

半導體專業試用教材

半 導 體 材 料

(供學員學習討論用)

武漢大學四大隊十六連編

一九七一年元月

前 言

伟大领袖毛主席教导我们说：“改革旧的教育制度，改革旧的教学方针和方法，是这场无产阶级文化大革命的一个极其重要的任务。”

党的九届二中全会公报指出：“要继续‘认真搞好斗、批、改’，深入开展革命大批判，肃清刘少奇反革命修正主义路线的余毒，把政治战线、文化教育战线、经济战线和上层建筑各个领域的革命进行到底。”在公报精神的指引下，在驻校工人解放军毛泽东思想宣传队的领导下，我们编写了这份“半导体材料”课的试用教材。

本教材是为一九七〇年首届入学的半导体专业连队的学员，经过半年校办工厂和校外工厂劳动，初步接触实际，依照“实践、认识、再实践、再认识”的规律，供大家学习讨论而编写的。考虑到学员在校学习的期间内，应当了解半导体的导电理论，把原属半导体物理中的一部分内容编入第四章。

由于我们学习毛主席著作不够，对毛主席的许多观点体会不深，用得不活，时间仓促，力量有限，因此，教材中一定还存在缺点和错误，请同志们提出宝贵意见，以便今后改进。让我们大家携起手来，在毛泽东思想的哺育下，编写出无产阶级的新教材，为创办社会主义大学，把无产阶级教育革命进行到底而共同努力吧！

目 录

第一章 认识世界 改造世界

——硅材料的基本性质	(1)
§1-1 半导体材料硅单晶体	(2)
§1-2 硅的导电类型和测量方法	(3)
§1-3 <i>N</i> 型和 <i>P</i> 型硅的电阻率	(5)
§1-4 硅单晶中的缺陷	(7)
§1-5 硅的物理化学性质	(10)
附 硅的晶体结构	(11)

第二章 通过实践而发现真理

——硅的合金相图和杂质分凝	(16)
§2-1 相图的基本知识	(16)
§2-2 硅的合金相图	(19)
§2-3 相图的应用 —— 合金结深度的控制	(21)
§2-4 杂质在硅中的分凝和分凝系数	(22)

第三章 对于具体的事物作具体分析

——半导体硅中的杂质	(26)
§3-1 杂质在硅中的特性	(26)
§3-2 杂质在硅单晶中的分布	(30)
§3-3 硅中杂质的补偿	(33)
§3-4 杂质的蒸发和沾污	(35)

第四章 理性认识依赖于感性认识

——半导体硅的导电理论	(39)
§4-1 硅的能带结构	(39)
§4-2 导电的电子与空穴	(41)
§4-3 硅中的施主和受主杂质	(43)
§4-4 载流子的迁移率	(47)
§4-5 载流子的扩散运动与寿命	(50)
§4-6 载流子的产生与复合	(52)

第五章 有所创造 有所前进

——砷化镓的制造方法和原理	(55)
§5-1 砷化镓的制造方法	(55)
§5-2 砷化镓的合成原理	(57)
§5-3 合成砷化镓的设备的要求	(59)
§5-4 砷化镓的单晶生长	(61)
§5-5 砷化镓的特性	(62)

附录:

一、硅的电学性质	(63)
二、元素的原子量、密度, 每毫克的原子数	(64)
三、常用物理常数	(65)
四、摄氏温度、绝对温度、华氏温度	(65)
五、获得低温的方法	(65)

第一章 認識世界 改造世界

——硅材料的基本性質

二十世纪六十年代 第一个春天，我国工人阶级 为了贯彻落实伟大领袖毛主席“**提高警惕，保卫祖国**”，“**备战、备荒、为人民**”的伟大战略方针，为加速我国电子工业的发展，做出了极其优异的成绩。

上海工人阶级依靠战无不胜的毛泽东思想，发扬了“**自力更生、艰苦奋斗**”的精神，狠抓两条路线的斗争，在短短的十三天高速度制造了第一台具有现代技术水平的中国式的单晶炉，很快就拉出了第一炉亮晶晶的单晶硅。又用五十天的时间，继续制造了五十台单晶炉，为多快好省地发展我国电子工业创造了有利的条件。

与此同时，首都工人阶级“**自力更生**”“**多快好省**”地设计和制造成一台具有先进技术水平的中国式大型单晶炉。这台单晶炉生产出高质量、大规格、大直径硅单晶，为生产大型可控硅元件提供必须的大面积的硅材料。每炉产量比原来小型单晶炉大大提高，在我国电子工业的技术水平上，向前跃进了一大步，为进一步发展我国电子工业作出了新贡献。

为了“**抓革命、促生产、促工作、促战备**”，巩固无产阶级专政，支援世界革命，多快好省地把我国建设成为一个具有现代工业、现代农业，现代科学文化和现代国防的伟大的社会主义强国，必然出现一个工农生产大跃进的新高潮。电子工业的蓬勃发展将成为工业革命的先导。

要发展电子工业，必需贯彻“**以粮为纲，全面发展**”的方针。半导体材料就是电子工业的粮食。没有半导体材料，无论什么样的半导体元件都是做不出来的。由此可见，我国工人阶级为了与帝修反作斗争，为了加速电子工业的发展，首先抓好半导体材料的生产，是具有战略意义的部署。

通过参加工厂的生产实践，我们已经知道硅单晶是用单晶炉拉制的。另外还有一种悬浮区熔法制造硅单晶。这两种方法是制造硅单晶最常用和最重要的方法。

我们在生产实践中也学习了外延的方法，在硅单晶薄片衬底表面上，生长一新的单晶层。外延是提供制造平面晶体管和集成电路的硅材料的一种极其重要的方法。

伟大领袖毛主席教导我们：“**不论做什么事，不懂得那件事的情形，它的性质，它和它以外的事情的关联，就不知道那件事的规律，就不知道如何去做，就不能做好那件事。**”我们制造硅材料，生产硅平面晶体管和集成电路，要常常与硅单晶接触，就需要对于自己的工作对象的性质有一个基本的了解。了解了硅的基本性能，在各种不同条件下的规律性，以便更好地为人民服务，达到**認識世界、改造世界**的目的。

