

21 世纪信息科学与电子工程系列精品教材

PHYSICS FOR CONTEMPORARY INFORMATION ELECTRONICS

现代信息电子学物理

◆ 杨冬晓 陈秀峰 编著



ZHEJIANG UNIVERSITY PRESS

浙江大学出版社

21 世纪信息科学与电子工程系列精品教材

现代信息电子学物理

Physics for Contemporary Information Electronics

杨冬晓 陈秀峰 编著

浙江大學出版社

内容简介

本书是电子信息类专业教材,它是以现代物理思想、概念、研究方法和现代教育思想、教学方法为基础,根据信息工程技术对物理基础的需求而编写的。全书以能带理论作为统一和完整的物理基础理论,以电子的不同运动方式贯穿全书。全书共分九章:第一到第三章简介晶体结构和量子力学以及固体电子论基础,第四章为半导体物理和器件原理并简介集成器件和微细加工技术,第五章为光电子学和光电子器件,第六章为磁电子学,第七章为超导电子学,第八章为电介质电子学,第九章简介介质中的光、声、电效应和应用。教学参考时数 50 学时。

本书可作为全国高校工科电子信息类学生的专业基础教材,也可供一般工程技术人员阅读、参考。

图书在版编目(CIP)数据

现代信息电子学物理 / 杨冬晓编著. —杭州:浙江大学出版社, 2007. 11

ISBN 978-7-308-05572-7

I. 现… II. 杨… III. 电子学 IV. TN01

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2007) 第 148635 号

责任编辑 杜希武

出版发行 浙江大学出版社

(杭州天目山路 148 号 邮政编码 310028)

(E-mail: zupress@mail.hz.zj.cn)

(网址: <http://www.zjupress.com>

<http://www.press.zju.edu.cn>)

排版 浙江大学出版社电脑排版中心

印刷 德清县第二印刷厂

开本 787mm×1092mm 1/16

印张 23.5

字数 566 千

版印次 2007 年 11 月第 1 版 2007 年 11 月第 1 次印刷

书号 ISBN 978-7-308-05572-7

定价 38.00 元

版权所有 翻印必究 印装差错 负责调换

前 言

本书主要介绍半导体、超导体、电介质、磁介质等材料中与信息电子器件有关的物理效应及相关器件的工作原理。

电子信息技术正在向数字化、网络化、高速化、大容量化、集成化和智能化方向发展。在对各种信息进行采集、存储、处理、控制、显示和传输等相关的电子系统设计和制造中,必然会遇到和使用微电子、光电子、固体微波类器件。因此有必要了解器件的结构特性与工作原理、构制的材料及其相关的物理效应,需要具备量子力学和固体物理学的基础知识。以晶体和半导体等为基础的固态电子器件的产生和发展,导致了以电子计算机和通信技术为代表的电子信息技术持续发展,这是近代物理学和固体物理学与电子学相结合的典型实例。《现代信息电子学物理》一书就是为相关物理学与电子信息技术之间建立桥梁。

浙江大学信息与电子工程学系从上世纪 90 年代开始为本科学生开设《信息电子学物理基础》课程,并编写了教材,由于其内容体系和讲述方式上具有鲜明特色,取得了较好的教学效果。从初设课程到今天近 20 年时间,固态电子器件方面已取得许多新的技术发展,需要对原课程内容进行较大的修改和充实扩展,以适应当前教学的需要。在此基础上,我们编写了教材《现代信息电子学物理》。全书以固体中电子过程为基础阐述信息电子器件中固态材料的结构特性和物理效应以及与之相关的固态电子器件的工作原理。

本书编写过程中,力求做到两点:第一,着重说明概念,尽量减少数学推导,数学公式的引入是为了深入浅出地叙述概念,同时有一定数量的例题,以帮助读者掌握概念;第二,在各章节介绍新理论、新技术、新方法的同时,融入了一些实际的应用,同时编排了一些参量数据附表,以便作业练习时查阅。

全书内容共分 9 章。在头两章,介绍了晶体结构和量子力学的基本知识,为全书提供了理论基础。第 3 章讨论固态电子学中的能带理论,给出了固体电子动量和能量的多重关系,解决了包括金属、半导体、绝缘介质的固体电性质基本理论问题。第 4 章到第 9 章在内容编排上,按照固体中电子形态和运动方式(包括电子的自由运动、转动,电子空穴对的扩散与漂移,库珀电子对的运动,正负电荷的位移)所产生的电磁光声热等物理效应及相关的器件原理,介绍半导体 pn 结理论和结型半导体器件、超导电子学及器件、电介质的物理效应和应用、光电子学及器件、磁电子学及器件。

