

功率晶体管原理

GONGLV
JINGTIGUANG
YUANLI

万积庆 唐元洪 编著

功率晶体管原理

万积庆 唐元洪 编著

湖南大学出版社

2009年·长沙

内 容 简 介

本书首先介绍 Si 和 SiC 材料的基本物理特性、PN 结的终端造型技术,并讨论肖特基二极管、PIN 整流二极管、功率晶体管的基本结构与特征参数;然后深入讨论功率 MOSFET 和 IGBT 的元胞结构、阻断特性、正向导通特性、开关特性及其基础工艺。

本书可以作微电子技术、微电子学、电子科学与电子技术、电力电子技术专业本科生教材或教学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

功率晶体管原理/万积庆,唐元洪编著.

—长沙:湖南大学出版社,2008.12

ISBN 978-7-81113-491-9

I. 功... II. ①万... ②唐... III. 微电子技术—电子器件—理论—高等学校—教材

IV. TN4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2007)第 196009 号

功率晶体管原理

Gonglǚ Jingtiguan Yuanli

作 者: 万积庆 唐元洪 编著

责任编辑: 严小涛

封面设计: 维思广告

出版发行: 湖南大学出版社

社 址: 湖南·长沙·岳麓山

邮 编: 410082

电 话: 0731-8822559(发行部), 8821334(编辑室), 8821006(出版部)

传 真: 0731-8649312(发行部), 8822264(总编室)

电子邮箱: yanxiaotao@hnu.cn

网 址: <http://press.hnu.cn>

印 装: 湖南航天长宇印刷有限责任公司

开本: 787×1092 16 开

印张: 17.5

字数: 405 千

版次: 2009 年 3 月第 1 版

印次: 2009 年 3 月第 1 次印刷

印数: 1~2 000 册

书号: ISBN 978-7-81113-491-9/TN·24

定价: 43.00 元

前 言

近年来应用超大规模集成电路技术开发功率半导体器件的研究已经取得很大进展,出现了大规模元胞集成结构.新一代功率半导体器件的制造技术已经进入亚微米时代,制造出了像功率 MOSFET 和 IGBT 等性能优良的功率半导体器件,改善了器件的大功率、高温、高频特性.这些器件已经广泛应用于科学技术、生产和生活各个方面,并与集成电路一起成为推动国家经济持续发展的基础产品.

《功率晶体管原理》是电子科学与电子技术专业“晶体管原理课”多年来选用的补充教材,现整理、补充近年来发展的新工艺、新器件结构和新材料,主要讨论功率半导体器件集成结构的基本元胞、基本原理和基础工艺等.

全书共 6 章,第 1 章为材料参数物理.讨论半导体材料的晶体结构、能带理论和材料参数.第 2 章讨论 PN 结的击穿和终端造型技术.第 3 章至第 6 章分别讨论功率肖特基整流二极管、PIN 二极管、功率晶体管、功率 MOSFET 和 IGBT 的结构、工作原理和器件参数,及其制造工艺.这 5 类器件是功率器件中最典型的结构.它们的基本工作原理也是阐述其他功率器件工作原理的基础.另外还编入了 SiC 材料特性、SiC 器件制造工艺的特点以及研制的进展.除了不断地改进器件的结构和加工技术之外,寻找制造功率器件的新材料是很重要的.SiC 材料比 Si 具有禁带宽度大、击穿强度高、热导率高和饱和漂移速度快等优良特性,因此 SiC 是制造高频、大功率、耐高温和抗辐射功率器件的理想材料.

本书的主要参考文献列在每章末尾.如果读者希望对功率微电子器件的理论和动态有更深入的了解,建议读者阅读 B. J. Baliga 著《Power Semiconductor Device》(1995 PWS 出版)和 IEEE 月刊《Transactions on Electron Device》的相关文献.

本书内容与《晶体管原理》连接,具有从材料参数物理到器件结构、原理和工艺的较完整的体系.它可作为微电子技术、微电子学、电子科学与电子技术专业的教材,也可供电力电子技术相关专业的本科生和研究生参考.

目 次

第 1 章 材料参数物理	(1)
1.1 半导体的晶体结构	(1)
1.2 能带理论	(4)
1.3 热平衡载流子	(12)
1.4 硅中载流子迁移率	(21)
1.5 硅的电阻率	(30)
1.6 寿 命	(35)
1.7 电流方程和连续方程	(45)
1.8 SiC 材料特性及器件工艺特点	(46)
习 题	(55)
参考文献	(56)
第 2 章 PN 结的击穿与终端造型技术	(58)
2.1 PN 结空间电荷区的电场和电位分布	(58)
2.2 雪崩击穿	(61)
2.3 柱面结与球面结	(66)
2.4 台面终端	(70)
2.5 刻蚀造型与钝化	(74)
2.6 离子注入展宽 PN 结终端	(77)
2.7 浮置限场环	(79)
2.8 场 板	(83)
2.9 限场环与场板复合结构	(87)
习 题	(90)
参考文献	(91)
第 3 章 功率整流二极管	(93)
3.1 肖特基整流二极管	(93)
3.2 碳化硅肖特基势垒整流二极管	(105)
3.3 PIN 整流二极管	(113)
3.4 PIN 肖特基组合整流二极管(MPS)	(124)
习 题	(125)
参考文献	(126)
第 4 章 双极功率晶体管	(128)
4.1 大注入效应	(128)

