



普通高等教育“十五”国家级规划教材



21世纪微电子学专业规划教材

2nd Edition

Fundamentals of
Silicon Integrated
Circuit Technology

硅集成电路工艺基础 (第二版)

关旭东 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

21世纪微电子学专业规划教材

普通高等教育“十五”国家级规划教材

硅集成电路工艺基础

(第二版)

Fundamentals of
Silicon Integrated
Circuit Technology

关旭东 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

内 容 提 要

本书系统地讲述了硅集成电路制造的基础工艺,重点放在工艺物理基础和基本原理上。全书共十一章,其中第一章简单地讲述了硅的晶体结构和非晶体结构及其特点,第二章到第九章分别讲述了硅集成电路制造中的基本单项工艺,包括氧化、扩散、离子注入、物理气相淀积、化学气相淀积、外延、光刻与刻蚀、金属化与多层互连,最后两章分别讲述的是工艺集成和薄膜晶体管的制装工艺。

本书可作为高等学校微电子专业本科生和研究生的教材或参考书,也可供从事集成电路制造的工艺技术人员阅读。

图书在版编目(CIP)数据

硅集成电路工艺基础/关旭东编著.—2 版.—北京:北京大学出版社,2014.4

(21 世纪微电子学专业规划教材)

ISBN 978-7-301-24109-7

I. 硅… II. 关… III. ①硅集成电路—高等学校—教材 IV. ①TN4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 068183 号

书 名: 硅集成电路工艺基础(第二版)

著作责任者: 关旭东 编著

责任 编辑: 王 华

标 准 书 号: ISBN 978-7-301-24109-7/TP · 1328

出 版 发 行: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区成府路 205 号 100871

网 址: <http://www.pup.cn> 新浪官方微博: @北京大学出版社

电 子 信 箱: zup@pup.cn

电 话: 邮购部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62765014 出版部 62754962

印 刷 者: 北京大学印刷厂

经 销 者: 新华书店

787 毫米×980 毫米 16 开本 25.5 印张 546 千字

2003 年 10 月第 1 版

2014 年 4 月第 2 版 2014 年 4 月第 1 次印刷

定 价: 52.00 元

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究

举报电话: 010-62752024 电子信箱: fd@pup.pku.edu.cn

第二版前言

《硅集成电路工艺基础》于2003年10月出版,至今已经10年。几年前在翻阅时,感到某些地方讲述得还不够清楚,再加上近些年来一些新工艺的出现以及薄膜晶体管在平板显示中的应用,还有其他一些原因促使我产生了对原书内容进行一些修订,增加一些新的内容的念头。但是,近几年来国内已经出版了很多包括编著和翻译的有关集成电路工艺方面的著作,积极性又下降了。最终还是在北京大学教材建设委员会和北京大学出版社的支持和鼓励下,决定对原书内容进行一定的修订并增加一些内容。单从目录上看,新增的内容并不是很多,实际上很多章节的内容,特别是对一些概念、机理、模型的讲述比第一版可能更加清楚些,更有利于学习。

在本书修订过程中,王漪博士、刘晓彦博士、杜刚博士参加了部分章节的修订工作;康晋峰博士、孙雷博士、韩德栋博士、刘力锋博士、刘翔博士以及魏莉老师和张维老师,在此书的修订过程中,都给予了非常多的帮助和关心,在此一并表示衷心的感谢;还要特别感谢校友包英群博士给予的支持和帮助。

感谢北京大学教材建设委员会和北京大学出版社。北京大学出版社的王华老师和其他工作人员对本书的出版付出了辛勤劳动,在此表示诚挚的谢意,如果没有上述各方面和各位的支持和关心,本书将很难完成修订。

由于作者水平有限,难免存在错误和不妥之处,诚请读者批评指正。

关旭东
2013年10月于北京大学

前　　言

《硅集成电路工艺基础》一书是为微电子专业本科生所编写的、内容涉及硅集成电路制造工艺的教材,也可作为从事集成电路研发和生产的科技人员的参考书。本书是根据作者多年教学经验并结合当今集成电路制造中新技术及新工艺编写而成的。全书取材兼顾了基础知识和集成电路工艺技术的最新发展,在以集成电路制造工艺的物理基础和基本原理作为重点的同时,还注重介绍最新发展起来的包括铜互连在内的多种新工艺、新技术。

