



高等院校电子信息与电气学科系列规划教材

微电子器件

曾云 杨红官 编著

*M*icroelectronic
Devices



机械工业出版社
China Machine Press

高等院校

...斗系列规划教材

微电子器件

曾云 杨红官 编著

 机械工业出版社
China Machine Press

图书在版编目 (CIP) 数据

微电子器件 / 曾云, 杨红官编著. —北京: 机械工业出版社, 2016.3
(高等院校电子信息与电气学科系列规划教材)

ISBN 978-7-111-52930-9

I. 微… II. ①曾… ②杨… III. 微电子技术—电子器件—高等学校—教材 IV. TN4

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 037616 号

本书共分为 11 章, 其中, 第 1 章介绍了半导体晶体的能带、结构和载流子分布规律; 第 2 章和第 3 章描述了 pn 结二极管、变容二极管、隧道二极管、肖特基二极管和雪崩二极管的特性与工作机理; 第 4 ~ 6 章详细地论述了晶体管的工作机理及其直流特性、频率特性、开关特性与功率特性; 第 7 章给出了晶闸管的结构、原理及其导通、阻断、关断特性; 第 8 章和第 9 章讲述了 MOS 场效应晶体管的结构、原理与特性, 以及纳米级 MOS 器件, 包括 SOI 结构、双栅结构、纳米线结构等; 第 10 章论述了异质结双极晶体管、GaAs MESFET 和高电子迁移率晶体管的工作原理和基本特性; 第 11 章介绍了光电池、光敏晶体管和电荷耦合器件。

本书可作为高等院校电子信息、电子科学与技术、光电信息科学与技术专业的本科生教材, 教师可根据专业和课时要求选学部分章节。本书亦可作为相关专业科研人员和工程技术人员的参考用书。

出版发行: 机械工业出版社 (北京市西城区百万庄大街 22 号 邮政编码: 100037)

责任编辑: 余洁

责任校对: 董纪丽

印刷: 北京市荣盛彩色印刷有限公司

版次: 2016 年 3 月第 1 版第 1 次印刷

开本: 185mm × 260mm 1/16

印张: 18.5

书号: ISBN 978-7-111-52930-9

定价: 55.00 元

凡购本书, 如有缺页、倒页、脱页, 由本社发行部调换

客服热线: (010) 88378991 88361066

投稿热线: (010) 88379604

购书热线: (010) 68326294 88379649 68995259

读者信箱: hzjsj@hzbook.com

版权所有·侵权必究

封底无防伪标均为盗版

本书法律顾问: 北京大成律师事务所 韩光 / 邹晓东

前 言

晶体管和集成电路的发明催生了新兴的微电子学和微电子技术，使人类进入了信息化时代。电子科学与技术的迅速发展已经“改变了世界”。电子器件是电子科学与技术的基础，晶体管是最重要和应用最广泛的微电子基础器件，由其发展和组成的集成电路已广泛应用于计算机、通信、家电和军工等许多科技和工程领域，推动着人类科学技术的发展。我国已经成为电子信息产业大国，集成电路及其相关产业的产品约占世界市场的一半，发展集成电路已成为国家的战略需求。培养电子科学与技术领域的专业人才是我国高等学校的一项重要任务，微电子基础器件是高等学校电子信息类专业的一门核心基础课程。

本书作者长期担任电子器件及其应用的教学科研任务，讲授本科生、研究生有关电子器件的课程十余年，在教学讲义的基础上，经过进一步整理、修改、补充，编著了本书。书中对 pn 结二极管、双极型晶体管、MOSFET 这三类基础器件，从宏观和微观方面，定性和定量地进行详细分析，论述器件内部载流子运动和电荷变化的规律，介绍器件特性与结构、材料、工艺的关系，深入探讨微电子器件的本质；同时介绍了一些有代表性的其他器件的结构、原理及特性，为微电子器件的研究、设计、制造和应用奠定理论基础。本书可作为高等学校电子信息类专业有关电子器件课程理论教学的教材，也可供从事相关领域的科学研究人员和工程技术人员参考，各学校在教学中可根据需要和课时选用部分章节。

本书第 2~8 章、第 11 章由曾云编著，第 1 章、第 9 章、第 10 章由杨红官编著，附录由杨红官整理。在本书编著过程中，作者参考了大量的相关教材和文献资料，选用了一些研究成果和图表数据，这些参考文献统一列于书末。作者在此对所有参考文献的贡献者表示衷心感谢。

由于作者水平有限，本书难免存在需要完善之处，热忱欢迎读者赐予宝贵意见。

教学建议

教学内容	教学要点及教学要求	课时安排	
		电子科学与技术专业	其他专业
第1章 微电子器件物理基础	<ul style="list-style-type: none"> 了解常见半导体的晶体结构 理解晶体能带的形成机理；熟悉并掌握有效质量、空穴的概念；了解硅和砷化镓的能带结构；了解半导体的杂质能级和界面散射等概念 熟悉并掌握状态密度函数和费米分布函数；理解载流子输运过程规律 	4 (选讲)	8
第2章 pn结二极管	<ul style="list-style-type: none"> 了解pn结的分类；熟悉并掌握pn结中载流子浓度、电场和电势分布规律 熟悉并掌握pn结载流子输运过程和直流电流电压方程；了解影响pn结载流子输运的主要因素 理解pn结的小信号交流特性、开关特性与击穿特性 	8	6
第3章 特殊二极管	<ul style="list-style-type: none"> 了解变容二极管、隧道二极管、肖特基二极管和雪崩二极管的基本特性和工作原理 	4 (选讲)	2 (选讲)
第4章 晶体管直流特性	<ul style="list-style-type: none"> 了解晶体管的基本结构；熟悉并掌握晶体管的放大机理 熟悉并掌握晶体管的直流电流电压方程；熟悉并掌握晶体管放大系数和特性曲线 理解晶体管的反向电流、击穿电压和基极电阻等概念 	8	8
第5章 晶体管频率特性与开关特性	<ul style="list-style-type: none"> 熟悉并掌握晶体管的频率特性及与其他晶体管参数的关系 理解晶体管的高频参数及其等效电路 理解晶体管的开关过程原理；了解晶体管的开关时间的概念 	7	6 (选讲)
第6章 晶体管功率特性	<ul style="list-style-type: none"> 理解晶体管的基区电导调制效应、有效基区扩展效应和发射极电流集边效应的原理 了解晶体管最大耗散功率、晶体管二次击穿和安全工作区等概念 	5	3 (选讲)
第7章 晶闸管	<ul style="list-style-type: none"> 理解晶闸管的基本结构、工作原理和电流电压关系 理解晶闸管的导通特性、关断特性和阻断特性 了解双向晶闸管的工作过程 	6 (选讲)	3 (选讲)
第8章 MOSFET	<ul style="list-style-type: none"> 了解MOSFET的结构和类型；熟悉并掌握MOSFET的工作原理和电流电压特性 熟悉并掌握MOSFET阈值电压及其提取方法 了解MOSFET的二级效应；熟悉并掌握MOSFET的频率特性和功率特性；了解MOSFET的温度特性和小尺寸特性 	8	8

