

半导体材料与物理

1. 晶体结构

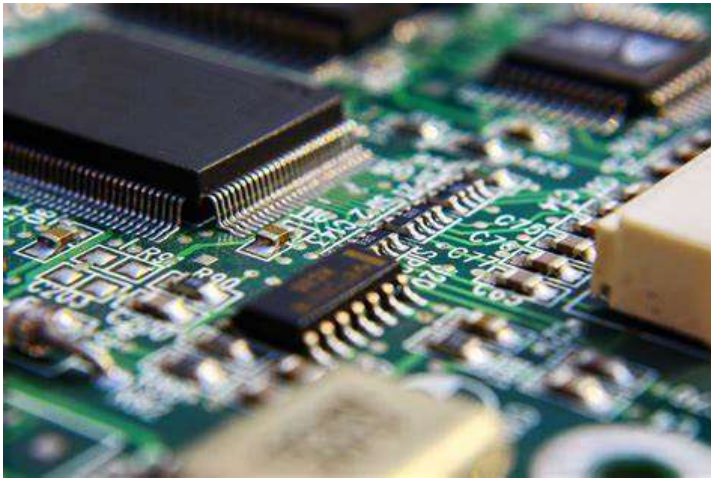
中国科学技术大学微电子学院 吕頔

课程内容

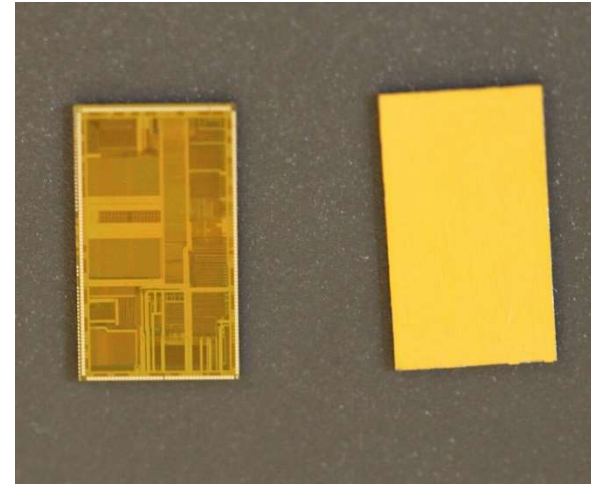
- 研究主体：半导体中的电子
- 第一部分：晶体结构
 - 主要内容：半导体材料的微观结构
- 第二部分：能带结构
- 第三部分：热力学统计
- 第四部分：载流子输运
- 第五部分：非平衡载流子

芯片的材料基础：单晶半导体

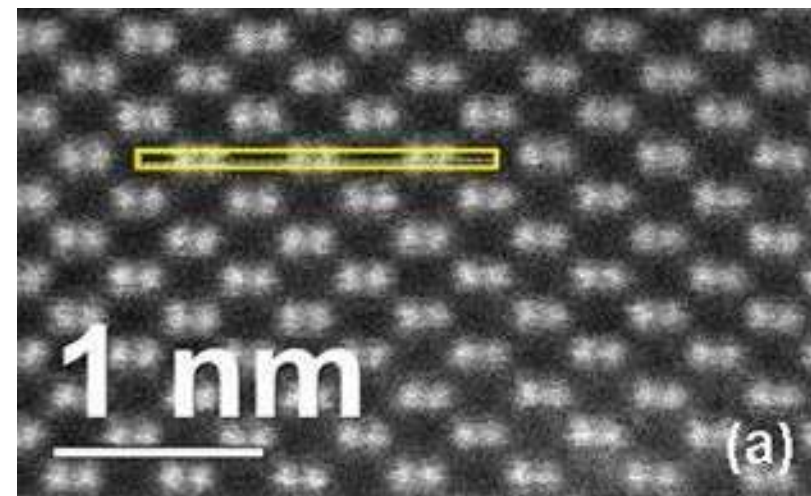
硅集成电路芯片



半导体芯片，“die”



