~9 章介绍半导体物理学知识。第 3 章主要讲述能带理论及半导体中电子的运动规律，介绍硅、锗和砷化镓半导体的能带结构及各种杂质能级和缺陷在半导体中的作用；第 4 章阐述半导体中电子的分布状态，分析半导体的载流子分布规律；第 5 章介绍半导体中载流子漂移运动的规律和载流子散射，讲述迁移率、电阻率与杂质浓度及温度的关系；第 6 章介绍非平衡载流子的注入与复合、寿命和准费米能级，阐述复合理论及载流子的扩散和漂移运动规律；第 7 章阐述 pn 结和金属半导体接触及其能带图，介绍半导体接触的各种应用；第 8 章介绍半导体的表面态和表面场效应，阐述 MIS 结构的电容—电压特性及其相关性质；第 9 章阐述半导体的光吸收、光电导和光生伏特效应，介绍半导体发光和半导体激光。此外，在本书最后的附录中，介绍了为“半导体物理学”重点理论内容设置的实验指导。分别为：①少子寿命测量；② pn 结直流电学特性；③半导体电阻率及其温度特性；④ MOS 结构高频 $C-V$ 特性；⑤ pn 结光电效应及其频谱特性。

全书结构与内容体系新颖，重点突出了物理概念，尽量避免繁杂的数学公式推导。在每章引言中介绍本章主要内容、重点、难点；各章后配有复习题。试图做到思路清晰，易于读者理解和掌握。本书除了作为本科生教材之外，也适合作为微电子学与固体电子学领域及相关专业人员学习半导体物理知识的参考书，而且本书还是哈尔滨工业大学“微电子学与固体电子学”学科研究生入学考试的重点参考教材。

本书主编刘晓为教授，自 1987 年至今一直从事“固态电子论”的本科教学工作，是哈尔滨工业大学微电子学与固体电子学学科负责人，系主任，国家集成电路培养基地主任。第 1、2 章和所附实验部分由王蔚执笔；第 3~6 章由张宇峰执笔；第 7、8 章由吕炳均执笔；第 9 章由付强执笔。

在本书编撰过程中刘振茂教授对全书进行了初审。另外，初稿编写中苑振宇、胡青云、孟昊等同学帮助收集资料并撰写了部分内容。在本书即将出版之际谨对上述各位，以及为本书出版给予支持与帮助的人士表示由衷感谢！

由于编者水平有限，在书中难免会出现各种问题，恳请读者予以指正。

编 者

2012 年 12 月于哈尔滨工业大学

目 录

第 1 章 晶体结构	1
1.1 晶体的宏观特征	1
1.2 晶体的微观结构	3
1.2.1 空间点阵	3
1.2.2 平移矢与晶格	4
1.2.3 原胞与晶胞	5
1.3 晶格类型与典型结构	6
1.3.1 立方晶系	6
1.3.2 其他晶格类型	8
1.3.3 金刚石结构	10
1.3.4 闪锌矿结构	11
1.3.5 密堆砌结构	11
1.3.6 其他典型结构	12
1.4 晶体的对称性	13
1.4.1 旋转对称操作	14
1.4.2 中心反演	15
1.4.3 镜像面	15
1.4.4 旋转反演操作	15
1.4.5 螺旋与滑移反映操作	16
1.5 晶向与晶面指数	17
1.5.1 晶列与晶向	17
1.5.2 晶面与晶面指数	18
1.5.3 金刚石结构硅的晶向与晶面	19
1.6 晶体的倒格子与布里渊区	21
1.6.1 倒格子的定义	21
1.6.2 倒格子与正格子的关系	21
1.6.3 布里渊区的定义	23
1.6.4 典型晶格倒格子及布里渊区	24
1.7 晶体的 X 射线衍射	26
1.7.1 晶体衍射简介	26
1.7.2 晶格衍射极大条件	27
1.7.3 厄瓦尔德反射球	28
1.7.4 影响衍射的因素	30
习题一	32