(续)

教学内容	教学要点及教学要求	课时安排	
		电子科学与技术专业	其他专业
第9章 纳米级 MOS 器件	<ul style="list-style-type: none"> 理解 SOI 结构 MOS 器件的工作原理和电流电压关系 了解纳米 MOS 器件中的栅工程和沟道工程 了解双栅 MOSFET 和硅纳米线晶体管的结构和基本特性 	4	4 (选讲)
第10章 半导体异质结器件	<ul style="list-style-type: none"> 理解半导体异质结的类型和能带排列; 理解异质结的注入特性和伏安特性 了解异质结双极晶体管、GaAs MESFET 和高电子迁移率晶体管的工作原理和基本特性 	6 (选讲)	4 (选讲)
第11章 光电器件与电荷耦合器件	<ul style="list-style-type: none"> 熟悉并掌握半导体中的光吸收过程和光电效应原理 了解光电池的基本结构、类型和工作原理 了解光敏晶体管的基本结构和工作原理 了解电荷耦合器件的基本结构、工作原理及应用 	6 (选讲)	4 (选讲)
教学总学时建议		40~64	30~54

说明:

- 1) 电子科学与技术专业本科教学使用本教材时, 建议课堂授课学时数为 40~64(包含习题课、课堂讨论等必要的课堂教学环节), 另外安排 10 个实验[⊖]课时, 共计 50~74 课时。不同学校可以根据各自的教学要求和计划学时数酌情对教材内容进行取舍。电子信息类的其他专业也可以参照上述建议进行调整安排。
- 2) 非电子科学与技术专业的师生使用本教材时可适当降低教学要求, 作为专业选修课时可安排 30 个课堂授课学时, 4 个实验课时, 共计 34 课时。

课堂教学建议:

- 1) 如果此前修读过半导体物理课程, 可跳过第 1 章。
- 2) 本书的重点是第 2 章、第 4 章、第 5 章、第 6 章、第 8 章、第 9 章。这几章对于掌握微电子基础器件的基本结构、基本工作过程和基本特性至关重要。其他类型的电子器件或在科研前沿领域中提出的新的器件类型都可以看成这几类电子器件的改进或发展。
- 3) 如果受学时限制, 第 3 章、第 7 章、第 10 章、第 11 章可略去不讲。

实验教学建议:

