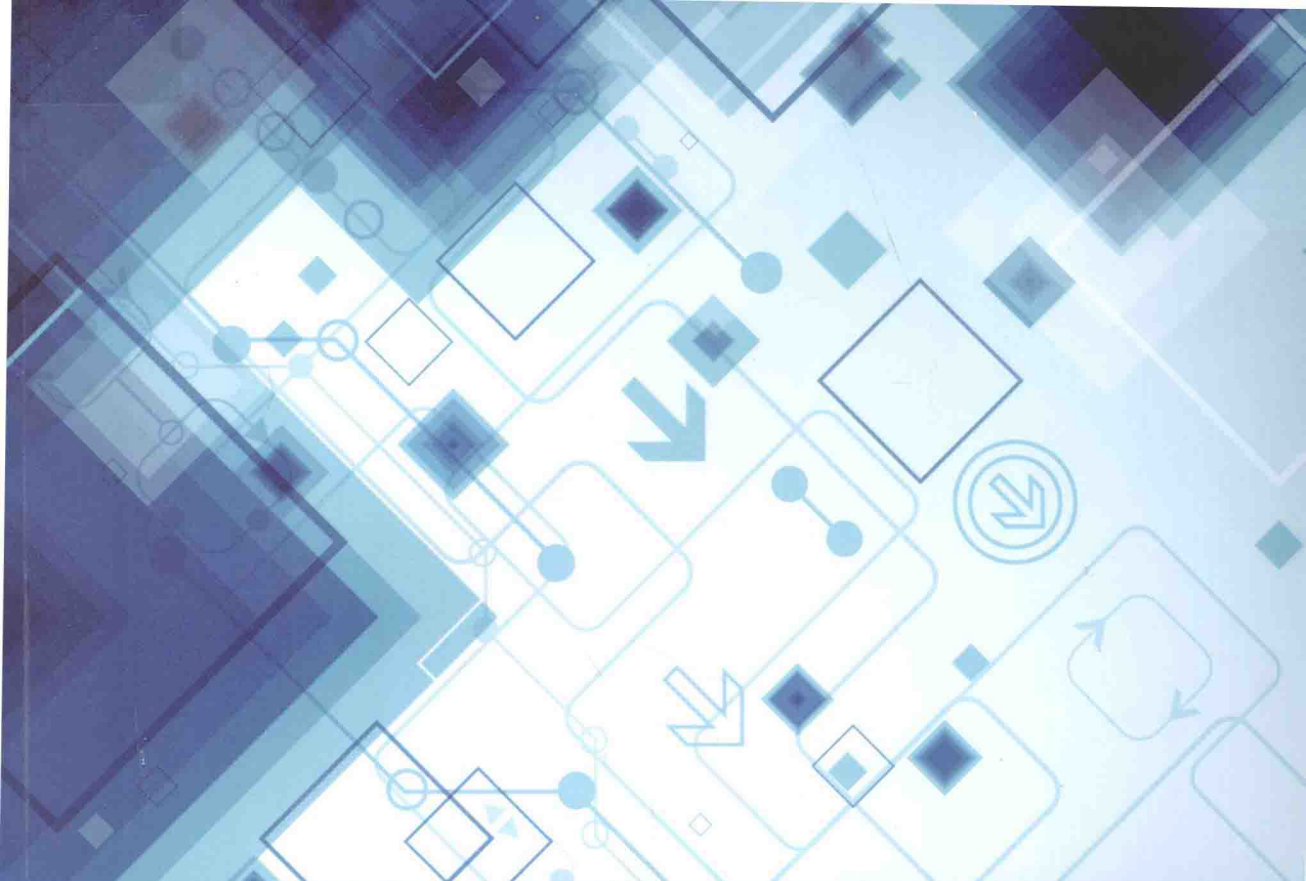




郭澎 张福海 刘永 编著

晶体管原理

(第2版)



国防工业出版社

National Defense Industry Press

晶体管原理(第2版)

郭 澎 张福海 刘 永 编著

国防工业出版社

·北京·

内 容 简 介

本书主要讲述双极型晶体管和场效应晶体管的基本工作原理及其频率特性、功率特性、开关特性,并描述这些特性的相关参数。讲述了新型半导体器件包括最新发明的石墨烯场效应晶体管和常温单电子晶体管的结构和特性。为适应计算机辅助设计仿真的需求,书中介绍了半导体器件特别是国产军品器件创建模型的方法。

