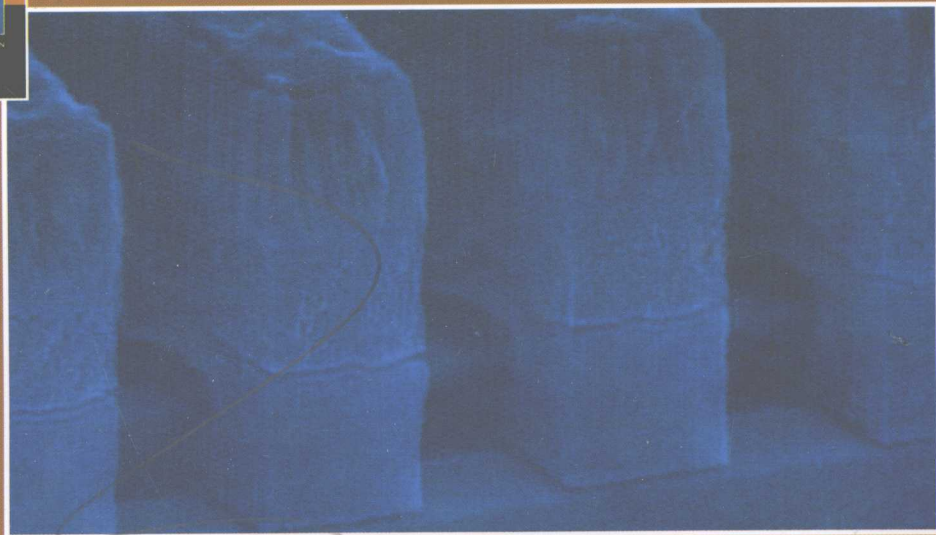
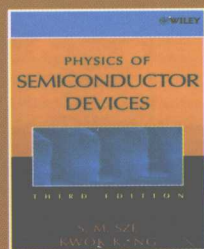
 国外名校最新教材精选

半导体器件物理

Physics of Semiconductor Devices

(第3版)
Third Edition

[美] 施敏 (S. M. SZE) 著
伍国珏 (KWOK K. NG) 译
耿莉 张瑞智 译



西安交通大学出版社
XI'AN JIAOTONG UNIVERSITY PRESS

国外名校最新教材精选

Physics of Semiconductor Devices
(Third Edition)

半导体器件物理

(第3版)

[美] 施敏 (S. M. Sze) 著
伍国珏 (Kwok K. Ng)

耿莉 张瑞智 译

西安交通大学出版社

Xi'an Jiaotong University Press

封面照片说明:

封面所示照片是一张浮栅非挥发存储器(NVSM)阵列的放大100000倍的扫描电子显微照片。NVSM是D. Kahng和施敏1969年在贝尔实验室发明的。世界上每年所生产的NVSM单元(数)比任何其它半导体器件都多,也比其它任何人造元件都多。该器件的讨论,见第6章。——照片承蒙台湾新竹旺宏电子股份有限公司(Macronix International Company)提供。

本书中文简体字翻译版由本书著作权人施敏先生和伍国珏先生授权西安交通大学出版社独家出版发行。未经出版者预先书面许可,不得以任何方式复制或发行本书的任何部分。

本书封面设计参考自该书英文版(Wiley公司2006年出版)。

图书在版编目(CIP)数据

半导体器件物理(第3版)/(美)施敏,(美)伍国珏著;耿莉,张瑞智译。—西安:西安交通大学出版社,2008.6

(国外名校最新教材精选)

书名原文:Physics of Semiconductor Devices / Third Edition

ISBN 978-7-5605-2596-9

I. 半… II. ①施… ②伍… ③耿… ④张… III. 半导体器件-高等学校-教材 IV. TN303

中国版本图书馆CIP数据核字(2008)第063260号

书 名 半导体器件物理(第3版)
著 者 [美]施敏(S. M. Sze) 伍国珏(Kwok K. Ng)
译 者 耿莉 张瑞智
策划编辑 赵丽平
责任编辑 贺峰涛
文字编辑 邹林

出版发行 西安交通大学出版社
(西安市兴庆南路10号 邮政编码710049)
网 址 <http://www.xjtupress.com>
电 话 (029)82668357 82667874(发行中心)
(029)82668315 82669096(总编办)
传 真 (029)82668280
印 刷 西安交通大学印刷厂

