

超大规模集成电路 工艺原理 ——硅和砷化镓

李永毅 著

电子工业出版社

超大规模集成电路工艺原理

——硅 和 砷 化 镓

〔美〕S·K·甘地 著

章熙康 江绵恒 王 纓 白国仁 译

沈国雄 校

电子工业出版社

内 容 提 要

DS93/22

本书讨论半导体器件和集成电路制造工艺的基本原理，重点是超大规模集成电路制造中的主要工艺，也包括制备分立器件及中规模集成电路用的许多工艺，为研究生和工程师提供 VLSI 领域的广泛的基础知识和把握其发展方向所必备的基本原理。

超大规模集成电路工艺原理

——硅 和 砷 化 镓

VLSI FABRICATION PRINCIPLES

Silicon and Gallium Arsenide

〔美〕S·K·甘地 著

章熙康 江绵恒 王 纛 白国仁 译

沈国雄 校

责任编辑：边 际

*

电子工业出版社出版(北京市万寿路)

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

山东电子工业印刷厂印刷

*

开本：787×1092毫米 1/16 印张：26.875 字数：620千字

1986年12月第1版 1986年12月第1次印刷

印数：1—2,500册 定价：5.50元

统一书号：15290·167

译 序

集成电路是现代化电子技术的基础，它的发展受到了高度的重视。经济发达国家大都已形成了集成电路科研、开发与生产的完整体系。有些国家还把发展集成电路作为国家发展科技和经济的一项重要决策。在国际上，集成电路的发展水平目前已成为衡量一个国家工业和经济发达程度的主要标志之一。

集成电路的发展经历了小规模、中规模和大规模集成化的阶段，目前已经进入超大规模集成化的阶段。随着集成度的提高，器件的尺寸日益缩小。为了获得良好的性能和高的成品率，通过研究微米及亚微米区域中半导体材料的组成、结构与晶体缺陷及其控制方法，建立了一整套适用于工业生产的集成化技术和微细加工工艺。

S. K. Gandhi教授所著《超大规模集成电路工艺原理》一书具有以下特点：1. 全书的重点是超大规模集成电路工艺，但同时顾及了分立器件及中规模集成工艺，并从器件发展的角度加以论述，因此很适合我国集成电路发展的现状。2. 该书着重讲解各单项工艺的基本原理，在此基础上介绍目前通用的工艺以及正在发展中的新工艺。这种论述方法有利于读者迅速掌握各种常规的及新的工艺。3. 书中包括了硅和砷化镓两方面的内容。目前砷化镓器件的应用范围虽然比硅器件小得多，但随着对器件速度与频率的要求不断提高，发展砷化镓集成电路是大势所趋，在超高速领域方面有可能超过硅集成电路。而且目前有关砷化镓集成工艺的专著仍属少见。

因此，电子工业出版社出版S. K. Gandhi所著《超大规模集成电路工艺原理》一书的中译本，我认为是非常适时的。将为从事半导体工艺研究及技术工作的工程技术人员及大专院校的师生和研究生提供一本有用的参考书。

当然，该书也不是没有缺点的，例如在内容编排上，某些章节重点不够突出；没有用足够的篇幅来介绍新工艺的发展趋势等。考虑到该书作为一本教学用书，篇幅有限，对此是不能苛求于作者的。

邹世昌

1985.5 于上海

作者原序

本书讨论半导体器件和集成电路制造工艺的基本原理，重点是超大规模集成(VLSI)电路制造中特别有用的那些工艺过程，但是也包括制备分立器件及中规模集成电路时所用的许多工艺过程，因为它们是VLSI工艺的前身。

撰写本书目的是为研究生及工程师提供有关VLSI工艺原理的丰富知识，使它们不仅能在这一领域内赶上形势，而且能保持领先地位。这是一项困难的任务，因为VLSI是一个迅速发展的领域。我认为，集中精力掌握这一领域广泛的基础知识，并把重点放在把握该领域发展方向的基本原理上，是一种行之有效的方法。作为一名具有13年历史的工程师和19年历史的教授兼产业顾问，我深信这一方法能完全满足从事VLSI工艺研究的工作人员的长期需要。