本书系统讲述了硅集成电路制造中的单项工艺,内容主要包括硅的晶体结构、氧化、扩散、离子注入、物理气相淀积、化学气相淀积、外延、光刻与刻蚀、金属化与多层互连。最后介绍了CMOS集成电路、双极集成电路以及BiCMOS集成电路的工艺集成。此外,对新工艺、新技术、集成电路工艺技术的发展趋势以及新结构器件对集成电路制造工艺提出的新要求等方面也作了介绍。近年来,集成电路工艺技术的发展非常迅猛,日新月异,作为教科书不可能囊括全部的新工艺、新技术。本书在着重阐述集成电路工艺的基本原理的基础上,尽可能完整地介绍了集成电路工艺及其最新技术的各个方面。同时还兼顾了部分集成电路发展早期的工艺如蒸发。其目的是为了对集成电路工艺及其发展作一个比较全面的介绍。

集成电路发展至今已进入甚大规模(ULSI),但是大部分的单项工艺与集成电路的集成度没有直接的关系,而本书中介绍的工艺集成和金属化中的大部分内容则主要是面向ULSI的。

特别感谢武国英教授,武国英教授不辞辛苦审阅了全书,对原稿提出了很多宝贵的修改意见。孙雷博士、杜刚博士参予了本书部分章节的编写工作,并协助进行了文字整理工作。刘晓彦博士、杨胜齐博士、王漪博士在本书编写过程中给予了许多帮助。罗文哲博士和贾霖博士帮助收集了许多资料。赵宝瑛教授、张天义教授在本书的编写过程中也给予了支持和帮助。翟霞云、韩德栋、王文平、陈剑鸣、郭德超、苏明、周晓君、杨红、盖博、史小蒙、王志远等完成了许多文字和图表的处理工作。在此一并表示深深的谢意。

北京大学出版社的沈承凤老师和其他工作人员对本书的出版付出了辛勤劳动,作者也一并致谢。如果没有上面各位的支持和帮助,本书将很难完成。

由于集成电路工艺技术的发展非常迅速,加上作者的水平所限,书中难免还存在一些错误和不妥之处,诚请读者批评指正。

关旭东

2003年6月于北京大学

目 录

第一章 硅晶体和非晶体	(1)
1.1 硅的晶体结构	(1)
1.1.1 晶胞	(1)
1.1.2 原子密度	(2)
1.1.3 共价四面体	(2)
1.1.4 晶体内部的空隙	(3)
1.2 晶向、晶面和堆积模型.....	(3)
1.2.1 晶向	(3)
1.2.2 晶面	(5)
1.2.3 堆积模型	(7)
1.2.4 双层密排面	(9)
1.3 硅晶体中的缺陷	(9)
1.3.1 点缺陷	(9)
1.3.2 线缺陷	(11)
1.3.3 面缺陷	(13)
1.3.4 体缺陷	(13)
1.4 硅中的杂质.....	(13)
1.5 杂质在硅晶体中的溶解度.....	(16)
1.6 非晶硅结构和特性.....	(18)
1.6.1 非晶硅的结构	(19)
1.6.2 非晶网络模型	(20)
1.6.3 非晶态半导体的制备方法	(21)
1.6.4 非晶硅半导体中的缺陷	(21)
1.6.5 氢化非晶硅	(22)
1.6.6 非晶硅半导体中的掺杂效应	(23)
参考文献	(24)
第二章 氧化	(26)
2.1 SiO ₂ 的结构及性质	(27)
2.1.1 结构	(27)