实验一: 霍尔效应法测量半导体的载流子浓度、电导率和迁移率

实验二: 电容-电压法测量 p^+n 结的平均杂质浓度和杂质分布

实验三: 双极晶体管直流特性的测试

实验四: 双极晶体管特征频率的测量

实验五: MOS 晶体管直流特性的测试

⊖ 关于实验, 另外编有讲义。

目 录

前 言 教学建议

第 1 章 微电子器件物理基础 1

1.1 半导体的晶体结构与能带 1

1.1.1 半导体的晶体结构 1

1.1.2 半导体能带图 3

1.1.3 半导体晶格缺陷 及其能级 9

1.2 半导体中载流子的统计分布 ... 15

1.2.1 状态密度函数与统计 分布函数 16

1.2.2 本征载流子 18

1.2.3 非本征载流子 20

1.3 半导体中载流子的运输规律 ... 24

1.3.1 载流子的产生与复合 24

1.3.2 载流子的漂移运动 26

1.3.3 载流子的扩散运动 29

1.3.4 载流子的输运方程 31

习题 34

第 2 章 pn 结二极管 35

2.1 pn 结杂质浓度分布 35

2.2 平衡 pn 结 36

2.2.1 空间电荷区 36

2.2.2 能带图 37

2.2.3 接触电势差 38

2.2.4 载流子浓度 39

2.3 pn 结的空间电荷区电场 和电位分布 40

2.3.1 突变结 41

2.3.2 线性缓变结 42

2.3.3 耗尽层近似 43

2.4 pn 结势垒电容 44

2.4.1 突变结势垒电容 44

2.4.2 线性缓变结势垒电容 45

2.5 pn 结直流特性 46

2.5.1 非平衡载流子的注入 46

2.5.2 反向抽取 47

2.5.3 准费米能级和载流子 浓度 48

2.5.4 直流电流电压方程 49

2.5.5 影响 pn 结直流特性的 其他因素 52

2.5.6 温度对 pn 结电流和电压 的影响 57

2.6 pn 结小信号交流特性与 开关特性 58

2.6.1 小信号交流特性 58

2.6.2 开关特性 61

2.7 pn 结击穿特性 63

2.7.1 基本击穿机构 63

2.7.2 雪崩击穿电压 64

2.7.3 影响雪崩击穿电压的 因素 68

习题 70

第 3 章 特殊二极管 72

3.1 变容二极管 72

3.1.1 pn 结电容 72

3.1.2 电容电压特性 73

3.1.3 变容二极管基本特性 75

3.1.4 特殊变容二极管 78

3.2 隧道二极管 79

3.2.1 隧道过程的定性分析	79	第5章 晶体管频率特性与 开关特性	121
3.2.2 隧道概率和隧道电流	80	5.1 晶体管频率特性理论分析 ..	121
3.2.3 等效电路及特性	82	5.1.1 晶体管频率特性参数 ..	121
3.2.4 反向二极管	83	5.1.2 共基极电流放大系数 与截止频率	121
3.3 肖特基二极管	83	5.1.3 共射极电流放大系数 与频率参数	125
3.3.1 肖特基势垒	83	5.2 晶体管高频参数与 等效电路	127
3.3.2 电流电压特性	85	5.2.1 交流小信号电流电压 方程	127
3.3.3 肖特基二极管和 pn 结 二极管的比较	86	5.2.2 晶体管 Y 参数方程及 其等效电路	128
3.3.4 金属-半导体欧姆接触 ..	86	5.2.3 晶体管 h 参数方程及 其等效电路	131
3.4 雪崩二极管	88	5.2.4 晶体管高频功率增益 和最高振荡频率	133
3.4.1 崩越二极管的工作原理 ..	88	5.3 晶体管的开关过程	133
3.4.2 崩越二极管的特性	90	5.3.1 开关晶体管静态特性 ..	133
3.4.3 几种崩越二极管	91	5.3.2 晶体管的开关过程	134
3.4.4 俘越二极管	92	5.3.3 晶体管的开关参数	135
3.4.5 势越二极管	95	5.4 Ebers-Moll 模型和电荷 控制方程	135
习题	96	5.4.1 Ebers-Moll 模型及 等效电路	135
第4章 晶体管直流特性	97	5.4.2 电荷控制方程	137
4.1 晶体管的基本结构与 放大机理	97	5.5 晶体管的开关时间	138
4.1.1 晶体管结构与杂质分布 ..	97	5.5.1 延迟时间	138
4.1.2 晶体管的放大机理	98	5.5.2 上升时间	139
4.2 晶体管直流电流-电压方程 ..	100	5.5.3 贮存时间	140
4.2.1 均匀基区晶体管	100	5.5.4 下降时间	143
4.2.2 缓变基区晶体管	103	习题	143
4.3 晶体管电流放大系数与 特性曲线	105	第6章 晶体管功率特性	145
4.3.1 电流放大系数	105	6.1 基区电导调制效应	145
4.3.2 特性曲线	107	6.1.1 注入对基区载流子 分布的影响	145
4.3.3 电流放大系数理论 分析	108	6.1.2 大注入对电流放大 系数的影响	147
4.3.4 影响电流放大系数的 其他因素	110	6.1.3 大注入对基区渡越 时间的影响	149
4.4 晶体管反向电流与击穿 电压	112		
4.4.1 晶体管反向电流	113		
4.4.2 晶体管击穿电压	113		
4.5 晶体管基极电阻	116		
4.5.1 梳状晶体管基极电阻 ..	117		
4.5.2 圆形晶体管基极电阻 ..	119		
习题	119		

6.1.4	大注入临界电流密度	150	7.5.1	二极管结构	174
6.2	有效基区扩展效应	150	7.5.2	控制极结构及触发	174
6.2.1	注入电流对集电结空间 电荷区电场分布的 影响	150	习题		176
6.2.2	基区扩展	151	第8章 MOSFET		177
6.3	发射极电流集边效应	153	8.1	MOSFET 结构、分类 和特性曲线	177
6.3.1	基区横向压降	153	8.1.1	MOSFET 结构	177
6.3.2	发射极有效条宽	154	8.1.2	MOSFET 类型	178
6.3.3	发射极单位周长 电容量	154	8.1.3	MOSFET 特性曲线	180
6.3.4	发射极金属条长	155	8.2	MOSFET 阈值电压	182
6.4	晶体管最大耗散功率	155	8.2.1	阈值电压的定义	182
6.4.1	耗散功率和最高结温	155	8.2.2	理想 MOSFET 阈值 电压	182
6.4.2	晶体管的热阻	156	8.2.3	MOSFET 阈值电压	183
6.4.3	晶体管最大耗散功率	158	8.3	MOSFET 电流电压特性	184
6.5	晶体管二次击穿和 安全工作区	158	8.3.1	线性工作区的电流 电压特性	184
6.5.1	二次击穿现象	158	8.3.2	饱和工作区的电流 电压特性	185
6.5.2	二次击穿的机理和防止 二次击穿的措施	159	8.3.3	击穿区	185
6.5.3	晶体管的安全工作区	161	8.3.4	亚阈值区的电流 电压特性	186
习题		162	8.4	MOSFET 二级效应	187
第7章 晶闸管		163	8.4.1	迁移率变化效应	187
7.1	晶闸管的基本结构与 工作原理	163	8.4.2	衬底偏置效应	187
7.1.1	基本结构及静态分析	163	8.4.3	体电荷变化效应	188
7.1.2	晶闸管的工作原理	164	8.5	MOSFET 频率特性	189
7.1.3	电流电压特性	166	8.5.1	MOSFET 的增量 参数	189
7.2	晶闸管的导通特性	167	8.5.2	小信号特性与等效 电路	192
7.2.1	导通特性定性描述	167	8.5.3	截止频率	192
7.2.2	导通特性曲线的 不同区域	168	8.6	MOSFET 功率特性	193
7.2.3	影响导通过程的 其他因素	170	8.6.1	MOSFET 的极限参数	193
7.3	晶闸管的阻断能力	170	8.6.2	功率 MOSFET 的 结构	195
7.3.1	反向阻断能力	170	8.7	MOSFET 温度特性	197
7.3.2	正向阻断能力	171	8.8	MOSFET 小尺寸特性	198
7.3.3	表面对阻断能力 的影响	171	8.8.1	短沟道效应	198
7.4	晶闸管的关断特性	172	8.8.2	窄沟道效应	200
7.4.1	载流子贮存效应	172	8.8.3	等比例缩小规则	202
7.4.2	改善关断特性的措施	173	习题		202
7.5	双向晶闸管	174	第9章 纳米级 MOS 器件		203
			9.1	SOI 结构	203