开 本 787mm×1092mm 1/16 印张 38 字数 933千字
印 数 0001~4000
版次印次 2008年6月第1版 2008年6月第1次印刷
书 号 ISBN 978-7-5605-2596-9/TN·109
定 价 76.00元

读者购书、书店添货如发现印装质量问题,请与本社发行中心联系、调换。

订购热线:(029)82665248 (029)82665249

投稿热线:(029)82665380

读者信箱:banquan1809@126.com

版权所有 侵权必究

译者序

施敏教授的《半导体器件物理》自出版(1969年第1版,1981年第2版)以来,一直是该领域的经典著作,始终被国内外大学作为教科书或教学参考书,也是从事半导体器件研究和开发的工程师及科学工作者的重要参考书。更新后的第3版,50%以上的内容被修订、更新和重新组织,既有经典半导体物理基础知识及各类传统半导体器件的论述,又涵盖了包括量子器件在内的许多新型半导体器件,内容更加丰富,更具时代气息。各章末还附有习题,可以作为微电子学、电子科学与技术、应用物理专业本科生和研究生相应课程的教科书和参考书,也可供相关领域的科学家与工程师参考。

全书共分为14章,耿莉翻译了第1章~第4章、第12章、第13章、导言和附录,张瑞智翻译了第5章~第11章和第14章,并对全部译稿进行了初审和统稿。感谢施敏教授的信任,将这本书的翻译交给了译者,在翻译过程中也得到了他无微不至的关心和帮助,责任编辑贺峰涛和赵丽萍两位老师为本书的出版付出了辛勤的劳动,翻译中还得到了陈贵灿教授、李昕和贺永宁老师的帮助,在此表示衷心的感谢。由于译者水平及经验所限,译本中的不妥和疏漏之处在所难免,恳请广大读者批评指出。

译者

2008年元月

前 言

自 20 世纪中期开始,电子工业取得了长足的进步,目前已成为世界上最大的产业,而其基础为半导体器件。为了适应电子工业的巨大需求,半导体器件领域取得了突飞猛进的发展,与之相应的是,半导体器件文献也大量涌现并种类繁多。为了便于获取这方面众多的知识和信息,需要一本全面介绍有关器件物理及器件工作原理的书籍。

为适应这种需求,《半导体器件物理》第 1 版和第 2 版分别于 1969 年和 1981 年出版。多少有点令人吃惊的是,此书长期以来一直作为应用物理、电机工程、电子工程和材料科学等专业的研究生和本科生的主要教材。此外,因为本书还包含了诸如材料参数和器件物理等方面有用的资料,也是从事半导体器件研究和开发的工程师及科技工作者的重要参考书。数据表明 (ISI Thomson Scientific),这本书在工程和应用科学领域的引用量已超过 15 000 次,或许不是被引用最多的书籍,但会是同时代被引用最多的文献之一。

自 1981 年以来,已有超过 250 000 篇关于半导体器件方面的论文发表,在器件概念和性能等方面取得了许许多多的新突破。显然,要使本书更好地继续服务于大众,需要对它再进行一次大的修订。在这本第 3 版的《半导体器件物理》中,50% 以上的内容被修订和更新,并且对资料也进行了重新组织。我们保留了经典器件的基本物理内容,增加了一些反映当代研究兴趣的内容,如三维 MOSFET 器件、非挥发存储器、中等掺杂场效应晶体管、单电子晶体管、共振隧穿二极管、绝缘栅双极晶体管、量子级联激光器以及半导体传感器等。另一方面,我们略去或减少了一些不太重要的部分,以维持全书原有的篇幅。

在每一章的最后我们增加了练习题,这些习题配合各章主题的发展,成为本书完整的组成部分,一些习题可以在课堂上作为例题。我们已经准备好各章习题的详细解答,对所有采用本书作为教材的教师免费提供题解,Wiley 出版公司还为教师提供书中用到的图和表格的电子文档,教师可以在该出版公司的网站 <http://www.wiley.com/interscience/sze> 上获得更为详细的信息。

在本书的撰写过程中,我们有幸得到了很多人的帮助和支持。首先我们对台湾新竹交通大学、台湾纳米器件实验室、杰尔系统(Agere Systems)和 MVC 等学术和工业机构表示感谢,没有他们的帮助,这本书不会完成。我们非常感谢台湾新竹交通大学的春天基金对本书在资金上的大力支持,作者之一(K. Ng)还要感谢 J. Hwang 和 B. Leung 的不断鼓励和帮助。