2.1.2 SiO_2 的主要性质	(28)
2.2 SiO_2 的掩蔽作用	(29)
2.2.1 杂质在 SiO_2 中的存在形式	(29)
2.2.2 杂质在 SiO_2 中的扩散系数	(31)
2.2.3 掩蔽层厚度的确定	(31)
2.3 硅的热氧化生长动力学	(33)
2.3.1 硅的热氧化	(33)
2.3.2 热氧化生长动力学	(36)
2.3.3 热氧化 SiO_2 生长速率	(38)
2.4 决定氧化速率常数和影响氧化速率的各种因素	(39)
2.4.1 决定氧化速率常数的各种因素	(39)
2.4.2 影响氧化速率的其他因素	(41)
2.5 热氧化过程中的杂质再分布	(47)
2.5.1 杂质的再分布	(47)
2.5.2 再分布对硅表面杂质浓度的影响	(49)
2.6 初始氧化及薄氧化层的制备	(51)
2.6.1 快速初始氧化阶段	(51)
2.6.2 薄氧化层的制备	(54)
2.7 Si-SiO₂ 界面特性	(57)
2.7.1 可动离子电荷 Q_m	(57)
2.7.2 界面陷阱(捕获)电荷 Q_{it}	(59)
2.7.3 SiO_2 中固定正电荷 Q_f	(61)
2.7.4 氧化层陷阱电荷 Q_{ot}	(62)
参考文献	(63)
第三章 扩散	(67)
3.1 杂质扩散机制	(67)
3.1.1 间隙式扩散	(67)
3.1.2 替位式扩散	(68)
3.2 扩散系数与扩散方程	(70)
3.2.1 菲克第一定律	(70)
3.2.2 扩散系数	(70)
3.2.3 菲克第二定律(扩散方程)	(71)
3.3 扩散杂质的分布	(72)
3.3.1 恒定表面源扩散	(72)
3.3.2 有限表面源扩散	(74)

3.3.3 两步扩散	(76)
3.4 影响扩散杂质分布的其他因素	(76)
3.4.1 硅晶体中的点缺陷	(77)
3.4.2 扩散系数与杂质浓度的关系	(80)
3.4.3 氧化增强扩散	(82)
3.4.4 发射区推进效应	(84)
3.4.5 二维扩散	(85)
3.5 扩散工艺	(87)
3.5.1 固态源扩散	(87)
3.5.2 液态源扩散	(88)
3.5.3 气态源扩散	(89)
3.6 扩散工艺的发展	(90)
3.6.1 快速气相掺杂	(90)
3.6.2 气体浸没激光掺杂	(91)
参考文献	(92)
第四章 离子注入	(94)
4.1 核碰撞和电子碰撞	(95)
4.1.1 核阻止本领	(96)
4.1.2 电子阻止本领	(98)
4.1.3 射程粗略估算	(99)
4.2 注入离子在无定形靶中的分布	(100)
4.2.1 纵向分布	(100)
4.2.2 横向效应	(103)
4.2.3 沟道效应	(104)
4.2.4 浅结的形成	(106)
4.3 注入损伤	(107)
4.3.1 级联碰撞	(107)
4.3.2 简单晶格损伤	(109)
4.3.3 非晶区的形成	(110)
4.4 热退火	(111)
4.4.1 硅材料的热退火特性	(112)
4.4.2 硼的退火特性	(113)
4.4.3 磷的退火特性	(114)
4.4.4 热退火过程中的扩散效应	(115)
4.4.5 快速退火	(116)

参考文献	(117)
第五章 物理气相沉积	(120)
5.1 真空蒸镀法制备薄膜的基本原理	(120)
5.1.1 真空蒸镀设备	(121)
5.1.2 汽化热和蒸汽压	(122)
5.1.3 真空度与分子的平均自由程	(122)
5.1.4 蒸发速率	(123)
5.1.5 多组分薄膜的蒸镀方法	(123)
5.2 蒸发源	(124)
5.2.1 电阻加热蒸发源	(124)
5.2.2 电子束加热蒸发源	(125)
5.2.3 激光束加热蒸发源	(126)
5.2.4 高频感应加热蒸发源	(126)
5.3 气体辉光放电	(127)
5.3.1 直流辉光放电	(127)
5.3.2 辉光放电中的碰撞过程	(131)
5.3.3 射频辉光放电	(132)
5.4 溅射法制备薄膜的基本原理	(133)
5.4.1 溅射特性	(134)
5.4.2 溅射方法	(136)
5.4.3 接触孔中的薄膜淀积	(141)
5.4.4 长投准直溅射技术	(143)
参考文献	(143)
第六章 化学气相沉积	(144)
6.1 CVD 模型	(144)
6.1.1 CVD 的基本过程	(144)
6.1.2 边界层理论	(145)
6.1.3 Grove 模型	(147)
6.2 CVD 系统	(152)
6.2.1 CVD 的气态源	(152)
6.2.2 质量流量控制系统	(153)
6.2.3 CVD 的热源	(153)
6.2.4 CVD 的其他能源	(154)
6.2.5 CVD 的分类	(154)

