

高等学校微电子类
“十三五”规划教材

微电子 物理基础

刘文楷 张 静 王文武 编著



西安电子科技大学出版社
<http://www.xduph.com>

高等学校微电子类“十三五”规划教材

微电子物理基础

刘文楷 张 静 王文武 编著



西安电子科技大学出版社

内 容 简 介

本书是微电子专业课程“半导体物理学”和“电子器件”的先导课程教材，主要内容融汇了“量子力学”和“固体物理”的相关知识，将两者有机地结合起来，并增加了“半导体物理学”的初步知识。

书中涵盖了“量子力学”的基本知识点和“固体物理”中的晶体结构及能带理论，重点讲解了量子理论的内涵和量子力学方程的应用。对“半导体物理学”中所要求掌握的理论物理知识进行了全覆盖。将量子力学理论与固体物理理论结合起来是本书的一大特点。

本书可作为高等院校微电子、电子、通信、自动化等相关专业的教材。

图书在版编目(CIP)数据

微电子物理基础/刘文楷, 张静, 王文武编著. —西安: 西安电子科技大学出版社, 2018.10

ISBN 978-7-5606-5001-2

I. ①微… II. ①刘… ②张… ③王… III. ①微电子学 IV. ①TN4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 170734 号

策划编辑 刘小莉

责任编辑 王 静

出版发行 西安电子科技大学出版社(西安市太白南路2号)

电 话 (029)88242885 88201467 邮 编 710071

网 址 www.xduph.com 电子邮箱 xdupfxb001@163.com

经 销 新华书店

印刷单位 陕西天意印务有限责任公司

版 次 2018年10月第1版 2018年10月第1次印刷

开 本 787毫米×1092毫米 1/16 印张 12.5

字 数 292千字

印 数 1~2000册

定 价 29.00元

ISBN 978-7-5606-5001-2 / TN

XDUP 5303001-1

*** 如有印装问题可调换 ***

前 言

本书是微电子学专业基础类教材，主要集中了“量子力学”和“固体物理”两大基础课程的内容，整个内容架构是为满足半导体材料物理特性的学习需求而设计的。

本书是在教学改革的基础上，根据高等学校微电子等专业学生的培养目标编写而成的，可作为微电子专业的课程教材，也可作为电气、电子、通信、材料、机械等专业的教材，还可作为电子技术工程人员的参考书。

对于微电子专业的学生来说，学习物理类专业基础课有一定难度。目前通用的量子力学和固体物理教材的难度较大，理论性强，并不适合工程类学生使用。编者在多年的教学中发现，学生学习“半导体物理”类基础学科存在一定的困难，对理论理解不够透彻。如果单独去学习量子力学和固体物理，难度又偏大。本书就是针对这一现状编写的，编写思路重点向工程应用方向倾斜。

本书共6章，分为三大部分：第一部分(第1章)为固体物理部分，着重介绍晶体结构、结合性质；第二部分(第2、3章)重点讲授量子力学中的量子理论基础，并将晶体结构和能带理论结合起来进行论述；第三部分(第4、5、6章)主要是半导体物理内容，包括杂质半导体性质、平衡半导体和载流子的漂移扩散运动等知识。

本书主要有以下几个特色：

- (1) 围绕半导体材料的物理特性，理清其物理理论来源。
- (2) 理论部分简单明了。
- (3) 有相应的配套习题，学生可进行练习。

由于水平有限，书中不妥之处在所难免，恳请读者批评、指正。

编 者

2018年6月

目 录

第 1 章 晶体结构	1
1.1 半导体材料的特性	1
1.2 晶体结构	1
1.2.1 晶体的共性	2
1.2.2 晶体的周期性	4
1.3 晶列、晶面、倒格子	9
1.3.1 基矢、晶胞	9
1.3.2 Miller 指数	9
1.3.3 倒格子	12
1.3.4 布里渊区	15
1.4 晶体的对称性	18
1.4.1 晶体的对称操作	19
1.4.2 晶格结构的分类	22
1.5 晶体的结合	23
1.5.1 晶体的结合力	24
1.5.2 金刚石结构和共价结合	29
1.5.3 闪锌矿结构和结合性质	30
1.5.4 纤锌矿结构和结合性质	30
习题	31
第 2 章 量子理论基础	34
2.1 经典物理学的困难	34
2.1.1 黑体辐射	34
2.1.2 光电效应	35
2.1.3 原子结构的玻耳(Bohr)理论	36
2.2 波函数和薛定谔方程	37
2.2.1 薛定谔(Schrödinger)方程	37
2.2.2 波函数的性质	39
2.2.3 量子力学基本理论	44
2.2.4 定态薛定谔方程	50
2.3 定态薛定谔方程的应用	52
2.3.1 一维无限势阱模型	52
2.3.2 一维有限势阱模型	55
2.3.3 一维线性谐振子	57