本书适合作为“微电子科学与工程”“集成电路设计与集成系统”等专业的本科教材,也适用于“光电子(信息)工程”等相关专业的研究生教材,以及从事微电子、光电子(信息)专业相关工作的科研与工程技术人员阅读参考。

图书在版编目(CIP)数据

晶体管原理 / 郭澎, 张福海, 刘永编著. — 2 版. — 北京 :
国防工业出版社, 2016. 4
ISBN 978 - 7 - 118 - 10771 - 5

I. ①晶… II. ①郭… ②张… ③刘… III. ①晶体管
— 理论 IV. ①TN320.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 071255 号

※

国防工业出版社 出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号 邮政编码 100048)

腾飞印务有限公司印刷

新华书店经售

*

开本 787×960 1/16 印张 23¼ 字数 473 千字

2016 年 4 月第 2 版第 1 次印刷 印数 1—3000 册 定价 58.00 元

(本书如有印装错误,我社负责调换)

国防书店:(010)88540777

发行邮购:(010)88540776

发行传真:(010)88540755

发行业务:(010)88540717

再版前言

本书根据2002年第1版修订而成,更正了第1版中的个别文字与符号错误,并增加了石墨烯场效应晶体管和常温石墨烯单电子晶体管以及新型半导体器件模型章节。

本书主要介绍双极型晶体管和MOS场效应晶体管两类器件,二者是目前集成电路中的核心器件,也是各种新型分立器件的基础。本书重点阐述这两类器件的基本原理及其各种特性和参数。第1章的固体与半导体物理、器件工艺知识,作为后续章节的基础,进行了简明扼要的介绍。

全书保持了第1版“少而精”的特点,着重阐述晶体管中载流子在各种不同工作条件下运动的物理过程,突出物理图像,强调基本概念。除了一些必需的数学推导外,尽量避免冗长的数学公式,有助于学生抓住重点,对器件基本原理和特性有清晰、完整的理解。

本书增加了最新发明的石墨烯场效应晶体管和常温石墨烯单电子晶体管的结构和特性内容。为适应计算机辅助设计仿真的需求,并注意到军品半导体器件优选目录中的大多数是国产半导体器件,国产半导体器件特别是军工器件普遍缺乏仿真模型,在民用电路仿真过程中,通常采用查找替代模型来解决这个问题。在军用电路仿真中,发现军品电子元器件虽能找到替代器件,但国外厂商也不提供它的仿真模型,因此添加了半导体器件模型章节。

在本书编写和再版修订过程中,参阅了国外以及兄弟院校的相关图书和论文,从中汲取了许多有益的内容,在此向这些资料的作者表示感谢。参加编写的人员有郭澎、张福海、刘永。郭澎编写第1、7、8、9章,张福海编写第2、3、5章,刘永编写第4、6章,贺劲松编写了半导体器件模型程序,郭澎负责本教材编写的统稿工作。

本书适用于“微电子科学与工程”“集成电路设计与集成系统”等本科专业的主干专业课“半导体器件物理”等相关专业课程,参考学时为54~72,可视具体学时数有选择地讲授。本书也适用于“光电子(信息)工程”等相关专业的研究生课程教材,以及从事微电子、光电子(信息)专业相关工作的科研与工程技术人员参考。

由于编者水平有限,书中难免存在一些缺点和错误,殷切希望广大读者批评指正。

编著者

2016年于南开园

目 录

第 1 章 半导体物理与工艺概要	1
1.1 晶体结构和能带结构	1
1.1.1 理想晶体的结构	1
1.1.2 理想晶体的能带结构	5
1.1.3 晶格振动和杂质原子对半导体性质的影响	8
1.2 半导体中的载流子	10
1.2.1 平衡载流子的统计	10
1.2.2 半导体中的非平衡载流子	18
1.3 载流子的运动	25
1.3.1 漂移运动	26
1.3.2 扩散运动	29
1.4 半导体中的基本控制方程组	30
1.4.1 电流密度方程	30
1.4.2 连续性方程	31
1.5 PN 结的电学特性	32
1.5.1 PN 结直流伏安特性	32
1.5.2 势垒电容和扩散电容	33
1.5.3 击穿特性	34
1.6 基本器件工艺	36
1.6.1 衬底制备和外延生长	36
1.6.2 氧化和光刻	37
1.6.3 扩散与离子注入	38
习题	41
参考文献	41
第 2 章 晶体管的直流特性	42
2.1 晶体管的基本结构及其杂质分布	42