6.3 CVD 多晶硅 ······	(159)
6.3.1 多晶硅薄膜的性质 ······	(159)
6.3.2 CVD 多晶硅 ······	(160)
6.3.3 淀积条件对多晶硅结构及淀积速率的影响 ······	(161)
6.3.4 多晶硅的掺杂工艺 ······	(162)
6.4 CVD 的 SiO ₂ ······	(163)
6.4.1 CVD SiO ₂ 的工艺 ······	(163)
6.4.2 CVD SiO ₂ 的台阶覆盖 ······	(167)
6.4.3 CVD 掺杂 SiO ₂ ······	(170)
6.5 CVD 氮化硅 ······	(172)
6.6 CVD 金属及硅化物薄膜 ······	(176)
6.6.1 CVD 钨 ······	(176)
6.6.2 CVD 硅化钨 ······	(180)
6.6.3 CVD TiN ······	(181)
6.6.4 CVD 铝 ······	(184)
参考文献 ······	(185)
第七章 外延 ······	(188)
7.1 硅气相外延的基本原理 ······	(189)
7.1.1 硅源 ······	(189)
7.1.2 外延层的生长模型 ······	(190)
7.1.3 化学反应 ······	(192)
7.1.4 生长速度与温度的关系 ······	(193)
7.1.5 生长速度与反应剂浓度的关系 ······	(195)
7.1.6 生长速度与气体流速的关系 ······	(196)
7.1.7 衬底晶向对生长速度的影响 ······	(196)
7.2 外延层中的杂质分布 ······	(196)
7.2.1 掺杂原理 ······	(197)
7.2.2 扩散效应 ······	(197)
7.2.3 自掺杂效应 ······	(199)
7.3 低压外延 ······	(201)
7.3.1 压力的影响 ······	(202)
7.3.2 温度的影响 ······	(202)
7.4 选择外延 ······	(202)
7.5 硅烷热分解法外延 ······	(205)
7.6 SOS 技术 ······	(206)

7.7 分子束外延	(207)
7.8 层错、图形漂移及利用层错法测量厚度	(210)
7.8.1 层错	(210)
7.8.2 层错法测量外延层的厚度	(211)
7.8.3 图形漂移和畸变	(212)
7.9 外延层电阻率的测量	(213)
参考文献	(215)
第八章 光刻工艺	(217)
8.1 光刻工艺流程	(218)
8.1.1 涂胶	(219)
8.1.2 前烘	(221)
8.1.3 曝光	(222)
8.1.4 显影	(222)
8.1.5 坚膜	(224)
8.1.6 刻(腐)蚀	(224)
8.1.7 去胶	(224)
8.2 分辨率	(225)
8.3 光刻胶的基本属性	(227)
8.3.1 对比度	(228)
8.3.2 光刻胶的膨胀	(231)
8.3.3 光敏度	(231)
8.3.4 抗刻(腐)蚀能力和热稳定性	(232)
8.3.5 粘附力	(232)
8.3.6 溶解度和粘滞度	(232)
8.3.7 微粒数量和金属含量	(232)
8.3.8 存储寿命	(233)
8.4 多层光刻胶工艺	(233)
8.4.1 光刻胶图形的硅化增强工艺	(233)
8.4.2 对比增强层工艺	(234)
8.4.3 硅烷基化光刻胶表面成像工艺	(235)
8.5 抗反射涂层工艺	(236)
8.5.1 驻波效应	(236)
8.5.2 底层抗反射层工艺	(237)
8.6 紫外线曝光	(238)
8.6.1 高压弧光灯	(238)