2.3.4	势垒贯穿	60
2.4	中心力场问题的薛定谔方程的求解	64
2.4.1	动量算符、角动量算符	64
2.4.2	电子在库仑场中的运动	67
2.5	微扰理论	70
2.5.1	非简并微扰理论	70
2.5.2	简并定态微扰	74
	习题	78
第3章	能带理论基础	81
3.1	周期场中电子的波函数——布洛赫函数	81
3.1.1	一维布洛赫定理的证明	82
3.1.2	三维布洛赫定理的证明	84
3.1.3	简约布里渊区	85
3.2	一维分析近似	86
3.2.1	克龙尼克-潘纳(Kronig - Penny)模型	86
3.2.2	近自由电子模型	89
3.2.3	紧束缚近似	94
3.2.4	导体、半导体、绝缘体的能带论解释	97
3.3	半导体中电子的运动	102
3.3.1	半导体中的能带和布里渊区	102
3.3.2	电子在能带极值附近的近似 $E(k)$ - k 关系和有效质量	103
3.3.3	半导体中电子的平均速度、加速度	104
3.3.4	本征半导体的导电机构、空穴	105
3.4	三维扩展模型——硅、锗的能带结构	106
3.4.1	半导体能带极值附近的能带结构	106
3.4.2	半导体能带极值附近有效质量的确定、回旋共振	107
3.4.3	Si、Ge 的能带结构	107
3.5	Ⅲ-V 族化合物半导体的能带结构	109
3.5.1	GaAs 的能带结构	110
3.5.2	GaP 晶体的能带结构特点	110
3.5.3	GaAs _{1-x} P _x 的能带结构	110
	习题	111
第4章	半导体中的杂质和缺陷能级	113
4.1	半导体中的浅能级杂质	113
4.1.1	半导体中的两类杂质	113
4.1.2	Ge 和 Si 中的浅能级杂质	114
4.1.3	Ⅲ-V 族半导体(GaAs、GaP 等)中的浅能级杂质	116
4.1.4	Ⅱ-VI 族半导体(CdTe、ZnS 等)中的浅能级杂质	116
4.2	浅能级杂质电离能的简单计算	117
4.2.1	类氢模型	117

4.2.2	类氢模型的合理性	118
4.3	半导体中的杂质补偿效应	119
4.3.1	杂质的补偿作用	119
4.3.2	强补偿半导体的特殊性质	120
4.3.3	重掺杂效应	120
4.4	半导体中的深能级杂质	120
4.4.1	Ge 和 Si 中的深能级杂质	120
4.4.2	Ge 和 Si 中的 Au 能级	121
4.4.3	III-V 族半导体中的深能级杂质	122
4.4.4	等电子陷阱	123
4.5	缺陷、位错能级	124
4.5.1	半导体中的点缺陷能级	124
4.5.2	半导体中的位错	125
	习题	126
第 5 章	载流子的统计分布	128
5.1	电子的分布函数	128
5.1.1	F-D 分布函数	128
5.1.2	M-B 分布函数	130
5.2	半导体能带极值附近的能态密度	132
5.2.1	k 空间的状态密度	132
5.2.2	半导体导带底附近和价带顶附近的状态密度	135
5.2.3	热平衡载流子浓度(非简并半导体)	137
5.3	本征半导体中的载流子浓度	141
5.3.1	本征载流子浓度 n_i 和 p_i	141
5.3.2	本征载流子浓度随温度的变化曲线图	143
5.3.3	半导体器件的工作温度范围	143
5.4	非简并掺杂半导体中的杂质和电荷	144
5.4.1	半导体中杂质的电离情况(非简并情况)	144
5.4.2	n 型非简并半导体中的载流子浓度	145
5.4.3	补偿半导体	149
5.4.4	利用掺杂半导体的载流子浓度与温度的关系来确定器件工作温区	153
5.5	简并半导体	154
5.5.1	简并半导体中的载流子浓度	154
5.5.2	简并化条件	154
5.5.3	简并化效应	155
5.6	过剩载流子的注入与复合	155
5.6.1	非平衡载流子的产生	155
5.6.2	非平衡载流子的特性	156
5.6.3	非平衡载流子的寿命	157
5.6.4	准费米能级和非平衡载流子浓度	158

5.7 非平衡载流子的复合理论	159
5.7.1 非平衡载流子复合的机理	159
5.7.2 复合的分类	160
5.8 陷阱效应	161
习题	162
第 6 章 半导体的输运性质	164
6.1 载流子迁移率和半导体电导率	164
6.1.1 漂移电流和迁移率	164
6.1.2 半导体的电导率	166
6.2 半导体中载流子的散射	166
6.2.1 载流子散射的概念	166
6.2.2 半导体中载流子遭受散射的机构	167
6.2.3 晶格热振动的规律	168
6.3 电阻率与杂质浓度和温度的关系	170
6.3.1 电导率、迁移率与平均自由时间的关系	170
6.3.2 迁移率与杂质浓度、温度的关系	172
6.3.3 半导体电阻率及其与杂质浓度和温度的关系	173
6.3.4 四探针法测电阻率	173
6.4 半导体的 Boltzmann 输运方程	174
6.4.1 分析载流子输运的分布函数法	174
6.4.2 Boltzmann 方程	175
6.4.3 Boltzmann 输运方程的弛豫时间近似	176
6.4.4 半导体电导率的统计计算	176
6.4.5 球形等能面均匀半导体在弱电场和无温度梯度时的电导率	177
6.5 强电场效应	179
6.5.1 强电场/窄尺寸效应	179
6.5.2 多能谷散射	181
6.6 载流子的扩散运动	183
6.6.1 载流子的扩散运动	183
6.6.2 扩散电流	184
6.6.3 爱因斯坦关系式	184
6.7 半导体的磁阻效应	185
6.7.1 半导体的 Hall 效应	185
6.7.2 半导体的磁阻效应	187
6.7.3 半导体的热传导	187
6.7.4 半导体的热电效应	188
6.7.5 半导体的热磁效应	190
习题	191
参考文献	192