4.2	基区扩展效应	(134)
4.3	发射极电流的集边效应	(140)
4.4	动态开关特性	(142)
4.5	静态阻断特性	(147)
4.6	达林顿功率晶体管	(148)
4.7	晶体管的最大耗散功率	(150)
4.8	二次击穿和安全工作区	(154)
4.9	巨型功率晶体管的设计与制造(GTR)分析	(160)
	习 题	(172)
	参考文献	(172)
第 5 章 功率 MOSFET		(173)
5.1	基本结构和工作原理	(173)
5.2	电容-电压特性($C-V$ 特性)	(175)
5.3	伏安特性	(182)
5.4	静态阻断特性	(188)
5.5	正向导通特性	(192)
5.6	反向导通特性	(199)
5.7	频率特性	(201)
5.8	开关特性	(204)
5.9	安全工作区	(210)
5.10	器件结构和工艺	(215)
5.11	碳化硅功率 MOSFET	(221)
	习 题	(225)
	参考文献	(225)
第 6 章 绝缘栅双极晶体管		(228)
6.1	IGBT 的结构与工作原理	(228)
6.2	稳态阻断特性	(230)
6.3	正向导通特性	(232)
6.4	非穿通和穿通型 IGBT 的 $I-V$ 特性	(238)
6.5	闩锁电流密度	(241)
6.6	安全工作区(S-O-A)	(250)
6.7	安全工作区的模拟实验分析	(253)
6.8	开关特性	(257)
6.9	开关特性的模拟实验分析	(261)
6.10	IGBT 新结构	(265)
	习 题	(271)
	参考文献	(271)

第 1 章 材料参数物理

近年来,采用微电子精细结构加工技术开发功率半导体器件已经取得成功,且生产出一系列性能优良的功率微电子器件.这种器件在家用电器、通信、电力系统以及交通运输中得到广泛应用.同时研究发现,其大电流控制能力、高电压阻断能力、高频响应、开关速度和开关功耗还没有达到对理想功率器件的要求.究其原因,主要是受到硅材料特性的限制.因此,要开发出理想的功率器件,除了改进器件结构和加工技术之外,寻找新的制作器件的材料是很重要的.

半导体材料所表现出的特性来源于其内部电子可以做多种多样的运动,因此,要了解材料特性、开发出优良的功率器件,就必须了解半导体中的电子运动规律.为此,本章介绍半导体晶体结构、电子的量子态、能带理论,重点讨论载流子的统计分布、载流子的迁移率、电阻率及其寿命,以为讨论功率器件的特性、优化功率器件参数提供有用的公式和数据.

支配器件工作特性的是材料基本特性,但用来控制材料特性的加工技术和加工功率器件的工艺技术,对于功率器件理想特性的获得也是十分重要的,因此,本章另一个重点是讨论制造功率器件的特殊加工技术,如中子嬗变掺杂控制材料的电阻率以及电子辐射控制少数载流子寿命等.

最后一节介绍碳化硅材料.碳化硅材料具有许多优良特性,它是制作高温、高频和大功率器件的理想材料.

1.1 半导体的晶体结构^[1]

半导体中的载流子浓度及其分布与半导体中原子排列有关,原子整齐地排列成晶体.因此,要讨论半导体中载流子状态,就必须了解半导体的晶体结构.

1.1.1 晶胞

用于生产功率半导体器件的材料,如硅、砷化镓、碳化硅等都是由四面体键结合成晶体的,每个原子周围有四个原子位于四面体四个顶角上.晶体的特点是原子排列具有周期性,晶体结构具有对称性.每一种晶体都可以找到一个最小重复单元,这个单元的性质可概括整个晶体的特点,这个单元称为晶胞.人们根据晶胞的形状把晶体分成七大晶系,上述半导体材料属于立方晶系.图 1.1(a)所示为属立方晶系的 3 种晶胞(简单立方、体心立方、面心立方)结构.四面体键合结构的半导体材料都属金刚石结构或闪锌矿结构,它是两个面心立方套构而成的复式晶胞^[1].

图 1.1(b)中用箭头表示晶格内四个原子可以由面心晶格上的原子(白球)经过平移得到.平移方向是沿对角线方向,平移距离是体对角线的 $1/4$.这实际上就是说各晶胞内的原子(黑球)也构成一个面心立方晶格,它和原来的面心立方晶格(白球)相比只是沿体对角线

平移1/4.图 1.1(b)为一个面心立方晶胞(白球),经过沿体内对角线平移 1/4,正好到达各晶胞内原子位置(黑球).图 1.1(c)说明金刚石结构可以由两个面心立方晶格套构而成.