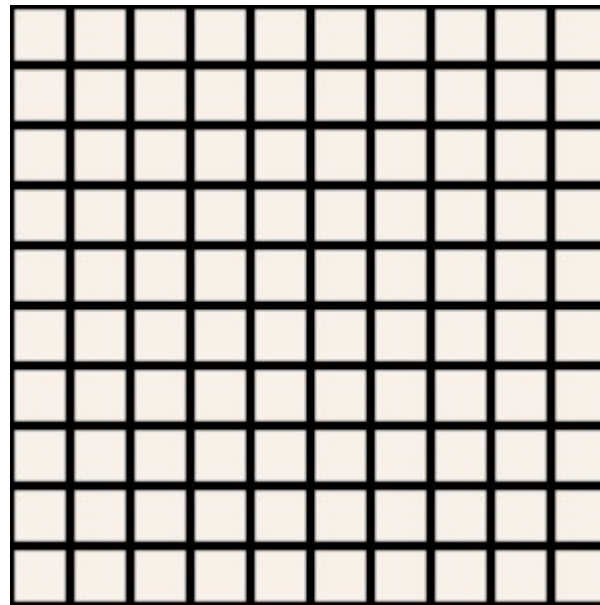
硅的扫描透射电镜 (STEM) 图像



晶体的定义

- 在三个方向上有平移不变性（平移对称性）的物质结构

平移不变性



重复单元：
晶胞(cell)