第1章 晶体结构

本章主要介绍半导体材料和半导体物理的基本性质。

1.1 半导体材料的特性

1947年晶体管被发明以后,半导体材料作为一个独立的材料领域得到了很大的发展,并成为电子工业和高新技术领域中不可缺少的材料。半导体材料是室温下导电性介于导电材料和绝缘材料之间的一类功能材料,室温时电阻率一般在 $10^{-3} \sim 10^9 \Omega \cdot \text{cm}$ 之间。

半导体具有的一些重要的特性:

(1) 电阻率与温度的关系密切,而且电阻率一般具有负温度系数。在室温条件下,温度每增加 80°C ,纯净半导体 Si 的电阻率就降低约一半;温度每增加 120°C ,纯净半导体 Ge 的电阻率就降低约一半。而金属的电阻率总是随着温度的上升而升高。

(2) 电阻率与掺杂(杂质种类和浓度)和缺陷有很大关系。例如,在 Si 中掺入百万分之一(浓度大约为 $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$) 的 As 杂质时,电阻率将降低 100 万倍。一般,在 Si 中掺入施主(P、As、Sb)或受主(B、Ga、In)杂质后,电阻率将大大降低;若掺入 Cu、Fe 等杂质后,对半导体电阻率的影响不大,但对半导体的其他性能影响却特别大。而且半导体掺杂后,在一定温度范围内可呈现出与金属类似的正的电阻温度系数。

(3) 存在两种(正、负电荷)载流子。金属中只有电子一种载流子,半导体中除了电子以外,还有一种带正电的载流子——空穴。电子导电为主的半导体称为 n 型半导体;空穴导电为主的半导体称为 p 型半导体。在 n 型半导体中,电子是多数载流子,空穴是少数载流子;在 p 型半导体中,空穴是多数载流子,而电子是少数载流子。

(4) 具有较高的光电导等光敏性。在适当波长的光照射下,半导体的电阻率会发生变化,出现光电导。半导体的导电能力还随电场、磁场等的改变而改变。

半导体材料的性质容易受到温度、掺杂、缺陷、光照以及电磁场等因素的影响,正是因为半导体材料具有这些独特的物理特性,所以获得了广泛的应用。通常的半导体材料都是单晶材料,为了更好地研究和利用半导体的这些特性,本章主要介绍晶体的结构,阐明晶体中原子排列的结合规则以及原子间是如何通过相互作用互相结合为晶体的。

1.2 晶体结构

固体分为晶体和非晶体。我们知道,材料的宏观物理化学性质取决于构成材料的元素种类,更取决于组成元素的原子是以何种形态(原子、离子、分子或它们的集团)、以何种方式排列于材料之中的。这是研究固体的宏观性质所要解决的首要问题。

晶体的性质与其内部原子的排列有很大的关系。晶体中原子排列的方式是研究其宏观

性质和各种微观过程的基础。晶体外形的规则性使得早期的研究者相信，晶体是相同体积的“积木块”有规则地重复堆积而成的。19 世纪由劳埃等提出的 X 射线衍射方法，从实验上证实了这一结论。随着晶体原子模型的建立，物理学家更进一步地对其进行了研究。

1.2.1 晶体的共性

一个理想的晶体是由全同的结构单元在空间无限重复而构成的。不同原子构成的晶体，其性质有很大差别，比如 Al 是良好的导电体，而 Al_2O_3 是良好的绝缘体；即使是同种原子构成的晶体，若结构不同，其性质也会有很大差异，例如金刚石和石墨都是由碳原子构成的，但其性质相差甚远，前者硬度很高，不能导电，后者质地疏松，有良好的导电性。除具有各自的特性外，不同的晶体还具有一些共同的性质。

1. 长程有序

长程有序是晶体最突出的特点。晶体中的原子都是按一定规则排列的，这种至少在微米量级范围的有序排列，称为长程有序。晶体分为单晶体和多晶体，多晶体是由许许多多小晶体(晶粒)构成的。对于单晶体，在整个范围内原子都是规则排列的。对于多晶体，在各晶粒范围内，原子是有序排列的。