2.1.1	基本结构	42
2.1.2	晶体管工艺与杂质分布	43
2.1.3	均匀基区晶体管和缓变基区晶体管	44
2.2	晶体管的放大机理	45
2.2.1	晶体管的电流传输作用	45
2.2.2	晶体管端电流的组成	47
2.2.3	描述晶体管电流传输作用和放大性能的参数	48
2.2.4	晶体管的放大能力	50
2.3	晶体管的直流伏安特性	52
2.3.1	均匀基区晶体管的伏安特性	52
2.3.2	缓变基区晶体管有源放大区的伏安特性	58
2.4	直流电流增益	66
2.4.1	理想晶体管的直流增益	66
2.4.2	影响直流增益的一些因素	71
2.5	反向电流和击穿电压	81
2.5.1	反向电流	81
2.5.2	击穿电压	84
2.5.3	穿通电压	88
2.6	基极电阻	90
2.6.1	梳状晶体管	90
2.6.2	圆形晶体管	94
2.7	特性曲线	95
2.7.1	输入特性曲线	96
2.7.2	输出特性曲线	97
2.7.3	晶体管的直流小信号 h 参数	98
2.8	晶体管模型	102
2.8.1	埃伯斯 - 莫尔模型	102
2.8.2	晶体管各工作区的模型	104
	习题	106
	参考文献	107
第3章	晶体管的频率特性	108
3.1	基本概念	108

3.1.1	晶体管的交流小信号电流增益	108
3.1.2	描述晶体管频率特性的参数	109
3.2	电流增益的频率变化关系——截止频率和特征频率	111
3.2.1	交流小信号电流的传输过程	111
3.2.2	共基极电流增益和 α 截止频率	114
3.2.3	共射极电流增益 β 截止频率和特征频率	123
3.3	高频功率增益和最高振荡频率	128
3.3.1	晶体管的功率增益	129
3.3.2	晶体管的高频功率增益	131
3.4	双极型晶体管的噪声特性	136
3.4.1	晶体管的噪声和噪声系数	136
3.4.2	晶体管的噪声来源	138
3.4.3	晶体管的噪声频谱特性	140
	习题	141
	参考文献	142

第4章 双极型晶体管的功率特性

4.1	基区大注入效应对电流放大系数的影响	143
4.1.1	大注入下基区少数载流子分布	143
4.1.2	基区电导调制效应	147
4.1.3	基区大注入对电流放大系数的影响	147
4.1.4	大注入对基区渡越时间的影响	149
4.2	基区扩散效应	150
4.2.1	注入电流对集电结空间电荷区电场分布的影响	150
4.2.2	基区扩展效应	152
4.3	发射极电流集边效应	155
4.3.1	发射极电流的分布	155
4.3.2	发射极有效条宽	156
4.3.3	发射极有效长度	158
4.4	发射极单位周长电流容量	159
4.4.1	集电极最大允许工作电流 I_{CM}	159
4.4.2	线电流密度	159
4.5	晶体管最大耗散功率 P_{CM}	161

4.5.1	耗散功率和最高结温	161
4.5.2	热阻	162
4.5.3	晶体管的最大耗散功率	164
4.6	二次击穿和安全工作区	164
4.6.1	二次击穿现象	165
4.6.2	二次击穿机理及改进措施	166
4.6.3	安全工作区	170
	习题	171
	参考文献	172
第5章	开关特性	173
5.1	晶体管的开关作用	173
5.1.1	晶体管开关作用的定性分析	173
5.1.2	截止区和饱和区的电荷分布	174
5.2	晶体管的开关过程和开关时间	179
5.2.1	几个开关时间的定义	179
5.2.2	电荷控制理论	180
5.2.3	延迟过程和延迟时间	183
5.2.4	上升过程与上升时间	185
5.2.5	电荷储存效应与储存时间	188
5.2.6	下降过程与下降时间	195
5.2.7	提高开关速度的措施	197
5.3	开关管正向压降和饱和压降	198
5.3.1	正向压降	198
5.3.2	饱和压降	199
	习题	202
	参考文献	203
第6章	结型场效应晶体管	204
6.1	结型场效应晶体管(JFET)的基本工作原理	204
6.1.1	JFET的基本结构	204
6.1.2	JFET的基本工作原理	204
6.1.3	JFET的输出特性和转移特性	205