我的著作经验使我深信，对本书而言上述方法是正确的。1968年，我用这种方法写了一本关于集成电子学的书。使我深感满意的是，尽管14年时间过去了，已经发展了许多新工艺，但是该书仍然是一本受到欢迎的有声誉的书。我认为，这是由于该书的重点放在基本原理上而不是放在最新的工艺细节上的缘故。

《超大规模集成电路工艺原理》一书也是抱着这种想法写成的，但与上述那本书不同，本书的重点是工艺原理。我尽可能不去讨论器件物理方面的问题，因为在这一方面施敏已有一些专著，例如《半导体器件物理》。即使如此，本书的篇幅仍比上述那本书增加一半，因为在这一领域取得了很大的进展。

本书既讨论元素半导体也涉及到化合物半导体。硅显然是当今用得最普遍的材料，并将仍然是电子工业的支柱。但是许多新材料(砷化镓便是其中之一)正在研究之中，因为它们具有独特的性能。砷化镓在工艺上已发展到能用于制备许多具有独特功能的器件和集成电路。砷化镓的开发和研究，已成为当今固态工艺中发展得最快的学科。

从学术上讲，我认为学生在大学里的宝贵时间最好用在熟悉本领域中广泛的基础知识上，而不是在某一特定的工艺领域内过早地专业化。由于在最新的硅工艺中研究人员正在解决的许多问题与他们早年在砷化镓工艺中遇到的问题极为相似，上述观点更为重要。例如，砷在硅中的异常扩散行为是在1975年首先得到解释的，而决定这种行为的数学关系与描述砷在砷化镓中扩散的数学关系完全相同，后者则早在1963年就已提出。因此作者希望阅读本书的学生们能熟悉工艺的全貌，并且根据需要能在半导体生产工艺的任何一个领域中非常灵活地进行工作。

本书着重讨论在集成电路生产中所包含的基本工艺过程。在每一章里首先讨论对各种半导体都共同适用的一些原理，然后根据需要分节讨论硅或砷化镓的有关问题和特点。各章重点是VLSI工艺，但是为了避免局限性太大，也讨论了中规模、大规模集成电路及分立器件的工艺技术。

第一章叙述材料的基本性质，特别是在器件工艺中非常重要的那些性质。接下来第二章讨论相图，这是研究两种或几种材料紧密接触所形成的系统在热处理时的行为的有

力工具。第三章叙述原材料生长的主要问题及各种晶体生长方法的局限性。

第四章至第六章叙述扩散、外延和离子注入等关键工艺。它们是本书的重点，因为这些都是目前采用的关键生产工艺。这里也是强调这些工艺的基本原理，而不是注重于每种工艺的最新进展。不可避免地要略去某些新技术，因为它们在器件生产中最终所起的作用尚不明确。

第七章讨论本征氧化膜，这种氧化膜是由半导体生长出来的，对于控制器件的表面及其长期稳定性起着重要的作用。在本章内，讨论的重点是已被采纳的各种工艺及其局限性。

淀积膜在第八章中讨论。在这方面可供选用的工艺流程很多，无法一一加以详细讨论。因此将这些薄膜按照其功能分为保护及掩蔽用膜，互连用膜，欧姆接触用膜和肖特基器件用膜。作者希望采用这种分类方法可以与本书的主题结合得更好。

第九章概述腐蚀与清洗工艺。讨论了湿法工艺和干法工艺，重点讨论干法工艺，因为它显然代表着VLSI电路制备的方向。

第十章概述光刻工艺的基本原理。本章的重点是光学光刻和电子束光刻。但是，对一些很有发展前途的工艺如X射线光刻工艺也作了讨论。还讨论了各种光刻胶的使用原理。

第十一章讨论了器件和电路的制造工艺，集前面几章之大成，制备出完整的集成电路。本章并不打算叙述可用于电路制作的各种工艺流程，而是首先考察对所用VLSI电路制作都共同适用的基本工艺技术，其中包括隔离、自对准、局部氧化及平面化。然后详细地讨论了MOS、金属-肖特基栅-半导体和双极型晶体管集成电路。列出了大量的参考文献，使读者能够查阅目前正在研制的各种器件结构，但未充分顾及器件的性能和成本。最后有一篇简短的附录，提供了扩散一章所必备的数学基础。

在各章末尽可能列出一些习题，多数习题涉及工艺生产的实际情况，而这些内容在正文中故意没有详加讨论。此外，在每章末都列出了大量的参考文献。选用这些文献并非要大家依样画瓢，而是供读者进一步研究时作参考。