§1-1. 半导体材料硅单晶体

用单晶炉拉制的硅单晶，都具有特殊的外形，它反映了内部原子是按一定规律排列的。用化学反应制得大量的硅材料，都是多晶体。实践证明，不能用多晶硅来制造晶体管和集成电路。

用单晶炉拉制硅单晶，是将多晶硅熔化成熔融的液体后生长的。在熔体中的硅原子是能够任意流动的。我们想得到排列规则的硅单晶体，而液体中的硅原子却是杂乱的，这便出现了矛盾。“矛盾着的对立的双方互相斗争的结果，无不在一定条件下互相转化。在这里，条件是重要的。”为了解决这个问题，我们首先讨论一下硅的晶体结构。

硅是四族元素，最外层具有四个价电子，每个硅原子要与周围的四个硅原子形成四个共价键（由两个原子分别提供一个电子，形成电子对，以这种方式结合起来的力，称为共价键。）依靠这种共价键的力量组成硅的晶体。所以硅晶体都是这样的：每个硅原子位于一个四面体的中心，而四个顶角为另外的四个硅原子所占有。这样组成的晶体结构如图 1-1 所示，常叫做金刚石结构，因为它与金刚石的原子（碳）排列是一样的。硅本身决定了这种排列的规律性：硅原子只能按照这种结构排列，才是最稳定的。

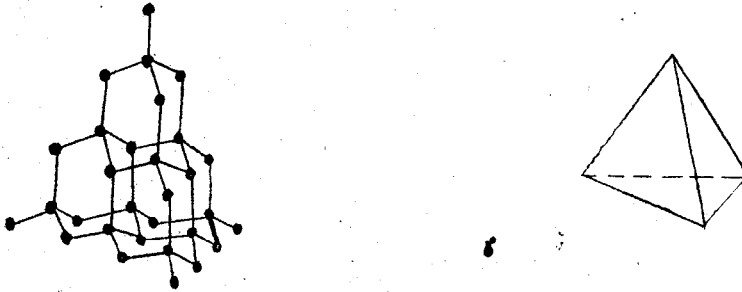


图1-1 1) 硅的金刚石结构模型

2) 正四面体

硅单晶体是如何从熔体中生长出来的呢？也就是在什么样的条件下使杂乱的硅原子，排列成为规则的硅单晶体的？“在这里，条件是重要的。”通过生产实践学习，我们知道控制熔体的温度，创造适当的条件，又人为的引入一个籽晶（必须是单晶体），使硅原子按照籽晶的原子排列的规则来排列，便能逐渐地生长出硅单晶体来。

按照炉温分布、晶体和坩埚旋转等条件，生长出来的硅单晶外形应当是圆柱形的。从这一方面说来，外形基本上应该是圆柱形的。但是我们见到的硅单晶体外形上为什么都有三条对称的棱呢？

“对于具体事物作具体的分析。”“所谓分析就是分析事物的矛盾。”下面我们具体的分析一下硅单晶体的原子排列的特点。

金刚石结构中，原子排列的特点是： $\{111\}$ 面上的原子排列最密（参看附录），因而在 $\{111\}$ 面上的原子与原子结合得最紧。金刚石结构共有四组 $\{111\}$ 面，它们组成一个正四面体，每组 $\{111\}$ 面分别对应于正四面体的四个面。正因为 $\{111\}$ 面上的原子排列最密，原子便易于沿着 $\{111\}$ 面生长成晶体。对于通常沿着 $\langle 111 \rangle$ 方向生长的硅单晶体说来，固液交界

面对应于一组 $\{111\}$ 面，其余的三组 $\{111\}$ 面与固液交界面倾斜 $70^{\circ}32'$ ，并且是以生长方向为轴心的三重对称分布的。 $\{111\}$ 面的三重对称分布与前面讲的圆柱形便构成一对矛盾，这样一对矛盾便是决定硅单晶体外形的根本原因。这一对矛盾对立斗争的结果，便形成我们通常见到的硅单晶体外形，是具有三条对称的稜。

初次拉单晶，或是因为没有控制好单晶的生长条件，便可能使生长出来的晶体不是单晶体。如果从液体状态的原子转变成成为固体状态时，各部分的原子排列不一致，彼此的排列不再同籽晶的原子排列一样，就会造成排列的混乱，生长出来的晶体就不是单晶体，而是多晶体。多晶体中的一个很小的区域内原子排列虽然还是规则的，但是我们“要求看问题比较全面一些”，从整体来看，原子排列就不规则了。这时晶体的外形，便不再具备以生长方向为轴心的三组 $\{111\}$ 面的三重对称性了。

我们经过亲自实践，很容易地就会判断生长出来的硅晶体是单晶还是多晶。在外形上看是否有三条对称的稜，便是沿 $\langle 111 \rangle$ 方向生长的硅晶体是不是单晶的一个重要的正确标志。有经验的同志，可以在晶体生长的过程中，根据晶体表面稜线的条数、对称性，有没有花纹等，来判断拉出来的晶体是不是单晶。拉出来的是单晶，便继续拉下去。拉出来的不是单晶，可以及时回熔，再重新拉。

鉴定硅晶体是不是单晶体，还可以采用 X 光照相的方法。

同样，对于外延生长说来，也是由于硅单晶体原子排列的这种规律性，所以必须控制适当的条件，使气相反应生成的硅原子，能依照衬底表面的原子排列的规则而排列，生长出来的外延层仍然可以是单晶体。