9.1.1	SOI 材料制备技术	203	10.4	GaAs 金属-半导体场效 应晶体管	236
9.1.2	工作模式与物理效应	205	10.4.1	GaAs MESFET 的 结构和工作原理	236
9.1.3	SOI 器件的电流-电压 关系	207	10.4.2	GaAs MESFET 的 理论模型	237
9.2	纳米 MOS 器件中的栅工程 和沟道工程	210	10.5	高电子迁移率晶体管	238
9.2.1	MOS 器件栅结构的 变化	210	10.5.1	HEMT 的器件结构 和工作原理	239
9.2.2	MOS 器件沟道方面 的变化	213	10.5.2	HEMT 的理论模型	240
9.3	双栅 MOSFET	215	习题		241
9.3.1	结构特点	215	第 11 章 光电器件与电荷耦合 器件		242
9.3.2	双栅 SOI MOS 器件的 按比例缩小理论	217	11.1	光电效应	242
9.3.3	双栅 MOS 器件的制备 工艺	217	11.1.1	半导体的光吸收	242
9.3.4	双栅 MOSFET 的 电特性	219	11.1.2	半导体光电效应	243
9.4	硅纳米线晶体管	221	11.2	光电池	245
9.4.1	硅纳米线晶体管的 结构、制备与特性	221	11.2.1	基本结构和主要 参数	245
9.4.2	硅纳米线晶体管的 理论模型	222	11.2.2	pn 结光电池	246
习题		224	11.2.3	异质结光电池	249
第 10 章 半导体异质结器件		225	11.2.4	金属-半导体结光 电池	253
10.1	半导体异质结及其 能带图像	225	11.2.5	太阳电池	255
10.2	半导体异质结的 伏安特性	228	11.3	光敏晶体管	256
10.2.1	异质结的伏安特性和 注入特性	228	11.3.1	光敏二极管	256
10.2.2	突变异质结的 伏安特性	231	11.3.2	光敏三极管	260
10.3	异质结双极晶体管	231	11.3.3	光敏场效应管	262
10.3.1	异质结双极晶体管的 结构与特性	232	11.3.4	光控晶闸管	264
10.3.2	几种常用的异质结 双极晶体管	234	11.4	电荷耦合器件	265
			11.4.1	CCD 的工作原理	265
			11.4.2	输入与输出	267
			11.4.3	基本特性	269
			11.4.4	CCD 摄像器件	271
			习题		272
			附录		273
			参考文献		281

微电子器件物理基础

集成电路的基础器件都是用半导体材料制作而成的，半导体材料的特性决定着微电子器件及集成电路的性能。因此，这里首先学习半导体材料的结构特性和电学特性非常必要。半导体单晶材料是由大量原子周期性排列而成的，这些原子以共价键结合成共价晶体，半导体元素晶体结构通常取金刚石结构形式，而半导体化合物晶体结构通常取闪锌矿或纤维锌矿结构形式。从能带结构上看，半导体和绝缘体的区别仅在于半导体的价带和导带之间的禁带宽度较小，以至于当温度高于热力学温度零度时价带电子受热激发到导带，形成导带电子和价带空穴两种导电机制，这与金属导体只有电子导电相比有很大的优越性。半导体材料还有掺杂特性、热敏特性和光敏特性等几个重要性质，这些性质是半导体材料制作电子器件和光电子器件的物理基础。本章简要地讨论半导体材料的晶体结构、能带结构、掺杂特性和载流子输运方法等内容，为后面章节学习各类半导体电子器件和光电子器件奠定基础。

1.1 半导体的晶体结构与能带

1.1.1 半导体的晶体结构

晶体是由大量原子周期性重复排列而成的，而每个原子又包含原子核和核外电子。不同原子对核外电子特别是价电子的束缚能力不同，这种束缚能力的差别用原子的负电性来表示，若用 χ 来表示负电性，则有

$$\chi = 0.18(W_i + W_a) \quad (1-1)$$

其中， W_i 和 W_a 分别是该元素原子的电离能和亲和能，系数选择 0.18 是为了使 W_i 和 W_a 用 eV 作单位时，Li 的负电性为 1。表 1-1 给出了周期表中一些原子的负电性。IV 族原子的负电性处于每一周期中间位置，表明它们对价电子束缚力的强弱处于中等水平，因而这一族的硅(Si)、锗(Ge)晶体是重要的半导体材料。III 族和 V 族、II 族和 VI 族原子负电性相差不大，它们可以结合成既有共价性又有离子性的半导体晶体，GaAs、AlAs、InP、GaN、ZnS、CdS 等都是其中的代表。IV-IV 族化合物如 SiC 等也是重要的半导体材料。

表 1-1 一些元素的原子负电性

H						
2.1						
Li	Be	B	C	N	O	F
1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl
0.9	1.2	1.5	1.8	2.1	2.5	3.0
K	Ca	Sc	Ge	As	Se	Br
0.8	1.0	1.3	1.8	2.0	2.4	2.8
Rb	Sr	Y	Sn	Sb	Te	I
0.8	1.0	1.3	1.8	1.9	2.1	2.5

1. 金刚石结构

硅(Si)和锗(Ge)元素的原子最外层有四个价电子，它们的晶格结构属于金刚石结构，如图 1-1a 所示为金刚石结构的晶胞。金刚石结构可以看成是两个面心立方结构沿立方体对角线相互平移了体对角线长度的 1/4 套构而成的。晶胞中总共包含 8 个原子：顶角处 1 个原子，面心处 3 个原子，体内 4 个原子。每个原子有 4 个最近邻原子，组成四面体结

构,如图 1-1b 所示,表明每个原子能贡献出 4 个价电子,与周围的 4 个原子形成 4 个键长和键能都相同的共价键,键的方向分别指向四面体的顶点。在金刚石结构的晶体中有两类方位不同的四面体,如图 1-1c 所示,表明顶角原子和面心原子处在同一个面心立方点阵(记为 CI 点阵)中,而对角线上的原子处在另一个面心立方点阵(记为 CII 点阵)中。从另一方面看,面心立方结构又称为立方密堆结构,即从立方体对角线方向看,面心立方结构是由二维密排面按照 $ABCABC\cdots$ 方式一层层地堆积而成的,在每一层内每个原子和周围的 6 个原子组成正六边形结构,如图 1-2a 所示。图 1-2b 所示的是金刚石结构在(111)面上堆积的图像,其中实线若表示 CI 类原子,则虚线就表示 CII 类原子。碳、硅、锗、锡金刚石结构的晶格常数(即立方体晶胞的边长)分别为 $a=3.567\text{\AA}$ 、 5.430\AA 、 5.658\AA 、 6.49\AA ($1\text{\AA}=10^{-10}\text{m}$)。