S. K. Ghandhi

1982年11月于纽约州 Niskayuna

目 录

第一章 材料性质	1
1.1 晶体结构	1
1.2 晶轴和晶面	4
1.3 取向效应	6
1.3.1 硅	6
1.3.2 砷化镓	8
1.4 晶体缺陷	9
1.4.1 点缺陷	9
1.4.1.1 热涨落效应	12
1.4.1.2 蒸气压效应	13
1.4.1.3 硅中的杂质	15
1.4.1.4 砷化镓中的杂质	18
1.4.2 位错	22
1.4.2.1 螺旋位错	23
1.4.2.2 棱位错	24
1.4.2.3 位错运动	25
1.4.2.4 位错的增殖	26
1.4.2.5 孪晶	26
1.5 缺陷的电学性质	27
1.5.1 点缺陷	27
1.5.2 位错	28
参考文献	30
习题	31
第二章 相图和固溶度	32
2.1 一元相图	32
2.2 二元相图	33
2.2.1 杠杆规则	33
2.2.2 相律	33
2.2.3 同晶相图	34
2.2.4 共晶相图	36
2.2.5 同组成变化	38
2.2.6 包晶反应及其它反应	40
2.2.7 氧化物体系的相图	44
2.3 固溶度	46
2.4 三元相图	47
2.4.1 等温截面图	49
2.4.2 同组成熔融化合物	49
2.4.3 自由度	50
2.4.4 一些感兴趣的三元体系	50

参考文献	54
第三章 晶体生长和掺杂	55
3.1 原材料	55
3.2 熔体生长方法	57
3.2.1 布里奇曼方法	57
3.2.2 切克劳斯基方法	57
3.2.2.1 液封技术	58
3.2.2.2 直接化合	59
3.2.2.3 完整晶体的生长条件	59
3.3 熔体掺杂	60
3.3.1 快速搅拌条件	61
3.3.2 部分搅拌条件	63
3.3.3 组元过冷	64
3.4 熔体生长晶体的性质	65
3.5 溶液生长	66
3.6 区域熔炼法	67
3.6.1 区熔提纯	67
3.6.2 区熔均匀掺杂法	68
3.6.3 区熔提纯晶体的中子掺杂	69
3.7 区熔材料的性质	70
参考文献	71
习题	72
第四章 扩散	73
4.1 扩散的本质	73
4.1.1 填隙式移动	74
4.1.2 替代式移动	75
4.1.3 填隙-替代式移动	75
4.2 浓度梯度引起的扩散	76
4.2.1 扩散系数	77
4.2.2 场辅助迁移	78
4.2.3 与带电缺陷的交互作用	79
4.2.4 离解过程	81
4.3 硅中杂质的性质	82
4.3.1 替代式扩散杂质	83
4.3.2 填隙-替代式扩散杂质	87
4.4 砷化镓中杂质的性质	90
4.5 扩散方程	92
4.5.1 D =常数的情形	92
4.5.1.1 恒定源扩散	92
4.5.1.2 有限源扩散	94
4.5.1.3 两步法扩散	95
4.5.1.4 逐次扩散	97
4.5.2 $D=f(N)$ 的情形	97
4.5.2.1 填隙-替代式扩散杂质	98
4.5.2.2 替代式扩散杂质	99

4.5.3 侧向扩散效应	101
4.6 扩散系统	102
4.6.1 掺杂源的选择	104
4.6.2 玷污控制	106
4.7 硅的扩散系统	107
4.7.1 硼	107
4.7.2 磷	109
4.7.3 砷	110
4.7.4 锑	111
4.7.5 金和铂	111
4.8 硅扩散的一些具体问题	111
4.8.1 氧化物生长过程中的再分布	112
4.8.2 硅中的硼	114
4.8.3 硅中的砷	114
4.8.4 硅中的磷	114
4.8.5 发射极—推挤效应	116
4.8.6 金和铂的择优掺杂	118
4.9 砷化镓的扩散系统	118
4.9.1 三元系观点	119
4.9.2 封管扩散	120
4.9.3 开管扩散	124
4.9.4 掩蔽扩散	125
4.10 扩散层的检验技术	126
4.10.1 结深	126
4.10.2 薄层电阻	127
4.10.3 表面浓度	128
4.10.4 硅中的扩散层	128
4.10.4.1 高浓度扩散层	132
4.10.5 砷化镓中的扩散层	133
参考文献	136
习题	139
第五章 外延	140
5.1 气相外延(VPE)	141
5.1.1 反应物输运	141
5.1.2 衬底上的反应物气流	142
5.1.3 衬底上的反应	144
5.1.4 成核与生长	144
5.1.5 稳态生长	146
5.1.6 外延系统设计	148
5.2 硅气相外延工艺	150
5.2.1 外延生长的化学原理	160
5.2.2 外延系统和工艺	151
5.2.3 生长前的原位腐蚀	152
5.2.4 生长时的杂质再分布	152
5.2.4.1 侧向自掺杂	156