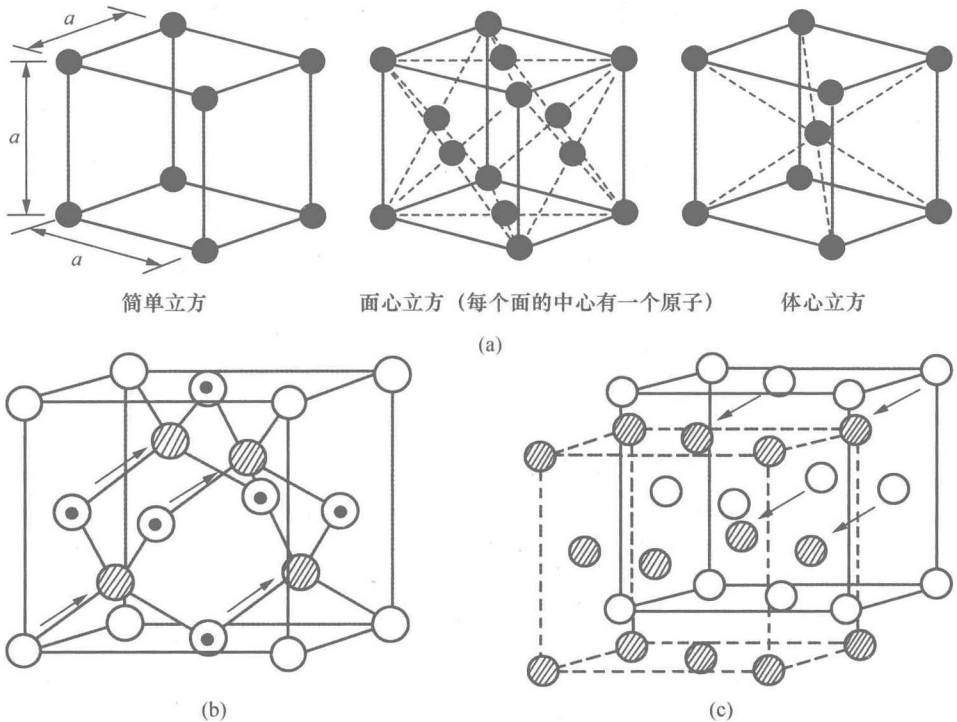


图 1.1 立方晶系的晶胞、金刚石结构及闪锌矿结构晶胞

1.1.2 基矢

晶胞中各原子的位置可用基矢表示.立方晶系的晶胞为立方体,取其任意顶点作原点,立方体三个边作坐标轴,三轴上与原点最近距离的原子与原点距离作为单位长度,分别以 a, b, c 表示为基矢,晶胞中某原子的位置可用基矢矢量和表示:

$$l = ma + nb + pc. \quad (1.1)$$

m, n, p 是整数,如金刚石结构与原点相对应的顶角原子的位置可写成:

$$l = a + b + c. \quad (1.2)$$

一个晶胞的体积:

$$V = a \cdot b \cdot c. \quad (1.3)$$

对于立方晶系, $a = b = c$,称为晶格常数.

1.1.3 晶向和晶向指数

晶体的一个基本特点是具有方向性,沿晶格不同方向晶体性质不同.功率器件实际使用的硅单晶材料都是按一定的方向生长的,用晶向指数标识单晶生长方向如 $[111]$ 和 $[100]$ 方向.

确定晶向指数 $[111]$ 或 $[100]$,首先要根据晶格结构规定一个坐标系,对于立方晶格,规

定的坐标轴平行于立方体的三个边,三个轴互相垂直,分别称为 x, y, z 轴,如图 1.2 所示。

为了确定晶向指数,可以取晶体中任意点作坐标原点,在确定某一晶向指数时,只要通过原点作沿该晶向的直线,然后从原点出发沿直线找到第一个格点坐标 (x, y, z) 分别除以晶格常数 a 就得到该晶向指数,一般写在方括号内。

图 1.3 画出了三个方向的晶向指数, x 轴是一个立方体边的方向,第一个格点为 A , 坐标为: $x=a, y=0, z=0$, 分别除以 a 得到立方体边的晶向指数为 $[100]$ 。图 1.3 中 OB 是面对角线,格点 B 的坐标为: $x=a, y=a, z=0$, 分别除以 a 得面对角线方向的晶向指数为 $[110]$ 。体对角线 OC , 沿线第一个格点 C 的坐标为: $x=a, y=a, z=a$, 分别除以 a , 得体对角线方向的晶向指数为 $[111]$ 。

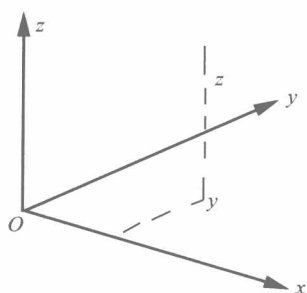


图 1.2 直角坐标系

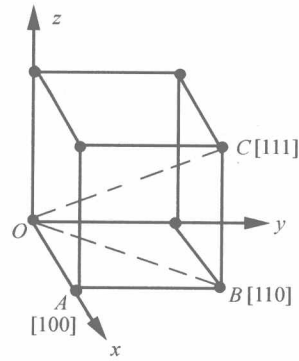


图 1.3 晶向指数

1.1.4 晶面与面指数

晶格中的格点不仅按照平行直线排列成行,而且还排列成一层层平行平面,由格点组成的平面称晶面,一个格点可以在不同方向上组成晶面,图 1.4 画出了几组不同晶面。下面说明这些晶面如何用不同的晶面指数(又称密勒指数)标识和区分。

