

中国科学院大学研究生教学辅导书系列

半导体材料物理与技术

Physics and Technology of Semiconductor Materials

杨建荣 著



科学出版社

(TN-1752.01)



中国科学院大学研究生教学辅导书系列 (YJF0809001)

半导体材料物理与技术

Physics and Technology of Semiconductor Materials



科学出版社互联网入口

部门: (021) 64042678 销售: (010) 64031535

部门 E-mail: yyjs@mail.sciencep.com

销售分类建议: 工学 / 材料科学与工程

www.sciencep.com

ISBN 978-7-03-062732-2



定价: 78.00 元

中国科学院大学教材出版中心资助

中国科学院大学研究生教学辅导书系列

半导体材料物理与技术

杨建荣 著

贵州师范学院内部使用

科学出版社

北京

内 容 简 介

半导体材料是二级学科“微电子与固体电子学”的一个分支学科,本书将这一分支学科的专业知识划分为半导体材料概述、物理性能、晶体生长、热处理、性能测量和工艺基础技术6个组成部分,通过把分散在众多教科书、专著和文献资料中的专业知识系统地纳入这一学科体系框架,使之成为一本全面介绍半导体材料物理知识、工艺基本原理和实用化技术的专业书籍。由于篇幅的限制,本书并未深入涉及物理学基本原理的推导、各种材料的性能参数和各类制备工艺的技术细节,需要时读者可运用搜索引擎来获取相关的内容。

本书可作为具备半导体物理基础知识的在校研究生的教学参考书,也可作为从事半导体材料和芯片研发的科研人员的参考书和工具书。

图书在版编目(CIP)数据

半导体材料物理与技术 / 杨建荣著. —北京: 科学出版社, 2020.1

ISBN 978-7-03-062732-2

I. ①半… II. ①杨… III. ①半导体材料—物理性质—研究 IV. ①TN304

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 243634 号

责任编辑: 王 威 / 责任校对: 谭宏宇
责任印制: 黄晓鸣 / 封面设计: 殷 靓

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>

南京展望文化发展有限公司排版

当纳利(上海)信息技术有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2020年1月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2020年1月第一次印刷 印张: 19 1/4

字数: 360 150

定价: 78.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

随着现代互联网通信、物联网、机器人、无人驾驶、人工智能、场景体验等现代新兴产业的发展,人类社会正在从过去的通信时代、当今的信息或数字时代,进一步迈向以智能装备、智能管理和智能创造为特征的人工智能时代。在这一跨时代的发展过程中,人类对半导体新材料和新器件(芯片)的需求将又一次快速增长,半导体产业的升级换代也将不断加快。为了适应时代的发展,加快半导体技术的进步,我们需要创新思维,研究新概念和新理论,研发新材料、新技术和新产品,而实现创新的基础则是已有理论、知识和技术的积累。

半导体技术在学科上属于“微电子和固体电子学”,基于这一专业技术发展起来的产业亦称为微电子产业,该学科又分为半导体微电子物理学、半导体材料物理与技术、半导体器件物理与技术、半导体集成电路设计与制造(即固体电子学)和器件可靠性物理与技术等多个分支学科。微电子和固体电子学所涉及的材料不仅包含半导体晶体材料,还包括介电材料、液晶材料和固态有机化合物等材料,即使是半导体材料,除了传统的无机晶体材料外,还包括有机无机混合的钙钛矿晶体材料,但从理论的完备性、应用的广泛性以及产品的生产规模来看,基于单质和化合物的无机半导体材料在本学科领域中占据主导地位。