5.2.5 选择外延	157
5.2.5.1 图形漂移	158
5.2.6 生长缺陷	158
5.3 砷化镓气相外延工艺	160
5.3.1 概述	160
5.3.2 生长对策	162
5.3.3 Ga-AsCl ₃ -H ₂ 工艺	162
5.3.4 Ga-AsH ₃ -HCl-H ₂ 工艺	164
5.3.5 (CH ₃) ₃ Ga-AsH ₃ -H ₂ 工艺 ^[40]	164
5.3.6 掺杂	166
5.3.7 取向效应	167
5.3.7.1 选择外延	169
5.3.8 生长缺陷	170
5.4 液相外延(LPE)	170
5.4.1 溶剂的选择	171
5.4.2 成核	172
5.4.3 生长	173
5.4.3.1 组元过冷	176
5.4.4 原位腐蚀	176
5.4.5 掺杂	177
5.5 液相外延系统	178
5.5.1 流体力学	178
5.5.2 垂直系统	179
5.5.3 水平系统	179
5.5.4 生长缺陷	181
5.6 异质外延	181
5.6.1 蓝宝石上生长硅	181
5.6.2 在砷化镓上生长铝镓砷	182
5.6.2.1 气相外延生长	183
5.6.2.2 液相外延生长	183
5.7 外延层的检验	183
5.7.1 薄层电阻	184
5.7.2 迁移率和载流子浓度	185
5.7.3 杂质截面	187
参考文献	188
习题	191

第六章 离子注入192

6.1 穿透深度	193
6.1.1 核阻止	196
6.1.2 电子阻止	199
6.1.3 射程	200
6.1.4 侧向效应	204
6.2 注入损伤	207
6.3 退火	209
6.3.1 硅的退火特性	210

6.3.2 砷化镓的退火特性	212
6.4 离子注入系统	216
6.4.1 离子源	218
6.4.2 加速器	219
6.4.3 质量分析器	219
6.4.4 离子束扫描	220
6.4.5 束流测量	221
6.5 注入工艺	222
6.5.1 退火时的扩散效应	222
6.5.2 多次注入	222
6.5.3 掩蔽	224
6.5.4 注入层接触	226
6.5.5 通过氧化膜注入	227
6.5.5.1 结	227
6.5.5.2 电阻器	228
6.6 离子注入在硅中的应用	229
6.6.1 双极型器件	229
6.6.2 MOS器件	230
6.7 离子注入在砷化镓中的应用	232
6.7.1 场效应晶体管器件	233
6.7.2 集成电路	234
参考文献	235
习题	237
第七章 本征氧化膜	238
7.1 硅的热氧化	238
7.1.1 本征氧化硅玻璃	238
7.1.2 掺杂氧化硅玻璃	239
7.1.2.1 替代式杂质	239
7.1.2.2 填隙式杂质	240
7.1.2.3 水汽	240
7.1.3 氧化物的生成	241
7.1.4 氧化物生长动力学	242
7.1.4.1 早期生长阶段	243
7.1.4.2 掺杂效应	245
7.1.4.3 取向效应	245
7.1.5 氧化系统	246
7.1.6 卤化物氧化系统	249
7.1.7 氧化诱发的层错	250
7.1.8 硅热氧化膜的性质	250
7.1.8.1 掩蔽性质	250
7.1.8.2 电荷态	252
7.1.8.3 热电子效应	254
7.2 砷化镓的热氧化	255
7.3 阳极氧化	256
7.3.1 氧化物生长	258