6.1.4	肖特基栅场效应晶体管(MESFET)	208
6.1.5	器件的类型和代表符号	208
6.2	JFET 的直流参数和低频小信号交流参数	209
6.2.1	JFET 的直流电流—电压特性	209
6.2.2	JFET 的直流参数	212
6.2.3	JFET 交流小信号参数	214
6.2.4	沟道杂质任意分布时器件的伏安特性	216
6.2.5	高场迁移率的影响	218
6.3	结型场效应晶体管的频率特性	219
6.3.1	交流小信号等效电路	219
6.3.2	JFET 的频率参数	222
6.4	结型场效应晶体管结构举例	223
6.4.1	MESFET	223
6.4.2	JFET	226
6.4.3	V 形槽 JFET	226
	习题	227
	参考文献	227

第7章 MOS 场效应晶体管 228

7.1	MOSFET 的基本工作原理和分类	228
7.1.1	MOSFET 的基本结构	228
7.1.2	MOSFET 的基本工作原理	229
7.1.3	MOSFET 的分类	230
7.2	MOSFET 的阈值电压	230
7.2.1	MOSFET 阈值电压表达式	231
7.2.2	影响 MOSFET 阈值电压的诸因素分析	233
7.3	MOSFET 的直流特性	239
7.3.1	MOSFET 的电流—电压特性	239
7.3.2	弱反型(亚阈值)区的伏安特性	243
7.3.3	MOSFET 的特性曲线	244
7.3.4	MOSFET 的直流参数	247
7.4	MOSFET 的频率特性	248
7.4.1	低频小信号参数	248

7.4.2	交流小信号等效电路	252
7.4.3	MOSFET 的高频特性	255
7.4.4	提高 MOSFET 频率特性的途径	258
7.5	MOSFET 的击穿特性	259
7.5.1	漏源击穿	259
7.5.2	MOSFET 的栅击穿	262
7.6	MOSFET 的功率特性和功率 MOSFET 的结构	263
7.6.1	MOSFET 的功率特性	264
7.6.2	功率 MOSFET 的结构介绍	265
7.7	MOSFET 的开关特性	268
7.7.1	开关作用	268
7.7.2	开关时间	271
7.8	MOSFET 的温度特性	275
7.8.1	迁移率随温度的变化	275
7.8.2	阈值电压与温度的关系	275
7.8.3	MOSFET 几个主要参数的温度关系	277
7.9	MOSFET 的噪声特性	279
7.9.1	沟道热噪声	279
7.9.2	诱生栅极噪声	280
7.9.3	$\frac{1}{f}$ 噪声	280
7.9.4	MOSFET 的高频噪声系数	281
7.10	MOSFET 的短沟道和窄沟道效应	281
7.10.1	阈值电压的变化	282
7.10.2	漏特性及跨导的变化	284
7.10.3	弱反型区的亚阈值电流	286
7.10.4	长沟道器件的最小沟道长度限制	287
7.10.5	短沟道高性能器件结构举例	288
	习题	291
	参考文献	292

第 8 章 石墨烯场效应晶体管 293

8.1	石墨烯场效应管	293
8.1.1	石墨烯材料	293

8.1.2	石墨烯场效应晶体管	294
8.1.3	石墨烯场效应晶体管的结构	295
8.1.4	石墨烯中载流子浓度的统计分布	298
8.1.5	石墨烯场效应晶体管的电流-电压特征	300
8.1.6	石墨烯场效应晶体管频率特性	305
8.2	单电子晶体管	307
8.2.1	单电子晶体管概述	307
8.2.2	单电子晶体管结构	308
8.2.3	库仑阻塞现象	309
8.2.4	隧穿概率的分析	310
8.2.5	单电子晶体管的 $I-U$ 特性	311
8.2.6	单电子晶体管的跨导	314
8.2.7	单电子晶体管的频率特性	315
	参考文献	316