如果抛光质量差，或是氢气纯化不好，或是降温方法不当等，都会使生长的外延片的质量不合要求。

“矛盾着的对立面又统一，又斗争，由此推动事物的运动和变化。”“没有一定的条件，斗争着的双方都不会转化。”无论用单晶炉来拉硅单晶，还是用外延法生长外延片，严格控制它们的生长条件是非常重要的。这只能在生产实践中才能逐步掌握。

§1—2. 硅的导电类型和测量方法

半导体材料硅的电学性质，依其各种不同的用途而有千差万别。就其导电类型来说，有 N 型和 P 型两种， N 型硅主要是电子导电， P 型硅主要是空穴导电。决定其导电类型不同的原因是什么呢？

“任何运动形式，其内部都包含着本身特殊的矛盾。这种特殊的矛盾，就构成一事物区别于他事物的特殊的本质”。根据实践，人们认识到，硅的导电类型不同，就是由于硅中所含的杂质原子种类不同。含有五价的杂质磷砷锑铟的硅是 N 型导电，含有三价的杂质原子硼铝镓铟的硅是 P 型导电。五价杂质原子称为施主，三价杂质原子称为受主。

在制造硅平面型晶体管时，基区和发射区中，既含有三价的杂质元素硼，又含有五价的杂质元素磷，其导电类型应是什么呢？在这种情况下，要看矛盾斗争的双方是那一方占优势，占优势的一方便构成矛盾的主要方面，决定着矛盾的性质。磷的浓度大于硼的浓度时，硅

就是 N 型的。反之，硼的浓度大于磷的浓度时，硅就是 P 型的。两者的浓度差，决定了载流子浓度的大小。抵消的部分，不再提供导电的载流子。也就是对于提供载流子不起作用。这样相互的作用抵消了，称为补偿。

三价与五价的杂质原子浓度相差很大，一种浓度远远小于另一种浓度时，称为弱补偿。假如两种浓度相比较，彼此相差很小，就是强补偿。在这里只讨论弱补偿（或不补偿）的情况，认为硅中只掺有一种杂质原子。一般地讲，硅在室温下载流子的浓度，就等于掺杂的杂质浓度。

“事物都是一分为二的”。事物总是矛盾斗争的统一体。电子和空穴也是又统一又斗争的两方。在 N 型硅中存在的载流子，主要是电子，常称多数载流子；但同时也存在少量的空穴，常称少数载流子。同样在 P 型硅中，空穴是多数载流子，电子是少数载流子。

我们在这一节中抓主要矛盾的方面，多数载流子决定硅的导电类型。

怎样检查硅的导电类型呢？检验硅的导电类型的方法很多，这里介绍生产中常用的热探针法。

热探针法测量半导体的导电类型是一种简单而直观的方法。如图 1-2 所示， A 、 B 两根探针，其中探针 A 被加热。当探针与硅表面接触时，与探针接触的两点产生了温度差。

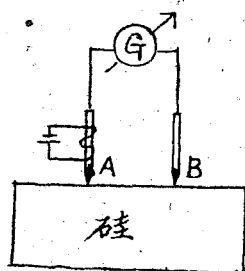


图1-2 热探针测硅的导电类型示意图

两处的温度不同，热激发产生的电子空穴对的数目也不一样，高温的地方产生的电子空穴对要比低温的地方多。金属与半导体接触时，有这样一种特性：金属探针要把半导体中的少数载流子引向金属探针中。于是高温处的多数载流子浓度要比低温处的多数载流子浓度高，形成了多数载流子的浓度不均匀。这样在硅中就形成一个多数载流子的浓度梯度，使多数载流子从热端向冷端扩散。

多数载流子扩散的结果，就造成热端的载流子欠缺而冷端的载流子过剩，产生了电位

差。如果将两根探针与检流计联成一个闭合回路，回路中就会有电流流过。检流计是用来检验电流的。

N 型硅和 P 型硅中的多数载流子是不相同的，电子带负电，空穴带正电。以 N 型硅为例， N 型是电子导电的。在硅中形成的多数载流子的扩散流为电子流。于是冷端过剩的电子从冷探针出发，经过检流计，最后到热探针而形成电流。我们观察到的电流方向为：热探针 → 检流计 → 冷探针。如图 1-3 所示。

同理，如果是 P 型硅，多数载流子的扩散流为空穴流，空穴在冷端过剩。于是我们观察到的电流方向为：冷探针 → 检流计 → 热探针。如图 1-4 所示。 N 型和 P 型的电流刚好相反。

“有比较才能鉴别”，所以我们可以根据电流的方向不同，来鉴别半导体材料是 N 型的还是 P 型的。

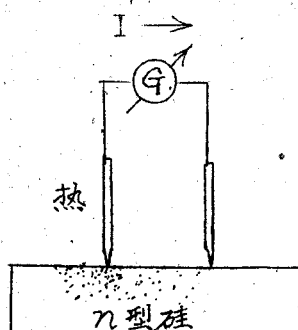


图1-3 N型硅中电子的扩散形成电流

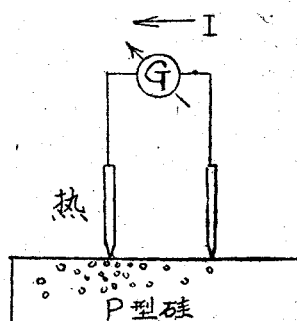


图1-4 P型硅中空穴的扩散形成电流

§1-3. N型和P型硅的电阻率

掺有三价杂质的硅是P型的，掺有五价杂质的硅是N型的。硅的电阻率与所掺杂质的多少有什么样的关系呢？

“一切真知都是从直接经验发源的”。“离开实践的認識是不可能的”。通过实践认识到，室温下硅的电阻率与硅中所含杂质浓度的关系，如图1-5所示。从图中可以看出，在室温下，硅的电阻率随硅中所含杂质浓度的增加而减少。