此处是一个方格，
实际上是一个或多个
原子

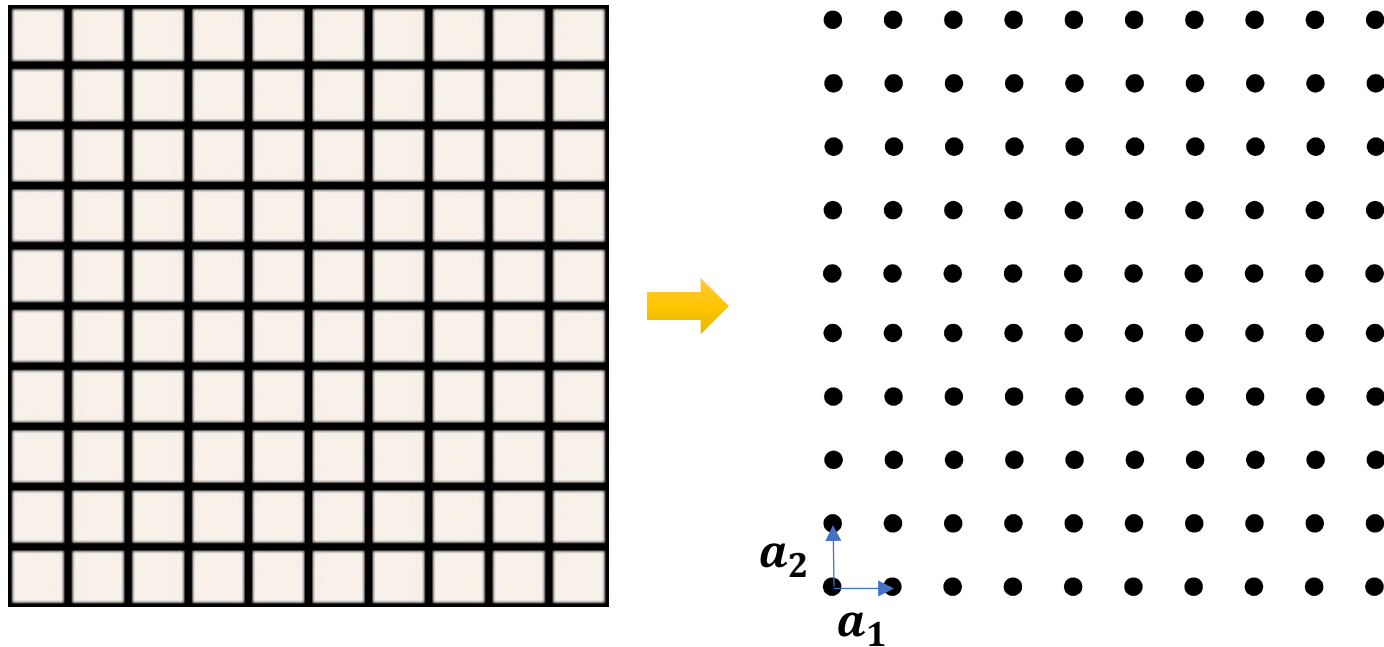
isohtedral.ca

- 两个方向上有平移对称性称为二维晶体，一个方向称为一维晶体

平移矢量（正格矢）通常称为 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 、 \mathbf{a}_3

晶格

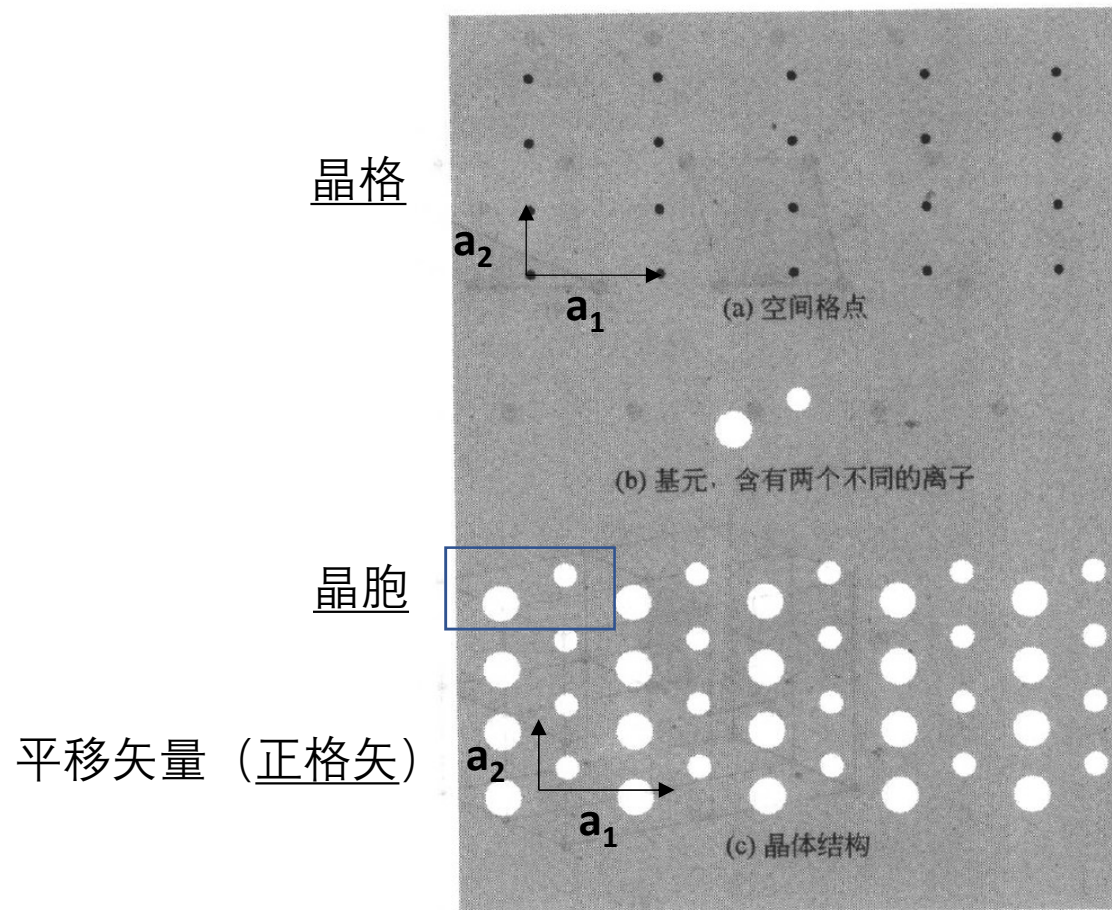
- 利用点来替代晶体中的重复单元，形成的点阵称为晶格 (lattice)