2. 自限性

晶体具有自发地形成封闭几何多晶面体的特性，称为晶体的自限性。这一特性是晶体内部原子的规则排列在晶体宏观形态上的反映。

在不同热力学条件下生长的同一品种的晶体外形可能不同。图 1.1 是石英晶体的理想外形，图 1.2 是人造石英晶体(与 m 面平行的轴为 c 轴，通常作直角坐标系的 Z 轴)。这表明晶体的大小和形状受晶体生长时外界条件的影响，它们不是晶体品种的特征因素。

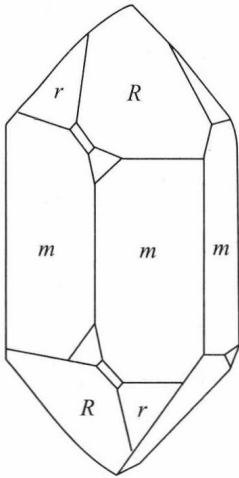


图 1.1 石英晶体的理想外形

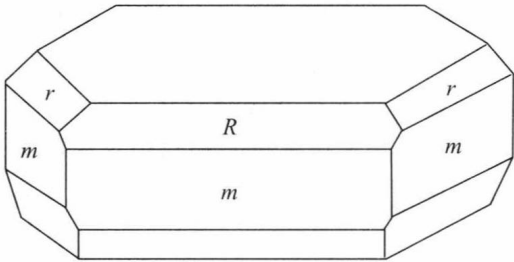


图 1.2 一种人造石英晶体

晶体外形中不受外界条件影响的因素是晶面夹角守恒，即属于同一种类的晶体，两个对应的晶面间夹角恒定不变，称为晶面夹角守恒定律。比如，石英晶体的 mm 两面夹角为 $60^{\circ}0'$ ， mR 两面的夹角为 $38^{\circ}13'$ ， mr 两面的夹角为 $38^{\circ}13'$ 。

3. 各向异性

晶体的物理性质是各向异性的。例如，平行石英的 c 轴入射单色光，不产生双折射；而沿其他方向入射单色光，会产生双折射。晶体常具有某些确定方位的晶面发生劈裂的现象，方解石和云母就是最好的例子。晶体的这一解理性也是各向异性的表现。晶体的各向异性从外形上也能体现出来，比如某一方位的晶面的形状和大小会与另一方位不同。有些晶面的交线(又称晶棱)互相平行，这些晶面称为一个晶带，晶棱的方向称为带轴。如石英晶体的 m 面构成一个晶带，这个晶带的带轴是石英的一个晶轴，即 c 轴。

正因为晶体的物理性质是各向异性的，因此有些物理常数一般不能用一个数值来表示。例如，弹性常数、压电常数、介电常数及电导率等一般需要用张量来描述。需要指出的是，晶体的各向异性是晶体区别于非晶体重要特性。

4. 密堆积

在 19 世纪以前，人们认为晶体是由实心的“基石”堆砌而成的。这一设想虽然粗浅，但它形象、直观地描述了晶体的内部规则排列这一特点。直到现在，人们仍沿用这种堆积方式形象地描述晶体的简单晶格结构。

把原子看作刚性小球，在一个平面内最简单的规则堆积便是正方排列，如图 1.3 所示，任一球与同一平面内的四个相邻的球相切。如果把这样的排列层层重合堆积起来，就构成了简单立方结构。用黑点代表球心，图 1.4 便是简单立方结构单元。

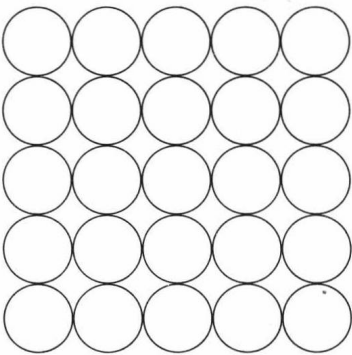


图 1.3 原子球的正方堆积

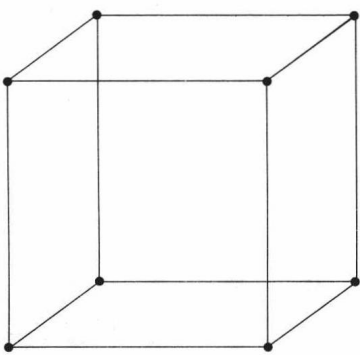


图 1.4 简单立方结构单元

设想上述简单立方堆积的原子球均匀地散开一些，而恰好在原子球的空隙内能放入一个全同的原子球，使空隙内的原子球与相邻的八个原子相切，便构成了如图 1.5 所示的体心立方堆积方式。图 1.6 便是由几何点来表示的体心立方结构单元。有相当多的金属，如 Li、Na、K、Rb、Cs、Fe 等具有体心立方结构单元。

以上两种堆积并不是最紧密的堆积方式。原子球若要构成最紧密的堆积方式，必须与同一平面内相邻的 6 个原子同时相切，如图 1.7 所示，如此排列的一层原子面称为密排面。要达到最紧密堆积，相邻原子层也必须是密排面，而且原子球心必须与相邻原子层的空隙相重合。若第三层的原子球心落在第二层的空隙上，且与第一层平行对应，便构成了如图 1.8 所示的六角密排方式。若第三层的球心落在第二层的空隙上，且该空隙也与第一层原子空隙重合，而第四层又恢复成第一层的排列，这便构成了立方密排方式。图 1.9 所示为立方密排结构单元，阴影平面对应密排面。