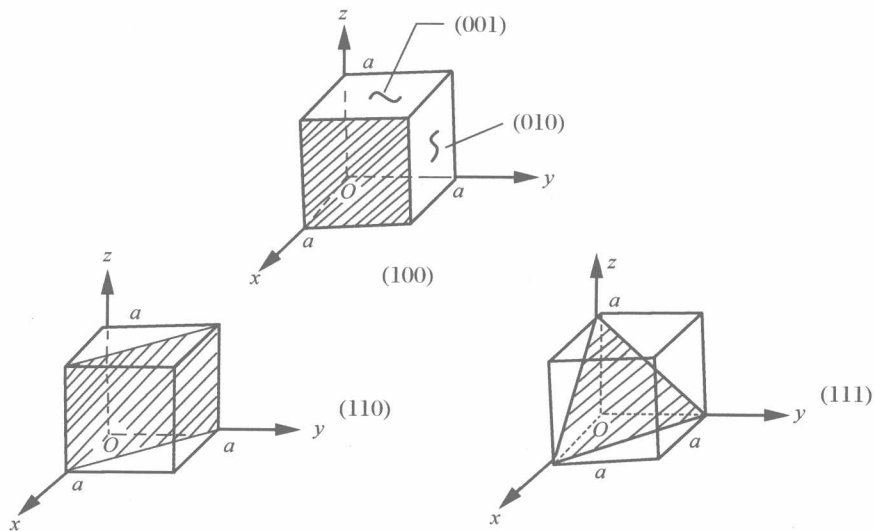


图 1.4 立方晶系三个重要晶面

确定晶面的具体步骤如下：

(1)在坐标系中画出晶面，找出晶面在三个坐标轴上的截距 p, q, r 。

(2)把各截距除以 a ，即以晶格边长 a 为单位表示截距：

$$p/a, q/a, r/a.$$

(3)找出它们的倒数的最小整数比：

$$h : k : l = \frac{1}{p/a} : \frac{1}{q/a} : \frac{1}{r/a}, \quad (1.4)$$

$h : k : l$ 就是晶面指数，按惯例写在圆括号内。

可以证明，在立方晶体中一个晶面指数和该晶面法线的晶向指数完全相同，它们相互垂直，如(111)面和 $[111]$ 晶向。晶体宏观的各向异性来源于微观结构的各向异性，主要指不同晶面和不同晶面原子排列有不同的密度。金刚石结构半导体材料(111)面间距大，解理面在(111)面，因此功率半导体器件在分割芯片时沿(111)与倾斜的(111)相交的晶向分割，晶片不会脆裂，但闪锌矿结构如砷化镓、碳化硅的解理面不是(111)面而是(110)面。表 1.1 给出了几个主要晶面的面密度和面间距。

表 1.1 几个主要晶面的面密度和面间距

晶面	100	110	111
面密度	$2/a^2$	$2.8/a^2$	$2.3/a^2, 4.6/a^2$ (双)
面间距	$a/4$	$\sqrt{2}/4a$	$\sqrt{3}/12a, \sqrt{3}/4a$ (双)
线密度	$1/a$	$1.4/a$	$1.1/a$

1.2 能带理论^[1,2]

能带理论是描写半导体中电子状态的基础，是讨论半导体基本特性的理论依据。本节扼要介绍量子态、能级和能带。

1.2.1 原子中电子的量子态和能级

半导体中的量子态是从原子中电子的量子态演变而来的。下面先介绍原子中电子的运动情况。对于讨论电子统计分布，最重要的是量子态的能量，而不是电子在量子态中的运动，为此介绍量子态时重点说明有关能级。

以硅原子为例，原子中共有 14 个电子绕着 $+14q$ 的原子核运动。14 个电子运行轨道是有区别的，各代表一个量子态。图 1.5 为原子中电子运动简图，图中不可能把 14 个量子态都表示出来，而是把 14 个量子态分别表示在三个离原子核不同距离的轨道上。在同一层量子态也是互相区别的，但是它们离原子核的平均距离和能量是

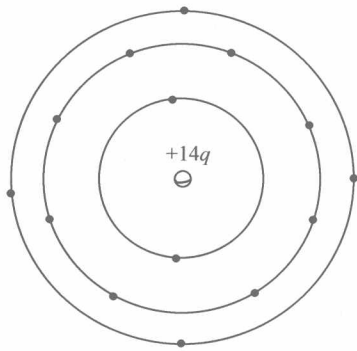


图 1.5 硅原子中电子运动简图

相同的. 最里层量子态距离原子最近, 受核束缚最强, 能量最低. 最外层的量子态, 受核束缚最弱, 能量最高.

电子在原子中的微观运动状态——电子态的最根本特点是电子态的能量只取某些特定值, 而不是随意的, 常常采用能级图表示, 如图 1.6, 用高低不同的水平线表示各个量子态所取的确定能量 $E_1, E_2, E_3 \dots$, 每一个量子态所取的确定能量称能级, 同一个能量值往往有几个量子态. 第一层 E_1 有两个量子态重叠在一起, 以 $1s$ 表示; 第二层 E_2 有 8 个量子态, 以 $2s$ 和 $2p$ 表示;

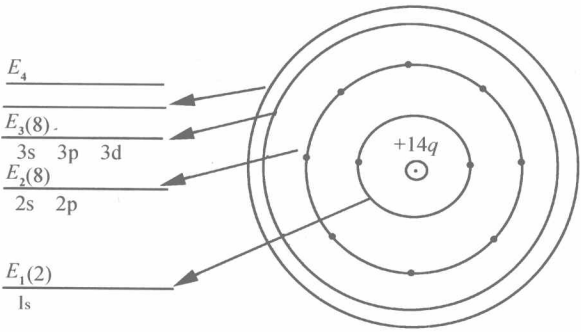


图 1.6 能级示意图

第三层可容纳 18 个量子态, 分别用 $3s, 3p$ 和 $3d$ 表示. 以硅原子为例: 有两个电子在 $1s$ 上, 有 8 个电子在 $2s$ 和 $2p$ 上, 剩下 4 个电子在 $3s$ 和 $3p$ 上, 所以 $3s$ 和 $3p$ 还空 4 个能级.

1.2.2 能带的形成

半导体是大量原子组成的晶体, 因此原子间距离很近, 在一个原子上的电子不仅受到这个原子的作用, 还受相邻原子的作用. 相邻原子上电子量子态将发生一定程度的交叠, 通过轨道交叠, 电子可以从一个原子移到相邻原子上去, 它将不再是固定在个别原子上的运动, 而是穿行于整个晶体的运动. 电子这种运动称为共有化, 因为电子不属于个别原子而是整个晶体所共有.

但是电子在原子间的转移不是任意的, 电子只能在能量相同的量子态之间转移, 如图 1.7 所示. 从图中可看到, 第一层的电子只能转移到第一层, 第二层的电子只能转移到相邻原子的第二层……因此, 共有化量子态与原子能级间存在着直接对应关系, 在同一个原子能级基础上产生的共有化运动也是多种多样的, 因为电子在晶体中的共有化运动有各种各样的速度. 这就是说, 从一个原子能级将演变出许许多多共有化量子态, 它们代表电子以各种不同速度在晶体中运动, 因此能量也是各不相同的. 图 1.8 画出了这种共有化量子能级图, 并且表示它们和原子能级之间的对应关系. 晶体中量子态能级分成了由低到高的许多组, 分别和各原子能级相对应, 每一组包含大量能量接近的能级, 故称能带, 能带之间的间隙称禁带. 图中禁带宽代表一个能带到另一个能带的能量差, 能带的宽窄由原子间距决定, 和组成晶体的原子数目无关, 原子数目的大小只决定带中能级密集程度, 外层轨道对应的能带较宽, 说明它的共有化程度较高.