我们还从那些从他们繁忙的工作计划中挤出时间阅读此书的人那里获得了很多的有益建议,他们是以下学者:A. Alam, W. Anderson, S. Banerjee, J. Brews, H. C. Casey, Jr. P. Chow, N. de Rooij, H. Eisele, E. Kasper, S. Luryi, D. Monroe, P. Panayotatos, S. Pearton, E. F. Schubert, A. Seabaugh, M. Shur, Y. Taur, M. Teich, Y. Tsvividis, R. Tung, E. Yang 和 A. Zaslavsky,我们还要感谢同意我们重新制作原始图表以便本书引用的期刊和原文作者。

感谢我们的家人在准备书稿的电子版上的帮助,Kyle Eng 和 Valerie Eng 扫描和输入了第 2 版的内容,Vivian Eng 编辑了公式,Jennifer Tao 准备了插图,这些插图被全部重新画过了。我们更要感谢 Norman Erdos 对于整个书稿在技术上的编辑,Iris Lin 和 Nai-Hua Chang 准备了习题及习题解答。感谢 John Wiley & Sons 出版公司的 George Telecki,是他鼓励我们承担了此项工作。最后我们还要感谢我们的妻子 Therese Sze 和 Linda Ng,感谢她们在整个成书过程中的支持和帮助。

施 敏 台湾新竹

伍国珏 圣何塞,加利福尼亚

2006 年 7 月

目 录

译者序

前言

导言..... (1)

第 1 部分 半导体物理

第 1 章 半导体物理学和半导体性质概要

- 1.1 引言..... (4)
- 1.2 晶体结构..... (5)
- 1.3 能带和能隙..... (8)
- 1.4 热平衡时的载流子浓度..... (11)
- 1.5 载流子输运现象..... (21)
- 1.6 声子、光学和热特性..... (38)
- 1.7 异质结和纳米结构..... (42)
- 1.8 基本方程和实例..... (47)

第 2 部分 器件的基本构件

第 2 章 p-n 结二极管

- 2.1 引言..... (60)
- 2.2 耗尽区..... (61)
- 2.3 电流-电压特性..... (69)
- 2.4 结击穿..... (78)
- 2.5 瞬变特性与噪声..... (87)
- 2.6 端功能..... (91)
- 2.7 异质结..... (95)

第 3 章 金属-半导体接触

- 3.1 引言..... (102)
- 3.2 势垒的形成..... (103)
- 3.3 电流输运过程..... (117)
- 3.4 势垒高度的测量..... (130)

3.5 器件结构	(138)
3.6 欧姆接触	(142)

第4章 金属-绝缘体-半导体电容

4.1 引言	(151)
4.2 理想 MIS 电容	(151)
4.3 硅 MOS 电容	(163)

第3部分 晶体管

第5章 双极晶体管

5.1 引言	(186)
5.2 静态特性	(187)
5.3 微波特性	(201)
5.4 相关器件结构	(211)
5.5 异质结双极晶体管	(215)

第6章 MOS 场效应晶体管

6.1 引言	(224)
6.2 器件的基本特性	(227)
6.3 非均匀掺杂和埋沟器件	(244)
6.4 器件按比例缩小和短沟道效应	(250)
6.5 MOSFET 的结构	(258)
6.6 电路应用	(264)
6.7 非挥发存储器	(266)
6.8 单电子晶体管	(274)

第7章 JFET, MESFET 和 MODFET 器件

7.1 引言	(285)
7.2 JFET 和 MESFET	(286)
7.3 MODFET	(304)

第4部分 负阻器件和功率器件

第8章 隧道器件

8.1 引言	(316)
8.2 隧道二极管	(317)
8.3 相关的隧道器件	(329)
8.4 共振隧穿二极管	(343)

第9章 碰撞电离雪崩渡越时间二极管

9.1 引言	(353)
9.2 静态特性	(354)
9.3 动态特性	(359)
9.4 功率和效率	(365)
9.5 噪声特性	(371)
9.6 器件设计和性能	(374)
9.7 BARITT 二极管	(376)
9.8 TUNNETT 二极管	(382)

第10章 转移电子器件和实空间转移器件

10.1 引言	(387)
10.2 转移电子器件	(387)
10.3 实空间转移器件	(406)