半导体材料物理与技术的物理基础是量子力学、电动力学、热力学和普通物理学等基础理论,涉及的专业基础理论有固体物理、半导体物理、能带理论、相图理论、晶体生长理论和缺陷化学理论等,涉及的专业技术包括材料生长技术、热处理技术、材料物性测量技术和半导体工艺技术等。此外,半导体材料的种类繁多,涉及各种材料的学术专著成千上万,发表在国内外期刊的文献更是不计其数。但是,反过来要找到一本专注于半导体材料物理与技术,且基础性、技术性和系统性兼顾的学术专著却很困难。撰写本书的初衷是把分散于各种基础理论书籍和研究论文中与半导体材料物理与技术相关的基础知识、基本原理、实用化技术和最新研究成果系统地纳入半导体材料物理与技术的知识体系框架,形成一部关于半导体材料的专业书籍,以帮助相关专业读者更好地学习、了解和掌握半导体材料的物理性能和制备技术,并能帮助读者从半导体物理和工艺技术原理的层面去认识

和理解材料的物理性能参数和材料制备的工艺技术,同时也能帮助读者更好更快更方便地获取前人已积累的海量文献资料。

基于以上想法,本人根据自己从事半导体材料研究所积累的理论知识、工作经验和技术资料,在查阅了大量的书籍和文献资料的基础上,将与半导体材料专业技术相关的知识要点提取出来,并根据自己的理解将相关内容分成6个部分,即半导体材料概述、材料物理性能、晶体生长、热处理、材料性能测量和半导体工艺基础技术。其中半导体材料物理性能被划分为三大类12个方面,共涉及100多个材料性能参数;晶体生长部分涵盖了晶体生长的基础理论、体晶生长技术、外延技术和近年来快速发展的低维材料的生长技术,论述时着重从机理上去认识和分析材料生长技术的特点和实验现象;半导体材料的热处理包括了热处理的物理机制、实现方式和实际应用,这部分内容是本人结合自身研究工作的结果对这一技术领域所做的系统性总结;材料性能的测量技术被划分为8大类,每个类别又包含了多种测量方法,除了关注测量技术的系统性和完备性之外,也特别关注测量数据的正确理解、分析和使用;半导体工艺基础技术涉及辅助材料的使用、净化(或纯化)工艺、真空技术、加热技术、源材料制备技术和材料加工技术等6个方面,在介绍这些技术的基本原理和常用方法的同时,特别注重介绍决定工艺成败的注意事项和技术诀窍。由于本书涉及固体物理、半导体物理、能带理论、材料的光学性质、电学性质、材料的相图理论、材料热力学理论、缺陷理化学平衡理论、晶体生长理论、晶体生长技术、材料热处理技术、材料参数的测试与评价技术、材料制备的工艺技术以及材料应用领域的相关知识等诸多内容,在写作上采用了小而全且短而精的叙述方式,在介绍具体内容时不得不舍去一些更基础的原理介绍、公式推导和更详细的技术细节,需要时读者可通过查询关键词并运用现代检索技术,快速获取相关的专业知识。

作为一名半导体材料科研工作者,本人深感在过去的工作中未能很好地从半导体物理的层面去认识材料的性能,也未能从热力学层面去很好地认识材料的相图和制备工艺,对相关专业技术的原理或物理机理的认识比较肤浅,这些问题的存在制约了本人解决复杂问题的能力,也制约了研究水平的快速提升。正因如此,作者希望通过撰写《半导体材料物理与技术》一书,能够帮助从事半导体材料研发和生产的相关人员提升解决半导体材料与芯片复杂问题的基础能力,帮助微电子与固体电子学学科的研究生更好更全面地掌握半导体材料专业知识。

与此同时,我也深感将众多教材、专著和文献资料中的知识与技术整合成物理与技术兼备的专业书籍是一项难度非常大的工作,《半导体材料物理与技术》的编写仅仅是一次初步的尝试。受限于本人的物理基础水平、工艺技术知识、经验和能力,本书远未达到经典专业书籍的水准。另外,文中对一些概念和方法的介绍难免也会存在一定的局限性,因此,建议读者能将质疑、批判和创新思维贯穿于整个阅读过程之中。

最后,我想感谢我的导师,也是我的人生楷模汤定元先生,他是我国红外事业的开创者,在本书即将出版之际他离开了我们,生前他老人家最关心的是科学事业的发展,同时也非常关心科学技术的传承,他让我懂得传承和创新是科学技术发展中不可或缺的两个方面。

本书能够出版也要感谢中国科学院上海技术物理研究所给我创造了很好的工作条件,特别要感谢中国科学院红外成像材料与器件重点实验室的领导和同事:何力研究员和丁瑞军研究员,正是因为有他们的支持和帮助,我才有机会深度参与半导体材料的科研工作、有条件从事研究生的教学工作和有信心做好本书的撰写工作。本书的出版得到了中国科学院大学教材出版中心资助;在编写和出版的过程中,得到了匡定波院士和褚君浩院士的鼓励,也得到了材料器件研究中心和研究生部的同事们的帮助,在此一并表示衷心的感谢!