第9章 新型半导体器件的仿真模型 318

9.1	仿真模型的研究	318
9.2	半导体器件的 SPICE 模型	319
9.2.1	SPICE 的 MOSEFT 器件模型	319
9.2.2	SPICE 的 MOS 器件的模型算法	323
9.2.3	理想的 MOSFET 的模型	328
9.3	新型半导体器件的建模	330
9.3.1	模型的建立	330
9.3.2	确定模型参数	330
9.3.3	模型参数计算优化提取	330
9.3.4	MOS(FET) 器件模型参数的提取	331
9.4	砷化镓场效应管模型	333
9.4.1	砷化镓场效应管模型的建立	333
9.4.2	砷化镓场效应管的仿真	336
9.5	离子敏感场效应管模型	339
9.6	功率 MOSFET 模型	342
9.6.1	等效电路结构	342
9.6.2	各部分的建模思路和参数提取	343

9.7 单电子晶体管的模型	346
9.8 Multisim 器件模型向 PSPICE 的转化	348
9.8.1 Multisim 与 PSPICE 元件库的比较	348
9.8.2 利用 Multisim 扩展 PSPICE 元件模型库	349
9.8.3 Multisim 器件模型向 PSPICE 的转化	350
9.9 从生产厂下载相似 PSPICE 模型	355
9.10 国产军品半导体器件建模	359
9.10.1 软件机器人 ISIGHT	359
9.10.2 军工半导体器件建模	360
9.10.3 建模实例	362
参考文献	366

第 1 章 半导体物理与工艺概要

半导体物理学是半导体器件工作的物理基础。为此本章简要回顾半导体物理的基本内容,且着重介绍与器件工作有关的概念与结论。另一方面,半导体器件的特性在很大程度上又依赖于其制作工艺,所以,基本的器件制造工艺也将在本章扼要介绍。

1.1 晶体结构和能带结构

本节简要讨论有关晶体结构和能带理论的基本知识。首先介绍理想晶体及其能带,讲述几种在器件制造中最重要的半导体晶体的结构及其电子态的能带结构;然后分析实际晶体偏离理想晶体的一些因素以及它们对半导体性质所产生的影响。

1.1.1 理想晶体的结构

1. 半导体单晶

固体按照其导电性质分为金属(导体)、绝缘体和半导体三大类。按照其微观的原子(这里“原子”泛指原子、离子、分子或基团,即基元)排列情况,则划分为晶体和非晶体两大类。原子规则排列,即所有原子的位置在空间形成一个周期点阵(又称周期格子)的固体,称为晶体。金属、半导体及部分绝缘体(如 NaCl、石英、方解石、各种宝石等)都是晶体。原子排列没有规则性的固体,则称为非晶体(也称无定形体)。玻璃、松香、石蜡、橡胶、塑料等为非晶体。虽然也有非晶态的半导体材料,如非晶硅,但只用来制造廉价的非晶硅太阳能电池和开关器件(如 TFT),目前尚不能制造出用于信号放大与处理的半导体器件。

晶体又分为单晶体和多晶体。在单晶体中,原子排列的规则周期性在整个晶体中出现。而在多晶体中,原子排列的规则性只在一个个被称为晶粒的很小的区域内出现,各个晶粒之间则由原子排列没有规则性的边界区域(称为晶粒间界,简称晶界)分隔开。多晶体可以看成是由许多微小的单晶体集合在一起构成的,而非晶体则连多晶体这种局部周期性也没有,整个原子的排列完全是杂乱无章的。常见的金属多为多晶体,烧结而成的陶瓷半导体也是多晶体,用提拉法和区熔法以及外延工艺生长的 Si、Ge、GaAs、GaP、CdS 等半导体晶体都是单晶体。由于多晶体中存在大量的晶界,而晶界处的性质与单晶体内部有很大不同。因此,一般来说也不能用多晶体材料制作半导体器件。半导体材料今天能得到如此广泛的应用,主要归功于现在能够制备纯净和完美的各种半导体单晶体。

