

半导体物理基础

[日] 白藤纯嗣 著

黄振岗 王茂增 译

郭永江 校

高等教育出版社



半导体物理基础

[日] 白藤纯嗣 著
黄振岗 王茂增 译
郭永江 校

高等教育出版社

本书译自日本大阪大学白藤纯嗣著《半导体电子工学》，书中把为学习半导体物理学所必备的固体物理学知识和半导体物理学各方面的基本知识编在一起，写法较新，并引了许多新的文献资料，内容较丰富。主要包括：晶体和固体的结合；晶格振动；经典电子论；固体能带与半导体；半导体电子统计和电导；过剩载流子和复合； pn 结和金属-半导体接触；半导体表面物理；半导体的光学性质；强场效应和微波振荡器件。并附有习题及提示与解答。

本书可供理工科大学相应专业的大学生、研究生和教师作教学参考书，亦可供有关科技人员参考。

半导体物理基础

〔日〕白藤纯嗣 著

黄振岗 王茂增 译

郭永江 校

*

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

北京印刷三厂印装

*

开本 850×1168 1/32 印张 12.125 字数 280,000

1982年12月第1版 1983年12月第1次印刷

印数 00,001—8,660

书号 13010·0843 定价 1.85 元

译 者 序

日本大阪大学副教授白藤纯嗣在他编著的“半导体电子工学”一书中把为学习半导体物理所必备的固体物理知识和半导体物理各方面的基础知识编在一起,写法颇为新颖。本书内容丰富,没有过于繁杂的数学推导,适合作理工科大学半导体专业教学参考书,也可供高年级学生、研究生和有关工程技术人员阅读。本书除了介绍一般半导体物理教科书中常见的内容外,对半导体的光学性质还作了重点阐述。在别的书中很少提到的一些内容,在本书中也给予了一定的篇幅,如作为各种新型器件的物理基础——异质结物理、表面和界面物理、电荷转移器件物理、超声波放大原理——在有关章节中给予适当说明,使得研究和生产这方面器件的工程技术人员能用较少的时间掌握其要领。

为了更符合本书的实际和我国的习惯,经再三斟酌,我们把书名译成“半导体物理基础”。序言和第一、五、六、八、九章由黄振岗翻译,第二、三、四、七、十章由王茂增翻译,全书由郭永江先生校阅。

译者因水平所限,译文中一定有许多错误和欠妥之处,恳请读者指正。

译 者

1982. 7. 14.

序 言

近年来半导体工艺学的进展是非常引人注目的。1948年当贝尔研究所的科学家偶然发现晶体管作用时，恐怕任何人都不可能预料到今天的繁荣局面。然而，我们如果回顾这一时期半导体技术的发展史便会明白，这是物理学和工艺学、基础研究和应用研究、或者是半导体物理性质的研究和半导体器件的研制各方面成绩的紧密结合而得到的必然结果。

在本世纪二十年代，以当时蓬勃发展的量子力学为背景，以能带理论为基础，半导体物理学取得了进展，使人们逐渐弄清了半导体内的元激发过程，也相继研究出区域提纯法，气相与液相低温生长法等获取高纯半导体单晶的方法。这些高纯单晶生长方法，既为半导体物理实验提供了高质量的样品，也大大推动了半导体器件的实际应用。

人们用各种手段弄清了大块晶体内以能带描述的电子结构以后，大大有助于理解作为半导体器件工作基础的各种物理过程，包括空穴的概念、少数载流子的复合、光跃迁和 pn 结等。另外，人们还清楚地知道，适合制造激光二极管和耿氏效应器件的那些材料同它们的能带结构有直接的关系，因此，能带理论的实际意义就再也不容怀疑了。近年来，利用半导体表面或界面现象的器件日益增多，计有金属-氧化物-半导体(MOS)晶体管、电荷耦合器件(CD)、金属-绝缘体-半导体非易失性存储器、异质结等；即便对双极集成电路而言，随着其集成度的提高，单个器件的尺寸也在不断缩短，晶体管效应只不过发生在距晶体表面约几微米的区域。此外，由杂质和晶格缺陷引起的深能级与器件的成品率和退化机构