中国科学院上海技术物理研究所研究生部

杨建荣

2019年7月5日

前言

第 1 章 概述	1
1.1 半导体材料	2
1.2 半导体材料物理与技术	4
1.2.1 半导体材料的物理基础	4
1.2.2 半导体材料的物理性能	6
1.2.3 半导体材料的制备技术	8
1.3 半导体材料的应用	9
第 2 章 半导体材料的物理性能	17
2.1 晶体材料的原子结构	18
2.2 材料的成分参数	21
2.3 材料的宏观结构特性	21
2.4 材料中电子的能带结构	22
2.5 缺陷性能	33
2.5.1 点缺陷	33
2.5.2 线缺陷	34
2.5.3 面缺陷	36
2.5.4 界面缺陷	37
2.5.5 体缺陷	38
2.5.6 表面缺陷	38
2.6 表面与界面性能	39
2.7 电学性能	41
2.7.1 平衡态下材料的电学特性	42
2.7.2 外场作用下的材料电学特性	46
2.7.3 非平衡态下的材料电学特性	48
2.7.4 载流子的碰撞电离特性	52
2.7.5 压电特性	52
2.8 光学性能	52

2.8.1	光在材料中的传播特性	53
2.8.2	材料的光吸收特性	53
2.8.3	材料的辐射特性	55
2.8.4	材料表面的光散射特性	56
2.9	磁学性能	56
2.10	力学性能	57
2.11	材料性能的非均匀性	58
2.12	热学与热力学性能	58
2.12.1	热学性能	58
2.12.2	相图	59
2.12.3	缺陷化学理论及其相关的材料热力学常数	64
2.12.4	材料中原子的扩散特性	65
第3章	半导体材料的生长	71
3.1	晶体生长的基础理论	71
3.1.1	生长方式与驱动力	72
3.1.2	成核理论	73
3.1.3	生长速率和生长模式	75
3.1.4	平衡形态理论	78
3.1.5	生长过程中的传输理论	79
3.2	体晶材料的生长技术	82
3.2.1	布里奇曼法	83
3.2.2	区熔法	92
3.2.3	切克劳斯基法	94
3.2.4	物理气相传输法	100
3.3	外延材料的生长技术	102
3.3.1	液相外延	104
3.3.2	分子束外延	110
3.3.3	金属有机气相沉积	123
3.3.4	其他一些气相外延技术	130
3.4	低维材料生长技术简介	132
第4章	半导体材料的热处理	137
4.1	热处理的基本原理	137
4.1.1	相平衡热处理	137

4.1.2	非平衡热处理	141
4.1.3	热处理过程中原子运动的基本规律	141
4.2	热处理工艺的实现方式	142
4.2.1	闭管热处理	142
4.2.2	开管热处理	143
4.2.3	快速降温热处理	146
4.2.4	快速热处理	146
4.2.5	高低温循环热处理	147
4.2.6	高压热处理	147
4.2.7	多源热处理	148
4.2.8	离子源热处理	150
4.3	半导体材料热处理的实际应用	151
4.3.1	本征点缺陷种类和浓度的调控	151
4.3.2	掺杂和杂质性质的调控	153
4.3.3	杂质浓度和位错密度的降低	154
4.3.4	体缺陷尺寸的减小	154
4.3.5	化合物材料组分分布的调整	155
4.3.6	半导体材料界面特性的改善	156
4.3.7	材料的隔离、剥离和粘接	156
4.4	热处理工艺的注意事项	156
第 5 章	半导体材料性能参数的测量	161
5.1	几何结构特性的测量	162
5.2	光学性能的测量	164
5.2.1	透射光谱的测量	166
5.2.2	反射光谱的测量	168
5.2.3	椭圆偏振光谱的测量	169
5.2.4	散射光谱的测量	171
5.2.5	光荧光光谱的测量	172
5.2.6	阴极荧光光谱的测量	173
5.3	电学性能的测量	173
5.3.1	电阻率的测量	174
5.3.2	载流子特性的测量	177
5.3.3	表面光电压测量技术	184
5.3.4	光电导衰退法测量技术	185