8.6.2	投影光源系统	(239)
8.6.3	准分子激光 DUV 光源	(239)
8.6.4	接近式曝光	(240)
8.6.5	接触式曝光	(242)
8.6.6	投影式曝光	(242)
8.6.7	离轴照明	(243)
8.6.8	扩大调焦范围曝光技术	(244)
8.6.9	化学增强的深紫外光刻胶	(245)
8.7	掩膜版的制造	(246)
8.7.1	石英玻璃基板	(246)
8.7.2	铬层	(246)
8.7.3	掩膜版的保护膜	(246)
8.7.4	相移掩膜	(247)
8.8	X 射线曝光	(248)
8.8.1	X 射线曝光系统	(248)
8.8.2	图形的畸变	(248)
8.8.3	X 射线源	(250)
8.8.4	X 射线曝光的掩膜版	(251)
8.8.5	X 射线曝光的光刻胶	(252)
8.9	电子束直写式曝光	(252)
8.9.1	邻近效应	(253)
8.9.2	电子束曝光系统	(254)
8.9.3	有限散射角投影式电子束曝光	(254)
8.10	光刻工艺对图形转移的要求	(255)
8.10.1	图形转移的保真度	(255)
8.10.2	选择比	(256)
8.10.3	均匀性	(256)
8.10.4	刻蚀的清洁	(256)
8.11	湿法腐蚀	(257)
8.11.1	Si 的湿法腐蚀	(257)
8.11.2	SiO ₂ 的湿法腐蚀	(258)
8.11.3	Si ₃ N ₄ 的湿法腐蚀	(258)
8.12	干法刻蚀	(259)
8.12.1	干法刻蚀原理	(259)
8.12.2	SiO ₂ 和 Si 的干法刻蚀	(260)

8.12.3	Si_3N_4 的干法刻蚀	(263)
8.12.4	多晶硅和金属硅化物的干法刻蚀	(264)
8.12.5	铝及铝合金的干法刻蚀	(265)
8.12.6	其他金属的干法刻蚀	(266)
8.13	干法刻蚀速率	(266)
8.13.1	离子能量和入射角	(266)
8.13.2	常用的刻蚀气体	(268)
8.13.3	气体流速	(269)
8.13.4	温度	(270)
8.13.5	压力、功率密度和频率	(270)
8.13.6	负载效应	(270)
	参考文献	(271)
第九章 金属化与多层互连		(275)
9.1	集成电路工艺对金属化材料特性的要求	(276)
9.1.1	金属材料的晶体结构及制备工艺对金属化的影响	(276)
9.1.2	金属化对材料电学特性的要求	(277)
9.1.3	金属化对材料的机械特性、热力学特性的要求	(277)
9.2	铝在集成电路工艺中的应用	(279)
9.2.1	铝薄膜的制备方法	(279)
9.2.2	Al-Si 接触中的几个物理现象	(279)
9.2.3	Al-Si 接触中的尖楔现象	(280)
9.2.4	Al-Si 接触的改进	(282)
9.2.5	电迁移现象及其改进方法	(285)
9.3	铜互连及低 K 介质	(287)
9.3.1	互连引线的延迟时间	(287)
9.3.2	Cu 互连的工艺流程	(288)
9.3.3	低 K 介质材料及淀积工艺	(289)
9.3.4	势垒层	(292)
9.3.5	金属 Cu 的淀积工艺	(293)
9.3.6	低 K 介质和 Cu 互连集成技术中的可靠性问题	(295)
9.4	多晶硅及硅化物	(296)
9.4.1	多晶硅栅技术	(296)
9.4.2	多晶硅薄膜的制备方法	(297)
9.4.3	多晶硅互连及其局限性	(298)
9.4.4	多晶硅氧化工艺	(299)