从图1-5中可以查出，电阻率为 $10^{-3} \Omega\text{-cm}$ 的外延片衬底，含施主杂质浓度大约为 $8 \times 10^{18}/\text{cm}^3$ 。电阻率为 $1 \Omega\text{-cm}$ 的外延层中，含施主杂质浓度大约为 $5 \times 10^{15}/\text{cm}^3$ 。

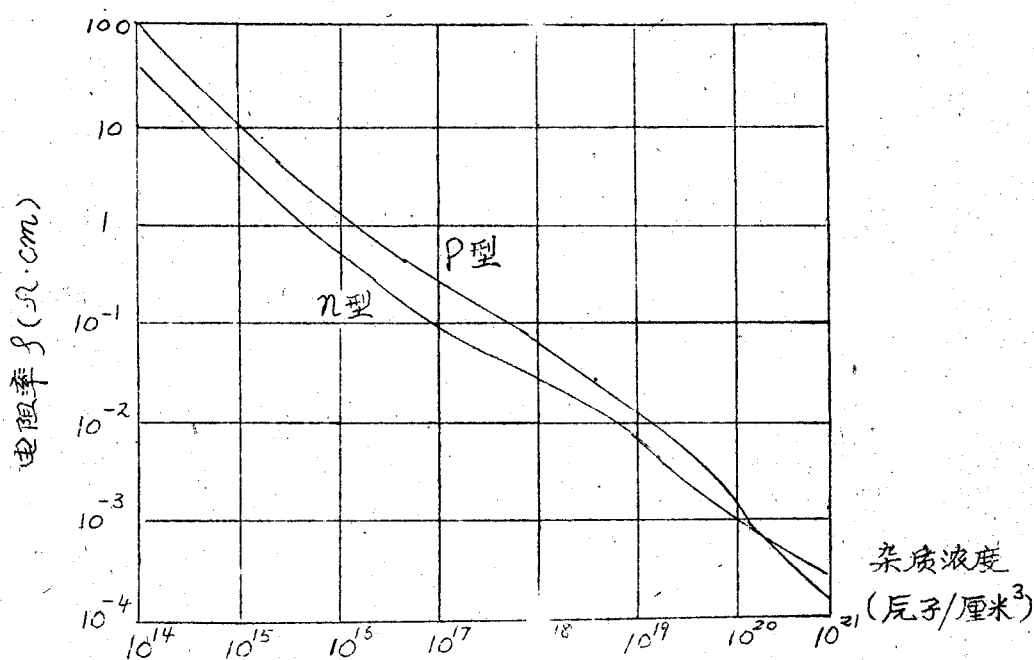


图1-5 300°K 时硅的电阻率和杂质浓度的关系

在室温 (300°K) 下硅中多数载流子浓度约等于所掺杂质原子的浓度。N 型硅中的电子浓度约等于所掺五价杂质原子的浓度，P 型硅中的空穴浓度约等于所掺三价杂质原子的浓度。

如何进一步认识载流子浓度与电阻率的关系呢？

遵照“由认识个别的和特殊的事物，逐步扩大到认识一般的事物”的教导，我们先讨论 N 型硅导电的情形。

设有一块 N 型硅，长、宽、高用 $l a b$ 表示，如图 1-6 所示。设它的电阻为 R ，A B 两端加电压为 V ，通电流为 I ，则有：

$$I = \frac{V}{R} \quad (1-1)$$

若硅的电阻率为 ρ ，则有：

$$R = \rho \frac{l}{a \cdot b} \quad (1-2)$$

$$\text{于是} \quad \frac{I}{a \cdot b} = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{V}{l} \quad (1-3)$$

$$\text{即} \quad J = \frac{1}{\rho} E \quad (1-4)$$

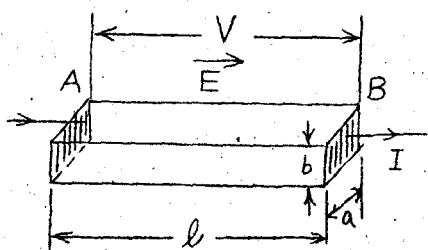


图1-6 N型硅块

J 是电流密度，是 1 厘米² 的横截面上流过的电流； E 是电场强度，为 1 厘米距离内的电压降。

N 型硅中含施主浓度为 N_D ，在室温下产生的电子浓度为 n ，因为一个施主杂质原子产生一个电子，则有 $n = N_D$ 。在无电场存在的条件下，电子的运动是杂乱的无规则的。当有外加电场 E 存在时，“外因通过内因而起作用”，这些电子便在电场的作用下而运动。我们称这种电子在电场作用下的运动叫做漂移运动。如果电子平均漂移速度为 v ，则电流密度 J 可用下式表示：

$$J = nev \quad (1-5)$$

式中 e 为电子的电量， $e = 1.6 \times 10^{-19}$ 库仑。将 (1-4) 式和 (1-5) 式比较，有：

$$nev = \frac{1}{\rho} E \quad (1-6)$$

已知电场强度 E 愈大，则电子的漂移速度也愈大。我们定义电子在单位电场强度 (1 伏特/厘米) 作用下的漂移速度，叫做电子迁移率，用 μ_n 表示。于是在 $E = 1$ 伏特/厘米时， $v = \mu_n$ ，则：