第2章 晶体结合与晶格振动及缺陷	33
2.1 晶体内能与性质	33
2.1.1 内能函数	33
2.1.2 与内能相关的性质	35
2.2 晶体结合类型	36
2.2.1 离子结合	36
2.2.2 共价结合	38
2.2.3 金属结合	41
2.2.4 范德瓦尔斯结合	41
2.2.5 氢键结合	42
2.3 一维晶格振动	43
2.3.1 单原子链运动方程	43
2.3.2 格波的色散关系	45
2.3.3 关于格波与波矢的讨论	46
2.3.4 波恩-卡曼周期性边界条件	47
2.3.5 双原子链的运动方程	48
2.3.6 声学波与光学波	49
2.4 三维晶格振动与声子	51
2.4.1 三维晶格振动讨论	51
2.4.2 晶格振动能量与谐振子	53
2.4.3 能量量子与声子	55
2.5 晶格缺陷	56
2.5.1 点缺陷	56
2.5.2 线缺陷	58
2.5.3 面缺陷	60
习题二	61
第3章 半导体中的电子状态与杂质	63
3.1 半导体中的电子状态和能带	63
3.1.1 原子中的电子状态和能级	63
3.1.2 晶体中的电子状态	64
3.2 周期性势场中的电子状态和能带	66
3.2.1 晶体的周期性势场	66
3.2.2 薛定谔方程和布洛赫(Bloch)定理	67
3.2.3 Kronig-Penney 模型	67
3.2.4 布里渊区	70
3.2.5 导体、半导体和绝缘体的能带结构	71
3.3 半导体中电子的运动、有效质量	72
3.3.1 半导体中 $E(k)$ 与 k 的关系	72
3.3.2 半导体中电子的速度(平均速度)	73
3.3.3 半导体中电子的加速度	74

3.3.4	有效质量的意义	75
3.4	本征半导体的导电机构——空穴	76
3.4.1	能带中电子的导电作用	76
3.4.2	空穴	78
3.5	回旋共振	79
3.5.1	k 空间等能面	80
3.5.2	回旋共振的实验原理与方法	81
3.6	硅和锗的能带结构	84
3.6.1	硅和锗的导带结构	84
3.6.2	硅和锗的价带结构	86
3.6.3	III-V 族化合物半导体能带结构	88
3.7	半导体中杂质、缺陷及其能级	89
3.7.1	硅锗晶体中的杂质能级	90
3.7.2	III-V 族化合物中的杂质能级	95
3.7.3	晶体缺陷和位错能级	97
	习题三	100
第 4 章	半导体中的载流子及其导电性	102
4.1	状态密度	102
4.1.1	k 空间的量子态分布	103
4.1.2	状态密度	103
4.2	费米能级和载流子的统计分布	105
4.2.1	费米分布函数	105
4.2.2	玻尔兹曼分布函数	107
4.2.3	非简并半导体载流子浓度	108
4.3	本征半导体	111
4.4	非简并杂质半导体	113
4.4.1	杂质能级上的电子和空穴	113
4.4.2	非简并杂质半导体载流子浓度	114
4.5	一般情况下载流子的统计分布	120
4.6	简并半导体	122
4.6.1	简并半导体的载流子浓度	122
4.6.2	重掺杂效应	124
	习题四	125
第 5 章	半导体的导电性	127
5.1	载流子的漂移运动——迁移率	127
5.1.1	欧姆定律的微分形式	127
5.1.2	载流子的漂移速度和迁移率	128
5.1.3	半导体的电导率	129
5.2	载流子散射	130

5.2.1	载流子的散射概念	130
5.2.2	半导体的主要散射机构	131
5.3	迁移率与杂质浓度和温度的关系	138
5.3.1	平均自由时间和散射概率的关系	138
5.3.2	电导率, 迁移率与平均自由时间的关系	139
5.3.3	迁移率与杂质浓度和温度的关系	141
5.4	电阻率与杂质浓度和温度的关系	144
5.4.1	电阻率与杂质浓度的关系	145
5.4.2	电阻率与温度的关系	146
5.5	强电场下的效应与热载流子	146
5.5.1	强电场下欧姆定律的偏离	146
5.5.2	平均漂移速度与电场强度的关系	148
5.6	耿氏效应	150
5.6.1	多能谷散射和体内微分负电导	151
5.6.2	高场畴区及耿氏振荡	153
	习题五	153
第 6 章	非平衡载流子及其扩散运动	155
6.1	非平衡载流子的注入与复合	155
6.2	非平衡载流子的寿命	156
6.3	准费米能级	158
6.4	复合理论	160
6.4.1	直接复合	161
6.4.2	间接复合	162
6.4.3	表面复合	168
6.5	陷阱效应	169
6.6	载流子的扩散运动、电流密度方程和爱因斯坦关系式	171
6.6.1	平面扩散	172
6.6.2	径向扩散	175
6.6.3	电流密度方程	175
6.6.4	爱因斯坦关系式	176
6.7	连续性方程	178
6.7.1	连续性方程的建立	178
6.7.2	连续性方程的应用	180
	习题六	183
第 7 章	半导体接触理论	186
7.1	pn 结及其能带图	186
7.1.1	pn 结的结构及杂质分布	186
7.1.2	空间电荷区	188
7.1.3	pn 结的能带图	188
7.1.4	接触电势差	190