7.3.2 阳极氧化系统	259
7.3.3 阳极氧化膜的性质	260
7.4 等离子体的阳极化	261
7.5 氧化膜的检验	262
参考文献	264
习题	266
第八章 淀积膜	267
8.1 保护膜及掩膜	267
8.1.1 二氧化硅	268
8.1.2 磷硅玻璃	269
8.1.3 氮化硅	271
8.1.3.1 氮氧化硅	272
8.1.4 非晶硅膜	272
8.1.5 自对准掩膜	273
8.1.5.1 多晶硅	274
8.1.5.2 硅化物	276
8.1.5.3 难熔金属	277
8.2 掺杂用薄膜	278
8.2.1 硅的掺杂源	279
8.2.2 砷化镓的掺杂源	280
8.3 互连用膜	281
8.3.1 单层金属互连	283
8.3.2 电迁移效应	284
8.3.3 多层金属互连	285
8.4 欧姆接触用膜	286
8.4.1 单层接触	287
8.4.2 Kirkendall 效应	288
8.4.3 多层接触	290
8.4.4 管芯键合	292
8.5 肖特基二极管用膜	293
参考文献	298
第九章 腐蚀与清洗	302
9.1 湿法化学腐蚀	303
9.1.1 晶体材料	303
9.1.2 硅的腐蚀	304
9.1.3 砷化镓的腐蚀	306
9.1.4 各向异性腐蚀	308
9.1.4.1 硅	310
9.1.4.2 砷化镓	310
9.1.5 结晶学腐蚀	310
9.1.6 非晶薄膜	311
9.1.6.1 二氧化硅膜	312
9.1.6.2 磷硅玻璃(PSG)	312
9.1.6.3 混合氧化物	313
9.1.6.4 氮化硅	313

9.1.6.5 多晶硅和半绝缘多晶硅	314
9.1.6.6 硅化物	315
9.1.6.7 金属	315
9.2 等离子腐蚀	315
9.2.1 去胶	317
9.2.2 负载效应	318
9.2.3 图形刻蚀	319
9.3 等离子辅助腐蚀	322
9.3.1 溅射腐蚀	323
9.3.2 离子磨蚀	325
9.4 清洗	326
9.4.1 肖特基二极管及肖特基栅	328
参考文献	334
习题	338
第十章 光刻工艺	339
10.1 图形发生及制版	339
10.1.1 光学制版	340
10.1.2 电子束技术 ^[2,3]	342
10.2 光刻及腐蚀	343
10.2.1 光学光刻技术	344
10.2.1.1 剥离技术	347
10.2.2 电子束光刻	348
10.2.3 离子束光刻	350
10.2.4 光电子光刻	350
10.2.5 X射线光刻 ^[21]	351
10.2.6 光刻胶	352
10.3 缺陷	354
10.3.1 掩模版缺陷	355
10.3.2 光刻及腐蚀缺陷	355
参考文献	357
第十一章 器件和电路的制造工艺	359
11.1 隔离	359
11.1.1 台面隔离	360
11.1.2 氧化隔离	360
11.1.3 $p-n$ 结隔离	362
11.2 自对准	363
11.3 局部氧化	364
11.4 平面化	367
11.5 金属布线	369
11.6 吸杂	370
11.7 MOS 集成电路	371
11.7.1 p 沟道晶体管	372
11.7.2 n 沟道晶体管	372
11.7.3 互补晶体管	373

11.7.4 不挥发存储器	375
11.7.5 硅-蓝宝石器件	376
11.8 金属半导体场效应集成电路	377
11.8.1 耗尽型晶体管	377
11.8.2 增强型晶体管	379
11.8.3 数字电路制造方法	380
11.9 BJT集成电路	381
11.9.1 埋层	382
11.9.2 晶体管类型的选择	383
11.9.3 晶体管的性能	384
11.9.3.1 击穿电压	384
11.9.3.2 增益-带宽积	385
11.9.3.3 有源寄生	385
11.9.4 $p-n-p$ 晶体管	386
11.9.5 专用双极型晶体管	387
11.9.6 场效应晶体管	388
11.9.7 自隔离VLSI 晶体管	389
11.9.8 二极管	391
11.9.8.1 肖特基二极管	393
11.9.9 电阻	393
11.9.9.1 扩散形成的电阻	393
11.9.9.2 离子注入电阻	396
11.9.9.3 薄膜电阻	396
11.9.10 电容	396
参考文献	399
附录 扩散数学	403
A.1 扩散系统恒定时的解	403
A.1.1 反射和叠加原理	403
A.1.2 推广的初值条件	403
A.1.3 狭缝扩散	404
A.1.4 几种常用的解	407
A.1.5 一些常用的误差函数关系	408
A.1.6 向半无限物体扩散的通解	408
A.2 扩散系数与时间有关时的解	410
A.2.1 扩散炉的斜坡式变温	410
A.3 扩散系数与浓度有关时的解	411
A.4 扩散系数的确定	413
A.4.1 $p-n$ 结法	413
A.4.2 Boltzmann-Matano 方法 ^[5]	413