$$\frac{1}{\rho} = ne\mu_n \quad (1-7)$$

$$\rho = \frac{1}{ne\mu_n} \quad (1-8)$$

在室温下，硅中电子迁移率 $\mu_n = 1350 \text{ 厘米}^2/\text{伏} \cdot \text{秒}$ 。

同样，对于 P 型硅说来，电阻率 ρ 与空穴浓度 p 的关系为：

$$\rho = \frac{1}{pe\mu_p} \quad (1-9)$$

μ_p 为空穴的迁移率。在室温下，硅中空穴迁移率 $\mu_p = 480 \text{ 厘米}^2/\text{伏} \cdot \text{秒}$ 。

正是由于硅中空穴的迁移率小于电子的迁移率，所以当 P 型硅中空穴浓度等于 N 型硅中电子浓度时， P 型硅的电阻率大于 N 型硅的电阻率。

以上推导出电阻率与载流子浓度的关系，正好成反比例。而实际上电阻率与载流子浓度的关系，偏离这种关系。那是由于硅的内部掺杂浓度增加，对载流子在硅中的漂移运动发生影响的缘故。我们将在第四章中讨论载流子的迁移率，随着掺杂浓度的增加而下降。参看图 4-10 和图 4-11。

§1-4., 硅单晶中的缺陷

上面讨论了硅单晶体的原子排列，应当是规则的排列。只是说这种排列是对于多晶而言是很规则的。但是实际的硅单晶中还隐藏着许多不规则的排列。单晶体中不规则的原子排列有以下几种：空位；间隙原子；取代原子；位错和边界面（层错，小角度晶粒间界）等。这些不规则的原子排列，通通称为晶体缺陷。在这里我们主要讨论位错和层错两种缺陷。

“没有什么事物是不包含矛盾的，没有矛盾就没有世界。”整个单晶硅的生长过程，都充满着硅原子是按照规则排列与不按照规则排列的矛盾斗争。这种矛盾斗争的存在，就提供了产生各种缺陷的可能性。

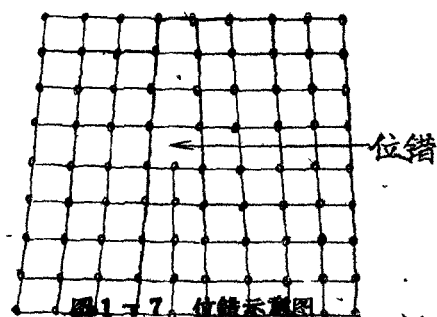
“你对于那个问题不能解决么？那末，你就去调查那个问题的现状和它的历史吧！”这里介绍一下位错、层错的概念，产生的原因，以及观察的方法。

硅单晶里，硅原子应该是规规矩矩、整整齐齐地排列在一起。但实际晶体中的硅原子排列不可能绝对的完整。位错就是排列上最常出现的一种差错。我们用队列来做比喻，比如本来是十个人一排，有一排站错了，只有九个人，后面的人跟着他们都站成九个人一排，造成如图 1-7 所示的情况。这时前前后后都很整齐，就是在一个地方前后差一个，对不齐。在晶体中原子排列造成的这种位置上的错误，这里就叫做位错。按空间排列，位错就是一种线形缺陷。

图 1-7 表示位错的示意图。对于金刚石结构中的位错，按照空间原子来绘制是很复杂的，我们不必追究那么详细了。

假如位错是在硅单晶的表面，用化学腐蚀液来腐蚀，由于在位错处的原子排列不规则，容易与化学腐蚀液起作用，在这里就会显出一个坑，称为位错腐蚀坑。将腐蚀后的硅表面放在金相显微镜下观察，就能看到位错的情况，并且可以测量位错的密度。

在化学腐蚀的过程中，由于表面上位错附近的原子排列不整齐，也就不如规则排列



的原子结合得紧，它们就比较容易地落入腐蚀液中，形成一个坑。又因为硅的晶体排列以 $\{111\}$ 面最密，所以坑中露出来的表面，刚好就是 $\{111\}$ 面。对于 $\{111\}$ 面为表面进行化学腐蚀时，露出来的三组 $\{111\}$ 面以三重对称的与硅单晶表面成 $70^{\circ}32'$ 的角度，最终得到的位错腐蚀坑就是正三角形的。如图1—8所示。图中标出了三个露出来的 (111) 面。

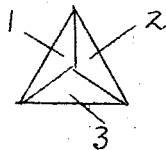


图1—8 位错腐蚀坑示意图

因为固体的硅单晶具有热胀冷缩的本性，生长硅单晶时，固液交界面不平，或是晶体内外温度差别太大，都会使晶体中各部分在降温过程中收缩情况不一样，以致造成原子的错位排列，增加单晶体中的位错数目。

实践告诉我们，位错多的单晶体质量较差，位错少的单晶体质量好些。“任何质量都表现为一定的数量，没有数量也就没有质量。”我们应用位错的数量来表示单晶硅的质量。既然位错是一种线形缺陷，可以用1厘米³体积内位错线的长度表示，也可以用1厘米²面积上位错的个数来表示。例如位错密度为850/厘米²，就是指1平方厘米的表面上，位错坑的数平均约为850个。外延片一般要求位错密度小于1000/厘米²。