7.1.5	pn 结中的载流子分布	191
7.2	pn 结电流-电压特性	193
7.2.1	pn 结的势垒	193
7.2.2	理想电流电压模型及方程	195
7.2.3	影响 pn 结伏安特性曲线的因素	197
7.3	pn 结电容	200
7.3.1	势垒电容与扩散电容	200
7.3.2	突变结的势垒电容	201
7.3.3	线性缓变结势垒电容	204
7.3.4	扩散电容	206
7.4	pn 结的击穿特性	207
7.4.1	雪崩击穿	207
7.4.2	隧道击穿	210
7.4.3	热电击穿	216
7.5	金属-半导体接触与能带图	216
7.5.1	金属和半导体的功函数	216
7.5.2	接触电势差	218
7.5.3	表面态对接触势垒的影响	220
7.6	金属和半导体接触的电流-电压特性	221
7.6.1	整流特性	221
7.6.2	少数载流子的注入效应	224
7.6.3	欧姆接触	226
	习题七	226
第 8 章	半导体表面与界面理论	228
8.1	半导体表面特性	228
8.1.1	表面态	228
8.1.2	表面电场效应	230
8.2	MIS 结构的电容-电压特性	237
8.2.1	理想 MIS 结构的 $C-V$ 特性	238
8.2.2	影响 MIS 结构 $C-V$ 特性的主要因素	243
8.3	硅-二氧化硅系统的性质	245
8.3.1	二氧化硅层中的可动离子	246
8.3.2	二氧化硅层中的固定表面电荷	247
8.3.3	硅-二氧化硅层的界面态	248
8.3.4	二氧化硅中的陷阱电荷	249
8.4	异质结	249
8.4.1	异质结的能带图	250
8.4.2	异质结的电流机制	254
8.4.3	异质结的应用	257
	习题八	258

第9章 半导体光学特性	260
9.1 半导体基本光学特性	260
9.2 半导体的光吸收	260
9.2.1 本征吸收与带间跃迁	260
9.2.2 激子吸收	264
9.2.3 带内跃迁	265
9.2.4 杂质吸收	266
9.2.5 晶格振动吸收	267
9.3 半导体的光电导	268
9.3.1 光电导现象的分类	268
9.3.2 本征光电导	269
9.3.3 杂质光电导	271
9.3.4 其他类型光电导	272
9.3.5 光电导灵敏度及对光电导材料的要求	272
9.3.6 光电导效应的影响因素	274
9.4 半导体的光生伏特效应	275
9.4.1 体光生伏特效应	275
9.4.2 势垒型光生伏特效应	276
9.4.3 光电二极管的伏安特性	277
9.4.4 太阳能电池	279
9.5 半导体发光	280
9.5.1 半导体中的发光过程	280
9.5.2 发光效率	284
9.5.3 电致发光机构	286
9.5.4 光发射器件	286
9.6 半导体激光	288
9.6.1 自发辐射和受激辐射	288
9.6.2 分布反转	289
9.6.3 半导体激光器	291
习题九	295
附录A 实验	296
附录B 常用数据表	311
参考文献	314

第1章 晶体结构

引言

物质的存在形态主要有固态、液态和气态三种，其区别在于构成某种物质的原子(也可以是离子、分子或它们的基团)，彼此之间距离的远近、相互作用的强弱。固态物体(简称固体)的构成原子彼此之间最为接近，因此原子之间作用最强，它们的位置在没有外力作用时，不会有宏观尺寸的变化，在低温条件下基本处于固定位置。而气态物体(简称气体)的构成原子彼此之间相距较远，因此相互作用最弱，空间位置也不确定。液态物体(简称液体)的构成原子彼此之间距离的远近、相互作用的强弱均处于固体和气体之间。固体根据原子空间位置的区别(即结构上的差别)又被划分为晶体、非晶体和准晶体三大类别。