由于时间紧迫和我们水平有限,书中不仅有些不尽如人意之处,也难免疏漏和不准确之处,敬请读者批评指正。

编著者

2007 年于浙江大学玉泉校区

重 要 符 号 表

a	晶格常数	g	朗德因子
A	面积;交换积分	G	状态密度;电导;光增益
$\mathbf{A}$	矢势	G_p	功率增益
B	频带宽度;爱因斯坦系数	G_v	电压增益
B	磁感应强度	h	普朗克常数;高度
B_0	真空中的磁感应强度	$\hbar$	$\hbar = h/2\pi$
c	真空光速;比热;弹性模量	H	磁场强度
c_n	介质中光速	H_C	矫顽力;临界磁场
C_r	光能流密度	I	电流强度;光强度
C	电容;居里常数	I_B	晶体管基极电流
C_B	pn 结势垒电容	I_C	晶体管集电极电流;约瑟夫森结临界电流
d	厚度;光透入深度;间距	I_D	暗电流
D	扩散系数;探测率	I_E	晶体管发射极电流
D^*	探测灵敏度	I_r	复合电流
D_n	电子扩散系数	I_R	背景光电流
D_p	空穴扩散系数	I_S	约瑟夫森结超流
D	电通量密度	I_{so}	声功率密度
e	电子电荷绝对值	I_{ph}	光电流
e^*	超导电子电荷	j	磁偶极矩
E	电子能量;杨氏模量	j_n	电子流密度
E_A	受主电子态能量	j_p	空穴流密度
E_B	束缚能	J	电流密度;磁极化强度
E_C	导带底能量	J_C	约瑟夫逊结临界电流密度
E_D	施主电子态能量	J_n	电子电流密度
E_F	费米能量;费米能级	J_p	空穴电流密度
E_g	禁带宽度	J_S	超导电流密度
E_V	价带顶能量	J_{SN}	超导和常导电流密度之和
E_{Fn}	n 型半导体费密能级	k	电子波数
E_{Fp}	p 型半导体费密能级	$\mathbf{k}$	波矢
$E_{\text{场}}$	电场强度	k_B	玻耳兹曼常数
f	分布函数;占有几率;频率	K	电子电离率与空穴电离率之比; 磁晶各向异性常数;电耦合系数
f^*	声频率	l	长度
f_T	电流增益 — 带宽乘积	K	声波矢
F	力	L	扩散长度;长度
F	自由能;晶体管噪声系数;过剩噪声因子		

L_n	电子扩散长度	S	熵;应变;赛贝克系数
L_p	空穴扩散长度	S	坡印廷矢
m	电子质量;调制度;大气质量数	t	时间
m	磁矩;交变磁化强度	T	温度;透射系数
m^*	超导电子质量	T_C	居里温度;临界温度
m_n^*	电子有效质量	T_F	费米温度
m_p^*	空穴有效质量	T_N	奈尔温度
M	雪崩倍增因子;磁化强度;声光优值	T_r	隧道贯穿几率
M	磁化强度	T_R	复合引起的损耗速率
M_S	自发磁化强度	u	布洛赫波的周期性调制函数
$\tilde{n}$	复折射率	U	内能;位函数
n	电子浓度;折射率	v	速度矢量
n_i	本征载流子浓度	v_d	漂移速度
n_S	超导电子对浓度	V	晶体体积;电压;位函数
n_{SN}	超导电子对和常导电子浓度之和	V_D	接触电势差
n_{eff}	导模有效折射率	V_F	正向电压
N	原子密度;分子密度;退磁因子	V_n	约瑟夫森结电流阶梯处电压
N_A	受主浓度	V_R	反向偏置电压
N_C	导带有效态密度	V_S	表面电位
N_D	施主浓度	V_T	阈值电压
N_V	价带有效态密度	w	能量密度
NA	数值孔径	x	化合物的组成成分;位移
ρ	空穴浓度;热电系数;动量	α	方向余弦;平面角;晶体管共基极 电流增益;光吸收系数
p	电偶极矩;角动量	α	衰减矢
P	几率;光功率;应变弹光系数	α_n	电子电离率
P	角动量;电极化强度	α_p	空穴电离率
p_F	费米动量	β	方向余弦;增益因子; 晶体管共发射极电流增益
q	电荷量	β	位相矢
q	电子波矢	γ	晶体管发射区注入效率;磁旋比; 磁畴壁能密度;传播系数; 线性电光系数;电子漂移参数; 弹性系数
Q	电荷面密度;电荷;品质因素	Γ	位相差;克里斯托尔模量
r	距离;半径;原子间距	δ	位相角;磁损耗角;电介质损耗角
R	电阻;霍耳系数;反射系数; 二次电光系数	$\triangle$	超导体能隙参量
R_C	接触电阻		
R_L	负载电阻		
R_N	非线性准粒子电阻		
R_{op}	光谱响应度		