9.4.5 难熔金属硅化物及其应用	(301)
9.4.6 硅化物的制备方法	(301)
9.4.7 硅化物的形成机制	(302)
9.4.8 硅化物的结构	(303)
9.4.9 硅化物的电导率	(303)
9.4.10 硅化物的氧化工艺	(305)
9.4.11 硅化物肖特基势垒	(306)
9.4.12 多晶硅/硅化物复合栅结构	(306)
9.5 集成电路中的多层互连	(307)
9.5.1 多层金属互连技术的意义	(308)
9.5.2 多层金属互连技术对材料的要求	(310)
9.5.3 多层互连的工艺流程	(311)
9.5.4 平坦化	(312)
9.5.5 CMP 工艺	(314)
9.5.6 接触孔及通孔的形成和填充	(318)
参考文献	(320)
第十章 工艺集成	(323)
10.1 集成电路中的隔离	(323)
10.1.1 MOS 集成电路中的隔离	(323)
10.1.2 双极集成电路中的隔离	(327)
10.2 CMOS 集成电路的工艺集成	(328)
10.2.1 CMOS 集成电路工艺的发展	(328)
10.2.2 CMOS 工艺中的基本模块及对器件性能的影响	(330)
10.2.3 双阱 CMOS IC 工艺流程	(336)
10.2.4 纳米尺度 CMOS IC 新工艺	(340)
10.3 双极集成电路的工艺集成	(344)
10.3.1 双极集成电路工艺的发展	(344)
10.3.2 标准埋层双极集成电路工艺流程(SBC)	(344)
10.3.3 其他先进的双极集成电路工艺	(347)
参考文献	(349)
第十一章 薄膜晶体管制造工艺	(352)
11.1 TFT 结构	(355)
11.1.1 TFT 基本结构	(355)
11.1.2 a-Si: H TFT 的基本结构	(356)
11.1.3 LTPS TFT 的基本结构	(358)

11.2 a-Si:H 薄膜和 LTPS 薄膜的制备工艺	(361)
11.2.1 a-Si:H 薄膜的制备工艺	(361)
11.2.2 LTPS 薄膜的制备工艺	(362)
11.3 非晶硅 TFT 制造工艺	(367)
11.4 低温多晶硅 TFT 制造工艺	(372)
参考文献	(381)
附录	(384)
附录 1 常用金属元素材料及其电学特性	(384)
附录 2 金属硅化物、金属合金的电学特性	(384)
附录 3 常用的金属材料和合金的晶格结构参数	(385)
附录 4 半导体材料的晶格结构参数	(386)
附录 5 金属材料薄膜在硅衬底上的晶格常数失配因子	(386)
附录 6 常用的半导体和绝缘介质的电学特性	(387)
附录 7 铝、铜、金合金电阻率随杂质原子数比的变化率	(388)
附录 8 物理常数	(389)
附录 9 部分常用材料的性质	(390)
附录 10 硅片鉴别方法(SEMI 标准)	(391)

第一章 硅晶体和非晶体

自然界中的固态物质，简称为固体，可分为晶体和非晶体两大类，晶体类包括单晶体和多晶体。晶体和非晶体在物理性质、内部结构等方面都存在着明显的差别。

集成电路和各种半导体器件制造中所用的材料，主要是硅、锗和砷化镓等单晶体，其中又以硅为最多。硅器件占世界上出售的所有半导体器件的 90% 以上。目前由于平板显示的发展，非晶硅薄膜晶体管和多晶硅薄膜晶体管在有源显示中已经得到了重要的应用。所以本章不但讲述硅晶体的有关特点，同时也讲述一些非晶硅的相关内容^[1]。关于多晶硅的结构特点和相关内容将在第六章中讲述。

1.1 硅的晶体结构

1.1.1 晶胞

晶体的重要特点是组成晶体的原子、分子、离子是按一定规则周期排列着。任一晶体都可以看成是由质点（原子、分子、离子）在三维空间中按一定规则作周期重复性排列所构成的。晶体的这种周期性结构称为晶体格子，简称为晶格。立方晶系的简单立方、体心立方和面心立方晶格如图 1.1 所示。如果整个晶体是由单一的晶格连续组成，就称这种晶体为单晶体。如果一个晶体是由相同结构的很多小晶粒无规则地堆积而成，称为多晶体。