密切相关, 阐明这些深能级的性质也是重要的研究课题. 对于表面、界面和晶格不完整性等晶格周期性遭到破坏的地方, 能带理论已经无能为力, 而必须用化学键理论加以处理. 在集成电路的制造工艺中, 氧化膜和氮化膜的形成, 光刻胶膜的曝光和显影以及干法腐蚀等过程中所发生的各种现象都属于化学反应, 而这些反应的结果使微细加工的精度受到限制, 由此可见, 半导体技术中化学的重要性也是不容忽视的. 可是, 就现状而言, 按化学键理论来解释这些问题还不够圆满, 尚有待于今后在理论和实验两方面作进一步的研究.

本书的大部分章节都是依据能带理论来阐述半导体物理学的基础知识的, 然而鉴于化学键理论的重要性, 在讨论到同共价键、表面现象和深能级等有密切联系的问题时, 我们也依据化学键理论简单地加以说明. 但是, 因为有很多问题目前尚无定论, 对这些问题的说明不一定是结论性的意见. 此外, 本书的内容仅限于半导体电子学的基本领域, 比如说, 关于晶体管就只讨论了 pn 结和表面场效应, 而没有讨论结型晶体管和场效应晶体管. 因本书篇幅有限, 非晶态半导体方面的内容不得不割爱了, 另外, 书中对有些段落的讨论也不得不十分简略, 读者可根据需要参考引用的文献和书末列出的参考书.

本书适合于掌握了量子力学和统计物理初步知识的有关各系高年级学生以及大学研究院的初年级学生阅读, 对于企业中从事半导体研究或工艺工作的研究人员和技术人员, 本书如能起到使认识深化或者获得新知识的作用, 笔者将感到由衷的喜悦.

白藤纯嗣

1979 年 1 月

目 录

第一章 晶体和固体的结合

§ 1.1	空间点阵和晶系	1
§ 1.2	倒格子	7
§ 1.3	晶体衍射	9
1.3.1	劳厄方程	10
1.3.2	原子散射因子和结构因子	12
§ 1.4	晶体结合	14
1.4.1	离子晶体	15
1.4.2	金属晶体	16
1.4.3	共价晶体	17
1.4.4	分子晶体	20
§ 1.5	晶体的对称性和物理量	21
§ 1.6	晶格缺陷	23
1.6.1	点缺陷	23
1.6.2	位错和堆垛层错	26
§ 1.7	原子的扩散	28
附录 A1	赫曼-摩干符号和熊夫利斯符号	30
附录 A2	对称操作的矩阵表示	32

第二章 晶格振动

§ 2.1	连续体的弹性振动	34
§ 2.2	一维晶格的振动	35
2.2.1	一维单原子晶格的振动	36
2.2.2	一维双原子晶格的振动	38
§ 2.3	三维晶格的振动	40
§ 2.4	晶格比热	46
2.4.1	爱因斯坦比热	47
2.4.2	德拜比热	48

§ 2.5 晶格振动的非简谐性质及热传导, 热膨胀	51
2.5.1 热传导	51
2.5.2 热膨胀	54
附录 A3 晶格振动的量子化	55
第三章 经典电子论	
§ 3.1 自由电子模型	59
§ 3.2 电导率和霍耳效应	61
§ 3.3 玻耳兹曼输运方程	63
§ 3.4 电子比热	68
第四章 固体能带论与半导体	
§ 4.1 布洛赫定理	72
§ 4.2 近自由电子近似	75
§ 4.3 紧束缚电子近似	79
§ 4.4 布里渊区	83
§ 4.5 晶体动量和有效质量	88
§ 4.6 金属、半导体及绝缘体	91
§ 4.7 空穴	93
§ 4.8 半导体的能带结构和回旋共振	94
4.8.1 $k \cdot p$ 微扰法	95
4.8.2 回旋共振和有效质量	102
§ 4.9 杂质中心	108
4.9.1 施主与受主	108
4.9.2 有效质量近似	111
4.9.3 等电子陷阱	115
4.9.4 杂质带和莫特转变	116
4.9.5 深能级	118
第五章 半导体电子统计和电导	
§ 5.1 半导体电子统计	121
5.1.1 本征半导体	121
5.1.2 杂质半导体	123
§ 5.2 迁移率和散射机构	126
5.2.1 声学声子散射(形变势散射)	127