ϵ_0	真空介电常数	ν	频率; n 型高阻半导体;
ϵ_r	相对介电常数		泊松比; 声光调制度参量
$\tilde{\epsilon}$	复介电常数	ξ	位移量; 相干长度
ϵ'	复介电常数实部	π	p 型高阻半导体; 圆周率
ϵ''	复介电常数虚部	Π	珀尔帖系数
η	晶体管基区输运系数; 效率; 量子效率; 光电转换效率, 发光效率; 有序度	ρ	电阻率; 密度
θ	角度; 平面角; 天顶角	σ	电导率; 应力; 电荷面密度
κ	消光系数	τ	寿命; 驰豫时间; 汤姆逊系数; 声渡越因子
λ	光波长; 外斯分子场常数; 磁致伸缩系数; 第一拉姆系数	τ_p	位相延迟
Λ	声波长	τ_{eff}	有效准粒子寿命
λ_c	半导体本征吸收波长限	φ	位相角; 平面角超导体量子位相; 波函数时间相关项
λ_L	伦敦穿透深度	$e\phi$	功函数; 宏观波函数
μ	迁移率; 磁导率; 刚性系数	Φ	噪声谱密度; 电压差; 经度角分离变量函数
$\tilde{\mu}$	复磁导率	$e\phi_{bn}$	金属 -n 型半导体接触肖特基势垒高度
μ'	复磁导率实部	$e\phi_{bp}$	金属 -p 型半导体接触肖特基势垒高度
μ''	复磁导率虚部	Φ_0	磁通量子
μ_+	正圆偏振波磁导率	χ	亲和势空间相关项; 磁化率; 电极化率
μ_-	负圆偏振波磁导率	ψ	波函数空间相关项; 平面角; 超导电子对宏观波函数
μ_B	玻尔磁子	Ψ	全波函数
μ_H	霍耳迁移率	ω	圆频率
μ_n	电子迁移率	Ω	声圆频率
μ_0	真空磁导率	ω_0	晶格振动固有频率
μ_p	空穴迁移率		

目 录

第一章 固体的晶体结构简介	1
§ 1.1 固体类型	1
§ 1.2 空间点阵	1
1.2.1 晶格、原胞、元胞	1
1.2.2 基本的晶体结构	2
1.2.3 晶面和密勒指数	3
§ 1.3 金刚石结构	5
§ 1.4 原子键	6
§ 1.5 固体中的缺陷和杂质	8
1.5.1 固体中的缺陷	8
1.5.2 固体中的杂质	9
习题一	9
第二章 量子力学导论	11
§ 2.1 量子力学原理	11
2.1.1 能量子	11
2.1.2 波粒二象性	12
2.1.3 测不准原理	13
§ 2.2 薛定谔波动方程	14
2.2.1 波动方程	14
2.2.2 波动方程的物理意义	15
2.2.3 边界条件	15
§ 2.3 薛定谔波动方程的应用实例	16
2.3.1 自由空间中电子	16
2.3.2 无限深势阱	18
2.3.3 阶跃位函数	19
2.3.4 势垒	22
§ 2.4 原子的波动理论	23
2.4.1 单电子原子	23
2.4.2 周期表	25
习题二	26