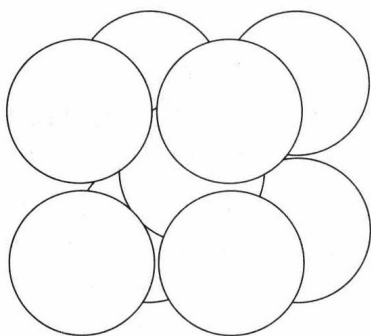


图 1.5 体心立方堆积

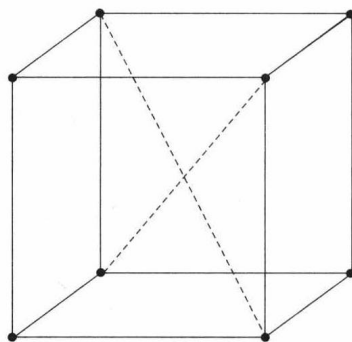


图 1.6 体心立方结构单元

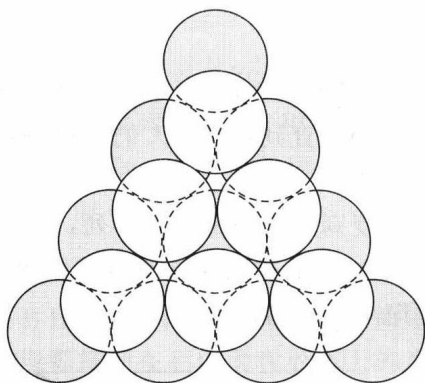


图 1.7 密排面

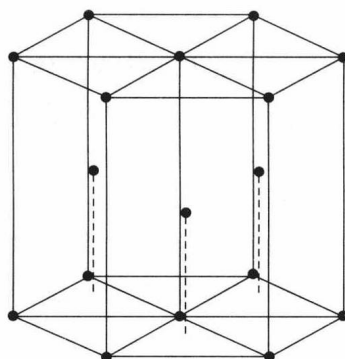


图 1.8 六角密排

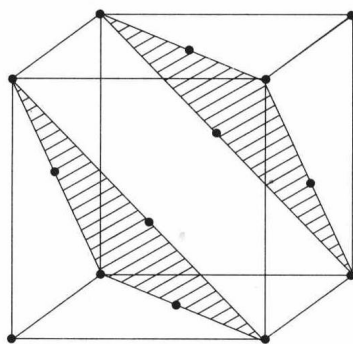


图 1.9 立方密排结构单元

一个原子周围最近邻的原子数，称为该晶体的配位数，可以用来表征原子排列的紧密程度。最紧密的堆积称密堆积，密堆积对应最大的配位数。对于体心立方，晶格原子的配位数为 8，相邻原子间存在一定的间隙，容易证明：相邻原子间的间隙 $\Delta = 0.31r_0$ (r_0 为原子球的半径)。对于六角密积和立方密积，晶体的配位数都是 12，即一个原子与最邻近的 12 个原子相切。

1.2.2 晶体的周期性

上面介绍了由同种原子构成的晶体的一些结构。但实际晶体并不一定是由同一种原子构成，而往往是由多种不同种原子构成的。晶体中原子种类越多，晶体的实际结构就越复杂。不

论晶体实际结构多么复杂,长程有序的共性是一定要遵守的。如何描述晶体中原子排列的有序性呢?17世纪及18世纪时,在研究方解石解理的过程中,阿羽依等认为晶体由一些相同的“基石”重复地规则排列而成,并发现了结晶学中重要的有理指数定律,但这种理论显然和物质结构的微粒性抵触;后来关于晶体结构的学说,从坚实的“基石”逐步演变为“微粒在空间按一定方式排列成为晶体”的空间点阵学说。

1. 空间点阵

空间点阵学说出现于19世纪(由布喇菲提出),按这个学说,晶体的内部结构可以概括为是由一些相同的点在空间有规则地作周期性的无限分布,这些点的总体称为点阵。空间点阵学说正确地反映了晶体内在结构的长程有序性,它的正确性为后来的X射线工作所证明。其后空间群理论又充实了空间点阵学说。需要指出,这一学说是实际晶体结构的数学抽象,它只反映出了晶体结构的周期性。

下面对空间点阵学说加以解释和说明:

(1) 空间点阵学说中所称的点子代表结构中相同的位置,称作节点。如果晶体是由完全相同的一种原子组成的话,节点可以是原子本身的位置。若晶体中含有数种原子,这数种原子构成基本的结构单元(称为基元),则节点可以代表基元的重心;当然节点也可以取在基元的其他点上,只要保持节点在基元中的位置都相同即可。