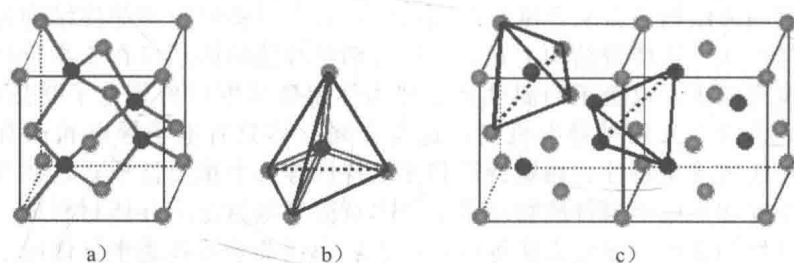


图 1-1 金刚石晶体的结构示意图

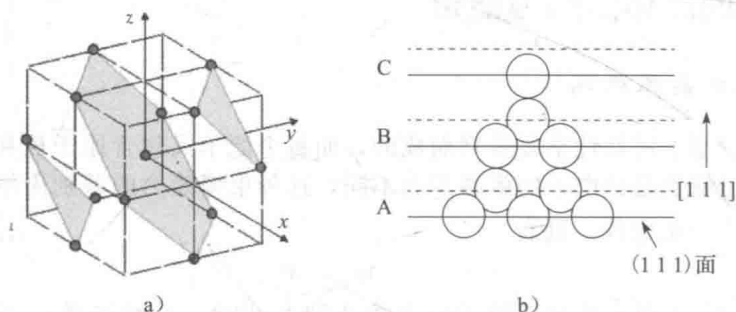


图 1-2 金刚石结构晶体在(111)面上的堆积示意图

2. 闪锌矿结构

砷化镓(GaAs)是重要的化合物半导体材料,其晶体结构通常取闪锌矿结构形式。闪锌矿结构与金刚石结构极为相似,其晶胞也可以用图 1-1a 示意地表示,只是它是由两类不同元素的原子组成的面心立方格子沿立方体对角线相互错开 $1/4$ 对角线长度套构而成的。晶胞内同样包含 8 个原子,即 4 个砷原子和 4 个镓原子。若砷原子位于立方体的顶角和面心上,则镓原子就位于立方体的对角线上,反之亦然。与金刚石结构类似,这类共价性的化合物中,共价键也是以 sp^3 杂化轨道为基础形成的。但是,这些化合物通常具有不同程度的离子性,是极性半导体。镓原子和砷原子在晶格中也构成四面体结构,镓原子在四面体的中心,则砷原子在顶角上。或者相反,若砷原子在四面体的中心,则镓原子在顶角上。它们同金刚石结构一样,也具有四面体对称性。而且以砷原子为中心四面体和以镓原子为中心四面体其方位不同,这种情形也和图 1-1c 所示的类似。沿着 $[111]$ 方向上双层原子面的排列亦如图 1-2b 所示,容易看出,在闪锌矿结构中不存在反演中心。由化学元素周期表中的 III 族元素铝、镓、铟和 V 族元素磷、砷、锑合成的 III-V 族化合物,以及 II 族元素锌、镉、汞和 VI 族元素硫、硒、碲合成的 II-VI 族化合物,它们都能够以闪锌矿结构形式结成半导体晶体。IV-IV 族混晶如 SiC、GeSi 等的晶体结构也取闪锌矿结构。

3. 纤维锌矿结构

砷化镓的晶体结构既可以取闪锌矿结构形式,也可以取纤维锌矿结构形式。如果把闪锌矿结构中相邻的四面体相对旋转 60° 就可以得到纤维锌矿结构,这样的转动使晶体的对称性由立方变成六角(图 1-3a)。硫化锌(ZnS)晶体是最早发现的纤维锌矿结构晶体。它的结构可以看作两个分别由硫离子和锌离子构成的六角密排子晶格沿六角轴方向位移 $3c/8$ 穿套而成,其中 c 为六角柱晶胞的高。因而纤维锌矿结构是由 4 个简单六角布拉菲格子穿套而成的。它的晶胞内包含了 12 个原子——6 个硫原子,6 个锌原子。值得注意的是,在纤维锌矿结构中,也像闪锌矿一样,硫离子周围有四个最近邻的锌离子,锌离子周围有四个最近邻的硫离子,形成四面体结构,如图 1-3b 所示。纤维锌矿和闪锌矿结构中锌硫四面体 ZnS_4 均作共顶连接,但锌硫四面体层平行排列的方向不同。闪锌矿中双层原子面平行于(111)面排列,而纤维锌矿中双层原子面平行于(0001)面排列。II 族和 VI 族元素形成的化合物,如 ZnS、ZnSe、CdS、CdSe 等,可以以闪锌矿结构形式结晶,也可以以纤维锌矿结构形式结晶。此外,III-V 族化合物,如 GaN、AlN 等,有时也形成纤维锌矿结构。

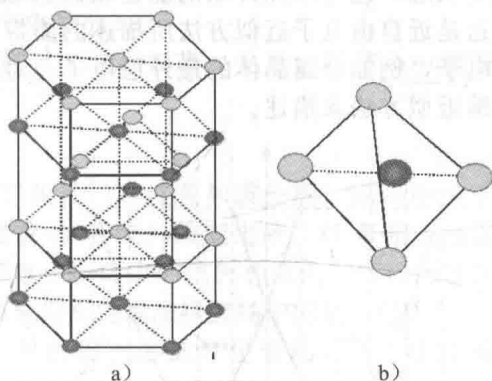


图 1-3 纤维锌矿晶体的结构示意图

1.1.2 半导体能带图

1928~1931 年,布洛克(Felix Bloch)等人为固体的能带理论奠定了基础。布洛克认为,在周期性势场中运动的电子波函数具有调幅平面波的形式,调幅因子是与晶格周期性相同的周期函数,这就是布洛克定理。1931 年,A. H. 威尔逊(A. H. Wilson)提出了金属和绝缘体相区别的能带模型,并预言介于二者之间存在半导体,为半导体的发展提供了理论基础。本节在单电子近似方法的基础上,描绘出晶体的能带图像,抽象出有效质量和空穴等概念,接着讨论硅、锗、砷化镓等常见半导体的能带结构的具体特点。