第三章 固态电子论基础	28
§ 3.1 周期势场中的电子和能带论	28
3.1.1 能带的形成	28
3.1.2 Kronig-Penney 模型(K-P 模型)	30
3.1.3 k 空间图	33
3.1.4 能带论的其他模型	36
§ 3.2 固体的导电性、有效质量和空穴	37
3.2.1 能带和键的模型	37
3.2.2 晶体中电子运动的速度和加速度	38
3.2.3 有效质量和空穴	39
3.2.4 满带和部分填充的能带	40
3.2.5 金属、绝缘体和半导体	41
3.2.6 一维概念的三维扩展	42
§ 3.3 半导体中载流子	44
3.3.1 态密度函数	44
3.3.2 费米分布函数	47
3.3.3 半导体中的载流子	50
3.3.4 半导体的连续性方程	58
3.3.5 半导体的连续性方程	61
3.3.6 准费米能级	65
3.3.7 非平衡载流子寿命	66
3.3.8 表面效应	69
§ 3.4 金属中的自由电子	71
3.4.1 电子气的能量状态和费米能量	72
3.4.2 电阻率和温度的关系	72
3.4.3 导电、电阻合金材料	75
§ 3.5 半导体材料	75
3.5.1 III-V 族化合物半导体	76
3.5.2 II-VI 族化合物半导体	77
3.5.3 非晶态半导体	77
3.5.4 有机半导体	78
§ 3.6 几种固态电子的体效应	79
3.6.1 磁电效应	79
3.6.2 热电效应	80
3.6.3 耿氏(Gunn)效应	81
§ 3.7 固态电子能谱	83
3.7.1 电子、光子、离子同固体相互作用概貌	83
3.7.2 俄歇电子能谱(AES)	84

3.7.3 X 射线光电子能谱(XPS)	84
习题三	85
第四章 半导体器件原理	88
§ 4.1 pn 结特性概述	88
4.1.1 平衡 pn 结	88
4.1.2 整流特性	92
4.1.3 电容特性	98
4.1.4 击穿特性	101
4.1.5 结击穿特性	105
§ 4.2 pn 结二极管	107
4.2.1 变容二极管(varactor)	107
4.2.2 开关二极管	110
4.2.3 隧道二极管	112
4.2.4 雪崩二极管	114
§ 4.3 双极型晶体管	115
4.3.1 晶体管的基本结构和工作原理	115
4.3.2 晶体管的放大作用	117
4.3.3 电流—电压特性	119
4.3.4 击穿电压与穿通电压	121
4.3.5 频率特性	121
4.3.6 开关特性	123
4.3.7 晶体管噪声	124
§ 4.4 金属—半导体接触和肖特基势垒二极管	125
4.4.1 理想肖特基势垒	125
4.4.2 表面态和界面层对接触势垒的影响	137
§ 4.5 场效应晶体管(FET)	140
4.5.1 JFET	140
4.5.2 MOSFET	141
4.5.3 MESFET	145
§ 4.6 异质结及其器件	146
4.6.1 异质结的材料	146
4.6.2 异质结的能带结构	147
4.6.3 异质结特性	150
4.6.4 异质结的电流运输机构	152
4.6.5 异质结中二维电子气和超晶格	153
4.6.6 HBT 和 MODFET	155
§ 4.7 半导体集成器件和微细加工技术	157
4.7.1 集成电路的构成	158

4.7.2 微细加工技术	160
4.7.3 集成器件发展的主要极限	163
习题四	164
第五章 光电子学和光电子器件	167
§ 5.1 固体的光吸收	167
5.1.1 光吸收系数	167
5.1.2 光吸收过程	169
5.1.3 电子—空穴对产生速率	170
§ 5.2 pn 结光生伏特效应和太阳电池	170
5.2.1 基本原理	170
5.2.2 光电池的 I - V 特性	171
5.2.3 太阳电池的光电转换效率	172
5.2.4 非均匀吸收效应	173
5.2.5 新结构 Si 太阳电池	174
5.2.6 异质结肖特基势垒和 MIS 太阳电池	174
5.2.7 薄膜太阳电池	176
§ 5.3 非增益型半导体光电探测器	176
5.3.1 基本原理	177
5.3.2 主要参数	178
5.3.3 PIN 光电二极管	181
5.3.4 肖特基势垒光电二极管	183
5.3.5 光电导探测器件	184
§ 5.4 增益型和异质结半导体光电探测器	186
5.4.1 雪崩光电二极管(APD)	186
5.4.2 异质结的窗口效应和光限制作用,异质结光电二极管	189
5.4.3 异质结雪崩光电二极管	190
5.4.4 光晶体管	191
§ 5.5 固体的光发射	192
5.5.1 发光过程中的激发	192
5.5.2 基本跃迁类型	193
5.5.3 发光效率	194
5.5.4 材料	194
§ 5.6 发光二极管(LED)	195
5.6.1 发光效率与量子效率	195
5.6.2 LED 材料	197
5.6.3 LED 的结构和性能	198
5.6.4 LED 的应用	200
§ 5.7 半导体激光器(LD)	200