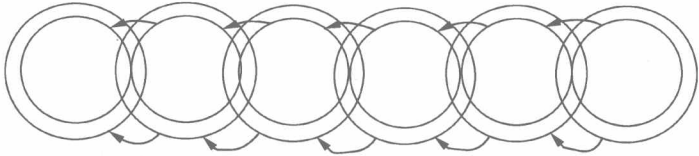
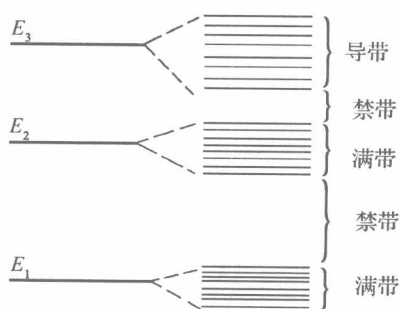
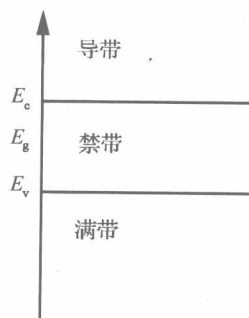


图 1.7 电子共有化运动示意图



(a) 共有化量子能级图



(b) 简化能带图

图 1.8 能带示意图

事实上,能带与原子能级间并不是总有一一对应 $E(r)$ 关系,共有化很强时,能带可能很宽,从而发生能带交叠,图 1.9 是用量子力学方法算出的金刚石能带与原子间距的关系图.可看出随原子间距减小,能带分裂越来越大,在 $r=r_1$ 处 2p 能级与 2s 能级交叠起来. r 进一步减小,两能带却再次分开,但分开后并不和 2s 或 2p 对应而是各为 $4N$ 个状态的新能带.金刚石的原子间距 $r=r_0=0.235 \text{ nm}$,禁带宽度等于 5.47 eV ,金刚石 $4N$ 个价电子正好填满下面的能带,上面的能带为空带.

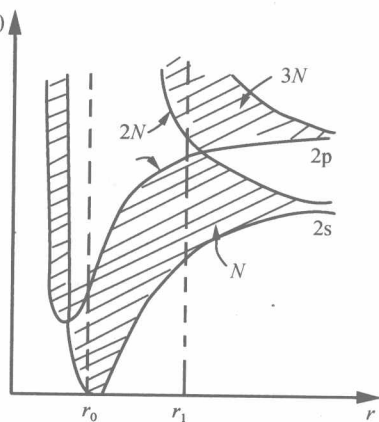


图 1.9 金刚石能带图^[2]

1.2.3 单电子近似方法

由于晶体中包含大量原子,原子核之间、电子之间、原子与电子之间都存在相互作用.欲建立这样一个多体问题的薛定谔方程并求出描述电子状态的精确解是困难的.一般采用各种近似方法.单电子近似法是将周期排列的原子核看做不动,并认为每个电子都在原子核的固定的周期势场和其他电子形成的平均势场中运动.满足单电子近似的一维薛定谔方程是:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]\psi = 0. \quad (1.5)$$

式中: $V(x) = V(x+na)$ 是周期性势场, a 为晶格常数, n 为整数. 方程(1.5)的解是:

$$\psi(x) = u_k(x) e^{i2\pi k_x \cdot x}. \quad (1.6)$$

式中: $u_k(x) = u_k(x+na)$. 从而可知

$$\begin{aligned} \psi(x+na) &= e^{i2\pi k_x(x+na)} u_k(x+na) \\ &= \psi(x) e^{i2\pi k_x na}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

可见,晶体中电子波函数是波矢为 k 的平面波,它的振幅受周期势场的调制,波函数遍及整个晶体,表示电子是共有化的,周期性函数 $u_k(x)$ 反映着电子受每个原子的影响,指数部分反映共有化特征.

式(1.7)表明,波函数在晶体的各个周期单元是完全相似的.由一单元过渡为另一单元的波函数只改变相角 $e^{i2\pi k_x a}$, 振幅不变. 式中 k 值描写相位差. 因此电子共有化运动状态就用 k 来描写. 处于某一能带中的电子有 N 个共有化运动状态就对应 N 个不同的 k 值. 由于晶体结构的周期性, 对于一维情况, 当 k 改变 $1/a$ 时不影响形容位相差的因子. 如 $k=k_1$ 时位相差因子是 $e^{i2\pi k_1 a}$, 而 $k=k_1+n/a$ 时的位相差因子为 $e^{i2\pi(k_1+n/a)a} = e^{i2\pi k_1 a}$. 这表明 k_1 和 k_1+n/a 两个状态具有相同的波函数, 所以描写晶体中电子的运动状态并不需要从 $-\alpha$ 到 $+\alpha$ 全部 k 值, 而只要考虑从 $-1/2a$ 到 $+1/2a$ 之间的 k 值即可. 常称 $-1/2a$ 到 $+1/2a$ 的 k 值的区间为第一布里渊区.