第11章 晶闸管和功率器件

11.1 引言	(415)
11.2 晶闸管的特性	(416)
11.3 晶闸管的变种	(435)
11.3 其它功率器件	(440)

第5部分 光学器件和传感器

第12章 发光二极管和半导体激光器

12.1 引言	(454)
12.2 辐射跃迁	(455)
12.3 发光二极管	(459)
12.4 激光器物理	(468)
12.5 激光器工作特性	(476)
12.6 特种激光器	(491)

第13章 光电探测器和太阳电池

13.1 引言	(500)
13.2 光电导	(503)
13.3 光电二极管	(506)
13.4 雪崩光电二极管	(514)
13.5 光电晶体管	(523)
13.6 电荷耦合器件(CCD)	(525)

13.7	金属-半导体-金属光电探测器	(537)
13.8	量子阱红外光电探测器	(539)
13.9	太阳电池	(541)

第 14 章 传感器

14.1	引言	(560)
14.2	温度传感器	(561)
14.3	机械传感器	(565)
14.4	磁敏传感器	(571)
14.5	化学传感器	(576)

附录

A.	符号表	(583)
B.	国际单位制	(592)
C.	单位词头	(593)
D.	希腊字母表	(594)
E.	物理常数	(595)
F.	重要半导体的特性	(596)
G.	Si 和 GaAs 的特性	(597)
H.	SiO ₂ 和 Si ₃ N ₄ 的特性	(598)

导 言

本书分为 5 个部分：

第 1 部分：半导体物理

第 2 部分：器件的基本构件

第 3 部分：晶体管

第 4 部分：负阻和功率器件

第 5 部分：光电器件和传感器

第 1 部分，即第 1 章，为半导体性质的总体概述，作为理解和计算半导体器件特性的基础，在整个书中都会用到。本章简要介绍了半导体能带、载流子浓度及输运特性，主要关注两种最重要的半导体材料：硅(Si)和砷化镓(GaAs)，这些半导体的常用或最为精确的参数值在第 1 章的图表中给出，为方便参考列在了附录中。

第 2 部分包括第 2 章到第 4 章的内容，介绍了所有半导体器件的基本构件。第 2 章讨论了 p-n 结的特性。因为 p-n 结是大多数半导体器件的基本构件，p-n 结理论成为整个半导体物理的基础。除此之外，第 2 章还考察了由两种不同的半导体材料构成的异质结，例如可以用砷化镓(GaAs)和砷化铝(AlAs)形成异质结，异质结是高速及光子器件的关键组成。第 3 章讨论了金属-半导体接触，它是金属和半导体的一种紧密接触。当半导体为中等掺杂时，这种接触有类似于 p-n 结的整流特性；如果半导体有非常重的掺杂，这种接触变为欧姆接触，电流从两个方向流过欧姆接触时均不产生额外的电压降，为器件和外部电路提供了必要的连接手段。第 4 章介绍了金属-绝缘体-半导体(MIS)电容，其中以基于硅的金属-氧化物-半导体结构为主要内容。与 MOS 电容相关的表面物理知识是非常重要的，它不仅对与 MOS 相关的器件如 MOSFET 和浮栅非挥发存储器非常重要，还在与所有半导体器件的表面和隔离区的稳定性和可靠性密切相关。

第 3 部分包括第 5 章到第 7 章的内容，讨论了晶体管类家族。第 5 章为双极晶体管，即两个紧密耦合的 p-n 结间的相互作用。双极晶体管是最重要的传统半导体器件之一，1947 年发明的双极晶体管引导了当今的电子时代。第 6 章考察了 MOSFET(MOS 场效应晶体管)，场效应晶体管和势效应晶体管(如双极晶体管)的差别在于：前者沟道是由栅通过电容调制的，而后的沟道是由在沟道区的直接接触所控制的^[1]。MOSFET 是现代集成电路中最重要的器件，广泛应用于微处理器和动态随机存储器(DRAM)中。第 6 章还讨论了非挥发半导体存储器，它是便携式电子系统，如手机、笔记本电脑、数码相机、音频和视频播放器和全球定位系统(GPS)的主要存储单元。第 7 章介绍了三种其它类型的场效应晶体管，它们是结场效应晶体管(JFET)、金属-半导体场效应晶体管(MESFET)和调制掺杂场效应晶体管(MODFET)。JFET 是半导体器件家族中的一个古老的成员，现在主要应用在功率器件上，而 MESFET 和 MODFET 应用于高速、高输入阻抗放大器和单片微波集成电路中。