5.7.1 半导体受激光发射的产生	201
5.7.2 半导体激光器的主要特性	205
5.7.3 异质结激光器	207
5.7.4 分布反馈式(DFB)半导体激光器	210
5.7.5 新型器件	211
习题五	214

第六章 磁电子学..... 217

§ 6.1 原子磁矩	218
6.1.1 单电子原子的磁矩	218
6.1.2 多电子原子的磁矩	219
6.1.3 洪德(Hund)定则	220
§ 6.2 逆磁性和顺磁性	221
6.2.1 半经典理论	221
6.2.2 稀土族和铁族离子的顺磁性	222
6.2.3 金属的逆磁性和顺磁性	223
§ 6.3 铁磁质	224
6.3.1 铁磁质的宏观特性	224
6.3.2 外斯(Weiss)分子场理论	225
6.3.3 铁磁性的起源	227
§ 6.4 反铁磁质和亚铁磁质	229
6.4.1 反铁磁性的奈尔(Neel)理论	229
6.4.2 亚铁磁性和铁氧体	230
§ 6.5 铁磁体的磁畴理论	232
6.5.1 铁磁体的各种相互作用能	232
6.5.2 磁畴的形成	234
6.5.3 单畴颗粒	235
6.5.4 磁泡畴	235
§ 6.6 动态磁化过程和磁共振	236
6.6.1 磁化的时间效应和复数磁导率	237
6.6.2 旋磁性和铁磁共振	238
6.6.3 动态磁化过程中的损耗	241
§ 6.7 磁性元器件	242
6.7.1 微波器件	242
6.7.2 磁性记忆器件	243
6.7.3 磁记录	246
§ 6.8 磁性材料	246
6.8.1 软磁材料	247
6.8.2 永磁材料	248

6.8.3 矩磁、磁记录和磁头材料	248
6.8.4 旋磁材料	249
6.8.5 非晶磁性材料	250
第七章 超导电子学	251
§ 7.1 超导的基本特性	251
7.1.1 完全导电性	251
7.1.2 完全逆磁性	252
7.1.3 临界磁场 H_c 和临界电流 I_c	252
§ 7.2 二流体模型	254
§ 7.3 伦敦方程	256
§ 7.4 超导 BCS 理论的物理图像	257
§ 7.5 超导结的隧道效应和约瑟夫逊效应	258
7.5.1 超导体单电子隧道效应	258
7.5.2 约瑟夫逊效应	260
§ 7.6 超导电子器件	265
7.6.1 超导器件的优点	265
7.6.2 二端超导器件	265
7.6.3 超导量子干涉器件	267
7.6.4 超导结型晶体管	270
7.6.5 超导场效应晶体管	271
§ 7.7 高温氧化物超导性和材料	273
§ 7.8 超导的应用	274
7.8.1 超导强电强磁应用	274
7.8.2 超导弱电弱磁应用	275
第八章 电介质电子学	276
§ 8.1 电介质极化	276
8.1.1 极化的宏观现象	276
8.1.2 极化的基本形式	278
8.1.3 内电场	279
8.1.4 介电常数与极化率的关系	281
§ 8.2 电介质损耗与色散	282
8.2.1 电介质损耗的参数	282
8.2.2 弛豫损耗及介电谱	285
8.2.3 谐振极化及色散	288
§ 8.3 电介质电导和击穿	291
8.3.1 电介质中的导电现象	291
8.3.2 离子导电	291

