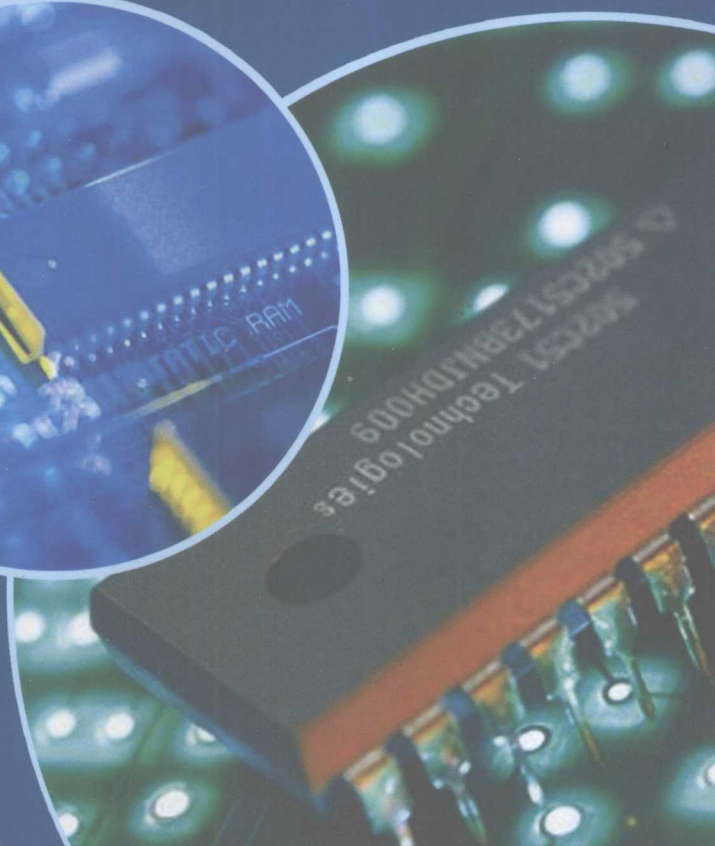
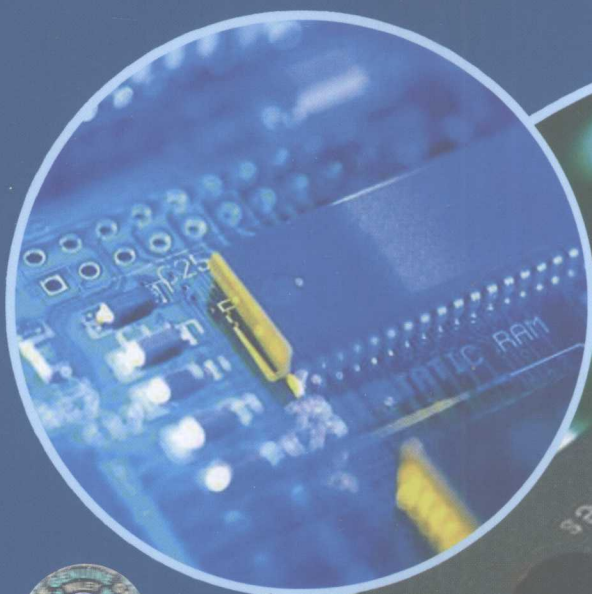


IV族、III-V族和II-VI族 半导体材料的特性

Properties of Group-IV,
III-V and II-VI Semiconductors

〔日〕 Sadao Adachi 著

季振国 等 译



科学出版社
www.sciencep.com

IV 族、III-V 族和 II-VI 族 半导体材料的特性

Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors

〔日〕 Sadao Adachi 著

科学出版社

北 京

图字: 01-2008-5910 号

内 容 简 介

以硅为基础的微电子技术在信息技术中仍占据着重要的地位,但是 III-V 族化合物和 IV-V 族化合物半导体材料因具有高的载流子迁移率和大禁带宽度而在发光器件、高速器件、高温器件、高频器件、大功率器件等方面得到越来越广泛的应用。可以预见,光电集成或光子器件所用的材料将大量采用 III-V 族化合物和 IV-V 族化合物半导体材料。然而目前除了 IV 族的 Si 材料外,其他半导体材料的数据资料比较零乱,缺少一本把这些材料的特性参数汇集到一起的专著。