第 4 部分，即第 8 章到第 11 章，介绍了负阻和功率器件。在第 8 章中，我们讨论了隧道二极管(重掺杂 p-n 结)和共振隧穿二极管(由多异质结构成的双势垒结构)。由于量子力学隧

穿,这些器件显示出了负的微分电阻,可以产生微波或作为特定的功能器件,即它们自身可以完成一种给定的电路功能,从而大大减小了电路中元器件的数量。第9章讨论了渡越时间器件。当p-n结或金属-半导体结在雪崩击穿状态下工作时,在适当的条件下可以得到IMPATT二极管,在所有固态器件中,只有它可以产生最大的毫米波频率范围内连续波(CW)功率输出(大约30GHz)。在本章还介绍了与它相关的BARITT和TUNNETT二极管的工作特性。转移电子器件(TED)在第10章进行了讨论。电子从具有高迁移率、低能量的导带能谷中转移到低迁移率、高能量的能谷中(在动量空间)可以产生微波振荡,即转移电子效应。另外,还讨论了实空间转移器件,它与TED相似,但是电子的转移发生在窄带隙材料和邻近的宽带隙材料之间,其电子转移发生在真实空间内而不是动量空间。晶闸管是由三个紧密耦合的p-n结以p-n-p-n的形式构成的,在第11章中给予了讨论。此外,还介绍了MOS控制晶闸管(由MOSFET和一个传统的晶闸管组合而成)和绝缘栅双极晶体管(IGBT,MOSFET和传统的双极晶体管的组合)。这些器件有很宽的功率处理范围和很强的开关转换能力,它们可以荷载从几个毫安到几千安的电流,耐压可以超过5000V。

第5部分为第12章到第14章的内容,涉及光子器件和传感器。光子器件可以探测、产生和将光能转换为电能或将电能转换为光能。第12章讨论了半导体光源—发光二极管(LED)和激光器。LED在电子设备和交通灯等显示器件、在闪光灯和自动头顶灯等发光器件方面有着众多的应用。半导体激光器可以用于光纤通信、视频播放和高速激光打印等。第13章中讨论了具有高量子效率和高响应速度的各种光电探测器,这一章还介绍了与光电探测器相似的、能够将光能转化为电能的太阳电池,但是它们有不同的研究重点和器件结构。目前,世界范围内能源需求快速增长,固体燃料即将消耗殆尽,这些都对开发替代能源提出了紧迫要求。太阳电池是主要的候选者,因为它可以以高的转换效率将太阳光直接转换为电能,而且能够以较小的运行成本提供无污染的、实用的永久性能源。第14章讨论了重要的半导体传感器。传感器可定义为能够探测或测量外部信号的器件,信号主要包含如下6种:电、光、热、机械、磁及化学信号。传感器可以为人们提供人类自身感官无法直接感知的上述信号的信息,在这样一种传感器的定义下,所有的传统半导体器件都可以认为是传感器,因为它们有输入和输出,并且二者均为电的形式,因此可以这样认为,第2章到第11章所讨论的器件为电信号传感器,第12章和13章为光信号传感器,第14章为剩下的其它4种信号的传感器,即热、机械、磁和化学信号。

我们推荐读者首先学习半导体物理(第1部分)和器件基本构件(第2部分),然后再学习本书的其它部分。第3部分到第5部分的每一章里会介绍一种主要器件或一个相关的器件家族,各章或多或少地与其它章节相互独立,所以读者可以将本书作为一个参考或指导书,按照自己喜好的顺序选择章节学习,以适应自己的课程。人们已经拥有了大量半导体器件文献。到目前为止,在该领域已发表了30多万篇论文,在下一个10年内预计论文总数会达到100万篇。本书以一种清晰、连贯的模式引出各个章节,不特别依赖原始文献。在每一章的后面还给出了关键文献目录,以便读者参考和进一步的阅读。

第 1 部分

半导体物理

第 1 章	1.1
第 2 章	2.1
第 3 章	3.1
第 4 章	4.1
第 5 章	5.1
第 6 章	6.1
第 7 章	7.1
第 8 章	8.1
第 9 章	9.1
第 10 章	10.1