8.3.3	电子导电	293
8.3.4	本征击穿	295
8.3.5	热击穿和放电击穿	296
§ 8.4	电介质材料和应用	296
8.4.1	单晶、玻璃和陶瓷电介质材料	297
8.4.2	聚合物电介质材料	298
8.4.3	电介质的应用	302
§ 8.5	压电性	303
8.5.1	压电效应	303
8.5.2	压电方程组和特性参数	304
8.5.3	压电材料及其应用	305
§ 8.6	热电性	308
8.6.1	热电效应	308
8.6.2	热电方程组和特性参数	308
8.6.3	热电材料及其应用	309
§ 8.7	铁电性	311
8.7.1	铁电现象	311
8.7.2	铁电理论	313
8.7.3	铁电材料及其应用	316
§ 8.8	驻电性	318
8.8.1	驻电现象	318
8.8.2	驻电体形成方法	318
8.8.3	驻电体材料及其应用	319
第九章	电介质中的电、光、声效应	321
§ 9.1	光波在电介质中的传播	321
9.1.1	麦克斯韦(Maxwell)方程	321
9.1.2	折射率和双折射	322
9.1.3	单轴晶体和双轴晶体	323
9.1.4	衰减与色散	324
§ 9.2	光导波现象	325
9.2.1	光波导中的内全反射	325
9.2.2	光导波模	326
9.2.3	消逝波	327
§ 9.3	声波在固体中的传播	328
9.3.1	体声波	328
9.3.2	表面声波	332
§ 9.4	电声效应	334
9.4.1	声波在压电半导体中的传播	334

9.4.2 声放大	336
§ 9.5 声光效应	337
9.5.1 声波对光的衍射	338
9.5.2 声光调制和声光偏转	339
§ 9.6 电光效应	341
9.6.1 电光效应	341
9.6.2 电光效应的应用	342
§ 9.7 热光效应	344
9.7.1 折射率随温度的变化	345
9.7.2 二次谐波发生的非临界相位匹配	345
§ 9.8 纤维光学和集成光学	346
9.8.1 光纤通信和光信号处理	346
9.8.2 纤维光学	348
9.8.3 集成光学	350
附表	353
参考书目	356

第一章 固体的晶体结构简介

本书涉及到的信息电子固体器件,均与构制器件的固体材料所具有的电学性质、磁学性质、介电性质、光学性质相关。信息电子器件所用的固体材料,一般是单晶材料。单晶材料的光、电、磁学等性质不仅由化学组分,而且由固体中原子排列决定。因此有必要了解固体的晶体结构知识。有关单晶材料的生长形成技术本章也作简单介绍,目的是为后续各章讨论器件结构提到的一些技术名词作些说明。

§ 1.1 固体类型

固体一般可分成无定形、多晶体和单晶体三类。多晶体和单晶体都是晶体,晶体是内部原子具有空间周期排列的固体。单晶体中原子排列的周期性是在整个固体内部存在的,而多晶体是由很多不同取向单晶体的晶粒组成的固体。它们的分类是以材料中的有序区域大小为特征。所谓有序区是一个空间体积,其内的所有原子或分子具有规范的几何排列,即原子是按一定周期性排列。无定形材料,只在数个原子尺度内有序,而多晶体在许多个原子范围内维持有序。这两种材料内存在多个有序区也即单晶区,彼此的大小和取向是互不相同的。因此有时称单晶区为晶粒,彼此由晶粒边界分隔。理想化的单晶体,在整个材料的空间内应具有高度有序,或者具有高度的规范几何周期性。单晶材料的磁、光、电学性质,一般远远优于非单晶材料,因为晶粒边界使其磁、光、电学性质恶化。图 1.1.1 为无定形、多晶体和单晶体材料的二维示意图。

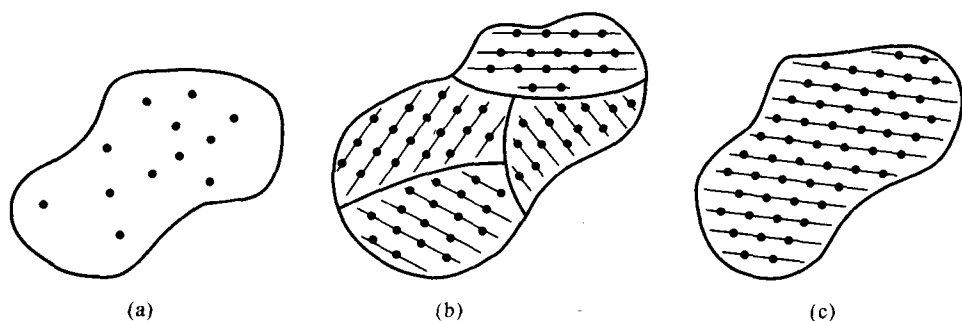


图 1.1.1 三类固体的二维示意图 (a)无定形 (b)多晶 (c)单晶

§ 1.2 空间点阵

1.2.1 晶格、原胞、元胞

单晶体中具有代表性的单元(原子群)沿着三维方向,按一定规则的间隔重复排列而形成

单晶。无限大的单晶体可以看成是完美晶体。在完美晶体中,用位于原子平衡位置的几何点替代原子,结果得到与晶体几何特征完全相同,但无任何物理实质的几何图形。这种周期性排列的图形称为晶格,也叫点阵。处于原子平衡位置的几何点称为格点。点阵中的所有格点都是等价的,一个没有边界的无穷大点阵,称为布喇菲(Bravais)点阵。