第一章 材料性质

虽然许多元素和金属间化合物具有半导体性质,但在半导体器件和现代集成电路生产中几乎都是用硅材料。选择硅材料的原因很多,其中最主要的是以下几点:

1. 硅是元素半导体。和锗一样,硅能够经受各种工艺处理而不分解,而化合物半导体则可以分解。正是由于这个原因,研究硅的性质要比研究化合物半导体的性质容易得多。因此,人们目前对于超纯单晶锗和单晶硅的制备和材料性质的认识,也许要比对周期表中任何其他元素的了解都更为深刻。

2. 硅的能隙比锗宽,因此与锗相比,用硅制作的集成电路能在较高的温度下工作。目前硅集成电路工作环境温度的上限在 $125\sim 175^{\circ}\text{C}$ 之间,这对很多军事方面的应用已完全足够。

3. 硅很适宜于表面钝化处理。在表面上热生长一层二氧化硅,对于下面的器件起着很好的保护作用。尽管在制造金属-氧化物-半导体(MOS)晶体管这样的器件中,一直强调热生长的二氧化硅不能完全控制表面现象,但是可以说,由于钝化技术的发展^[1],用硅做集成电路原材料肯定比用锗更为有利。因此,利用硅的特性建立了有效的工艺基础,包括硅层的淀积和掺杂等许多先进工艺的开发,以及形成和确定超大规模集成电路复杂图形的尖端设备。

硅并不是在各方面都是最佳的。例如砷化镓的低场迁移率就比硅高,因此砷化镓器件有小的寄生参数和好的频率响应。硅的另一个更严重的不利因素在于硅是间接带隙半导体,因此,许多重要的电光应用不可能用硅器件及其集成电路。

化合物半导体独特的性质使其具有硅达不到的性能,在这些领域里化合物半导体具有最巨大的影响,例如转移电子器件、光发射二极管、激光器和红外光探测器。目前正在研究的各种化合物半导体中砷化镓是工艺上最成熟的。近年来已经证明^[2]用砷化镓制作通常的高速器件,特别是肖特基栅场效应晶体管,其速度为硅器件的 $3\sim 4$ 倍^{*}。只是最近,砷化镓高速度的优点才在数字逻辑电路中得到发挥^[3]。砷化镓器件的制造工艺也在迅速发展,所以硅和砷化镓构成了现代半导体器件和集成电路的基础。

这一章讨论硅和砷化镓的一些材料性质,因为这些性质关系到器件的生产工艺和电学性能。

1.1 晶体结构

硅和砷化镓都属于立方晶体。属于这一类的晶体具有下面几种结构类型:

1. 简单立方(S. c.)晶体 如图1.1(a)所示。很少几种晶体具有这样简单的结构,例如钋只有在在一个狭窄的温度范围内才显示出这种结构。

2. 体心立方(b. c. c)晶体 如图1.1(b)所示。钼、钽和钨都具有这种晶体结

* 三元化合物像GaInAs器件可能还要快2倍,但它们的生产工艺尚未成熟,这里未予讨论。

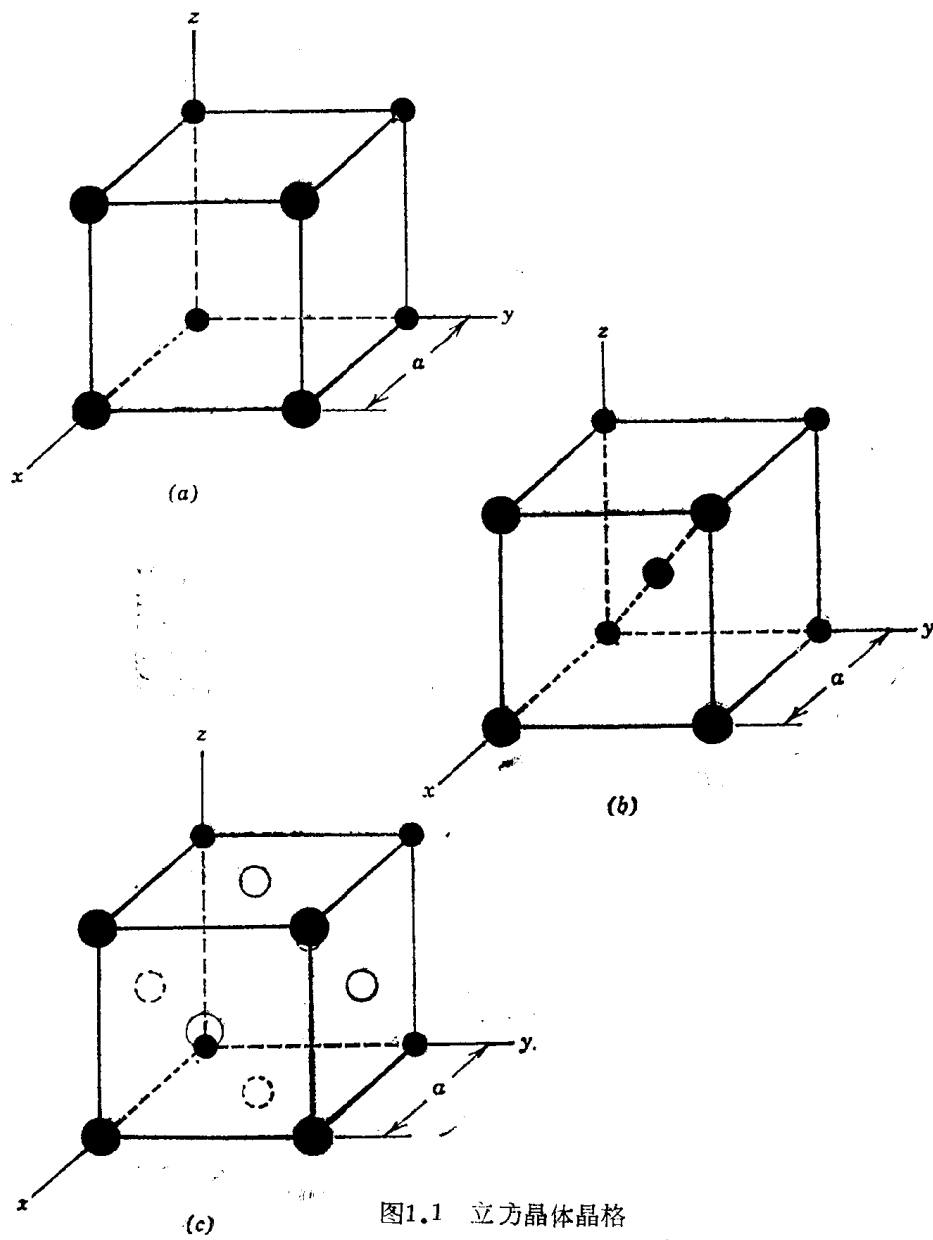


图1.1 立方晶体晶格

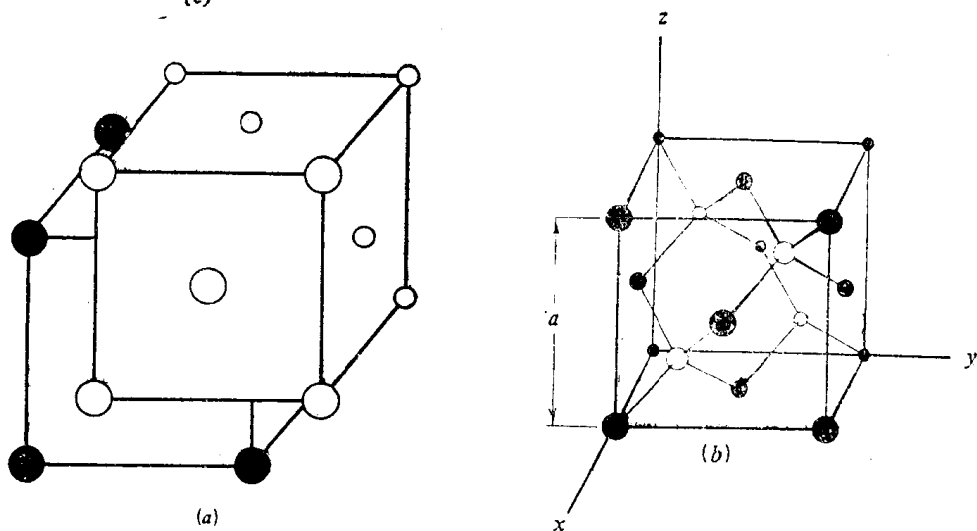


图1.2 闪锌矿晶格

结构。

3. 面心立方(f. c. c)晶体 如图1.1(c)所示。铜、金、镍、铂和银等许多元素都属于这种结构(图中面心原子和顶角原子画法不同只是为了图示清楚)。

4. 闪锌矿结构 这种结构是由两个互相嵌套的面心立方子晶格构成,其中第二个子晶格的一个原子位于第一个子晶格体对角线的四分之一处。闪锌矿结构的示意图见图1.2(a)和(b);图中实心点属于第一个子晶格,空心点属于第二个子晶格。在砷化镓晶体里,每一个子晶格只包含一种类型的原子(或者是镓或者是砷原子)。金刚石晶格是闪锌矿结构的一种简并形式,其中每一个子晶格的原子都相同。硅属于金刚石结构。