1. 晶体中能带的形成

单电子近似方法认为晶体中某个电子在与晶格周期同样周期的势场中运动,电子的波函数满足下列薛定谔(Schrodinger)方程:

$$H\psi(\mathbf{r}) = \left[\frac{\hbar^2}{2m} (-\nabla^2) + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1-2)$$

其中: $\psi(\mathbf{r})$ 为单电子的本征波函数; $V(\mathbf{r})$ 为单电子的周期势; E 为单电子的本征能量。

布洛克认为单电子的波函数应该具有晶格周期性的调幅平面波的形式,即

$$\psi_{\mathbf{k}_v}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{k}_v}(\mathbf{r}) \quad (1-3)$$

其中: $u_{\mathbf{k}_v}(\mathbf{r})$ 为具有晶格周期性的调幅因子。

我们首先考虑简单的情形。在一维情况下,单电子的薛定谔方程为:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (1-4)$$

若对于自由电子,有 $V(x)=0$, 则薛定谔方程的解为

$$\psi_{k_v^0}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ik_v x}, \quad E^0(k_v) = \frac{\hbar^2 k_v^2}{2m} \quad (1-5)$$

由式(1-5)知,自由电子的色散关系($E-k_v$)曲线是一条抛物线,如图 1-4 所示,其能量可以在 $0 \sim \infty$ 之间连续取值。处于晶格势场中的电子,其势能也具有晶格周期势的特征,

即 $V(x+la)=V(x)$, 电子的色散关系不再是图 1-4 所示的抛物线, 而是如图 1-5 所示的那样在布里渊(Brillouin)边界处色散关系曲线出现间断, 晶格中的电子不允许取间断处的能量状态, 这些不允许取的能量状态区域称为禁带, 而允许取的能量状态区域则称为允带, 这是近自由电子近似方法所描述的能带图像。近自由电子近似方法适用于弱周期势场中的电子, 例如金属晶体的最外层电子。对于内层电子和共价晶体中的外层电子, 则常用紧束缚近似方法来描述。

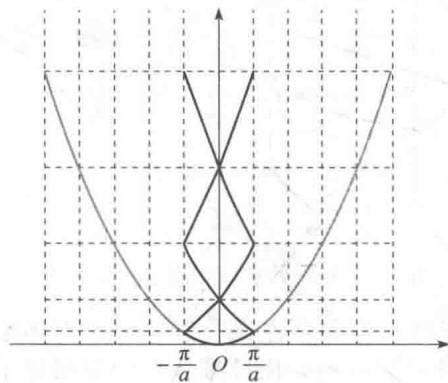


图 1-4 自由电子近似下电子的色散关系

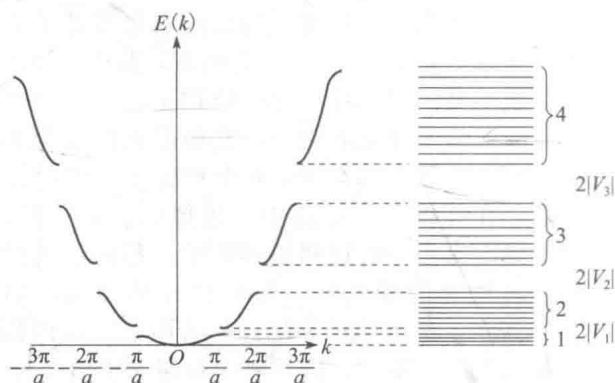
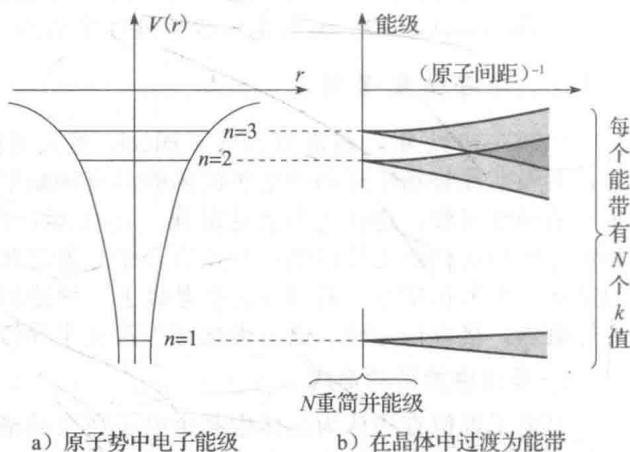


图 1-5 近自由电子的能带和禁带

紧束缚近似方法是以孤立原子的波函数为基函数, 作为研究对象的电子“紧束缚”在某个原子周围, 近邻原子的作用当作微扰, 来求解电子能量状态的一种方法。我们可以设想, 原来 N 个孤立的原子, 它们的能量状态用一系列线状的能级来表示, 其中每个能级都是 N 重简并的。在这 N 个原子相互靠近组成晶体的过程中, 原子之间会发生相互作用, 原子的能量状态会发生变化。原来简并能级就会分裂, 扩展为一系列能带, 如图 1-6 所示。原子的间距越小, 相互作用就越强, 能带就扩展得越宽。紧束缚近似方法认为, 能带是由能级演化而来, 由此方法可以研究能带展宽的情形。



a) 原子势中电子能级 b) 在晶体中过渡为能带

图 1-6 电子能级扩展为一系列能带

假定 $\varphi_i(\mathbf{r})$ 和 E_i 是孤立原子的单电子本征波函数和本征能量。紧束缚近似方法的出发点是将晶体中的单电子波函数看成 N 个简并的原子波函数的线性组合, 称为原子轨道线性组合方法, 即

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}_i} a_i \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (1-6)$$

且认为原子波函数满足正交归一条件, 即 $\int \varphi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_m) d\mathbf{r} = \delta_{nm}$ 。

根据布洛克函数的形式, 把式(1-6)改造为

$$\psi_{k_v}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}_v \cdot \mathbf{R}_i} \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (1-7)$$