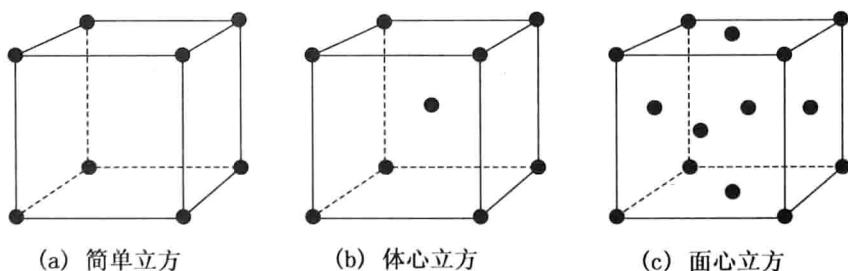


图 1.1 三种立方晶体原胞

图 1.2 示意地表示硅晶体中原子排列情况。图中的立方体是反映硅晶体中原子排列基本特点的一个单元，整个晶体可以看成是由这个单元，沿立方体三个边的方向周期重复排列构成。这个单元不是最小的周期性重复单元，但是它能反映出晶体结构的立方对称性，因而在讨论晶体结构中常被采用。这种能够最大限度地反映晶体对称性质的最小单元，称为晶胞，图 1.2 所示的就是硅的晶胞。

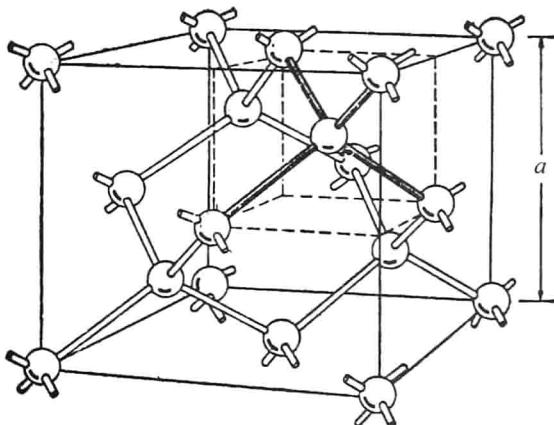


图 1.2 金刚石结构的立方晶胞

在图 1.1 所示的面心立方单元中心到顶角引八条对角线, 在其中不相邻的四条中点各加一个原子, 所得到的就是硅的晶胞结构, 由这个晶胞所表示的晶格称为金刚石结构。金刚石、硅、锗具有相同的晶格结构, 但它们的晶胞边长 a 不同。通过 x 射线结构分析, 已确定在 300 K 时, 硅的晶格常数 $a=5.4305\text{\AA}$, 锗的晶格常数 $a=5.6463\text{\AA}$ 。

1.1.2 原子密度

知道了晶格常数, 就可以计算出硅晶体中的原子密度。先由图 1.2 所示的立方体来分析一下每个晶胞中所含的原子数。因为晶格中相邻的晶胞都是邻面重合的, 因此, 顶角上虽然共有 8 个原子, 但每个原子都是属于 8 个晶胞所有。面心上共有 6 个原子, 但每个原子都是属于 2 个晶胞所有。只有位于内部对角线上的 4 个原子不在邻面上, 完全属于该晶胞所有。所以实际上每个晶胞所含的原子数是 8。晶胞体积为 a^3 , 每个原子所占的空间体积就为 $a^3/8$, 所以硅晶体中的原子密度就为 $8/a^3=5\times10^{22}/\text{cm}^3$ 。对锗晶体来说, 其原子密度为 $4.42\times10^{22}/\text{cm}^3$ 。

1.1.3 共价四面体

由图 1.2 还可以看出, 处在立方体顶角和面心的原子, 它们构成一套面心立方格子, 处在体对角线上的原子也构成一套面心立方格子。因此可以认为硅晶体是由两套面心立方格子沿体对角线位移四分之一长度套构而成的。

硅晶体虽然是由同一种化学元素硅组成, 但其晶格原子所处的环境并不相同, 在几何位置上是不等价的。仔细考查一下图 1.2 就会发现, 两套面心立方格子的原子, 它们近邻都有 4 个原子, 这 4 个原子在空间的取向方位, 对同一套面心立方上的原子是相同的, 而对于不同套面心立方则是不同的。这说明硅晶体的晶格为复式晶格, 因为晶格中有两种不等价原子。

在硅晶体中虽然不等价原子的环境不完全相同, 但任一原子都有 4 个最近邻的原子, 它