(2) 空间点阵学说概括了晶体结构的周期性。晶体中所有基元都是相同的。整个晶体的结构,都可以看作由这种基元沿空间三个不同的方向,各按一定的距离周期性地平移而成。每次平移的距离称为一个周期。因此在一定的方向有着一定的周期;不同的方向上周期一般不同。每个节点周围的情况都相同,实际上,任何基元中相应原子周围的情况都是相同的,而每个基元中各个原子周围的情况当然是不同的。这里,我们认为格子在空间是无限延伸的,而不管实际晶体的体积总是有限的事实。节点的周期性,即代表了基元的周期性。图1.10分别示出了二维晶体结构、基元及其点阵。

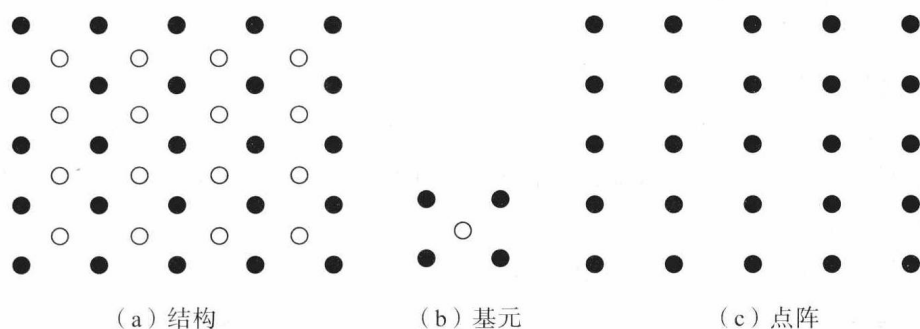


图 1.10 二维晶体结构、基元及其点阵

(3) 沿三个不同方向通过点阵中的节点作平行直线簇,把节点包括无遗,点阵便构成一个三维网格。这种三维网格称为晶格,又称布喇菲格子,节点又称格点,如图1.11所示。

(4) 某一方向相邻节点的距离称为该方向上的周期。以一节点为定点,以三个不同方向的周期为边长的平行六面体可作为晶体的一个重复单元,称为原胞或固体物理学原胞,它能反映晶格的周期性。原胞的选取不是唯一的,但它们的体积都相等。图1.12给出了几个形状不同的原胞。

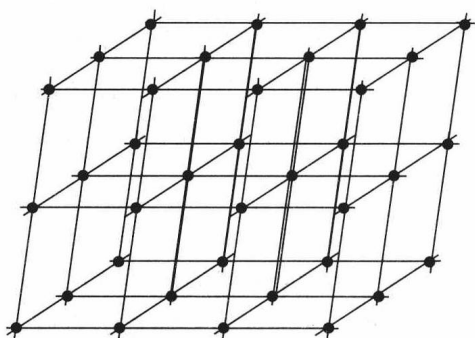


图 1.11 晶格

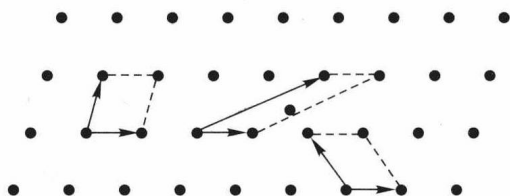


图 1.12 原胞选取示意图

2. 晶格的周期性

为了同时反映晶体的对称性，结晶学上所取的重复单元，体积不一定最小，节点不仅可以在原胞的顶角上，而且也可以在体心或面心上。在结晶学中，原胞的边在晶轴方向，边长等于该方向上的一个周期，代表原胞的三个边的矢量称为结晶学原胞(简称晶胞)的基矢。

在固体物理学中，通常只选取反映晶格周期性的原胞，原胞自然是最小的重复单元。因此，对于布喇菲格子，固体物理学中的原胞就只包含一个原子。对于复式格子，原胞中所包含原子的数目正是基元中原子的数目。

三维格子的重复单元是平行六面体，最小重复单元的节点只在顶角上。如果没有其他的规定，最小重复单元的三边的取向和长度可以是多种多样的。设 $\mathbf{r}$ 为重复单元中任意一处的位矢、 Γ 代表晶格任意物理量，晶格的周期性可用下式表述：

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \Gamma(\mathbf{r} + l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3) \quad (1.1.1)$$

式中， l_1, l_2, l_3 是整数， $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 是重复单元的边长矢量，也就是有关方向上的周期矢量。式(1.1.1)表示一个重复单元中任一处 $\mathbf{r}$ 的物理性质和另一个重复单元相应处的物理性质相同。这里没有把 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 理解为基矢，因为任意的重复单元不一定是所要求的原胞。结晶学中的原胞是按对称性的特点来选取的，基矢在晶轴方向。固体物理学中的原胞也不是任意的重复单元，其在基矢的方向和晶轴的方向是有一定的相对取向的。如果重复单元不是任意的，而是原胞，那么式(1.1.1)中的 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 就是基矢。下面用 $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 表示固体物理学中的基矢，而用 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ 表示结晶学原胞的基矢。