5.3.5	微波反射法测量技术	186
5.3.6	光束诱导或电子束诱导电流的测量	188
5.3.7	深能级瞬态谱的测量	189
5.3.8	角分辨光电子能谱的测量	192
5.3.9	界面电学特性的测量	194
5.4	缺陷性能的测量	196
5.4.1	化学腐蚀法	196
5.4.2	热腐蚀法	200
5.4.3	散射光激光扫描成像法	200
5.4.4	透射显微镜成像法	200
5.4.5	热波法测量技术	201
5.5	材料晶格特性的测量	202
5.5.1	晶向测定技术	202
5.5.2	X 光衍射技术	203
5.5.3	反射式高能电子衍射技术	211
5.5.4	与晶格特性相关的材料宏观性能参数的测量	213
5.6	显微结构的测量	214
5.6.1	微分干涉相差显微镜	214
5.6.2	共聚焦显微镜	216
5.6.3	近场光学显微镜	217
5.6.4	扫描力显微镜	218
5.6.5	电子显微镜	219
5.6.6	场离子显微镜	223
5.7	原子成分和浓度的测量	224
5.7.1	基于原子价电子跃迁的特征光谱测量技术	225
5.7.2	基于原子内壳层电子跃迁的 X 射线特征光谱 测量技术	227
5.7.3	基于被激发电子的能谱测量技术	228
5.7.4	基于质谱分析的测量技术	229
5.8	热力学特性的测量	237
5.8.1	差热分析法	237
5.8.2	差示扫描量热法	238
5.8.3	绝热量热法	239
5.8.4	热流法(或热板法)	239
5.8.5	激光闪射法	239

5.8.6	热膨胀系数的测量	240
第 6 章	半导体材料制备工艺的基础技术	243
6.1	半导体工艺中辅助材料的选用	243
6.2	半导体材料工艺中的净化和纯化工艺	246
6.2.1	水的纯化	246
6.2.2	气体的纯化	247
6.2.3	环境的净化	250
6.2.4	工艺所用材料和腔体的洁净处理	253
6.3	半导体设备的真空技术	256
6.3.1	真空泵	257
6.3.2	真空部件	259
6.3.3	真空系统	264
6.3.4	真空度的测量	267
6.3.5	抽真空工艺	268
6.3.6	真空系统的检漏	269
6.4	半导体工艺中的加热技术	271
6.4.1	加热	271
6.4.2	温场的建立和控制	273
6.4.3	温度的测量	275
6.4.4	温度的控制	277
6.5	源材料的制备技术	279
6.5.1	提纯技术	279
6.5.2	合成技术	283
6.6	半导体材料的加工工艺	285
6.6.1	晶体滚圆	285
6.6.2	晶锭切割	286
6.6.3	划片与倒角	286
6.6.4	表面抛光	287
6.6.5	单点金刚石切削	290
6.6.6	剥离和粘接技术	290
6.7	其他与工艺相关的辅助性技术	294

第 1 章 概 述

半导体材料是一种具有导电且能与光子产生相互作用功能的材料,经过近百年的发展,基于半导体材料的芯片产业已发展成为当今社会的一个支柱产业。“半导体材料物理与技术”是在半导体物理学的发展和半导体材料的应用过程中逐步形成和完善的一门专业学科,它与半导体微电子物理学、半导体器件物理与技术、半导体集成电路设计与制造(即固体电子学)和半导体器件可靠性物理与技术一起隶属于微电子与固体电子学,其内容涵盖了半导体材料物理性能、半导体材料生长、热处理、性能测试与评价以及半导体材料工艺的基础技术 5 个大的方面。图 1-1 给出了这一专业学科的知识体系及其支撑学科和相邻学科的分布情况。