本书对常见半导体材料的晶体结构、热学特性、机械特性、晶格动力学特性、电子能带结构、光学特性、载流子输运特性、压电特性以及光电效应等特性进行了比较全面的描述,并提供了大量的图表以及具体数据。

本书可以在作为相关领域材料和器件工程师的参考资料,也可以作为从事半导体材料、半导体器件与物理、半导体材料生长等相关领域教学和研究工作的教师和学生参考。

Copyright © 2005 John Wiley & Sons Ltd

版权所有。译本经授权译自威利出版的英文版图书

All Rights Reserved. Authorized Translation from the English Language edition published by John Wiley & Sons Ltd

图书在版编目(CIP)数据

IV 族、III-V 族和 II-VI 族半导体材料的特性/(日)Sadao Adachi 著;季振国等译. —北京:科学出版社,2009

ISBN 978-7-03-025095-7

I. IV… II. ①A…②季… III. 半导体材料-特性 IV. TN304

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 128814 号

责任编辑:姚庆爽/责任校对:钟 洋

责任印制:赵 博/封面设计:耕者设计工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双青印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2009 年 7 月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2009 年 7 月第一次印刷 印张: 23 1/4

印数: 1—2 500 字数: 468 000

定价: 68.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换<长虹>)

译者前言

长久以来，硅材料在电子器件和集成电路中占据着主导地位。然而，随着电子、光电子和光子器件的迅速发展，越来越多的器件需要可实现新功能的新材料。但是，与已经非常成熟的硅材料科学技术相比，人们对这些材料的研究相对较少，尚缺乏系统、完整的实验数据。《IV族、III-V族和II-VI族半导体材料的特性》一书正是为了满足上述需求而撰写的。该书不但详细地介绍了这些材料相关的科学问题，同时也尽可能多地列出了这些新材料的各种参数和物理化学特性，既适合作为研究生学习的教材，也可以作为研究人员和工程技术人员的参考手册。

本书翻译由季振国总负责，毛启楠、马国进、孙淑强、贺海晏、曹虹、杨永德等参加了翻译工作，季振国和毛启楠对全文进行了校对和润色。由于翻译小组学术水平和翻译水平有限，加上原著涉及许多新材料和新概念，翻译过程中难免存在疏漏之处，敬请各位读者谅解。另外，本书的翻译工作得到了杭州电子科技大学学术专著基金的资助，特此表示感谢。

本书翻译小组

2009年6月9日

丛书前言

Wiley 电子材料和光电子材料系列丛书

本系列丛书主要是为了适应电子和光电子材料的迅速发展。系列丛书尽可能多地提供了这些材料的基本信息，以及这些特性在技术上得到应用的情况。本系列丛书的对象包括研究和学习电子和光电子材料的研究生、研究人员和技术人员，以及在电子、光电子和通信领域从事新材料、新器件和新电路开发的科技人员。

研发新的电子和光电子材料不但依靠材料工程，还需要对材料的特性以及隐藏在特性后面的科学本质有清晰的了解。正是材料本身的特点最终决定了它们是否能够得到实际应用。因此，本系列丛书也包含了固体中的电导、光学特性、热学特性等内容以及这些材料在电子和光电子领域的应用实例。系列丛书中还尽可能多地包括了材料表征方面的内容，因为如果没有合适的结构和特性表征手段是不可能开发出新材料的。结构与特性的关系对材料科学而言永远是最重要和最本质的内容。

众所周知，材料科学是学科交叉最多的学科之一。正是因为多学科交叉的特性引起了许多振奋人心的新发现，包括新材料和新应用。一个化学工程背景的科学家在电子应用领域从事材料研发项目是非常平常的一件事。在选择丛书的题目时，我们尽量保持这个领域的多科学交叉特性以及这些特性对该领域研究人员的吸引力。

Peter Capper
Safa Kasap
Arthur Willoughby

原 书 前 言

几乎所有具有实际应用价值的半导体材料都是 IV 族、III-V 族和 II-VI 族材料，这些半导体材料的技术应用范围非常广泛。这些半导体器件可以程度不同地进行分类，不少科技论文、综述性文章、专著的某个章节或者专著都对半导体材料的各种特性进行了讨论，但是至今还没有一本专著把 IV 族、III-V 族和 II-VI 族半导体材料各种特性都整合进去。