3. 立方晶系

在结晶学中，属于立方晶系的布喇菲原胞有简立方、体心立方和面心立方三种。

(1) 简立方。原子球在一个平面内呈现正方排列，这样的原子层层叠加起来得到简单立方格子，如图 1.13 所示。对于简单立方，原胞和晶胞是统一的，即

$$\mathbf{a}_1 = \mathbf{a}, \mathbf{a}_2 = \mathbf{b}, \mathbf{a}_3 = \mathbf{c} \quad (1.1.2)$$

一个角顶为 8 个原胞所共有，也就是说，角顶上的

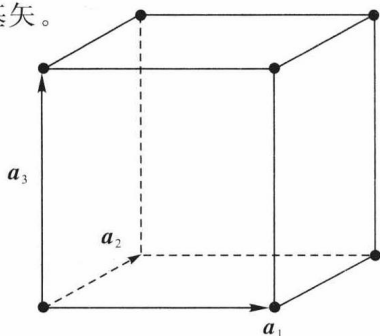


图 1.13 简单立方原胞(晶胞)

一个格点对一个原胞的贡献是 $1/8$ ，8 个角顶上的格点对一个原胞的贡献正好等于一个格点的贡献。这就是说，一个简立方原胞对应点阵中一个节点。

(2) 体心立方。图 1.14 给出了体心立方原胞基矢的一种选取方式，容易得出

$$a_1 = \frac{-a+b+c}{2}, \quad a_2 = \frac{a-b+c}{2}, \quad a_3 = \frac{a+b-c}{2} \quad (1.1.3)$$

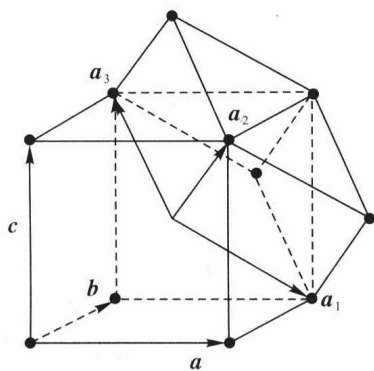


图 1.14 体心立方原胞

原胞的体积为 $\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = a^3/2$ ， a 是晶胞的边长，又称晶格常数，可见，原胞体积是晶胞体积的一半。一个晶胞对应两个格点，一个原胞只对应一个格点。

(3) 面心立方。如图 1.15 所示，原胞基矢与晶胞基矢的关系是

$$a_1 = \frac{b+c}{2}, \quad a_2 = \frac{c+a}{2}, \quad a_3 = \frac{a+b}{2} \quad (1.1.4)$$

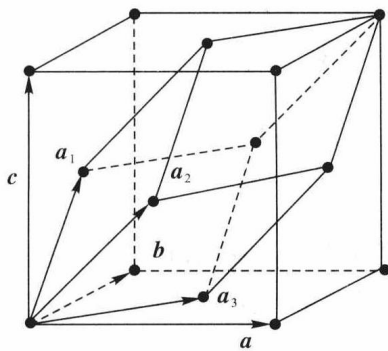


图 1.15 面心立方原胞

除顶角上有原子外，在立方体的 6 个面的中心还有 6 个原子，故称面心立方，每个面上的原子为相邻的两个原胞所共有，于是每个面心原子只有 $1/2$ 是属于一个原胞，6 个面心原子实际上只有 3 个是属于这个原胞的，再加上顶角格点的贡献，因此面心立方的布喇菲原胞只有 4 个原子，也就是有 4 个格点。原胞的体积 $\Omega = a_1 \cdot (a_2 \times a_3) = a^3/4$ ，为晶胞体积的 $1/4$ 。

4. 复式格子

再看几种常遇到的实际晶体结构——复式格子。

(1) 氯化钠结构、氯化铯结构。

氯化钠由钠离子(Na^+)和氯离子(Cl^-)结合而成,是一种典型的离子晶体,它的结晶学原胞如图 1.16 所示(钠离子和氯离子分别用圆圈○和圆点●表示)。从图中可以看出,钠离子和氯离子周围的情况都相同,因此可以把格点选在任意一种离子上。如果只看钠离子,它构成面心立方格子;同样,氯离子也构成面心立方格子。这两个面心立方格子各自的原胞具有相同的基矢,只不过互相有一定位移。氯化钠结构的固体物理学原胞的取法,可以按 Na^+ 的面心立方格子选基矢,新取的原胞的顶角上为 Na^+ ,而内部包含一个 Cl^- ,所以这个原胞中包含一个 Na^+ 和一个 Cl^- 。如果按 Cl^- 的面心立方格子选基矢,其结果是一样的。

氯化铯是另一种典型的离子晶体结构,它的结晶学原胞如图 1.17 所示。在立方体的顶角上是 Cl^- ,在体心上是 Cs^+ (如取立方体,顶角上是 Cs^+ ,体心上是 Cl^- ,也是一样的),但 Cl^- 或 Cs^+ 则各自组成简立方结构的子晶格。氯化铯结构是由两个简立方的子晶格彼此沿立方体空间对角线位移 $1/2$ 的长度套构而成的。氯化铯是典型的复式格子,它的固体物理学原胞是简立方,不过每个原胞中包含两个原子(离子),但不把它的结构说成是“体心立方”。