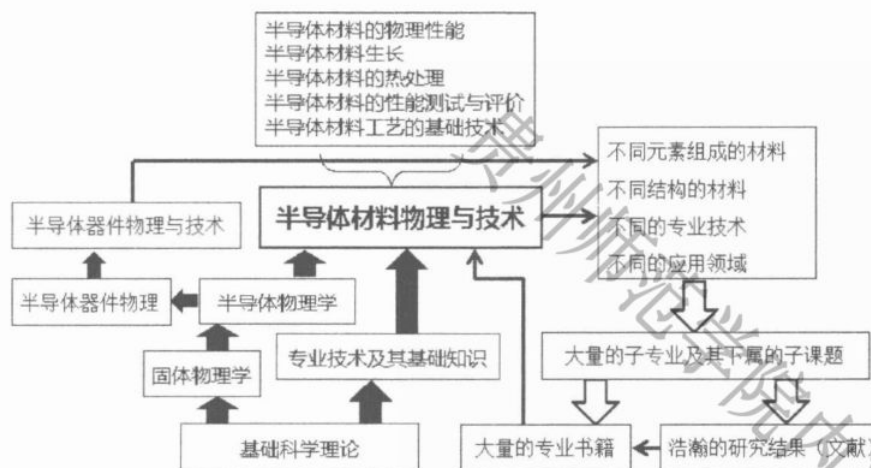


图 1-1 “半导体材料物理与技术”学科的知识体系及其支撑学科和相邻学科的分布情况

从 1949 年第一片 Si 单晶材料在贝尔实验室诞生到当今低维半导体材料的出现,半导体材料的种类和产量发生了翻天覆地的变化。半导体材料从Ⅵ族元素的 Si 材料和 Ge 材料发展到Ⅲ-V 族和Ⅱ-VI 族化合物材料,从体晶材料发展到外延材料、异质结、量子阱、超晶格材料、纳米材料和二维材料,直至今日,新的半导体材料仍在不断涌现。与此同时,半导体芯片则从分立的电子器件发展到今天的超大规模集成电路,同时还发展出了发光器、激光器、光电能量转换器和光电探测器等一大批光电子器件。由此形成的计算机、通信、太阳能、照明与显示以及各种电子元件和传感器等产业已成为当今国民经济的支柱产业,其应用已渗透到实体经济、金融和文化、服务业、互联网和智能社会的方方面面。基于半导体材料的计算机技

术是第三次工业革命(亦称信息技术革命)的重要标志,随着以互联网+、工业智能化和生物技术为代表的第四次工业革命时代的到来,各种新产品和新技术的发展依然离不开对半导体功能材料的需求。半个多世纪以来,“半导体材料物理与技术”的发展始终围绕着两条主线,即在固体物理前沿学科的引领下,人们不断探索和发展新材料,并将其转化成能够满足实用化需求的半导体材料,与此同时,在芯片产业化和工程化应用需求的牵引下,人们始终不渝地将“大尺寸、高均匀性、低缺陷、高性能和低成本”作为发展材料制备技术的终极目标。

1.1 半 导 体 材 料

半导体材料是一种功能材料,它能对光、电、热、磁、声等的作用产生特定的响应。从材料结构上看,它可以是单质材料,也可以是混晶材料、化合物材料、异质结材料或超晶格材料。它可以是体晶材料,也可以是外延材料。即使是同一种材料,它也可以是单晶材料、多晶材料或非晶材料。半导体材料既可按照功能分类,也可按照原子结构分类。以 Si 材料为例,它有单质的体晶材料和外延材料,也有与其他 VI 族原子结合在一起的 SiC、SiGe 和 SiGeSn 等混晶材料。Si 材料既可以是单晶