对比布喇菲点阵的概念,可以定义非布喇菲点阵,也称为复式晶格。非布喇菲点阵的定义是:无穷大点阵,其中一部分格点与其他部分格点不等价,复式晶格可看成带基元的布喇菲点阵,每个布喇菲点阵中的格点由一组基元替代而成为复式晶格。基元为格点附近一组原子,离子或分子的集合。复式晶格中格点不等价的原因一般有两个:一个是格点本身代表不同的原子,例如砷化镓晶格(图 1.3.5),其中镓离子对应的格点 A 和砷离子对应的格点 B 显然是不等价的,一组基元包含两个离子,恰好符合化学分子式 GaAs。第二个原因是,格点附近空间结构的不对称,例如金刚石晶体结构中(图 1.3.1),顶角的格点 A 和图中示意的处于 4 个化学键中的格点 B 就不等价,主要是相邻 4 个化学键的空间方位不一样,所以金刚石晶体中,一组基元也包含两个格点 A 和 B。

在布喇菲点阵中,可以人为选取与晶格维数同样多的一组矢量,使得晶格中任意两个格点间的位移矢量(即格矢量)可以表达为该矢量的整数线性组合。也就是说,从这组矢量出发,可以用线性组合的方式创造出整个布喇菲点阵,这组矢量被称为原矢。由原矢组成的小体积元称为元胞,元胞有多种取法,最小的元胞称为原胞。图 1.2.1 所示为广义的三维元胞,这一元胞与晶格之间关系将以三个原胞单位矢量 a, b, c 为标志,不需要三者互相垂直,长度也可以不相等,对于三维晶体中每一个等效格点,其位置可用以下位置矢量(格矢量)表达

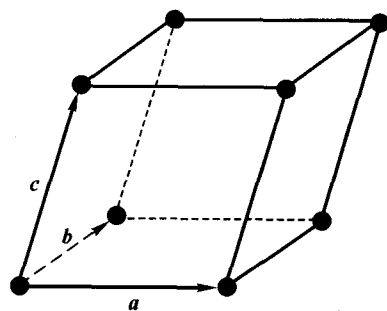


图 1.2.1 广义三维元胞

$$r = pa + qb + sc \quad (1.1.1)$$

式中 p, q, s 为整数,因为坐标原点位置是任选的,所以为了简化,常选 p, q, s 为正整数。

1.2.2 基本的晶体结构

晶体结构分为低级、中级和高级三大晶族。低级晶族分为三斜、单斜和斜方三个晶系;中级晶族分为正方、三方和六方三个晶系;而高级晶族只有立方晶系。以上七大晶系又派生出 32 个晶类。

在讨论具体晶体材料之前,先考虑三种晶体结构和了解这些晶体的基本特性。图 1.2.4 给出了简单立方、体心立方和面心立方的结构。对这三种简单结构,选择它们的元胞是三个矢量 a, b, c ,它们彼此垂直,长度相等。因此,简单立方(sc)结构中原子均处在体顶角,体心立方(bcc)结构,在体心有一粒原子,而面心立方(fcc)结构,在立方体的六个面中心各有一粒原子。

若已知材料的晶体结构及其晶格尺寸,可以求得晶体的特性。

例 1.2.1 有一单晶材料是体心立方体,它的晶格常数 $a = 5 \text{ \AA} = 5 \times 10^{-8} \text{ cm}$,求晶体的原子体密度。

解:对体心立方体的晶体,体角原子为每个体角上相遇的 8 个元胞共享,所以每个体角原子把它的八分之一的体积“贡献”给 1 个元胞,因此 8 个体角原子对一个元胞的“贡献”等效为 1 个原子。结果,晶体元胞的体心原子和 8 个体角原子相加,每个元胞实含 2 个原子。