1.2.4 k 空间的态密度

在第一布里渊区, k 并不能取连续值, 它只能取一些分立值. 为了说明这种情况, 设想晶体中的电子被封闭在体积 $V=L^3$ 的容器中, 电子虽能在其中作共有化运动, 但不能穿出容器, 因此电子共有化状态受边界条件限制, 使 k 只能取分立值. 作为零级近似, 设薛定谔方程中的势场等于一个平均值 $\bar{V}$, 则三维情况下的薛定谔方程为:

$$\nabla^2 \psi - \frac{2m}{\hbar^2} (E - \bar{V}) \psi = 0, \quad (1.8)$$

得到自由粒子的解:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i2\pi k \cdot r}, \quad (1.9)$$

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \bar{V} = \bar{V} + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad (1.10)$$

k 所满足的边界条件是:

$$k_x = \frac{n}{L}, k_y = \frac{l}{L}, k_z = \frac{m}{L}. \quad (1.11)$$

式中: n, l, m 均为任意整数. 式(1.11)表明, 晶体中电子由于受到有限体积限制, 只能取式(1.11)决定的分立值.

实际上常用几何方法标识电子共有化运动状态. 选 k_x, k_y, k_z 为轴画出一个三维“ k 空间”, 如图 1.10 所示, 每一组 (n, l, m) 值对应 k 空间一个点, 有一个确定的 k 值就代表 1 个确定的电子共有化运动状态.

取不同的 (n, l, m) 可在 k 空间得到许多点, 代表许多不同的电子状态, 因此 k 空间点的密度就代表电子的状态密度. 根据式(1.11), k_x, k_y 和 k_z 轴上都是每隔 $1/L$ 有一个状态, 故 $dk_x dk_y dk_z$ 内的状态数为:

$$\frac{dk_x dk_y dk_z}{(1/L)^3} = V dk_x dk_y dk_z. \quad (1.12)$$

可见在 k 空间状态是均匀分布的, 其密度值为晶体体积 V 值, 考虑到一个能级上可以容纳自旋相反的两个电子, 故在小体元 dk 中可容纳的电子数为 $2Vdk$. 而在 k 到 $k+dk$ 这个球壳中的状态数为 $4\pi k^2 dk \cdot V$.

现在求能量间隔 E 到 $E+dE$ 中的状态数. 设 $Z(E)$ 为能量空间的状态密度. 由于 E 和 k 有一一对应关系, 所以

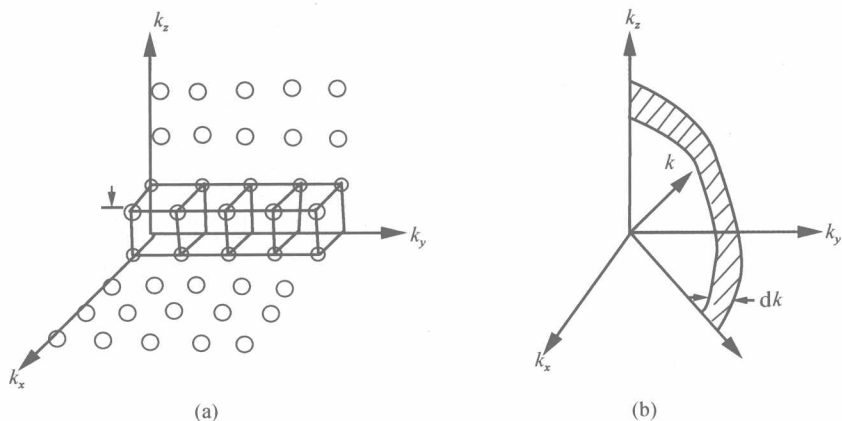


图 1.10 k 空间示意图

$$Z(E)dE = 4\pi k^2 V dk.$$

已知 $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, $dE = \hbar^2 k dk / m$, 故 $dk = m dE / \hbar^2 k$, $k = (2mE)^{1/2} / \hbar$, 则有:

$$Z(E)dE = \frac{4\pi m V}{\hbar^3} (2m)^{1/2} E^{1/2} dE.$$

考虑到电子自旋, 可以得到单位体积中能量为 E 到 $E + dE$ 中电子状态数为:

$$Z(E)dE = 4\pi / \hbar^3 (2m)^{3/2} E^{1/2} dE. \quad (1.13)$$

式中: $Z(E) = 4\pi / \hbar^3 (2m)^{3/2} E^{1/2}$ 称为状态密度, 有时也称为能级密度, 应注意其中 m (电子质量) 对于具体问题要换用有效质量.

利用 k 空间概念, 前述一维晶体的“体积”相当于 Na , 晶体 k 空间即为 x 轴, 它的第一布里渊区为 $-1/2a$ 到 $+1/2a$, 总长度为 $1/a$, 故第一布里渊区的状态密度等于 $1/a \cdot Na = N$. 说明一维晶格第一布里渊区允许能带的状态密度等于组成晶体的原子数 N .

三维晶格的情况是类似的, 标志状态的 k 值也描写波函数在各个周期单元的位相差, 为描述所有状态也只需考虑 k 空间原点附近的一个有限区域, 也称为第一布里渊区域. 这里不同 k 值总数等于晶体元胞总数目 N . 金刚石结构的第一布里渊区域的形状是个截角八面体, 可以看成正八面体的六个角被截后形成的 14 面体. 原来八个面变成正六角形, 截去角的结果又形成六个正方形面, 如图 1.11 所示. 三维问题较复杂, 不详细讨论.

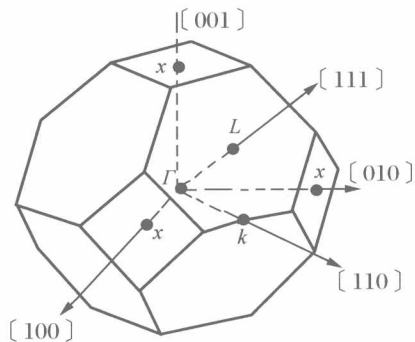


图 1.11 金刚石结构的布里渊区

$\Gamma - \frac{1}{a}(0, 0, 0)$, 布里渊区中心;

$L - \frac{1}{a}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$, 布里渊区边缘与 $[111]$ 轴

交点;

$X - \frac{1}{a}(0, 0, 1)$, 布里渊区边沿与 $[100]$ 轴交点;

$K - \frac{1}{a}(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0)$, 布里渊区边沿与 $[110]$ 轴的交点.