闪锌矿晶格中各个原子的位置可以按立方体边长 a 的倍数来计算。例如对于面心立方结构,其各个顶角晶格位置的坐标是 $0, 0, 0; 0, 1, 0; 0, 0, 1; 0, 1, 1; 1, 0, 0; 1, 1, 0$ 和 $1, 1, 1$ 。面心位置的坐标分别是 $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ 。对于闪锌矿晶格,必须包括第二个子晶格的坐标,它位于离第一个子晶格的坐标 $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$ 处。在原胞里,第二个子晶格的格点坐标分别是 $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}$ 和 $\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}$;在图1.2(b)中,其位置用空心点表示,而实心点则代表第一个子晶格的格点。关于这种结构有以下几点说明:

1. 这种晶格的配位数是4,即每一个原子有四个属于不同子晶格的最近邻原子。在硅晶体中每一个硅原子有四个价电子,同四个最近邻的硅原子形成共价键。但是在砷化镓晶体中,每一个砷原子(有五个价电子)最近邻是四个镓原子,而每一个镓原子有三个价电子。同样,每一个镓原子(有三个价电子),四个近邻的砷原子有五个价电子。这些镓-砷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。在

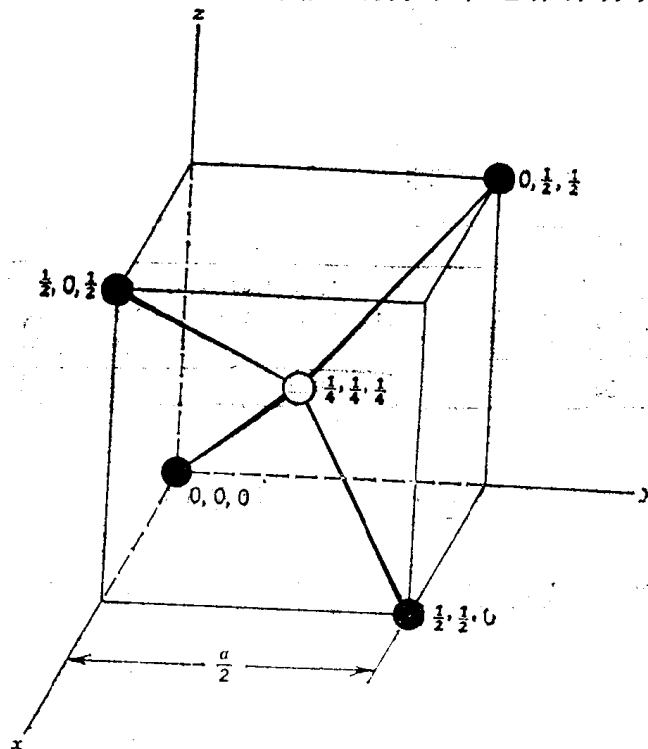


图1.3 闪锌矿子原胞