晶体的构成原子在空间的排列位置具有周期性，即长程有序，又有平移对称性，是一种高度有序结构。

非晶体的构成原子的排列没有一定规则，是一种无序结构。由于近邻原子之间的相互作用，使得在数个原子之间空间位置具有一定排列结构，可以看成具有一定的短程有序。

准晶体是一种介于晶体和非晶体之间的固体，其构成原子有完全有序的排列结构，然而又不具有晶体所应有的平移对称性。

举例来看，常用的半导体材料硅、锗、砷化镓，以及自然形成的冰、石英等都是晶体；玻璃、塑料等是非晶体；准晶体是在 1984 年从急冷凝固的铝锰合金中发现的介于晶体和非晶体之间的固体。目前已知的准晶体都是金属互化物。而本书中提到的固体，一般都是指晶体。

这一章首先从晶体的宏观特征出发，由表及里地介绍晶体微观结构的特点，引入了空间点阵的描述方法；进而介绍晶格的基本类型与典型结构，晶体的对称性；晶面、晶列特点及表征方法——晶面指数、晶向指数，以及倒格子概念与布里渊区；最后简要介绍晶体 X 射线衍射原理与方法。本章重点是晶体结构的周期性和对称性，难点在对倒格子概念的理解及其应用方面。

1.1 晶体的宏观特征

晶体有单晶和多晶之分，整块材料都是一种结构贯穿整体的为**单晶**；而由大量小的单晶粒随机堆砌的整块材料为**多晶**，晶粒之间的过渡区称为**晶界**。天然晶体是在恒定环境下的原子有序“堆砌”形成。例如常见的天然石英(SiO_2)晶体，它是在一定压力下的硅酸盐溶液中经过漫长的地质过程而形成的。常用的半导体(硅晶体、砷化镓晶体等)都是人造晶体或称人工晶体。

晶体外观多为凸多面体，围成这个凸多面体的各个光滑平面称为**晶面**，外观最显著的特征是晶面大多是有规则的配置，有一定的对称性。如图 1-1 所示，两个不同方位晶面的交线称为**晶棱**，晶棱互相平行的这些晶面的组合称为**晶带**，互相平行的晶棱的共同方向称为该晶带的带轴，重要的带轴称**晶轴**，在图 1-1 中的 $O-O'$ 轴就是该晶体的一个晶轴。

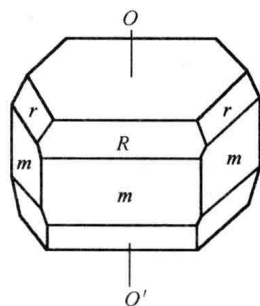


图 1-1 人工石英晶体

晶体由于形成条件的不同,即使是相同的品种其外形也可以不同,例如,岩盐(NaCl)晶体,其外形可以是立方体或八面体,也可以是立方体与八面体的混合体。如图 1-2(b)所示,外界条件使立方体岩盐(图 1-2(a))的 6 个晶面消失了,发展成图 1-2(b)中八面体岩盐的 8 个晶面;而图 1-2(c)中岩盐的立方体和八面体晶面都存在,只是相对地变小了。因此,晶面本身的大小和形状不是晶体品种的特征因素,它们都受晶体形成过程之中外界条件的影响,会发生改变。

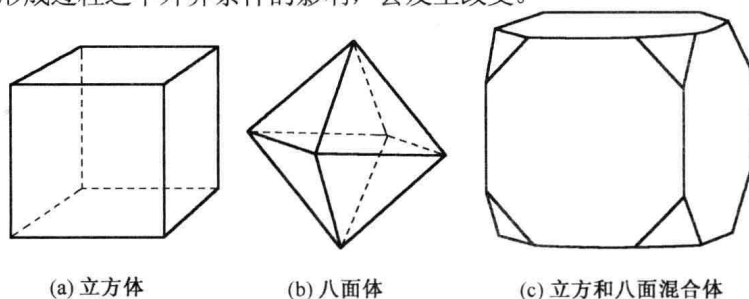


图 1-2 岩盐晶体的若干外形

晶体外形上的规则性、对称性都反映着晶体原子的周期性排列,即长程有序性。因此晶体外形中,也应有受内在结构决定而不受外界条件影响的因素。石英晶体的各晶面间夹角就是恒定的。如图 1-3 所示, a 、 b 面间的夹角总是 $141^\circ 47'$, b 、 c 面间的夹角总是 $120^\circ 00'$, a 、 c 面间的夹角总是 $113^\circ 08'$ 。实际上,晶面间夹角就是晶体品种的特征因素。这个普遍的规律被概括为**晶面角守恒定律**:属于同一品种的晶体,其两个对应晶面(或晶棱)间的夹角恒定不变。因此,测量晶面间夹角的大小是判定晶体品种类别的依据。晶面间夹角通常使用晶体测角仪来测量。