本书有两个目的：一是讨论 IV 族、III-V 族和 II-VI 族半导体材料关键的特性，二是从固体物理的观点使得这些特性系统化。本书大部分内容主要用于描述这些半导体材料晶格的结构、热学、机械、晶格动力学、电子能带结构、光学和载流子输运等特性。另外，本书也讨论了某些集体行为产生的效应如压电效应、光弹效应和电光效应。

本书包含了大量可方便使用的表格，这些表格整合了各种半导体材料的特性以及各种半导体材料重要特性的定义。本书也包含了大量的图片以便数据更加量化，更加清楚明了。我个人觉得目前现有的书籍中没有能够较好地包含上述全部内容的。

本书目标读者不仅仅是半导体器件工程师，也包括物理学家和物理化学学家，特别是在半导体材料的合成、晶体生长、半导体器件物理和技术等相关领域学习的学生。

SADAO ADACHI (安达隆史)

日本郡马

致谢与献辞

本书作者感谢以下刊物和会议论文的编辑和作者容许本书复制他们以前发表的图表: Appl. Phys. Lett. (图 6.19, 10.37, 12.10, 12.13, 12.14, 12.24); IEEE Proc. -J (图 11.7); IEEE Proc. Int. Electron. Dev. Meeting (图 6.18, 6.20); J. Appl. Phys. (图 4.4, 7.7, 10.25, 12.26); J. Cryst. Growth (图 10.36); J. Phys. Chem. Solids (图 10.40, 12.5); Jpn. J. Appl. Phys. (图 6.14, 12.32); Kluwer Academic Publishers (图 2.7, 2.10, 2.11, 3.5, 4.9, 6.12, 6.25, 6.27, 9.4~9.8, 10.4, 10.15, 12.6~12.8, 12.15~12.17, 12.30, 12.33~12.38, 12.41~12.43); Phys. Rev. (图 1.3, 2.1, 4.10, 6.1, 6.3, 6.5, 6.7, 8.6, 10.5 (a), 10.11, 10.17, 10.21, 10.23, 10.24, 10.34, 10.38, 11.4, 11.9, 12.9, 12.19, 12.21, 12.22, 12.27~12.29); Proc. Phys. Soc. (图 4.6); Semicond. Sci. Technol. (图 10.5 (b)); Solid State Commun. (图 4.5, 10.22, 11.10); Solid-State Electron. (图 9.10)。

目 录

译者前言

丛书前言

原书前言

致谢与献辞

1 结构特性	1
1.1 电离度	1
1.1.1 定义	1
1.1.2 电离度值	3
1.2 元素同位素丰度和分子量	3
1.2.1 元素同位素丰度	3
1.2.2 分子量	5
1.3 晶体结构和空间群	6
1.3.1 晶体结构	6
1.3.2 空间群	9
1.4 晶格常数和相关参数	11
1.4.1 晶格常数	11
1.4.2 分子和晶体密度	12
1.5 结构相变	13
1.6 解理	15
1.6.1 解理面	15
1.6.2 界面能	17
参考文献	19
2 热学性能	20
2.1 熔点及其相关参数	20
2.1.1 相图	20
2.1.2 熔点	20
2.2 比热	23
2.3 德拜温度	24
2.4 热膨胀系数	26
2.5 热导率和热扩散率	30
2.5.1 热导率	30

2.5.2 热扩散率	35
参考文献	35
3 弹性性能	37
3.1 弹性常数	37
3.1.1 概述	37
3.1.2 室温值	39
3.1.3 外部微扰影响	46
3.2 三阶弹性常数	48
3.3 杨氏模量、泊松比及相关性质	49
3.3.1 杨氏模量和泊松比：立方点阵	49
3.3.2 体模量、切变模量及相关性质：立方点阵	52
3.3.3 杨氏模量和泊松比：六方点阵	56
3.3.4 体模量、剪切模量及相关性质：六方点阵	58
3.4 显微硬度	59
3.5 声速	64
参考文献	67
4 晶格动力学性质	69
4.1 声子色散关系	69
4.1.1 布里渊区	69
4.1.2 声子散射曲线	71
4.1.3 声子态密度	74
4.2 声子频率	75
4.2.1 室温下的值	75
4.2.2 外部微扰效应	80
4.3 Grüneisen 参数	83
4.4 声子畸变势	84
4.4.1 立方晶格	84
4.4.2 六方晶格	87
参考文献	88
5 集体效应和响应特性	89
5.1 压电常数和机电系数	89
5.1.1 压电常数	89
5.1.2 机电耦合系数	92
5.2 Fröhlich 耦合系数	93
参考文献	95