5.2.2	极性光学声子散射	132
5.2.3	电离杂质散射	136
§ 5.3	霍耳效应与磁阻效应	139
5.3.1	霍耳效应	139
5.3.2	磁阻效应	141
§ 5.4	热电子	144
§ 5.5	超声波放大	150
附录 A4	杂质能级的量子统计	153
第六章 过剩载流子和复合		
§ 6.1	过剩载流子和连续方程	156
§ 6.2	准费米能级	159
§ 6.3	复合过程	160
6.3.1	带间辐射直接复合	160
6.3.2	通过复合中心的复合	165
6.3.3	带间俄歇复合	170
§ 6.4	表面复合	173
§ 6.5	漂移迁移率	175
第七章 pn 结和金属-半导体接触		
§ 7.1	pn 结	180
§ 7.2	过渡区的电势分布和结电容	182
7.2.1	电势分布	182
7.2.2	结电容	184
§ 7.3	pn 结的电流-电压特性	186
§ 7.4	pn 结的击穿现象	194
7.4.1	碰撞电离和雪崩击穿	195
7.4.2	带间隧道效应和齐纳击穿	201
§ 7.5	隧道 pn 结	203
7.5.1	简并半导体	203
7.5.2	隧道结	204
§ 7.6	异质结	207
7.6.1	晶格匹配	208
7.6.2	通过界面态的复合	211
7.6.3	能带图和电流-电压特性	212

§ 7.7 金属-半导体接触·····	217
7.7.1 理想的金属-半导体接触·····	217
7.7.2 肖特基势垒高度和表面态·····	219
7.7.3 肖特基势垒的电学特性·····	221

第八章 半导体表面物理

§ 8.1 表面态·····	226
§ 8.2 表面电荷和表面场效应·····	230
§ 8.3 MIS 结构·····	238
§ 8.4 表面反型层中的电子导电·····	241
§ 8.5 MIS 结构的存储效应·····	246
§ 8.6 表面电荷的转移和电荷耦合器件·····	248
§ 8.7 光电发射·····	251

第九章 半导体的光学性质

§ 9.1 唯象理论·····	258
§ 9.2 自由载流子和晶格振动光吸收与色散关系·····	262
9.2.1 自由载流子吸收和等离子体反射·····	263
9.2.2 晶格振动光吸收和色散关系·····	265
§ 9.3 带间光吸收·····	267
9.3.1 直接跃迁·····	267
9.3.2 间接跃迁·····	274
9.3.3 乌尔巴赫(Urbach)定律·····	280
§ 9.4 激子·····	282
9.4.1 瓦尼尔-莫特激子·····	283
9.4.2 束缚激子·····	286
§ 9.5 内光电效应·····	288
9.5.1 光电导·····	289
9.5.2 光生伏打效应·····	290
§ 9.6 发光和结型激光器·····	295
9.6.1 发光·····	296
9.6.2 感应发射和半导体激光器·····	299
§ 9.7 朗道能级和磁光效应·····	302
9.7.1 朗道能级·····	302
9.7.2 磁光吸收·····	305

§ 9.8 夫兰兹-凯尔迪什效应与调制光谱学	308
附录 A5 克喇末-克朗尼格关系	311
第十章 强场效应和微波振荡器件	
§ 10.1 电子的谷间转移和负阻	315
§ 10.2 电压控制型负阻及电流振荡	318
§ 10.3 电子雪崩、渡越时间效应产生的相位延迟和负阻	324
§ 10.4 里德二极管和崩越二极管	326
习题	330
习题提示与解答	337
参考文献	351
参考书	359
索引	367