第 1 章 半导体物理学和半导体性质概要

半导体物理学是研究半导体的物理性质及其在电子器件中的应用的一门学科。本章主要介绍半导体的基本概念、晶体结构、能带理论、载流子浓度、霍尔效应、光电效应、PN 结、太阳能电池、发光二极管、半导体激光器、微波器件、半导体存储器、半导体传感器、半导体集成电路、半导体封装、半导体测试、半导体可靠性、半导体材料、半导体器件、半导体工艺、半导体器件设计、半导体器件制造、半导体器件应用、半导体器件市场、半导体器件未来发展趋势。

第 1 章

半导体物理学和半导体性质概要

- 1.1 引言
- 1.2 晶体结构
- 1.3 能带和能隙
- 1.4 热平衡时的载流子浓度
- 1.5 载流子输运现象
- 1.6 声子、光学和热特性
- 1.7 异质结和纳米结构
- 1.8 基本方程和实例

1.1 引言

半导体器件物理学与半导体材料自身的物理特性有着天然的依赖关系。本章总结和回顾了半导体的基础物理和性质。它仅代表众多半导体文献的很小一部分,只有那些与器件工作相关的论题收入在这里。如果读者想对半导体物理学有更为详细的研究,可查阅 Dunlap^[1]、Madelung^[2]、Moll^[3]、Moss^[4]、Smith^[5]、Boer^[6]、Seeger^[7]及 Wang^[8]等人编著的标准教科书或参考书,这里也仅列出了少数几本。

为了把大量资料浓缩在一章内,本章汇集了来源于实验数据的四个表格(一些在附录中)和三十余幅图片,重点讲述两种最重要的半导体材料:硅(Si)和砷化镓(GaAs)。硅材料已得到了广泛的研究并应用于各类商用电子产品中。近些年,人们对砷化镓进行了深入的研究,已研究清楚砷化镓的特殊性质是其可供光电应用的直接带隙能带结构,以及可产生微波的谷间