6 能带结构：禁带宽度	97
6.1 基本性质	97
6.1.1 能带结构	97
6.1.2 电子状态密度	104
6.2 E_0 带隙区域	107
6.2.1 有效 Γ 点哈密顿算符	107
6.2.2 室温值	108
6.2.3 外部扰动作用	113
6.2.4 掺杂作用	120
6.3 能量较大的直接带隙	123
6.3.1 立方晶系半导体	123
6.3.2 六方晶系和菱方晶系半导体	131
6.4 最小间接带隙	132
6.4.1 室温值	132
6.4.2 外部扰动作用	133
6.5 导带能谷间的能量差	135
6.6 直接-间接带隙转变压力	137
参考文献	138
7 能带结构：有效质量	141
7.1 电子有效质量： Γ 能谷	141
7.1.1 概述	141
7.1.2 数值	142
7.1.3 极化子影响	145
7.1.4 外部扰动和掺杂效应	146
7.2 电子有效质量：卫星能谷	150
7.2.1 “驼峰”结构	150
7.2.2 数值	152
7.3 空穴有效质量	153
7.3.1 有效 Γ 价带哈密顿算符和 Luttinger 参数	153
7.3.2 数值	157
7.3.3 极化子影响	162
7.3.4 外部扰动和掺杂影响	163
参考文献	164
8 形变势	166
8.1 谷内形变势： Γ 点	166
8.1.1 导带	166
8.1.2 价带	168

8.1.3	E_0 带隙	173
8.1.4	光学声子形变势	174
8.2	谷内形变势: 高对称性点	176
8.2.1	L 点	176
8.2.2	X 点	181
8.3	带间形变势	183
8.3.1	概述	183
8.3.2	数值	184
	参考文献	185
9	电子亲和势和肖特基势垒高度	187
9.1	电子亲和势	187
9.1.1	概述	187
9.1.2	数值	187
9.2	肖特基势垒高度	190
9.2.1	理想的肖特基-莫特接触	190
9.2.2	个案研究: 金/半导体接触	195
9.2.3	表面重构和外部扰动效应	196
9.2.4	击穿电压	199
	参考文献	200
10	光学特性	203
10.1	光色散关系总结	203
10.1.1	介电常数	203
10.1.2	光色散关系	204
10.1.3	光学求和规则	205
10.1.4	光谱	207
10.2	余辉区	208
10.2.1	静态和高频介电常数	208
10.2.2	余辉区谱	213
10.2.3	多声子光吸收谱	219
10.3	本征吸收边及近边区域	221
10.3.1	自由激子束缚能和相关参数	221
10.3.2	折射率	227
10.3.3	本征吸收边的光吸收	234
10.3.4	Urbach 带尾态	245
10.4	带间跃迁区域	247
10.4.1	介电函数模型	247
10.4.2	本征光谱	252

10.4.3	外部扰动和掺杂效应	257
10.5	自由载流子吸收和相关现象	259
10.5.1	自由载流子吸收	259
10.5.2	导带间和价带间的吸收	262
10.5.3	自由载流子引起的折射率的改变	265
	参考文献	266
11	光弹、电光和非线性光学性能	271
11.1	光弹效应	271
11.1.1	理论表达式	271
11.1.2	实验值	273
11.2	线性电光常数	278
11.2.1	理论表达式	278
11.2.2	实验值	282
11.3	二阶电光常数	283
11.3.1	理论表达式	283
11.3.2	实验值	285
11.4	Franz-Keldysh 效应	287
11.4.1	理论表达式	287
11.4.2	实验值	288
11.5	非线性光学常数	289
11.5.1	二阶非线性光学系数	289
11.5.2	三阶非线性常数	294
11.5.3	双光子吸收	296
	参考文献	298
12	载流子的输运特性	301
12.1	低场迁移率：电子	301
12.1.1	电子散射机制	301
12.1.2	三能谷模型	305
12.1.3	室温值	305
12.1.4	外部干扰和掺杂效应	308
12.1.5	霍尔因子	313
12.2	低场迁移率：空穴	315
12.2.1	空穴散射机制	315
12.2.2	室温下的值	317
12.2.3	外部微扰和掺杂效应	319
12.3	高场下的输运：电子	324
12.3.1	电子漂移速率-场强特性	324