材料,也可以是多晶材料和非晶材料。在应用上,Si 材料既是电子材料,也是光电子材料,广泛应用于电子元器件、集成电路、光电探测器、太阳能电池和热敏型红外探测器等不同领域。图 1-2 给出了半导体材料常用的若干种分类方法。

顾名思义,半导体材料是一种导电性能介于导体和绝缘体之间的材料。通常将室温下电阻率介于 $10^{-3} \sim 10^9 \Omega \cdot \text{cm}$ 的材料归于半导体材料,如此宽泛的范围源于半导体材料所处的工作温度存在很大的差异(从低于液氮温度到大于 500°C),如以实际工作状态下的材料导电性能为衡量标准,半导体材料电阻率的范围要窄很多。通过对材料掺杂浓度的控制,半导体材料在工作状态下的载流子浓度和

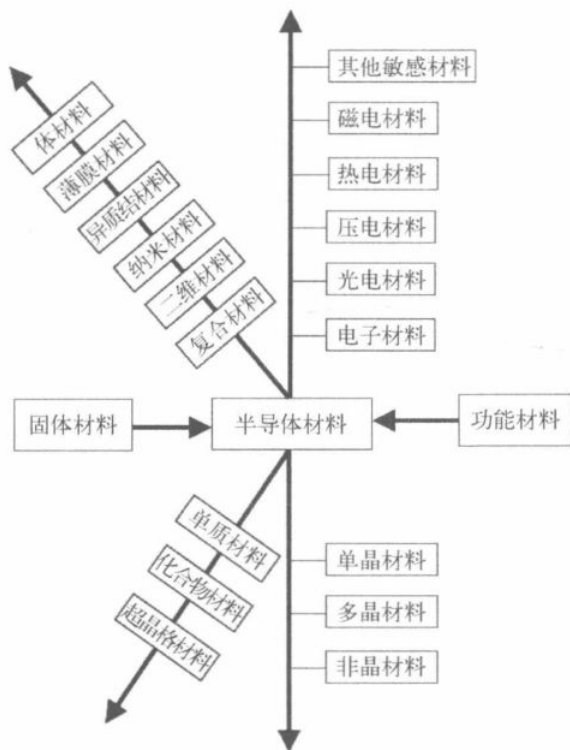


图 1-2 半导体材料的若干种分类方法

电阻率还将受到进一步的调控。

按照固体物理理论,晶体材料中的本征载流子浓度取决于材料价带与导带之间的能量间隙(即禁带宽度)、能带结构中电子的态密度和有效质量,禁带宽度越大,电子从价带通过热激发跃迁到导带成为载流子的浓度就越小。从能带角度看,半导体材料的禁带宽度大都落在 50 meV 到 5 eV 之间。图 1-3 为常用半导体材料在禁带宽度和晶格常数坐标系中的分布图,由于材料的禁带宽度与原子之间相互作用的强弱相关,随着材料晶格常数的增大,禁带宽度总体上呈现出下降的趋势。