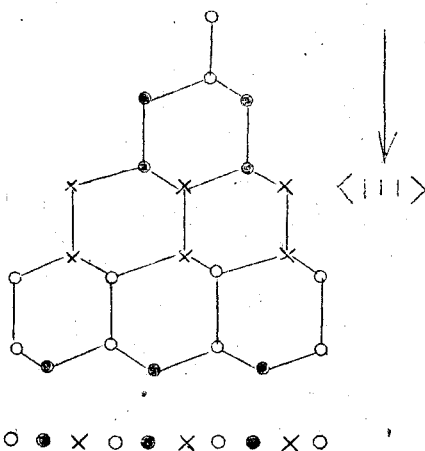


图1—9 晶体剖面示意图

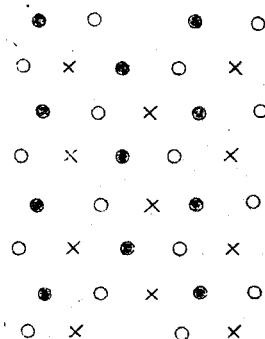


图1—10 $\{111\}$ 面顶视图

层错不同于位错，它是一种面形缺陷。为了理解层错，我们再讨论一下晶体结构。

我们把图1—1划成剖面图，如图1—9所示，用以区分 $\{111\}$ 面上三种原子排列

的位置。从图 1—9 可以看出，金刚石结构有三种原子排列的位置，用 $\circ$ ， $\bullet$ ， $\times$ 来表示。绘制 $\{111\}$ 面的顶视图，把三种位置画在一个平面上，就如图 1—10 所示。我们用 abc 来代表这三种排列位置的话，那么在沿着 $\{111\}$ 面来生长硅单晶体时，硅原子的排列顺序应该是 abcabc.....。

我们在生产外延片的过程中，发现外延层的表面出现正三角形的化学腐蚀图形。经过研究表明，这是由外延衬底表面开始产生，并扩展到外延层的表面上来的一种面形缺陷，通常叫做层错。

层错是怎样发生的呢？又为什么能利用层错来测定外延层的厚度呢？

经过抛光的外延衬底，在进行外延时应当按照 abcabc 的顺序逐渐生长。绝大部分硅原子都是依照正确的顺序来排列，但由于某种因素使得局部的原子排列错误。例如 $\{111\}$ 表面原子是 a 位置，绝大部分新生长的硅原子排列在 b 位置，是正确的；而有一个小的局部范围发生错误排列，排列在 c 位置上。这以后继续生长下去，正确的排列按 abcabcab 顺序排列，错误的排列按照 acabcabc 的顺序排列，于是两者的排列就会发生不一致。两者之间必定有一交界面。这种局部范围内的“错误排列”，且按照本身的正确顺序排列，随着外延层的生长，还要逐渐扩大范围。由于 $\{111\}$ 面排列得最为紧密，所以“错误排列”与正确排列的交界面是排列最紧密的 $\{111\}$ 面，如图 1—11 所示。在外延层中，四组 $\{111\}$ 面围成的一个正四面体，就是“错误排列”的区域。三组倾斜的 $\{111\}$ 面同表面相交构成一个正三角形。

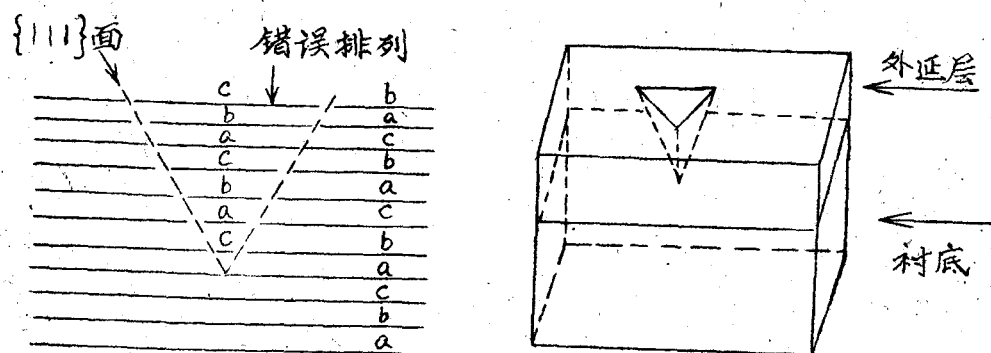


图 1—11 层错形成的示意图。

从单晶体的规则排列来看，这三个交界面上的原子排列是混乱的。因为在这个四面体之内或之外，它们的排列都符合硅单晶的规则排列，但是彼此又不一致，必然有一个过渡，这个过渡的界面就必然是混乱的。用化学腐蚀液腐蚀时，表面就显出正三角形的图形来。

由于层错是从衬底表面开始的，根据正四面体的高与一个边的关系，可以计算出外延层的厚度 h 与边长 l 的关系为：

$$h = 0.816l$$

我们用金相显微镜测知 l 以后，可用上式计算外延层的厚度。

外延片的层错数要求小于 100/厘米²。

§1-5. 硅的物理化学性质

除上面介绍硅的电学性质外，在制造硅单晶，或使用硅单晶时常常要碰到一些有关硅的物理化学性质的问题。我们掌握了它的性质，它的规律性，以便更好地发挥人的主观能动性，更好地利用它，为发展我国电子工业服务。“无产阶级认识世界的目的，只是为了改造世界，此外再无别的目的。”

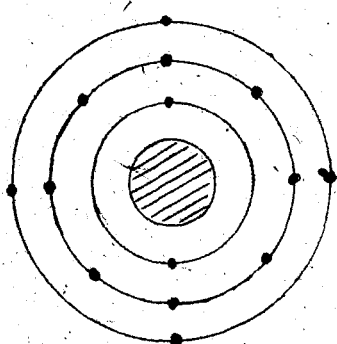


图1-12 硅原子的电子壳层

在元素周期表中，硅位于第三周期ⅣA族。原子序数是14。硅原子的电子壳层共有三层：第一层2个电子，第二层8个电子，第三层4个电子，总共有14个电子，刚好等于硅的原子序数。硅的原子量为28.09。

硅在室温下(300°K)的密度为2.328克/厘米³。即1立方厘米体积的硅重2.328克。1立方厘米的硅含有 5.0×10^{23} 个原子。每个硅原子的重量可以计算出来，约为 4.66×10^{-23} 克。

硅在常温下是固态。在很高温度之下才会熔化。硅的熔化温度同硅的纯度有关，硅中所含杂质浓度增加，会使硅的熔化温度下降。通常测得硅的熔化温度为1420°C（或1415°C，或1410°C）。由于硅的熔化温度较高，在熔硅拉单晶的过程中，我们要考虑到与高温有关的各种问题。