第一章 晶体和固体的结合

§ 1.1 空间点阵和晶系

晶体是由原子或分子在空间规则地排列而构成的。天然水晶和萤石呈现以平面围成的独特外观, 就是因为它们是晶体。

由基矢 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ 的线性组合

$$\mathbf{l} = p\mathbf{a} + q\mathbf{b} + s\mathbf{c} \quad (p, q, s \text{ 为整数}) \quad (1-1)$$

所规定的各点在空间的排列称为空间点阵, 简称点阵或晶格, 晶格中的上述各点称为格点。以基矢 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ 为三个棱、而由 $\mathbf{l}_0 = \mathbf{a} + \mathbf{b} + \mathbf{c}$ 决定的格点为对角点的平行六面体称为元胞或初基胞。空间点阵是由元胞堆积而成的, 整个空间点阵具有下述对称性。

i) 平移对称 如格点平移一个矢量 $\mathbf{l}$, 它必然与另一格点重合。因此, 晶体内与晶格一样也具有平移对称性的那些空间函数 $f(\mathbf{r})$, 比如说静电势, 应在平移一个格矢 $\mathbf{l}$ 后保持不变, 即满足式 $f(\mathbf{r} + \mathbf{l}) = f(\mathbf{r})$ 。今考虑周期为 a 的一维晶格, 则可将周期函数 $f(x + a) = f(x)$ 展开成傅里叶级数

$$f(x) = \sum_n A_n \exp(2\pi i n x / a) \quad (1-2)$$

式中, n 为整数。若引入

$$G = \frac{2\pi}{a} n \quad (1-3)$$

则式(1-2)变为

$$f(x) = \sum_G A_G \exp(i G x) \quad (1-4)$$

对于所有的平移 $\mathbf{l}$, 从式(1-4)可直接得到 $\exp(i G \mathbf{l}) = 1$ 。不难把

式(1-4)推广到三维情形, 我们得到

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{G_x, G_y, G_z} A(G_x, G_y, G_z) \exp[i(G_x x + G_y y + G_z z)] \quad (1-5)$$

如引入一个满足 $\exp(i\mathbf{G}\mathbf{l}) = 1$ 的矢量 $\mathbf{G}$, 则式(1-5)可写为

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} A_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad (1-6)$$

矢量 $\mathbf{G}$ 通常称为倒格矢, 若用晶格的基矢 $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}$ 来表示, 倒格子的基矢 $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}$ 可定义为

$$\mathbf{A} = 2\pi \frac{\mathbf{b} \times \mathbf{c}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{B} = 2\pi \frac{\mathbf{c} \times \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}}, \quad \mathbf{C} = 2\pi \frac{\mathbf{a} \times \mathbf{b}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \times \mathbf{c}} \quad (1-7)$$

设 h, k, l 为整数, 则倒格矢 $\mathbf{G}$ 为

$$\mathbf{G} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C} \quad (1-8)$$

由此不难证明 $\mathbf{G}\mathbf{l} = 2\pi \times (\text{整数})$, 因而满足 $\exp(i\mathbf{G}\mathbf{l}) = 1$. 可见在具有平移对称性的情形下, 可将周期性空间函数按照式(1-6)用倒格矢 $\mathbf{G}$ 展开.

ii) n 重旋转轴 1, 2, 3, 4, 6 或 C_n 晶体绕某根轴旋转 $2\pi/n$ ($n=1, 2, 3, 4, 6$) 或其整数倍角度后能够自身重合. 不存在 $n=5, 7, 8, \dots$ 的旋转轴.

iii) 镜面映射 m 或 $\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$ 这是晶体对于某个平面的对称性, 例如, 对于 xy 面的镜面映射是将点 (x, y, z) 移至 $(x, y, -z)$.