根据一维薛定谔方程计算, 满足方程(1.5)的 $E(k)$ 关系可用图 1.12 表示. 图 1.12(a) 为计算 $E(k)$ 关系, 它在 $k = \pm n/2a$ 处不连续, 表明晶体中电子与自由电子不同, 出现了能带禁区. 不连续区的宽度与禁带对应, 其他区域则对应允许能带, 由于第一布里渊区以外的状态都可以用第一布里渊区内状态描述, 故在图 1.12(b) 中把第一布里渊区以外的 $E(k)$ 曲线移动 $\pm n/a$ 折合到第一布里渊区内, 于是在第一布里渊区有 n 组 $E(k)$ 关系.

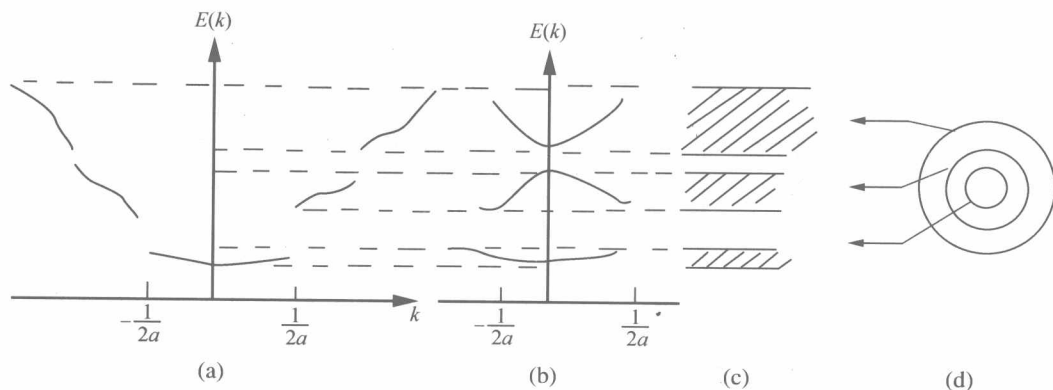


图 1.12 $E(k)$ 关系和能带图

但是, 对于半导体来说, 通常起作用的是接近能带底部和能带顶部的电子, 只要掌握其能带顶和能带底附近, 即能带极值附近的 $E(k)$ 与 k 的关系就足够了. 假设能带极值在 $k=0$ 处, 在 $k=0$ 附近按泰勒级数展开 $E(k)$, 取至 2 次项:

$$E(k) = E(0) + \left(\frac{dE}{dk} \right)_{k=0} k + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0} k^2 + \dots \quad (1.14)$$

由于 $k=0$ 处是能量的极小值, 所以 $dE/dk=0$, 因而

$$E(k) - E(0) = \frac{1}{2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0} k^2. \quad (1.15a)$$

令 $\frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0} = \frac{1}{m_n^*}$, 则

$$E(k) - E(0) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}. \quad (1.15b)$$

类比自由电子能量 $\frac{\hbar^2 k^2}{2m^0}$, 其中 m^0 是电子的惯性质量, 而式(1.15b)中的 m_n^* 称能带底电子的有效质量. 因为 $E(k) > E(0)$, 所以能带底电子有效质量是正值, 采用同样方法讨论能带顶, 得 $E(k) < E(0)$, 所以 $\left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)_{k=0} < 0$, 因此能带顶电子有效质量是负值. 由于我们已经引入“空穴”表征满带电子运动状态, 而且在电场作用下空穴运动方向和电子运动方向相反, 现在定义空穴具有和满带电子反号的有效质量, 于是空穴是带正电荷、正有效

质量的载流子.从以上讨论看出,讨论晶体中载流子运动时,用有效质量代替电子惯性质量,而载流子的有效质量大小与能带的形状有关.

1.2.5 硅、砷化镓的能带结构

所谓能带结构是指 $E(k)$ 关系.由于晶体各向异性,能带结构也比较复杂.曾有人对固体能带进行过许多理论研究和计算,令人满意的结果很少,大都用实验结果进行补充和修正.对硅和砷化镓研究的结果表示在图 1.13.图中画出了 k 空间 $[111]$ 和 $[100]$ 方向及 $k=0$ 点的第一布里渊区的能带图,在 (111) 面和 (100) 面的截面图的上部是导带,下部是价带,导带最小值与价带最大值之间是禁带 E_g . $k=0$ 是 Γ 点即布里渊区的中心. $[100]$ 方向上的 X 点是 $[100]$ 方向与第一布里渊区边界交点. $[111]$ 方向的 L 点是 $[111]$ 方向与布里渊区边界的交点.由图 1.13 可以看出,半导体的导带、价带都是几个子能带重叠而成的.