载流子运输和高迁移率特性。

1.2 晶体结构

1.2.1 原胞和晶面

晶体是具有周期性重复排列的原子的集合,将可以被重复并形成整块晶体的最小原子排列称为原胞,其尺度由晶格常数 a 表示,图 1.1 给出了一些重要原胞结构。

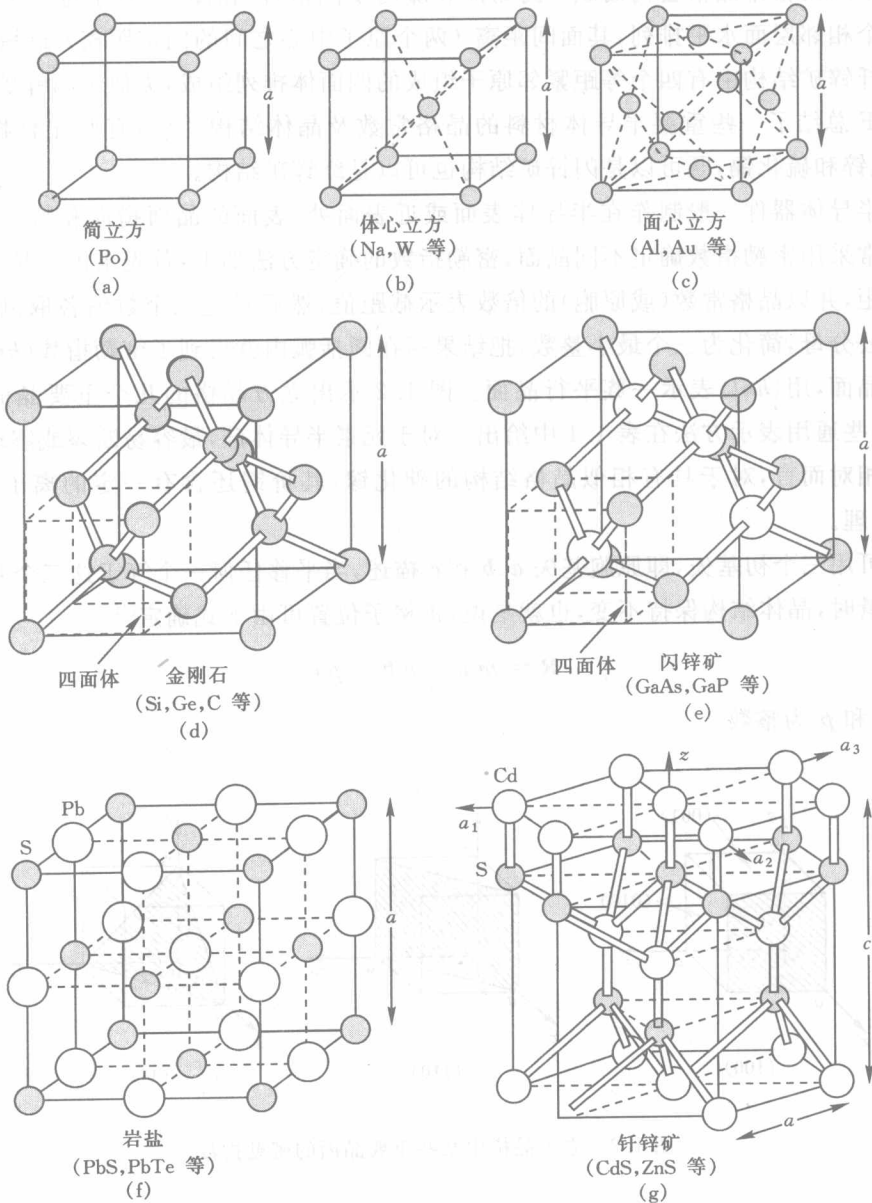


图 1.1 一些重要原胞(正格子)及其代表元素, a 为晶格常数

许多重要的半导体具有属于四面体的金刚石或闪锌矿晶格结构,即每个原子被位于正四面体顶角的四个等距紧邻原子包围,两个紧邻原子之间的键由自旋相反的两个电子形成。金刚石和闪锌矿晶格可认为是两个面心立方晶格(fcc)的套构,对于金刚石晶格,例如硅(图 1.1(d)),所有原子是相同的硅原子;而对于闪锌矿晶格,如砷化镓(图 1.1(e)),一个格点上为镓原子,另一为砷原子,砷化镓是 III-V 族化合物,它由周期表的 III 族元素和 V 族元素构成。

多数 III-V 族化合物是闪锌矿结构^[2,9],但是,其它很多半导体材料(包括部分 III-V 族化合物)为岩盐或纤锌矿结构。图 1.1(f)示出了岩盐晶格结构,也可以被认为是两个面心立方晶格套构而成,在岩盐结构中,每个原子有六个紧邻原子。图 1.1(g)示出了纤锌矿晶格结构,可看作是两个六角密排晶格套构而成(例如镉和硫的子晶格)。在图中,对于每一个子晶格(镉或硫),两个相邻层面水平排列,其面间距离(两个原子中心之间的固定距离)最短,因此称为密排列。纤锌矿结构由有四个等距紧邻原子组成的四面体排列组成,类似于闪锌矿结构。

附录 F 总结了一些重要半导体材料的晶格常数及晶体结构^[10,11],有些化合物半导体材料,如硫化锌和硫化镉,既可以是闪锌矿结构也可以是纤锌矿结构。

由于半导体器件一般制作在半导体表面或近表面处,表面的晶面指向和特征非常重要。晶体中通常采用密勒指数确定不同晶面,密勒指数的确定方法如下:首先求出该晶面在三个主轴上的截距,并以晶格常数(或原胞)的倍数表示截距值,然后对这三个数值各取倒数,乘以它们的最小公分母,简化为三个最小整数,把结果括在圆括弧内就得到了密勒指数(hkl),用它来表示一个晶面,用{hkl}表示一族平行晶面。图 1.2 示出立方晶格的几个重要晶面的密勒指数,其它一些通用表示方法在表 1.1 中给出。对于元素半导体硅,最容易断裂或解理的晶面为{111}面,相对而言,对于具有相似晶格结构的砷化镓,其价键还含有一定的离子键成分,沿{110}面解理。