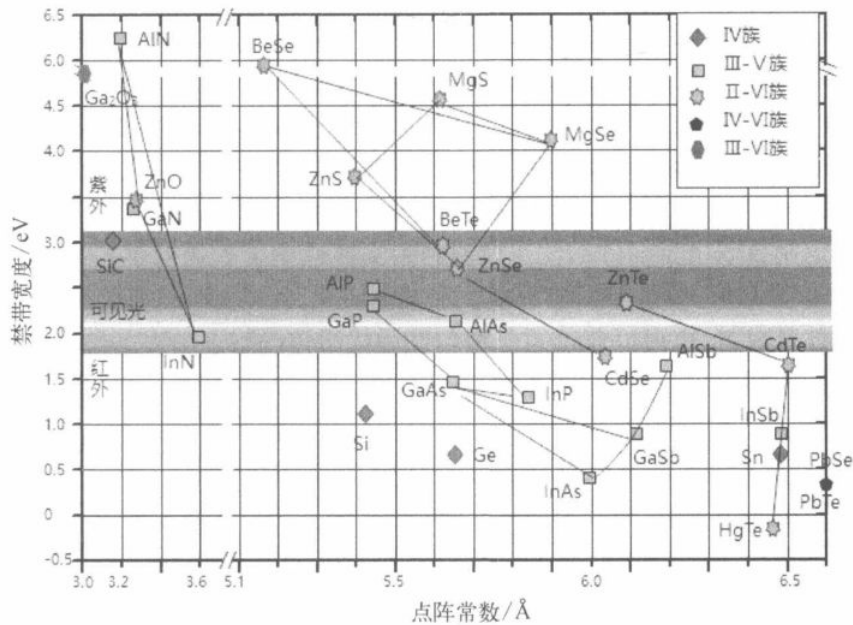


图 1-3 室温下常用半导体材料禁带宽度和晶格常数的分布图

从图 1-3 也可以看出,半导体材料主要包含了 IV 族原子(Si、Ge、C 和 Sn)构成的单质晶体或混晶材料、III 族原子(Ga、In 和 Al 等)与 V 族原子(As、P、Sb 和 N 等)结合而成的二元或多元 III-V 族化合物材料以及由 II 族原子(Zn、Cd、Hg、Mg 和 Be 等)与 VI 族原子(Te、Se、S 和 O 等)构成的二元或多元 II-VI 族化合物材料。Si 材料是一种在常温下呈现半导体性能的材料^[1],其特点是资源极其丰富且拥有理想的 SiO₂表面钝化层,它是目前应用最为广泛的半导体材料。III-V 族化合物材料则因其具有直接带隙而拥有很高的光电转换效率,进而成为制备光电子器件的最佳材料^[2]。II-VI 族化合物材料的特点是禁带宽度的覆盖范围很宽^[3],如用光子波长来衡量的话,它可以从红外光一直覆盖到蓝光,在光电子领域,它能对上述两类半导体材料形成了很好的补充。另外,随着近年来功率器件的发展,III-VI 族的 Ga₂O₃ 化合物材料也开始成为一种重要的半导体材料^[4]。除了以上这几类半导体材料

外,还存在一些小众化的半导体化合物材料,如VI-VI族元素组成的PbTe、PbSe和PbSnTe等材料^[5]和掺Mn或掺Fe的磁性半导体材料等^[6]。

除了从材料的组成上可以衍生出一系列半导体材料之外,通过对材料性能和结构的调控(亦称能带工程技术)也能获得许多新型的半导体材料^[7-9],常用的调控手段包括异质结、量子阱、超晶格、 δ 掺杂、纳米结构和二维材料等,即利用材料性能和结构在实空间上的变化或材料的边缘效应来改变材料的能带结构和物理性能。由此诞生出的新材料包括GeSi/Si、AlGaAs/GaAs、InGaAs/GaAs、InAsSb/InAs、GaSb/InAs、GaInAs/InP、InGaN/GaN、ZnO/ZnMgO和PbSnTe/PbTe等异质结、量子阱和超晶格材料,以及通过减小材料尺寸获得的纳米线和量子点材料。近几年,以石墨烯和拓扑绝缘体为代表的二维材料的出现又为拓展新型半导体材料提供了新的发展方向。

从物理本质上看,普通的薄膜材料(单层外延材料)与体材料在能带结构上并不存在区别,但是从材料的应用角度看,两者有时也会存在显著的差异。例如,Si的外延片是制备双极型器件的优选材料;将Si材料加工成亚微米厚的SOI(silicon on insulator)材料后,器件的漏电流可大幅度减小^[10];采用外延方法可以在异质衬底上生长外延材料,也可以获得组分均匀性远优于体晶材料的多元化合物材料,进而给材料的性能带来质的变化。

1.2 半导体材料物理与技术

半导体材料物理包括半导体材料的物理基础、材料的物理性能和工艺技术的物理原理,半导体材料技术则包括材料的生长技术、热处理技术、材料性能测量技术和工艺基础技术。半导体材料学科是由半导体材料物理与工艺技术所构成的学科,物理是基础,技术是手段,没有好的物理基础就没有好的技术,没有好的技术就无法获得好的半导体材料。