这里 $\frac{1}{\sqrt{N}}$ 是归一化因子。

把原子波函数式(1-7)代入到单电子薛定谔方程式(1-2)中, 经演算后得到

$$E(k_v) = E^a + C - J \sum_{R_1} e^{ik_v \cdot R_1} \quad (1-8)$$

其中: E^a 为孤立原子的能级; C 和 J 为常数(称为交叠积分)。

紧束缚近似方法给出的晶体能带结构的图像同样是允带、禁带、允带、禁带……相间排列的情景。

2. 有效质量

晶格周期势场中的电子是微观粒子, 具有波粒二象性, 其位置和波矢满足测不准关系 $\Delta r \cdot \Delta k_v \sim 2\pi$ 。但若在所讨论的问题中, 位矢的变化量 Δr 和波矢的变化量 Δk_v 都相应地远小于位矢 r 和波矢 k_v 的变化范围, 则我们可以赋予该电子以确定的位矢和波矢, 这样的情况卜布洛克电子可以被看作准经典的粒子, 进而用经典理论来处理晶格势场中的电子行为。

在外力作用下, 布洛克电子的波矢发生变化, 其速度也必然发生变化, 即产生加速度。布洛克电子的平均加速度为

$$\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \nabla_{k_v} E(k_v) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{k_v} \frac{\partial E(k_v)}{\partial t} \quad (1-9)$$

可以写成分量的形式为

$$a_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_{vi}} \frac{\partial E(k_v)}{\partial t} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial}{\partial k_{vi}} \frac{\partial E(k_v)}{\partial k_{vj}} \frac{\hbar dk_{vj}}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vi} \partial k_{vj}} F_j \quad (1-10)$$

这里, $i, j = x, y, z$ 。因此上式可表示为矩阵形式, 有

$$\begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx}^2} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx} \partial k_{vy}} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx} \partial k_{vz}} \\ \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx} \partial k_{vy}} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vy}^2} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vy} \partial k_{vz}} \\ \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx} \partial k_{vz}} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vy} \partial k_{vz}} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vz}^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix} \quad (1-11)$$

若令

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx}^2} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx} \partial k_{vy}} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx} \partial k_{vz}} \\ \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx} \partial k_{vy}} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vy}^2} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vy} \partial k_{vz}} \\ \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vx} \partial k_{vz}} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vy} \partial k_{vz}} & \frac{\partial^2 E(k_v)}{\partial k_{vz}^2} \end{pmatrix} \quad (1-12)$$

得到

$$\begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} = \frac{1}{m^*} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}, \quad \text{或} \quad \mathbf{a} = \frac{1}{m^*} \mathbf{F} \quad (1-13)$$

此式与牛顿(Newton)第二定律在形式上非常类似, 因此我们把式(1-13)中的 m^* 称为有效质量, 它是一个二阶张量。从式(1-13)中可以看出, 有效质量取决于色散关系, 是波矢 k_v 的函数。

在研究半导体的性质时, 通常只考虑导带底和价带顶处电子的有效质量。这种情况下有效质量的大小可由 $E-k_v$ 曲线的曲率大小来反映, 如图 1-7 所示, 曲率越大, 有效质量越小。

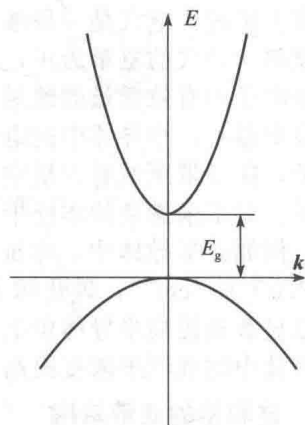


图 1-7 简单能带的色散关系示意图

3. 空穴

在热力学温度零度时, 半导体和绝缘体的能带类似, 即下面是已被价电子占满的满带, 亦称价带, 中间为禁带, 上面是空带。当外界条件发生变化, 例如温度升高或有光照时, 如图 1-8 所示, 满带中有少量的电子可能被激发到上面的空带, 使能带底部附近有少量电子, 因而在电场作用下, 这些电子将参与导电, 将这样底部有少量可参与导电的电子的能带称为导带; 同时, 满带中由于少了一些电子, 在满带顶部附近出现一些空的量子状态, 满带变成了近满带, 在外电场的作用下, 留在近满带中的电子也能起导电作用, 近满带电子的这种导电作用等效于把这些空的量子状态看作带正电荷的准粒子的导电作用, 通常称这些空的量子状态为空穴。通过下面的讨论我们能更清楚地了解空穴概念的由来和空穴的特点。

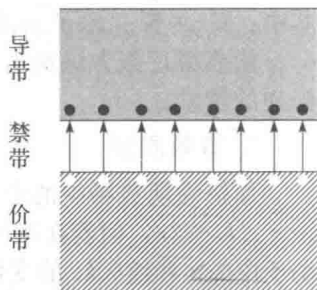


图 1-8 电子空穴对的产生

假设在近满带上只有一个波矢为 k_v 电子跃迁到导带中, 即我们研究的近满带是满带缺少一个电子形成的。令 $J(k_v)$ 表示整个近满带的总电流密度, 假想把一个电子放入近满带中使它成为满带, 这个电子所荷电流密度为 $J_e(k_v) = -ev(k_v)$, 则应有

$$J(k_v) + [-ev(k_v)] = 0 \quad (1-14)$$

即 $J(k_v) = ev(k_v)$, 表明近满带的总电流等同于一个带正电荷 e 、速度为 $v(k_v)$ 的粒子所引起的电流。我们就引入这样一个准粒子来描述近满带导电的情形, 称此粒子为空穴。显然, 空穴是正电荷, 它的电量为 e , 其波矢等于近满带带顶空缺状态的波矢。

在外场 E 的作用下, 波矢为 k_v 的电子的加速度为

$$a_e = \frac{d}{dt}v(k_v) = \frac{1}{m^*}F = \frac{1}{m^*}(-eE) = \frac{1}{-m^*}(eE) \quad (1-15)$$