晶体可用三个初基矢,即原胞基矢 a 、 b 和 c 描述,当平移任何一个等于这三个基矢整数倍之和的矢量时,晶体结构保持不变,也就是说,正格子位置可由下式确定^[12]

$$R = ma + nb + pc \tag{1}$$

式中, m 、 n 和 p 为整数。

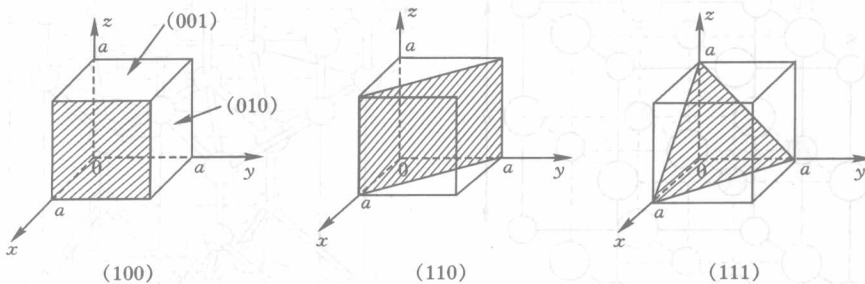


图 1.2 立方晶格中某些重要晶面的密勒指数

表 1.1 密勒指数和它所代表的晶体表面的晶面或方向

密勒指数	晶面或方向描述
(hkl)	在 x 、 y 及 z 轴的截距分别为 $1/h$ 、 $1/k$ 和 $1/l$ 的晶面
$(\bar{h}kl)$	截负 x 轴、 y 及 z 轴的晶面
$\{hkl\}$	对称面, 如 $\{100\}$ 代表立方对称的 (100) 、 (010) 、 (001) 、 $(\bar{1}00)$ 、 $(0\bar{1}0)$ 和 $(00\bar{1})$ 各面
$[hkl]$	晶向, 如 $[100]$ 表示 x 轴
$\langle hkl \rangle$	一族等效晶向
$[hklm]$	(如纤锌矿结构) 的晶面, 在 a_1 、 a_2 、 a_3 和 z 轴上的截距分别为 $1/h$ 、 $1/k$ 、 $1/l$ 和 $1/m$ (图 1.1(g))

1.2.2 倒格子

对于一组给定的正基矢, 一组倒格基矢 a^* 、 b^* 、 c^* 可定义为

$$a^* \equiv 2\pi \frac{b \times c}{a \cdot b \times c} \quad (2a)$$

$$b^* \equiv 2\pi \frac{c \times a}{a \cdot b \times c} \quad (2b)$$

$$c^* \equiv 2\pi \frac{a \times b}{a \cdot b \times c} \quad (2c)$$

因此 $a \cdot a^* = 2\pi$ 、 $a \cdot b^* = 0$ 等等, 由于 $a \cdot b \times c = b \cdot c \times a = c \cdot a \times b$, 上述各式的分母相同, 为三个矢量组成的立方体的体积, 总的倒格矢为

$$G = ha^* + kb^* + lc^* \quad (3)$$

式中, h 、 k 和 l 为整数, 由此得出正格子和倒格子的一个重要的关系式:

$$G \cdot R = 2\pi \times \text{整数} \quad (4)$$

因而每个倒格矢垂直于正格子的一组晶面, 并且倒格子原胞的体积 V_c^* 与正格子原胞的体积 (V_c) 成反比, 即 $V_c^* = (2\pi)^3 / V_c$, 其中 $V_c \equiv a \cdot b \times c$ 。

倒格子的原胞可用维格纳-赛茨原胞表示。连接倒格子中选定的中心点与紧邻的等效倒格点, 作该直线的垂直平分面, 如此得到的一组平面即可围成一个维格纳-赛茨原胞, 这种方法也可用于正格子。倒格子的维格纳-赛茨原胞称为第一布里渊区。图 1.3(a) 给出了体心立方 (bcc) 倒格子的典型例子^[13], 首先从中心点 (Γ) 到立方体的八个顶点画直线, 然后作垂直平分面, 其结果就是立方体内的截角八面体, 即维格纳-赛茨原胞。可以看出^[14], 晶格常数为 a 的面心立方 (fcc) 正格子有间距为 $4\pi/a$ 的体心立方倒格子, 因此, 图 1.3(a) 所示的维格纳-赛茨原胞是 fcc 正格子的倒格子 (bcc) 原胞。同理, 可以作出 bcc 和六角结构正格子的维格纳-赛茨原胞, 如图 1.3(b) 和 1.3(c) 所示^[15]。后面会看到, 当波矢 k ($|k| = k = 2\pi/\lambda$) 的坐标在倒格子坐标系中表示时, 倒格子对于显示 $E-k$ 关系非常重要, 特别是对于 fcc 晶格, 布里渊区非常重要, 因为它与最感关心的半导体材料有关。图 1.3(a) 所用符号在后面将会详细讨论。