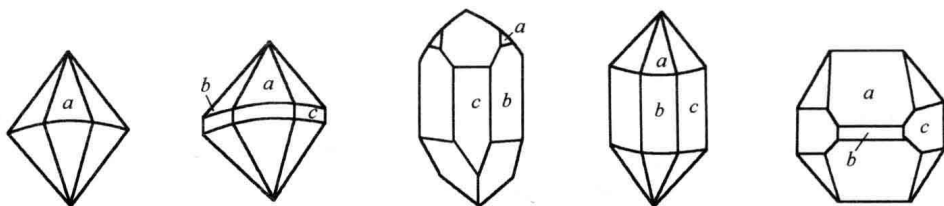


图 1-3 石英晶体的若干外形

晶体的其他主要特征还表现在各向异性、解理性、有固定的熔点等。

各向异性是指晶体的很多物理性质,如光学、磁学、热学等性质随观测方向的不同而变化的现象。例如,石英晶体对平行其光轴的入射单色光,不产生双折射现象;而沿其他方向入射的单色光,会产生双折射现象。双折射现象是指有两束折射光,其中一束的偏折方向符合折射定律,称为寻常光;而另一束折射方向不符合折射定律,称为非常光。

解理性是指当晶体受到敲打、撞击等外力作用时,常具有容易沿某些确定方位的晶面发生劈裂的现象。例如,云母晶体很容易沿着自然层状结构平行的方向劈裂为薄片。这些劈裂的晶面称为解理面。自然界中晶体显露于外的表面往往就是一些解理面。

有固定熔点。例如,晶体硅的熔点是 1417°C , 砷化镓的熔点是 1238°C 。因为组成晶体的原子具有高度长程有序的结构,所以晶体融化的过程也就是有序原子的解体过程,这一过程是在熔点温度下进行的;反之,液态熔体原子的结晶过程也就是在熔点温度下周期性排列,形成有序化晶体结构的过程。非晶体的组成原子不具有长程有序结构,因此也就无固定的熔点。

多晶体由于是大量晶粒随机堆砌而成的,晶粒内的原子长程有序,通常晶粒尺寸在微米、亚微米量级,也可小至纳米或大至毫米以上;而晶界是晶粒之间的过渡区,原子排列不是严格有序的(甚至无

序), 晶界尺寸通常远小于晶粒尺寸。因此, 宏观上多晶体也会有固定的熔点, 但外观形状不规则, 无解理性, 并将呈现各向同性特征。例如, 多晶硅的熔点也是 1417°C , 其物理性质为各向同性。金属、陶瓷等大都为多晶体材料。图 1-4 所示为单晶硅与多晶硅照片。



图 1-4 单晶硅与多晶硅

1.2 晶体的微观结构

晶体的宏观性质取决于构成元素种类, 更取决于构成元素的原子是以何种粒子形态(原子、离子、分子或它们的基团)、以何种方式排列, 即晶体的宏观性质与其微观结构有关。晶体内粒子在空间的排列形成晶体结构。晶体结构的最大特点在于其长程有序性, 即构成晶体的粒子在三维空间内呈周期性的重复排列。

1.2.1 空间点阵

对晶体的微观结构进行描述源自 17 世纪和 18 世纪。在研究方解石的解理性过程中, 阿羽依(Haüy)等人认为晶体是由相同的**基石**(Building Blocks)重复地、规则地排列而成的, 如图 1-5 所示。由于当时条件的限制, 认为重复单元是“实心”的基石, 显然这与物质由原子组成相抵触。19 世纪, 布喇菲(Bravais)提出了空间点阵(Space Lattice)学说, 认为理想晶体可以看做相同的点子, 又称**格点**(Lattices Site), 在三维空间呈周期性无限分布所构成的系统, 其中所有的点子是等价的, 这些点子的总体称为**空间点阵**, 又称为**布喇菲点阵**(Bravais Lattices)。20 世纪, X 射线衍射技术从实验上证明了点阵学说描述晶体内部结构的正确性。其后, 空间群理论又充实了空间点阵学说, 形成近代关于晶体几何结构的完备理论。