硅在熔化时，即由固态变为液态，硅的体积要缩小9%。反之，硅在凝固时，即由液态变为固态，硅的体积要增加9%。这一性质与水结冰的情形相类似。

石英的成份是二氧化硅，多晶硅常常是放在石英坩埚中熔化。熔硅在高温下与石英起反应，因而熔硅对石英坩埚有侵蚀作用。一旦熔融的硅凝结成固体时，便与石英粘附得很紧，不易把它们分开，倘若在拉单晶的过程中，石英坩埚内的硅料拉不完，残留在石英坩埚内的熔硅凝固时，便会由于粘得很紧而把坩埚胀破。我们必须树立“全心全意地为人民服务”的思想，对技术精益求精，尽可能地避免发生硅料拉不完的现象。

前面已经讲过，硅的晶体结构是金刚石结构。相邻两原子的间距为2.35Å（埃），每个硅原子的半径为1.17Å。

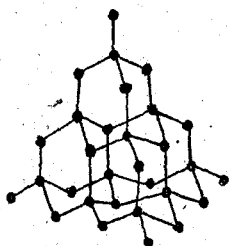
硅的其他一些物理化学性质，参看下表。

硅的物理性质

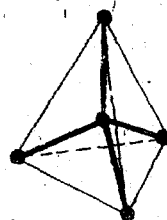
性 质	符 号	数 值	单 位
原 子 序 数	Z	14	
原 子 量	A	28.09	
密 度	D	2.33	克/厘米 ³
每立方厘米原子数		4.99×10^{22}	1/厘米 ³
晶 格 常 数	a	5.431	埃
最近晶格间距		2.35	埃
原 子 半 径		1.17	埃
熔 点	T_m	1420	°C
沸 点	T_b	3145	°C
凝固时体积膨胀		+9	%
热 导 率	σ_T	(纯硅)0.35 (低阻)0.24	卡/厘米·度·秒 卡/厘米·度·秒
比 热	C_P	0.181	卡/克·度
熔 解 热	L_f	425	卡/克
表 面 张 力		720	达因/厘米
线性膨胀系数	α	$+2.33 \times 10^{-6}$	1/度
体 弹 性 模 量	C_{11}	1.656×10^{12}	达因/厘米 ²
硬 度		7.0	洛氏
折 射 率	n	3.420	

附：硅的晶体结构

硅的晶体排列的特点是，每个原子位于正四面体的中心，四面体的四个顶角为另外的四个硅原子所占有。正四面体就是四个正三角形围成的四面体，如图1所示。

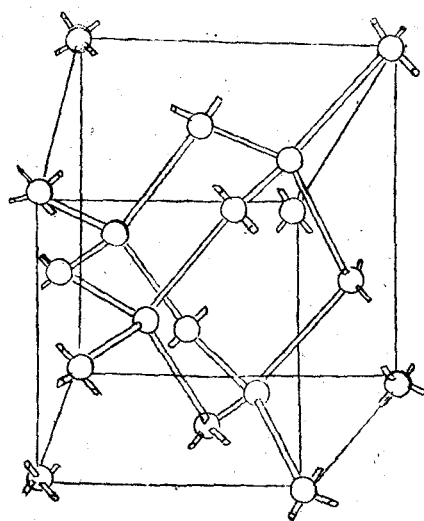


附图 1 1) 硅的晶体结构模型



2) 正四面体结构

硅晶体的这种原子排列，与金刚石的原子排列相同，常称金刚石结构。选取金刚石结构的一个立方体为最小单元，其原子排列如图2所示。



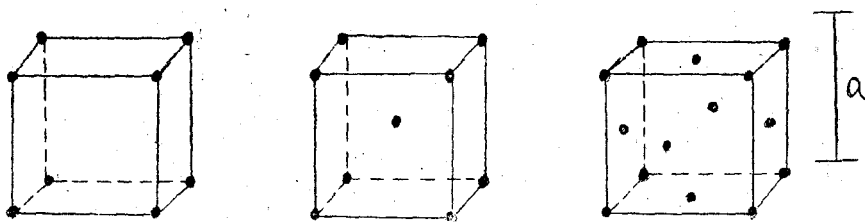
附图 2

金剛石結構

“馬克思主义者认为，只有人們的社会实践，才是人們对于外界認識的真理性的标准。”对于硅的晶体结构的认识，绝不是凭空想像出来的，而是用X射线这种工具逐步研究而认识的。把这种认识应用到实践过程中，这种认识又被证实了。所以我们便认为对硅的晶体结构的认识是科学的，是符合实际的。

我们认为认识发展过程是“基于实践的由浅入深的辯証唯物論”。为了对金剛石晶体结构作进一步的了解，需要先介绍一下晶体结构的有关知识。

金剛石结构属于立方晶系。对于立方晶系说来基本原胞有三种：简单立方，体心立方和面心立方。如图 3 所示。



附图 3 (1)简单立方

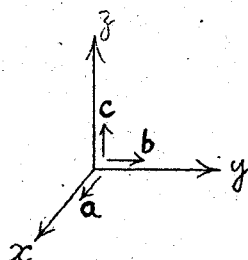
(2)体心立方

(3)面心立方

它们都是立方晶系的最小重复单元，称为晶胞。

通常我们在一个平面内绘图，有横坐标和纵坐标两个坐标轴，用这两个坐标便能表示平

面内任一点位置。晶体中的原子是在空间排列的，要表示任一原子的位置，必须用空间坐标来表示。空间三个互相垂直的坐标所取的单位便是立方晶系的三个基本矢量。立方晶系的三个基本矢量的长度相等，并且互相垂直。即 $a=b=c$ ； $a \perp b$ ， $b \perp c$ ， $c \perp a$ 。如图 4 所示。