在宏观物理性质上,晶体(以下均指单晶体)表现出几个主要特征^[1]:具有固定的熔点、规则的几何外形、各向异性等。晶体之所以具有这些特点,是由于晶体在结晶时,原子是按一定的规则排列的。也就是说,这些性质反映了晶体内部原子的有序排列。非晶体在凝固时不经过结晶(即有序化)的阶段,因此完全不具备上述性质。纯净的半导体单晶锗(Ge)、硅(Si)和砷化镓(GaAs)的熔点(亦是其结晶点)分别为 937℃、1415℃、1238℃,当其中混有不同比例的杂质时,其熔点将发生变化。晶体的各向异性是指在不同方向上,其力学、热学及光学等性质是不同的,如热导率、光折射系数等参数沿不同晶向而有差异。此外,单晶体还有沿某些确定方位的晶面容易劈裂(称为解理)的性质,这是力学性质的各向异性。对 Ge 和 Si,解理面为{111}面,而对具有类似晶格结构的 GaAs 则为{110}面,其原因将在后面说明。半导体单晶的各向异性还表现在沿不同晶向其腐蚀速率不同,称为各向异性腐蚀。正是利用这一性质发展起来的 VMOS 工艺,使 MOS 晶体管开始进入大功率器件领域。

2. 重要半导体的晶体结构

3 种最重要的半导体是 Ge、Si 和 GaAs,它们的性质已得到广泛和深入的研究。在半导体器件中,Si 是应用最多的材料,这是因为 Si 的本征载流子浓度比 Ge 小 3 个数量级,所以 Si 器件的参数如反向漏电流等比 Ge 器件好得多。Ge 材料的性质最早得到研究,因而它较多地用于早期的半导体器件中。GaAs 有与 Ge、Si 不同的性质,主要用于微波器件和光电器件中。

Ge、Si、GaAs 单晶体都属于立方晶系,晶胞为立方体。Ge 和 Si 晶体为金刚石结构,如图 1-1 所示,在一个面心立方晶胞内还有 4 个原子,这 4 个原子分别位于 4 个体对角线的 1/4 处。它是一个复式格子,可以看做是由两个 Ge 或 Si 原子组成的两个面心立方子晶格沿体对角线位移 1/4 的长度套构而成。GaAs 晶体为闪锌矿晶格(图 1-2),其结构与金刚石类似,只不过组成闪锌矿晶格的两个面心立方子晶格是由两种原子组成,即 Ga 原子的面心立方子晶格和 As 原子的面心立方子晶格沿体对角线平移 1/4 套构而成。除 GaAs 之外的大多数 III-V 族化合物半导体单晶体也是闪锌矿结构。

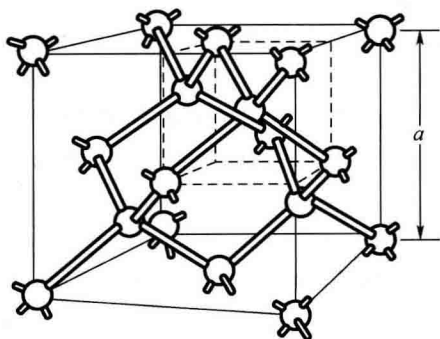


图 1-1 金刚石晶格(C、Ge、Si 等)

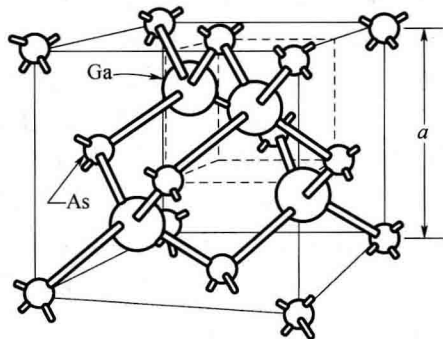


图 1-2 闪锌矿晶格(GaAs、GaP 等)

除金刚石结构和闪锌矿结构外,有许多半导体(包括部分Ⅲ-V族化合物半导体)有纤锌矿或NaCl晶体结构。图1-3示意出纤锌矿结构,它可以看成是由两个6角密积晶格(例如,对于CdS,为Cd的子晶格和S的子晶格)套构而成。在上述金刚石结构、闪锌矿结构和纤锌矿3种晶体结构中,每个原子(或离子)都有4个最近邻的原子(或离子)。以任一原子为中心,它的4个最近邻原子分别位于一个四面体的4个顶角上。

图1-4所示为NaCl型晶体结构,是由两个简立方晶格(例如,对于PbS,为Pb的子晶格和S的子晶格)沿 $\langle 100 \rangle$ 方向位移 $1/2$ 套构而成,每个原子有6个最近邻原子。