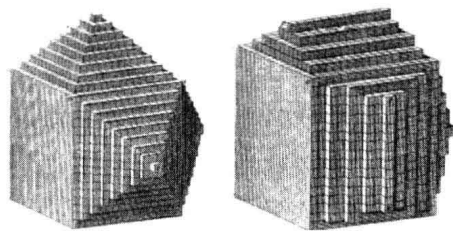


图 1-5 同种“基石”堆砌的两种晶体结构模型

空间点阵学说是晶体结构的一个数学抽象, 它描述的是理想晶体, 即完整且无限的单晶体模型。而空间点阵中的**点子**是将组成晶体的最小结构单元——**基元**抽象成几何的点, 如图 1-6 所示。它反映了晶体结构的周期性(Periodicity)。

基元实质上是指构成晶体的完全相同的原子、分子或原子团, 这里“完全相同”有两方面的含义: 一是原子的化学性质完全相同, 二是原子的周围环境完全相同。在无限大的理想晶体中, 各个基元周围原子的排列情况是完全相同的, 在每个基元内部, 各个原子的情况可能是不完全相同的, 或者原子的化学性质不同, 或者原子周围的环境不同; 但在任意两个基元中, 相应位置处原子的情况则一定是完全相同的。

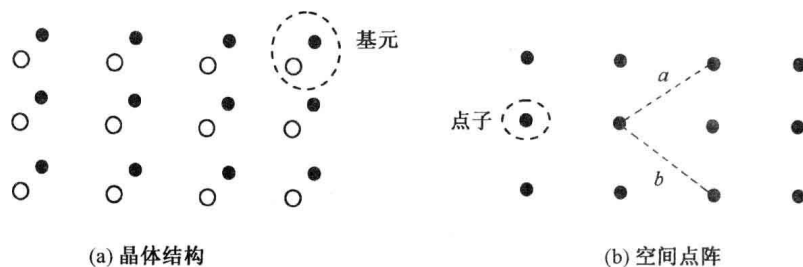


图 1-6 空间点阵示意图

有些晶体的基元只含有一个原子，如铜、金、银等；有些晶体的基元含有成千上万个原子，如蛋白质晶体的基元含多达 10 000 个以上的原子。而常用半导体硅、锗、砷化镓晶体的基元含有两个原子，虽然硅、锗都是单质晶体，基元中两个原子的化学性质相同，但它们的周围环境不同(见 1.2.3 节)。

空间点阵中的点子忽略了晶体结构中基元内原子分布的细节，用一个几何点来代表基元的位置。如果晶体是由完全相同的一种类原子所组成的话，点子可以是原子本身的位置；当基元由多个原子组成时，则点子可以是其中任何一种类原子的位置，如图 1-6(b) 所示。关键在于各个基元中相应点子的位置必须是相同的，即空间点阵中每一个点子都是严格的等有点，点子周围环境(原子分布)完全相同。

空间点阵与晶体结构的逻辑关系是：

$$\text{空间点阵} + \text{基元} = \text{晶体结构}$$

晶体结构的周期性表现在理想晶体是基元沿空间点阵不同方向，按一定的距离周期性地平移构成的。每一个平移距离称为周期(Period)。特别值得注意的是，晶体的周期总是具有方向性的，一个方向对应一个周期值，不同方向上的周期一般不同。在图 1-6(b) 中， a 、 b 就是空间点阵中两个不同方向的周期。

1.2.2 平移矢与晶格

为了便于用数学方法来表征晶体结构，常将空间点阵的各点子之间用直线相连形成网络，称为布喇菲格子或空间格子。因此，空间点阵中的点子又称为**格点**。如图 1-7 所示，若以空间点阵中任一格点为原点向 3 个不在同一直线上的近邻格点引线，且标出方向， a 、 b 、 c 这 3 个矢量称为该空间点阵的**平移矢**。在平移矢的起始点有格点，平移矢在空间平移就得到空间点阵。因此，若给出一个空间点阵的平移矢，该空间点阵也就确定了。