1.2.1 半导体材料的物理基础

纵观半导体材料的发展历史,半导体材料的物理性能研究和应用技术研究都离不开基础理论的支撑,半导体材料的从业人员或研究人员做的是宏观世界中的事情,想的却是材料内微观世界中的物理图像,跨越两个世界的桥梁就是与半导体材料相关的基础理论和基于理论所建立起来的测量技术。固体物理和半导体物理是半导体材料物理的基础理论^[11-12],普通物理、电动力学、量子力学和热力学统计物理则是这些专业基础理论的理论基础。半导体材料专业的研究人员还需掌握一些更为专业的基础理论,例如,能带理论、载流子输运理论、半导体光学性质、表面物理、相图理论和材料缺陷化学理论等。

从材料使用的角度来看,用户最关心的是材料的光电性能,即材料中的电子状态(或结构)及其在外场(电磁场和光子)作用下的变化规律,即电子在实空间、能量和动量上的分布,以及在实空间上发生迁移和在动量空间上发生能级跃迁的行为特性。描述材料中电子结构的物理图像是电子的能带结构,它源于半导体材料的能带理论^[13],而能带理论的基础则是量子力学。反过来看,正是有了量子力学和能带理论,才有了我们对半导体材料光电性能的表述方法。能带理论、量子力学和电动力学等理论也为我们进一步描述电子的迁移和跃迁奠定了理论基础,并由此引出了材料的导电特性和电子与光子相互作用的特性。

从材料制备的角度来看,所有材料的制备工艺都是材料性能在受热力学规律控制的条件下发生改变的一种过程,这些性能主要包括材料的成分、原子排列的结构(晶体结构)、缺陷、电学性能和光学性能等,高温下的材料性能同时也决定着或影响着材料的使用性能。半导体制备技术所涉及的物理原理和理论也很广泛,如材料的晶体生长理论、相图理论、缺陷化学平衡理论、原子扩散理论、材料测试技术原理、真空技术原理、传热学理论和流体力学理论等,对相关理论进行系统化的学习将有助于对材料制备技术的理解,有助于对测试结果的分析,也有助于材料制备技术的改进和新技术的研发。

在工艺技术上,半导体材料制备工艺不仅包括自身特有的晶体材料生长技术、半导体材料热处理技术和材料性能测量技术,还包含了支撑材料制备工艺的很多基础性技术,这些技术包括材料的加工、清洗和腐蚀,材料制备系统的加热、温控、密封、真空、部件的运动和工艺过程的自动化控制,以及材料清洗使用的高纯水、制备工艺中使用的高纯气体和工艺环境需要的洁净空气等工艺质量保障技术。以热力学和热力学统计物理为基础的材料相图理论^[14]、缺陷化学平衡理论^[15]、原子扩散理论^[16]、真空技术理论^[17]和基础化学等是支撑材料制备技术发展的基础理论,而普通物理、普通化学、电子学理论、机械原理和计算机技术也贯穿于整个材料制备工艺的基础性技术之中。

理论是思考问题和认识问题的基础,也是分析问题的工具。随着计算机技术的快速发展,近年来计算机仿真技术获得了快速发展,对理论仿真工具的使用越来越普及。在晶体生长方面,比利时的 FEMAG Soft、德国的 CrysVUn 和俄罗斯 STR 公司的 CGSim 都已成为商业化的晶体生长模拟软件;相图分析方面的软件有 CALPHAD(calculation of phase diagram)、Thermo-Calc 和 Lukas Program;Synopsys 公司的 Sentaurus TCAD(technology compute aided design)、Lumerical DEVICE 和 Comsol 等软件可用于对材料与器件的光学、电学和电磁学特性的模拟计算。理论工具的应用能帮助我们提高工作效率,降低工艺技术研发的成本。

半导体材料技术的发展自始至终都离不开理论的引导和支撑,半导体材料在早期的发展主要基于对元素和化合物导电性质的认识。得益于量子力学、固体物