12.3.2	电子饱和和漂移速率	331
12.4	高场输运：空穴	335
12.4.1	空穴漂移速率-场强特性	335
12.4.2	空穴饱和和漂移速率	338
12.5	少数载流子输运：p 型材料中的电子	339
12.5.1	少数电子迁移率	339
12.5.2	少数电子漂移速率	340
12.5.3	少数电子寿命和扩散长度	341
12.6	少数载流子输运：n 型材料中的空穴	343
12.6.1	少数空穴迁移率	343
12.6.2	少数空穴寿命和扩散长度	345
12.7	碰撞电离系数	347
12.7.1	理论考虑	347
12.7.2	实验值	349
	参考文献	353

1 结构特性

1.1 电 离 度

1.1.1 定义

所有四面体配位的 $A^N B^{8-N}$ 型半导体都可以用一个简单的模型框架进行处理。不过要利用这种方法得到准确的结果,就需要认真地选择输入模型参数。其中最重要的一个参数就是化学键的电离度^[1]。

一个化学键的电离度可以由化学键中离子性或极性成分所占的比例 f_i^* 与共价性或者说非极性成分的比例 f_h 进行比较得到。根据定义,这两种成分满足以下关系

$$f_i^* + f_h = 1 \quad (1.1)$$

对于元素半导体比如硅, $f_h=1$ 并且 $f_i^*=0$ 。与此相反,我们发现一些碱金属的卤化物(如 NaCl、KCl 等)都有 90% 以上的离子性。

1. 菲利浦电离度

菲利浦研究了 $A^N B^{8-N}$ 类型晶体的化学键特性与电子能带结构之间的联系^[1]。他的模型的基础是分子中的成键轨道和反键轨道的构想,两种轨道之间用宽度为 E_g 的能隙隔开。他的电离度 f_i 是根据一些物理量的平均值定义的,对于 A—B 型化学键,与之相联系的复数能隙 E_g 与非极性参量 E_h 和极性参量 C 之间的关系为

$$E_g = E_h + iC \quad (1.2)$$

则菲利浦电离度为

$$f_i = \frac{C^2}{E_g^2} = \frac{C^2}{E_h^2 + C^2} \quad (1.3)$$

一些 $E_g(f_i)$ 的实例如下:对 Si, $E_g = 4.70 + i0$ ($f_i = 0$); 对 GaAs, $E_g = 4.32 + i2.90$ ($f_i = 0.310$); 对 ZnSe 而言, $E_g = 4.29 + i5.60$ ($f_i = 0.630$), 其中 E_g 的单位是 eV。

2. 泡利电离度

泡利关于电离度 f_i^p 的定义不是基于键的总能量,而是基于形成能的经验值^[2]。他认为一个原子 A 吸引电子的能力可以用电负性 X_A 这样一个无量纲的数值来表示。这样剩余电荷与已转移的价电荷之间的库仑作用与 $(X_A - X_B)^2$ 成正比,而这也就是额外离子能的来源。根据定义 f_i^p 不可能大于 1, 并且当 $X_A - X_B$