已知空间点阵的平移矢 a 、 b 、 c ，若以 $O(a, b, c)$ 为坐标系，则其任一格点的**格矢** R 也就确定了，有

$$R_n = n_1 a + n_2 b + n_3 c \quad (1-1)$$

在图 1-7 所示的布喇菲格子中，格矢为 R 的格点坐标 $(n_1 n_2 n_3)$ 为：(3 1 3)。

晶体中原子形成的网格称为晶格。如果晶体由完全相同的一种原子构成，即基元只包含一个原子，这时晶格中的每一个原子都对应着一个格点，与空间格子是一样的，这样的晶格称为布喇菲晶格，又称简单晶格或单式晶格。如果晶体由两种类以上原子构成，基元包含了两个或两个以上的原子，则这种晶格称为复式格子(晶格)。在复式格子中，每一种同种类原子形成的网格与布喇菲格子有相同的几何结构，整个晶格可以看做由若干不同种类原子所形成的布喇菲格子相互位移套构而成。如图 1-8 所示，基元含两种类原子，是复式格子，两种原子各自构成的网格(称子晶格)都是布喇菲格子，子晶格的数目等于基元中所含的原子数。

铜、金、银等晶体的基元只含有一个原子，它们的晶体结构都是简单晶格；而常用半导体硅、锗、砷化镓晶体的基元含有两个原子。砷化镓是由砷子晶格和镓子晶格平移套构形成的复式格子；硅和锗虽然都是单质晶体，但它们的晶体结构也都是复式格子。

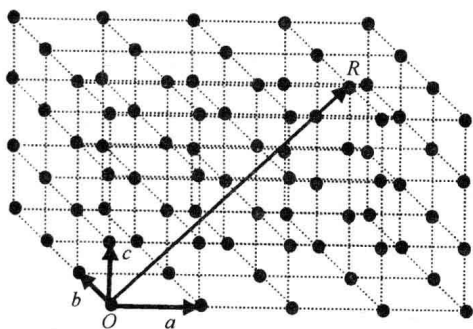


图 1-7 布喇菲格子示意图

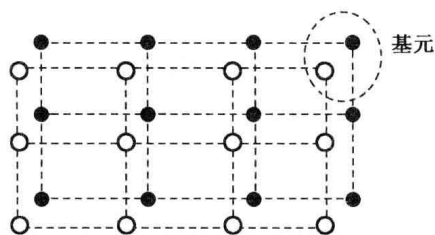


图 1-8 复式格子示意图

空间格子与晶体结构的逻辑关系是：

$$\text{复式格子} = \text{晶体结构}$$

1.2.3 原胞与晶胞

除了采用空间点阵和晶格的概念来描述晶体周期性的微观结构之外，采用重复体单元来描述晶体的微观结构也是一种常用的方法。

在图 1-7 中，以平移矢 a 、 b 、 c 为边构成的平行六面体作为重复单元来反映晶格的周期性，则整个晶体可以看做由其在空间分别沿 a 、 b 、 c 方向重复排列构成的。如果这个六面体是晶体的最小重复体积单元，则称为晶体的原胞 (Primitive Cell)，又称为初基原胞或固体物理学原胞，将平移矢称为**基矢**，用 a_1 、 a_2 、 a_3 表示，原胞的体积 Ω 为

$$\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3) \quad (1-2)$$

原胞作为晶体的最小重复单元，格点在重复单元顶点上，原胞只包含一个格点，平行六面体有 8 个顶角，每个顶角的格点归 8 个原胞所有，因此一个原胞包含的格点数应为： $8 \times \frac{1}{8} = 1$ 。