iv) 反演 $\bar{1}$ 或 i 这是将格矢由 $\mathbf{l}$ 变为 $-\mathbf{l}$ 的操作, 等效于 2 重旋转轴和镜面映射的组合.

v) n 重旋转反演轴 $\bar{n}$ 或 S_n 这是 n 重旋转轴与反演组合而成的对称操作, 有 1, 2, 3, 4, 6 重旋转反演轴, 其中 1 重旋转反演轴等效于反演, 2 重旋转反演轴等效于镜面映射, 而 3 重旋转反演轴是 3 重旋转轴与反演的组合, 6 重旋转反演轴是 3 重旋转轴与镜面映射的组合. 因此, 只有 4 重旋转反演轴才是独立的旋转反演轴.

满足平移对称性的空间点阵有 14 种, 这些空间点阵的元胞按照对称性, 可分为 7 类. 在图 1.1 中将 14 种布喇菲格子分成 7 个晶系. 若采用赫曼-摩干符号, 上述对称操作中除平移操作外, 独立的操作只有如下 8 种:

$$1, 2, 3, 4, 6 (n \text{ 重旋转轴}) \quad (1-9)$$

$$\bar{1} (\text{反演}), m = \bar{2} (\text{镜面映射}), \bar{4} (4 \text{ 重旋转反演轴})$$

这些独立操作组合起来所构成的群称为点群, 已查明可能的点群有 32 种. 表 1.1 中用赫曼-摩干符号和熊夫利斯符号表示出属于 7 个晶系的点群*. 图 1.1 所示布喇菲格子的元胞中也有含

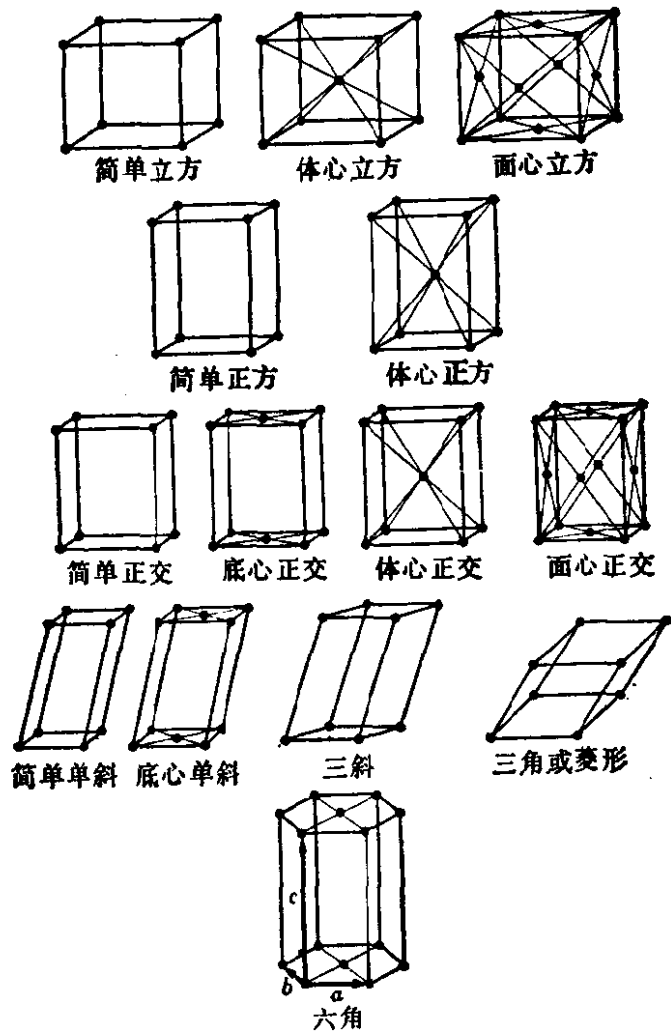
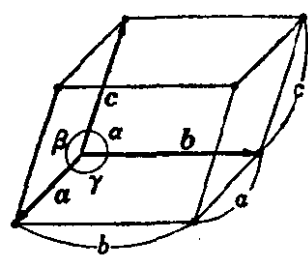


图 1.1 布喇菲格子

* 这些符号的意义请参看附录 A1.