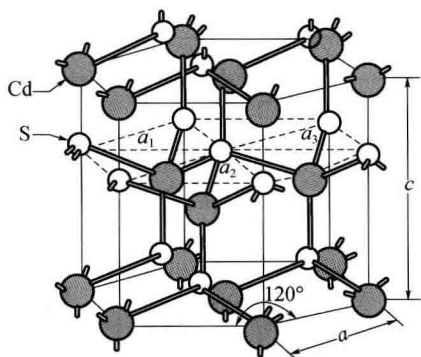


图1-3 纤锌矿晶体结构(CdS、ZnS等)

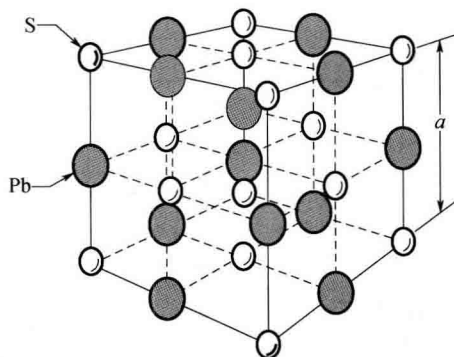


图1-4 NaCl晶格(PbS、PbTe等)

表1-1列出了重要半导体的晶体结构及晶格常数^[2]。注意,有一些化合物半导体,如ZnS和CdS,可以兼有闪锌矿和纤锌矿两种晶体结构。

3. 半导体晶体中原子间的结合力

半导体晶体的基本结合方式有两种,即共价键和离子键。Ⅳ族元素半导体C(金刚石)、Si、Ge、Sn(灰锡)是共价键结合的典型代表。共价键即相邻的两个原子各出一个电子相互共用,这两个电子的自旋方向彼此相反,从而在最外层形成公用的封闭电子壳层,这类晶体称为原子晶体,也称为共价晶体。在上述4个元素半导体中,每个原子最外层有4个电子,而这4种晶体均具有金刚石结构,因此每个原子都有4个同样的原子作为其最近邻。所以每个原子能够与周围其他4个原子组成共价键而各自形成封闭壳层的结构,其平面图如图1-5(a)所示。离子键又叫极性键,可以在许多化合物半导体中找到。以Ⅱ-VI族化合物半导体ZnS为例,Zn原子的最外层电子有两个,而S原子的最外层电子则有6个。当二者结合时,Zn原子失去两个电子转移到S原子上,形成具有封闭壳层的正负两种离子 Zn^{2+} 、 S^{2-} ,成为稳定的结构。在ZnS晶体的纤锌矿结构中,两个6角密积子晶格分别由 Zn^{2+} 和 S^{2-} 所占据。它们彼此之间,则主要依靠离子间的静电库仑力结合在一起,因此一种离子的最近邻离子必为异号离子,其平面图如图1-5(b)所示,对ZnS晶体(纤锌矿结构),与金刚石和闪锌矿结构类似,一个 Zn^{2+} (或 S^{2-})与4个最近邻的 S^{2-}

(或 Zn^{2+}) 组成正四面体, 即配位数是 4。离子键比共价键结合力强, 即拆散离子键需要较大的能量。

表 1-1 重要半导体的晶格结构

	元素或化合物	名 称	晶体结构	300K 的晶格常数/ $\text{\AA}$
元素半导体	C	碳、金刚石	金刚石	3.56679
	Ge	锗	金刚石	5.6748
	Si	硅	金刚石	5.43086
	Sn	灰锡	金刚石	6.4892
IV - IV	SiC	碳化硅	闪锌矿	4.358
III - V	AlSb	锑化铝	闪锌矿	6.1355
	BN	氮化硼	闪锌矿	3.615
	BP	磷化硼	闪锌矿	4.538
	GaN	氮化镓	纤维锌矿	$a = 3.186, c = 5.176$
	GaSb	锑化镓	闪锌矿	6.0055
	GaAs	砷化镓	闪锌矿	5.6534
	GaP	磷化镓	闪锌矿	5.4505
	InSb	锑化铟	闪锌矿	6.4788
	InAs	砷化铟	闪锌矿	6.0585
	InP	磷化铟	闪锌矿	5.8688
II - VI	CdS	硫化镉	闪锌矿	5.832
	CdS	硫化镉	纤维锌矿	$a = 4.16, c = 6.756$
	CdSe	硒化镉	闪锌矿	6.05
	ZnO	氧化锌	立方	4.58
	ZnS	硫化锌	闪锌矿	5.42
	ZnS	硫化锌	纤维锌矿	$a = 3.82, c = 6.26$
IV - VI	PbS	硫化铅	立方	5.935
	PbTe	碲化铅	立方	6.45