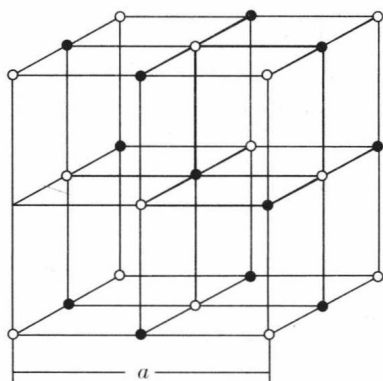


图 1.16 NaCl 结晶学原胞

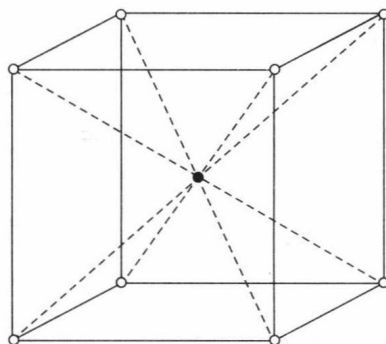


图 1.17 CsCl 结晶学原胞

这里需要强调:按固体物理的观点,复式格子总是由若干相同的子晶格互相位移套构而成的;结构、取原胞都是对布喇菲格子而言的,因此氯化钠型的结构是面心立方(而不是简立方),氯化铯型的结构是简立方(而不是体心立方)。

(2) 金刚石结构。

金刚石结构是典型的原子晶体,原子间以共价键结合。每个原子有四个最近邻原子,这四个原子处在正四面体的顶角上,正四面体中心上的碳原子和顶角上每个碳原子共有两个电子。图 1.18 画出了金刚石的一个晶胞。原子间的连线代表共价键,从图中可以看出,晶胞内的原子的共价键的取向都相同。若将最近邻的原子都考虑在内,可以发现,晶胞顶角上的原子的共价键的取向都相同,但与晶胞内原子的共价键的取向不同。这说明这两种原子周围的情况不同,因此空间点阵的节点只能取在其中的一种碳原子上。由于金刚石的布喇菲格子是面心立方结构,所以称金刚石的结构是面心立方格子。晶胞内处在空间对角线 $1/4$ 处的碳原子,再加上顶角和面心上原子的贡献,一个晶胞内包含八个原子。

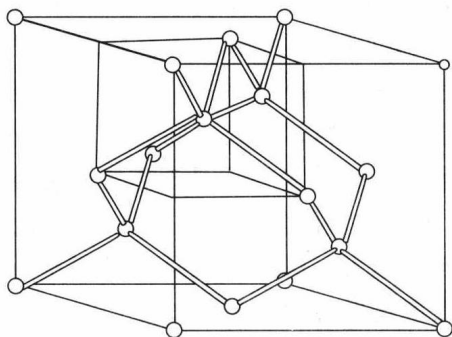


图 1.18 金刚石的一个晶胞

半导体材料，如锗、硅等都有四个价电子，它们的晶体结构和金刚石的结构相同。立方系的硫化锌也具有和金刚石类似的结构，其中硫和锌分别组成面心立方结构的子晶格，沿空间对角线位移 $1/4$ 的长度套构而成。这样的结构通称闪锌矿结构。许多重要的化合物半导体如锑化铟、砷化镓等都是闪锌矿结构，在集成光学上很重要的磷化铟也是闪锌矿结构。

1.3 晶列、晶面、倒格子

1.3.1 基矢、晶胞

根据空间点阵学说，晶体结构可以用晶格来描述，晶体结构 = 基元 + 空间点阵。但是，采用晶格来描述晶体很不方便，也不直观，为了更方便地描述晶体结构，常采用原胞和基矢来描述。

每个方向上一定的平移距离称为点阵在该方向上的周期，在一定方向上有一定的周期，不同方向上的周期大小一般不相同，于是可选用三个不共面方向上的最小周期作为这三个不共面方向上的天然长度单位，并选取任一阵点作为原点。由此原点引出这三个方向上的天然长度单位以构成三个初级平移矢量 $\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ ，形成一个坐标系，这样一个坐标系便可用来描述整个空间点阵。这空间点阵可用矢量 $\mathbf{R}_n$ 来描述：

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$$

$\mathbf{a}_1$ 、 $\mathbf{a}_2$ 、 $\mathbf{a}_3$ 通常称为基矢。

原胞能反映晶格的周期性，它是晶格的最小周期性单元，其选取也不是唯一的，但它们的体积都相等。在有些情况下，原胞不能反映出晶体的对称性，为了同时反映晶体对称的特性，结晶学上所取的重复单元，体积不一定最小，节点不仅可以在顶角上，还可以是面心或体心，这种重复单元称为晶胞或单胞。晶胞在有些情况下是原胞，在另外一些情况下则不是原胞。沿晶胞的三个棱所作的三个矢量通常称为晶胞的基矢。

1.3.2 Miller 指数

1. 晶列

由于晶体的周期性，在晶体内部所有的原子或离子都可以看成是排在一系列彼此平行