在同一晶格中，原胞的选取不是唯一的，但它们的体积都是相等的。图 1-9 所示是一个二维晶体，图中所绘几个原胞的形状不同，但这几个原胞的面积都相等。

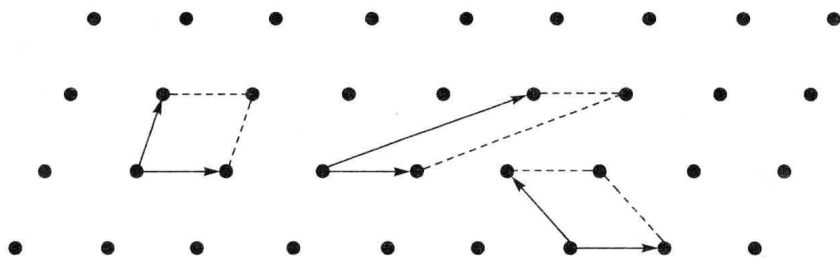


图 1-9 二维晶体原胞选取示意图

晶体除了具有微观结构的周期性之外，还具有特殊的宏观对称性。在结晶学中，为了既能反映晶体的周期性，又能反映其对称性特征，所取的重复体单元不一定是最小的，格点不仅在该重复单元顶角上，也可在体心、面心或其他位置上。但该重复单元边长总是一个周期，且均为晶轴方向。也就是说结晶学中重复单元是按对称性特点选取的，通常取为最小重复单元的几倍，这种能显示对称性的晶格重复单元称为**晶胞** (Unit Cell)，又称为结晶学原胞或惯用原胞。晶胞的 3 个边长 (亦是平移矢) 称为轴矢，常用 a 、 b 、 c 表示，晶胞的体积是原胞体积的整数倍，即

$$a \cdot (b \times c) = n\Omega, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-3)$$

晶体周期重复单元的重要选取方法还有维格纳-赛茨(Wigner Seitz, WS)方法, 这种方法既能体现晶体的对称性, 又是最小的重复单元。

在空间点阵中任选某一个格点为原点 O , 向所有其他格点(往往只是近邻格点)画连接直线, 作这些连线的中垂面。这些平面在 origin 附近围成一个最小的凸多面体, 这一凸多面体中没有任何的连接直线的垂直平分面通过。这样的凸多面体就称为维格纳-赛茨原胞(WS 原胞), 如图 1-10 所示。

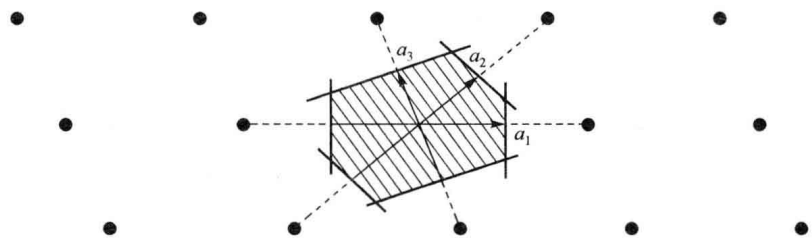


图 1-10 二维空间点阵的 WS 原胞

WS 原胞的结点处于原胞的中心, 而不在原胞的顶角上。通过所有平移矢 a_1 、 a_2 、 a_3 (见图 1-10)作平移, 凸多面体 WS 原胞的重复排列可以无交叠地填满整个空间。因此, 一个 WS 原胞中只包含一个格点, 其体积就是一个格点所拥有的体积, 即原胞体积 Ω 。

1.3 晶格类型与典型结构

实际晶体可以划分为 14 种晶格类型, 通常按照晶胞类型又将这 14 种晶格类型划分为 7 个晶系, 有立方、六方、四方、三方、正交、单斜、三斜晶系。其中三斜晶系是最普通的晶系。立方晶系是结构最简单、也是被研究最多的晶系。常用的半导体硅、锗及砷化镓都是立方晶系晶体, 其中硅、锗是金刚石结构晶体, 而砷化镓是闪锌矿结构晶体。

1.3.1 立方晶系

立方晶系有三种晶格类型: 简(单)立方(Simple Cubic, SC)、体心立方(Body-Centred Cubic, BCC)和面心立方(Face-Centred Cubic, FCC)。图 1-11 给出了这三种晶格的晶胞。

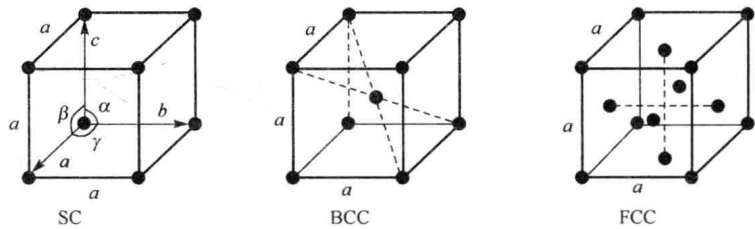


图 1-11 立方晶系的三种晶胞

立方晶系晶胞的 3 个轴矢 a 、 b 、 c 长度相等, 均为晶格常数 a ; a 、 b 、 c 彼此垂直。通常分别将 bc 、 ca 、 ab 轴的夹角记为 α 、 β 、 γ 有 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ 。

1. 简立方

从图 1-11 可以看出, 只有简立方的晶胞与原胞一致, 轴矢与基矢相等, 有

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= a = ai \\ a_2 &= b = aj \\ a_3 &= c = ak \end{aligned} \right\}$$

(1-4)