我们有了这三个基本矢量，便能表示空间任一原子所占据的位置了。

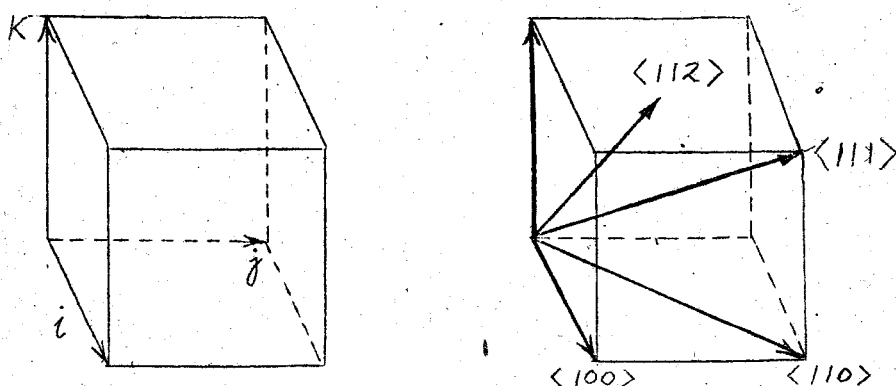
附图 4

空间三个基本矢量

晶体取向 我们通常讲的晶体取向（简称晶向）。就是指晶体中原子排列的方向。在结晶学中用晶向的指数来表示。在晶体中连接两原子所表示的方向，总是可以用原胞的三个基本矢量 a, b, c 来表示。晶体中任一方向（矢量） R 可以表示为

$$R = ma + nb + pc$$

式中的 m, n, p 必须用互质的整数来表示。这三个数称为晶向 R 的指数。我们把三个指数 m, n, p 用尖括号括起来， $\langle m n p \rangle$ ，表示晶向 R 的方向，就是晶体的取向。 m, n, p 若是分数或不互为质数，就要乘以公倍数或用公约数除之，使之成为互质数。这样处理只改变 R 的大小，不会改变 R 的方向。图 5 中标出了几种主要的晶体取向。有时我们常常用 ijk 来代替 abc 三个基本矢量。



附图 5

立方晶系中几个主要晶向的标示

下面列出几种主要晶向的矢量的表示式：

$$\langle 100 \rangle: \quad 1 \cdot i + 0 \cdot j + 0 \cdot k$$

$$\langle 001 \rangle: \quad 0 \cdot i + 0 \cdot j + 1 \cdot k$$

$$\langle 110 \rangle: \quad 1 \cdot i + 1 \cdot j + 0 \cdot k$$

$$\langle 111 \rangle: \quad 1 \cdot i + 1 \cdot j + 1 \cdot k$$

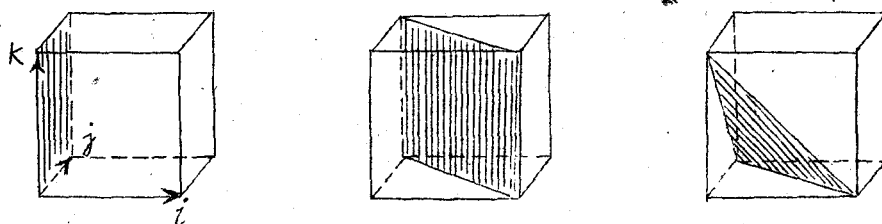
$$\langle 112 \rangle: \quad \frac{1}{2} \cdot i + \frac{1}{2} \cdot j + 1 \cdot k$$

$$(\text{用 2 乘之}) \quad 1 \cdot i + 1 \cdot j + 2 \cdot k$$

晶体取向除用尖括号 $\langle mnp \rangle$ 表示外，有的还用方括号 $[mnp]$ 来表示。

晶面指数 晶体中的原子是按规律排列的。在一个平面上的原子便组成一个晶面。因为晶体中的原子是按次序重复排列的，所以彼此平行的晶面上的原子排列是完全一样的。为大家取得晶体结构方面的共同语言，使用晶面指数来表示晶面的方位。

关于晶面指数的规定法则，在一般的情况下比较复杂。对于我们所讨论的立方晶系说来，晶面的指数与这个晶面的垂直线的方向（晶向）的指数完全相同。例如某晶面的垂直线的方向矢量为 $R = mI + nJ + pK$ ，那么这个晶面的指数表示为 (mnp) 。圆括号表示晶面，以便与晶向区分开。



附图6 (100)面 (110)面 (111)面

图6中表示 (100) 、 (110) 和 (111) 三个晶面。 (100) 面、 (110) 面和 (111) 面的垂直线的方向，是同 $\langle 100 \rangle$ 、 $\langle 110 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ 晶向完全一致的。

晶面的指数通常是用圆括号来表示的，有时也用花括号表示，如 $\{mnp\}$ ，两者都是用来表示晶面的。

金刚石结构 金刚石结构比前面介绍的三种结构较为复杂一些，在一个面心立方体内还有四个原子，这四个原子分别位于四条空间对角线的四分之一处。如图2所示。

“对于物质的每一种运动形式，必须注意它和其他各种运动形式的共同点。但是，尤其重要的，成为我们认识事物的基础的东西，则是必须注意它的特殊点，就是说，注意它和其他运动形式的质的区别。”我们要注意到金刚石结构是一种面心立方的原子排列，但是，它又比面心立方结构更复杂一些。每一个硅原子和周围的四个硅原子形成四个共价键，这四个

晶面	原子排列	面密度	面间距
(100)		$2/a^2$	$a/4$
(110)		$2\sqrt{2}/a^2$	$\sqrt{2}a/4$
(111)		(单层) $2.31/a^2$ (双层) $4.62/a^2$	$a/\sqrt{3}$