表 1.1 7 个晶系, 14 种布喇菲格子和 32 种点群



晶系	布喇菲格子	主要对称素	点群
立方晶系 $a=b=c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单, 体心, 面心	4 根 3 重旋转轴	T, T_h, T_d, O, O_h $23, \frac{2}{m}\bar{3}, \bar{4}3m, 432, \frac{4}{m}\bar{3}2$
正方晶系 $a=b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单, 体心	1 根 4 重旋转轴或 1 根 4 重旋转反演轴	C_4, C_{4h}, C_{4v}, S_4 $4, \frac{4}{m}, 4mm, \bar{4}$ D_{2d}, D_4, D_{4h} $\bar{4}2m, 422, \frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
正交晶系 $a\neq b\neq c$ $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	简单, 底心, 体心, 面心	3 根互相垂直的 2 重旋转轴	D_2, D_{2v}, D_{2h} $222, 2mm, \frac{2}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$
单斜晶系 $a\neq b\neq c$ $\alpha=\beta=90^\circ\neq\gamma$	简单, 底心	1 根 2 重旋转轴	C_2, C_s, C_{2h} $2, m, \frac{2}{m}$
三斜晶系 $a\neq b\neq c$ $\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90^\circ$	简单	无	C_1, C_i $1, \bar{1}$
三角晶系 $a=b=c$ $\alpha\neq\beta\neq\gamma\neq90^\circ$	简单	1 根 3 重旋转轴	$C_3, C_{3v}, S_6, D_3, D_{3d}$ $3, 3mm, \bar{6}, 322, \bar{3}\frac{2}{m}$
六角晶系 $a=b\neq c$ $\alpha=120^\circ, \beta=\gamma=90^\circ$	简单	1 根 6 重旋转轴	$C_6, C_{6h}, C_{6v}, C_{3h}, D_6$ $6, \frac{6}{m}, 6mm, \frac{3}{m}, 622$ D_{3h}, D_{3d} $\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}, \bar{6}2m$

两个以上格点的元胞,但是,例如对于面心立方或体心立方晶格,如象图 1.2 那样选取基矢,也可得到初基胞。然而,对考察晶格对称性来说,这样做是不合适的,通常要选取能直接显示出晶体电学和光学性质的各向异性的布喇菲格子作为元胞。

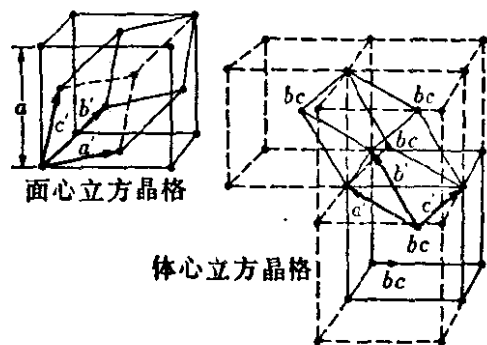


图 1.2 面心立方晶格和体心立方晶格的初基胞。bc 表示位于体心处的格点。

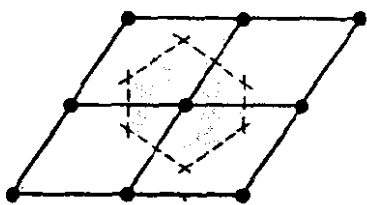
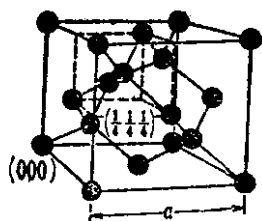


图 1.3 二维正交晶格的维格纳-赛茨元胞

将一个格点与其最近邻格点和次近邻格点用直线连接起来,然后作这些直线的垂直平分面,这些垂直平分面所围成的多面体也是只包含中心处一个格点的初基胞。这种多面体是一种元胞,特别称为维格纳-赛茨元胞。图 1.3 中示出了二维正交晶格的维格纳-赛茨元胞。