很大时, f_i^p 趋向于 1。此外, 一个 A—B 型化学键的电离度应该等于一个 B—A 型化学键的电离度。泡利于是定义一个单键的电离度为

$$f_i^p = 1 - \exp\left(-\frac{(X_A - X_B)^2}{4}\right) \quad (1.4)$$

3. 哈里森电离度

在哈里森的模型中^[3], 电离度参数 f_i^H 可以用电子结构的两个参数来表示

$$f_i^H = \frac{V_3}{\sqrt{V_2^2 + V_3^2}} \quad (1.5)$$

其中 V_2 等于成键态与反成键态能量间隔的一半, V_3 是把一个电子从阴离子传递到阳离子过程中能量改变值的一半。这样, 参数 f_i^H 可以定义为阴离子从每个价键得到的过量电子, 称为极性。因此, 在一个四面体结构体系中每一个阴离子上都有 $Z^* = 4f_i^H - \Delta Z$ 的电荷量。其中 ΔZ 是化合价与 4 的差值 (如对于氮原子 $\Delta Z=1$, 对于氧原子来说 $\Delta Z=2$)。同样的, 每一个价键提供一个电偶极矩 $\mathbf{P} = \gamma f_i^H (-e\mathbf{d})$, 其中 $\mathbf{d}$ 是从阳离子指向阴离子的距离向量, γ 是考虑了局域电场和电荷对称性的尺度参数, 一般 γ 取 $\sqrt{2}$ 就能与实验结果符合得很好。

表 1.1 一些 IV 族、III-V 族和 II-VI 族半导体的 f_i 、 f_i^p 和 f_i^H

体系	材料	f_i	f_i^p	f_i^H	体系	材料	f_i	f_i^p	f_i^H
IV	Diamond	0	0	0	II-VI	MgO	0.841	0.88	
	Si	0	0	0		MgS	0.786		
	Ge	0	0	0		MgSe	0.790		
	Sn	0	0	0		MgTe	0.554		
	SiC	0.177	0.11	0.35		ZnO	0.616	0.80	0.69
III-V	BN	0.221	0.42	0.43		ZnS	0.623	0.59	0.69
	BP	0.032				ZnSe	0.630	0.57	0.70
	BAs	0.044				ZnTe	0.609	0.53	0.68
	AlN	0.449	0.56	0.57		CdS	0.685	0.59	0.74
	AlP	0.307	0.25	0.47		CdSe	0.699	0.58	0.74
	AlAs	0.274	0.27	0.44		CdTe	0.717	0.52	0.76
	AlSb	0.250	0.26	0.56		HgS	0.790		
	GaN	0.500	0.55	0.61		HgSe	0.680		
	GaP	0.327	0.27	0.48		HgTe	0.650		0.78
	GaAs	0.310	0.26	0.47					
	GaSb	0.261	0.26	0.43					
	InN	0.578							
	InP	0.421	0.26	0.55					
	InAs	0.357	0.26	0.51					
	InSb	0.321	0.25	0.48					

1.1.2 电离度值

表 1.1 总结了一些 IV 族、III-V 族和 II-VI 族半导体的飞利浦电离度^[1]、泡利电离度值^[2]和哈里森电离度值^[3]的数值。图 1.1 给出了这些半导体的飞利浦电离度与泡利电离度和哈里森电离度的关系。

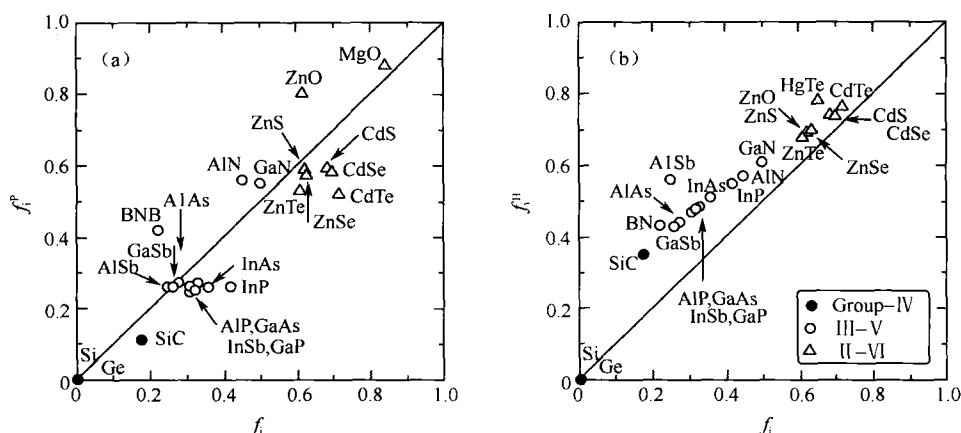


图 1.1 一些 IV 族、III-V 族和 II-VI 族半导体的飞利浦电离度 f_i 关于 (a) 泡利电离度 f_i^p 和 (b) 哈里森电离度 f_i^H 的关系。(a) 图和 (b) 图中的实线分别表示 $f_i = f_i^p$ 和 $f_i = f_i^H$ 。