在大多数半导体晶体中, 原子间的结合力是介乎离子键与共价键之间的形式。一般来说, 元素在周期表中的位置越靠近上部和左右两侧, 形成的键越接近于离子键; 反之, 元素在周期表中的位置越靠近下部和中间, 形成的价键越接近于共价键。IV 族元素半导体 C、Ge、Si、Sw 为纯粹的共价键, III - V 族化合物半导体 GaAs、InSb 等以共价键为主, 但兼有一些离子键的成分; 以离子键为主的半导体可以 ZnS、PbS 为例, 但都兼有共价键的成分; 许多 II - VI 族化合物半导体也是如此。以离子键为主的半导体, 常称为极性半导体,

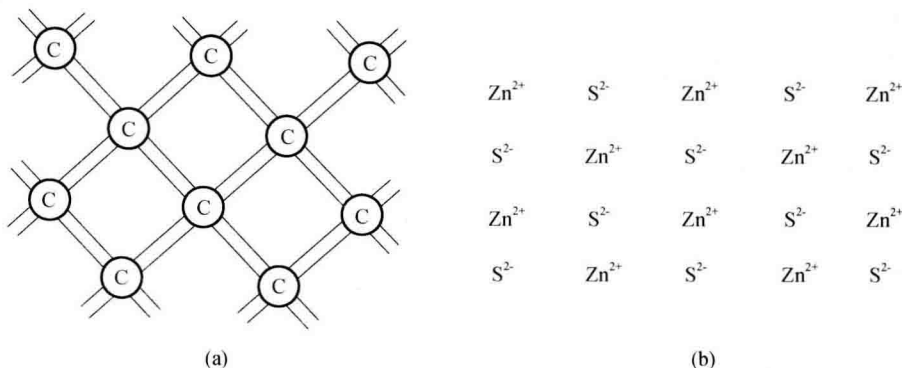


图 1-5 共价键和离子键的平面示意图

其中一部分取 NaCl 晶格结构。以共价键为主的半导体,则常称为非极性半导体。

除晶格结构决定晶体的性质外,原子(或离子)间的结合力对晶体的性质亦有影响。以Ⅲ-V族具有闪锌矿结构的 GaAs 为例,其(110)面就具有容易解理的性质。我们知道,对于金刚石结构(可以看做闪锌矿结构的特例)的 Ge、Si 晶体,(111)面之间有最大面间距,因此(111)面是解理面。但对 GaAs 单晶来说,虽然(111)面的面间距 $\frac{\sqrt{3}}{4}a$ 大于(110)面间的面间距 $\frac{\sqrt{2}}{4}a$,但在(111)面的两侧一边全是 Ga 原子,

一边全是 As 原子。由于 Ga 与 As 之间具有离子键的成分使(111)面之间存在较强的库仑引力,而(110)面是由相同数目的 Ga、As 原子组成的,两相邻的(110)面间除 Ga、As 原子键合时的库仑引力外,在相同原子之间还存在一定的库仑斥力。因此,GaAs 晶体的(110)面更容易解理。

1.1.2 理想晶体的能带结构

1. 能带理论

在晶体中由于原子间的相互作用,电子(尤其是价电子)不再专属某个原子,而是可以在整个晶体中运动,这称为电子的共有化。描述电子能量与电子在晶体中做共有化运动的波矢 $\mathbf{k}$ 之间的关系 $E(\mathbf{k})$ 称为能带结构,它表明电子在晶体中,其能量可能具有哪些值。

由于晶体中复杂的相互作用,使 $E(\mathbf{k})$ 关系极为复杂。于是采用绝热近似、静态近似和单电子近似等近似处理,将晶体中电子系统这一多体问题简化为单电子问题。再用现代计算方法和高速电子计算机,采用适当的势函数,求解薛定谔方程。确定本征波函数和本征能量值 $E(\mathbf{k})$,其问题的实质是只需要考虑一个电子在固定的原子实势场及其他电子