实际晶体并不是在布喇菲格子各格点处排列同一种原子而构成的,通常,在布喇菲格子各格点处排列着由若干个原子所组成的结构单元。在 IV 族元素半导体中,各原子靠共价键聚集在一起,形成晶体,而价电子轨道是电子对键的方向由正四面体中心指向四个顶角的 sp^3 杂化轨道,所以晶体具有**金刚石结构**。图 1.4(a)表示出金刚石结构。碳(金刚石),硅,锗的晶体都具有这种结构。GaAs, GaP, InP, InSb 等 III-V 族化合物及 CdTe, ZnTe 等 II-VI 族化合物具有**闪锌矿结构**,这种结构是在金刚石结构的各格点上交替排列两种原子而成[图 1.4(b)]。金刚石结构是在面心立方格点处排列两个同种原子(在闪锌矿结构中则排列两个异种原子)而



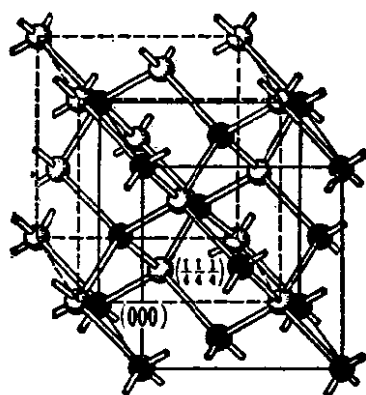
(a) 金刚石结构

●: C, Si, Ge

在格点(000), $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$ 上排

列两个同种原子作为结构单元

的面心立方晶格



(b) 闪锌矿结构

●: Ga 或 As

○: As 或 Ga

在格点(000), $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4})$ 上排列

两个异种原子作为结构单元的

面心立方晶格

图 1.4 金刚石结构和闪锌矿结构

成。如果换一种看法, 可以认为金刚石结构是两个面心立方晶格沿体对角线方向错开四分之一体对角线长度套嵌成的一种结构。

离子性强的半导体, 如 CdS, ZnS, GaN 等, 其结构由正四面体排列演变为六角晶系的纤锌矿结构, 如图 1.5(b) 所示。对于金刚石、闪锌矿和纤锌矿结构, 配位数为 4, 每个原子与其周围的 4 个原子以共价键结合起来, 然而对于离子键起主导作用的离子晶体, 则取配位数为 6 的 NaCl 型(面心立方)结构或配位数为 8 的 CsCl 型(体心立方)结构。

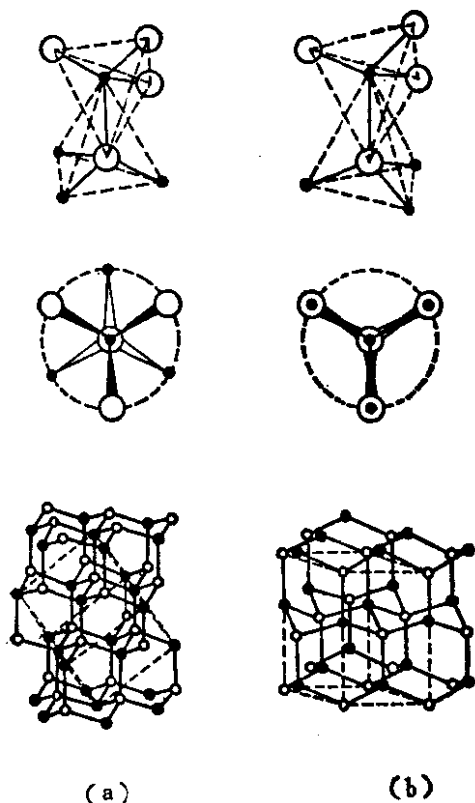


图 1.5 闪锌矿结构(a)和纤锌矿结构(b)