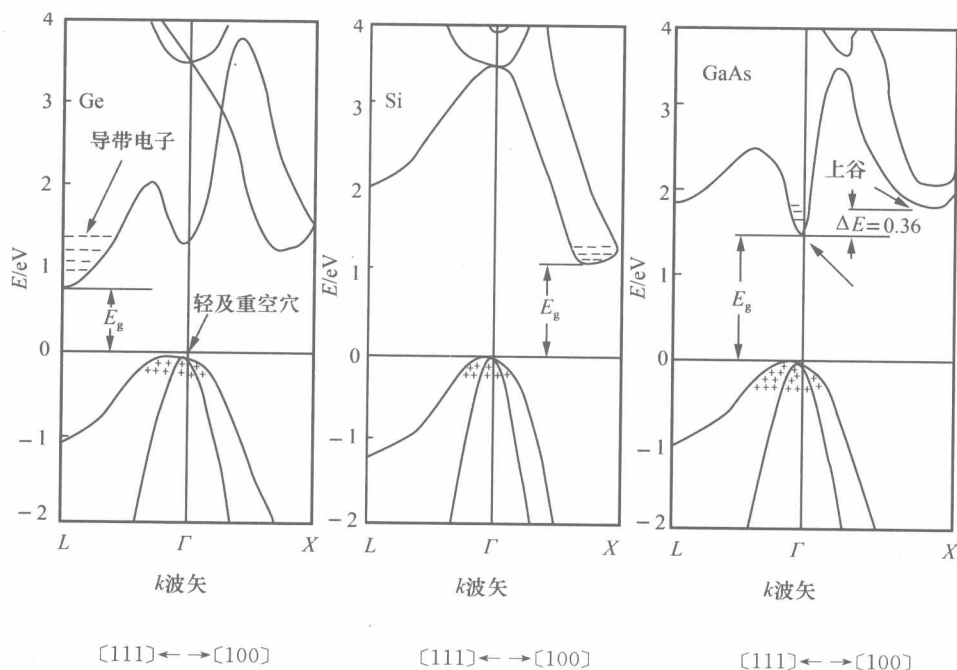


图 1.13 锗、硅、砷化镓的能带结构

(E_g 是禁带宽度;“+”号表示价带中的空穴;“-”号表示导带中的电子^[2])

1.2.5.1 价带结构

硅、砷化镓价带顶都由 3 个能带组成,由于自旋轨道相互作用,使它们在 $k=0$ 处分裂成两个较高和一个较低的能带.最高的称 V_1 ,另外一个称 V_2 , V_1 和 V_2 两能带最大值交于 $k=0$ 点,另一个较低的称为 V_3 .实验证明, V_1 和 V_2 的等能面都是扭曲的.在进行有效质量计算时近似为有相同曲率半径的球面.这样 V_1 和 V_2 两能带空穴有效质量为:

$$\text{Si: } m_{V_1} = 0.49m_0, m_{V_2}^* = 0.16m_0;$$

$$\text{GaAs: } m_{V_1} = 0.50m_0, m_{V_2}^* = 0.12m_0.$$

m_0 是电子的惯性质量.

1.2.5.2 导带结构

硅的导带有 3 个能谷,如图 1.14 所示,但它的最低能谷是在 $[100]$ 方向,有 6 个等同极小值,等能面也是旋转椭球,其长轴在 $[100]$ 方向,短轴与 $[100]$ 方向垂直.由于另外两个能谷相距较远,故一般说上面电子甚少.半导体的电学特性主要由 $[100]$ 上最低能谷决定.但是必须指出,在外电场作用下,硅中电子是在 6 个低能谷中运动,最低能谷有效质量 $m_r = 0.190m_0$, $m_l^* = 0.916m_0$. 下标 r 表示横向, l 表示纵向,测量温度为 1.26 K.

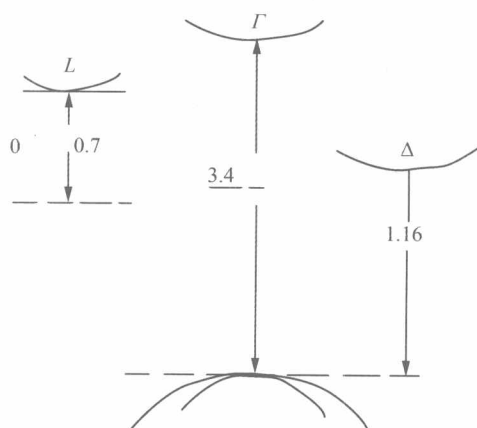


图 1.14 硅的导带^[2]

砷化镓最低能谷位于 $k=0$ 的 Γ 点,具有球形等能面,故有效质量各向同性.砷化镓在 $[100]$ 方向有一能谷,它与 $k=0$ 的最低能谷相差 $\Delta E = 0.036$ eV,称上能谷. $k=0$ 处称下能谷.上能谷电子有效质量为 $m^* = 1.2m_0$,下能谷电子有效质量为 $0.068m_0$.这反映上能谷电子迁移率比下能谷的电子迁移率小很多,如果使下能谷电子跃迁到上能谷将出现负阻效应,这正是负阻体效应器件的基础.

1.2.5.3 禁带宽度

最低能谷与价带顶之间的能量差称禁带宽度,常见材料的性质见表 1.2.可用测量电导与温度的关系的电学方法和测本征光吸收谱的方法测量.

实验证明,大多数半导体禁带随温度升高而减小,有负温度系数:

$$\text{Si} \quad \frac{dE_g}{dT} = -2.3 \times 10^{-4} \text{ eV/K}; \quad (1.16a)$$

$$\text{GaAs} \quad \frac{dE_g}{dT} = -4.3 \times 10^{-4} \text{ eV/K}. \quad (1.16b)$$

表 1.2 锗、硅及砷化镓的性质 (300 K)^[2]

性 质	Ge	Si	GaAs
原子密度/atom · cm ⁻³	4.42×10^{22}	5.0×10^{22}	2.21×10^{22}
相对原子质量	72.6	28.08	144.63
击穿电场/V · cm ⁻¹	$\sim 10^5$	$\sim 3 \times 10^5$	$\sim 4 \times 10^5$
晶体结构	金刚石	金刚石	闪锌矿
密度/g · cm ⁻³	5.33	2.33	5.32
介电常数	16	11.8	10.9
导带中态的有效密度 N_c/cm^{-3}	1.04×10^{19}	2.8×10^{19}	4.7×10^{17}
价带中态的有效密度 N_v/cm^{-3}	6.1×10^{18}	1.02×10^{19}	7.0×10^{18}