1.2 元素同位素丰度和分子量

1.2.1 元素同位素丰度

半导体材料种类繁多。我们在表 1.2 中列出了至少可以组成一种四面体配位 $A^N B^{8-N}$ 型半导体的元素，以及它们的天然的同位素丰度百分数^[4]。表 1.3 列出了一些 IV 族、III 族、V 族、II 族和 VI 族元素的标准原子量^[4]。

表 1.2 一些 IV、III、V、II 和 VI 族元素同位素的百分比自然丰度

族	同位素	自然丰度/%	族	同位素	自然丰度/%
IV	^{12}C	98.90	IV	^{112}Sn	0.97
	^{13}C	1.10		^{114}Sn	0.65
	^{28}Si	92.23		^{115}Sn	0.34
	^{29}Si	4.67		^{116}Sn	14.53
	^{30}Si	3.10		^{117}Sn	7.68
	^{70}Ge	21.23		^{118}Sn	24.23
	^{72}Ge	27.66		^{119}Sn	8.59
	^{73}Ge	7.73		^{120}Sn	32.59
	^{74}Ge	35.94		^{122}Sn	4.63

续表					
族	同位素	自然丰度/%	族	同位素	自然丰度/%
III	⁷⁶ Ge	7.44	V	¹²⁴ Sn	5.79
	¹⁰ B	19.9		¹⁴ N	99.634
	¹¹ B	80.1		¹⁵ N	0.366
	²⁷ Al	100		³¹ P	100
	⁶⁹ Ga	60.108		⁷⁵ As	100
	⁷¹ Ga	39.892		¹²¹ Sb	57.36
	¹¹³ In	4.3		¹²³ Sb	42.64
II	¹¹⁵ In	95.7	VI	¹⁶ O	99.762
	²⁴ Mg	78.99		¹⁷ O	0.038
	²⁵ Mg	10.00		³² S	95.02
	²⁶ Mg	11.01		³³ S	0.75
	⁶⁴ Zn	48.6		³⁴ S	4.21
	⁶⁶ Zn	27.9		³⁶ S	0.02
	⁶⁷ Zn	4.1		⁷⁴ Se	0.89
	⁶⁸ Zn	18.8		⁷⁶ Se	9.36
	⁷⁰ Zn	0.6		⁷⁷ Se	7.63
	¹⁰⁶ Cd	1.25		⁷⁸ Se	23.78
	¹⁰⁸ Cd	0.89		⁸⁰ Se	49.61
	¹¹⁰ Cd	12.49		⁸² Se	8.73
	¹¹¹ Cd	12.80		¹²⁰ Te	0.096
	¹¹² Cd	24.13		¹²² Te	2.603
	¹¹³ Cd	12.22		¹²³ Te	0.908
	¹¹⁴ Cd	28.73		¹²⁴ Te	4.816
	¹¹⁶ Cd	7.49		¹²⁵ Te	7.139
	¹⁹⁶ Hg	0.15		¹²⁶ Te	18.95
	¹⁹⁸ Hg	9.97		¹²⁸ Te	31.69
	¹⁹⁹ Hg	16.87		¹³⁰ Te	33.80
	²⁰⁰ Hg	23.10			
	²⁰¹ Hg	13.18			
	²⁰² Hg	29.86			
	²⁰⁴ Hg	6.87			

表 1.3 一些 IV、III、V、II 和 VI 族元素的标准原子量, 括号中的数字为不确定值

族	符号	原子量	族	符号	原子量
IV	C	12.0107(8)	V	N	14.00674(7)
	Si	28.0855(3)		P	30.973761(2)
	Ge	72.61(2)		As	74.921560(2)
	Sn	118.710(7)		Sb	121.760(1)
III	B	10.811(7)	VI	O	15.9994(3)
	Al	26.981538(2)		S	32.066(6)
	Ga	69.723(1)		Se	78.96(3)
	In	114.818(3)		Te	127.60(3)
II	Mg	24.3050(6)			
	Zn	65.39(2)			
	Cd	112.411(8)			
	Hg	200.59(2)			