其中: m^* 为能带顶电子的有效质量。

引入空穴的概念后, 把近满带带顶空缺的状态用空穴来表示, 则上式的加速度也可以认为是相应空穴的加速度, 即

$$a_h = a_e = \frac{1}{-m^*}(eE) \quad (1-16)$$

令 $m_h^* = -m^*$, 则有

$$a_h = \frac{1}{m_h^*}(eE) = \frac{F}{m_h^*} \quad (1-17)$$

这里 m_h^* 为空穴的有效质量。由于在能带顶 $m^* < 0$, 所以 $m_h^* > 0$, 故而空穴的有效质量是正值。

综上所述, 空穴是一种准粒子, 它代表的是近满带电子的集体运动状态, 一般位于价带的顶部。空穴的电量为正, 数值上等于电子电量; 空穴的有效质量也为正, 数值上等于价带顶电子的有效质量的绝对值。

在室温下, 半导体中的电子受热激发, 从价带顶跃迁到导带底。这样在导带底就有少量电子, 在价带顶就有少量空穴。在电场的作用下, 电子和空穴都参与导电, 它们被称为载流子。对于未掺杂的本征半导体, 导带中电子的数目和价带中的空穴的数目相等, 浓度很小。例如硅半导体中, 本征载流子浓度为 $7.8 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$; 锗半导体中, 本征载流子浓度为 $2.0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$; 砷化镓半导体中, 本征载流子浓度为 $2.6 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$ 。利用掺杂的方法可以显著地提高半导体中的载流子浓度, 例如在硅半导体中掺入三价硼或五价元素磷, 可以将其中的载流子浓度提高到 10^{19} cm^{-3} 数量级, 这极大地提高了半导体的导电性。

4. 硅和锗的能带结构

20 世纪 50 年代以后, 人们发展了许多实验方法和理论计算方法来确定半导体晶体的

能带结构,在揭示半导体能带结构的复杂性和多样性的同时,对各种半导体的能带结构取得了系统的认识。IV族元素硅和锗是最早得到广泛应用的半导体,特别是硅单晶制造技术的进步和硅器件优良的性能,使得硅技术发展成为包含数以亿计电子器件的大规模集成电路的最基础的技术。

由于硅和锗以及许多 III-V 族化合物晶体结构都属于面心立方结构,为了方便对能带结构的描述,这里先回顾面心立方结构的第一布里渊区,

如图 1-9 所示。布里渊区的中心在 Γ 点,即波矢 $k_v = \frac{2\pi}{a}(0\ 0\ 0)$ 。

三个最重要的高对称点的方向分别为 $[1\ 0\ 0]$ 方向的 X 点,波矢 $k_v = \frac{2\pi}{a}(1\ 0\ 0)$; $[1\ 1\ 0]$ 方向的 K 点,波矢 $k_v = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ 0\right)$; $[1\ 1\ 1]$ 方向的 L 点,波矢

$k_v = \frac{2\pi}{a}\left(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right)$ 。研究固体的能带结构通常是要表征在

布里渊区中心以及三个高对称轴方向上的色散关系 ($E-k_v$ 关系)。

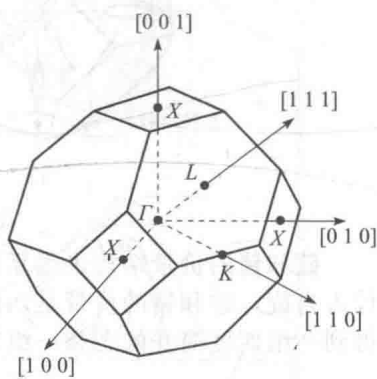


图 1-9 面心立方晶格的第一布里渊区

通过回旋共振实验和施主电子自旋实验得出,硅和锗的导带在布里渊区中心虽然都有极小值,但导带中最小的极小值却不在布里渊区中心 Γ 点,如图 1-10 所示,硅导带中的最小极值在空间 $[1\ 0\ 0]$ 方向上,与 Γ 点之间的距离约为 Γ 点到 X 点间距的 $5/6$,锗导带中的最小极值在空间 $[1\ 1\ 1]$ 方向上的 L 点处。通常把导带极小值附近的那部分能带称为能谷。由于晶格的对称性,硅导带共有 6 个等价的能谷,以每个能谷最低点为中心的等能面是旋转椭球面,如图 1-11a 所示,共有 6 个这样的旋转椭球面,旋转椭球面长轴沿 $[1\ 0\ 0]$ 方向,称为纵向,与之垂直的两个短轴长度相等,称为横向。锗导带上有 8 个最低等价点,有 8 个旋转椭球面,如图 1-11b 所示,不过每个椭球面只有一半位于第一布里渊区内,可以看出,其长轴沿着 $[1\ 1\ 1]$ 方向。硅和锗晶体中电子的纵向有效质量 m_{nl}^* 都大于横向有效质量 m_{nt}^* ,对于硅, $m_{nl}^* = 0.98m_0$, $m_{nt}^* = 0.19m_0$,对于锗, $m_{nl}^* = 1.64m_0$, $m_{nt}^* = 0.082m_0$,其中, m_0 为自由电子质量。

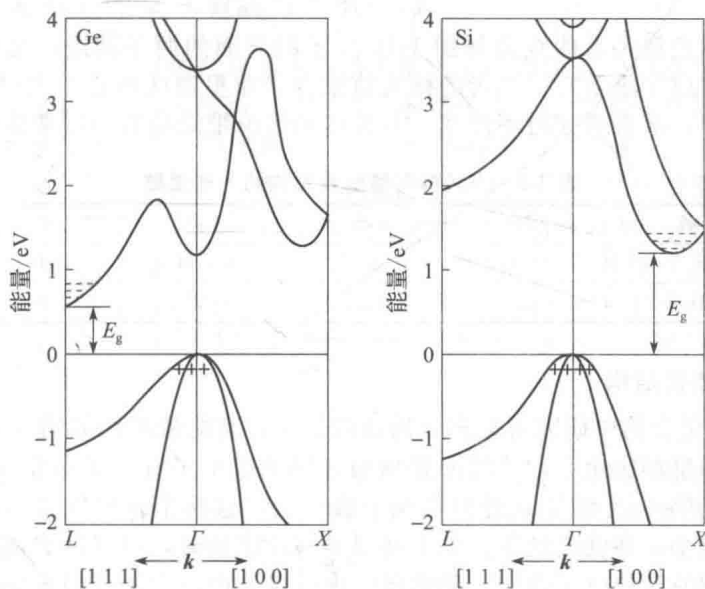


图 1-10 锗和硅的能带结构