- 一个格点可代表一个原子，也可代表两个或者多个原子
- 每个格点所代表的原子的集合称为一个晶胞 (cell)

例子

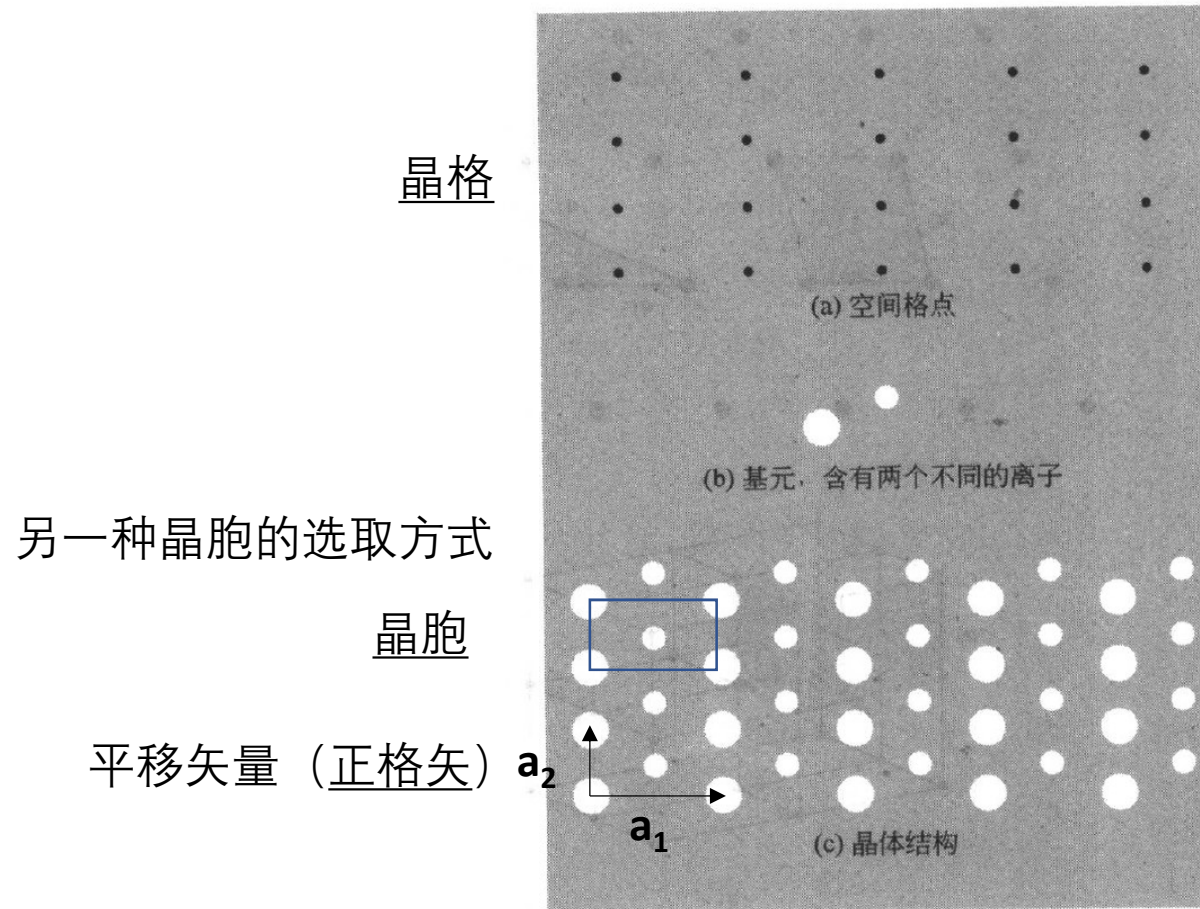
二维晶体示意（现实中并不存在这样的二维晶体）



关键点：平移不变性（平移对称性）

例子

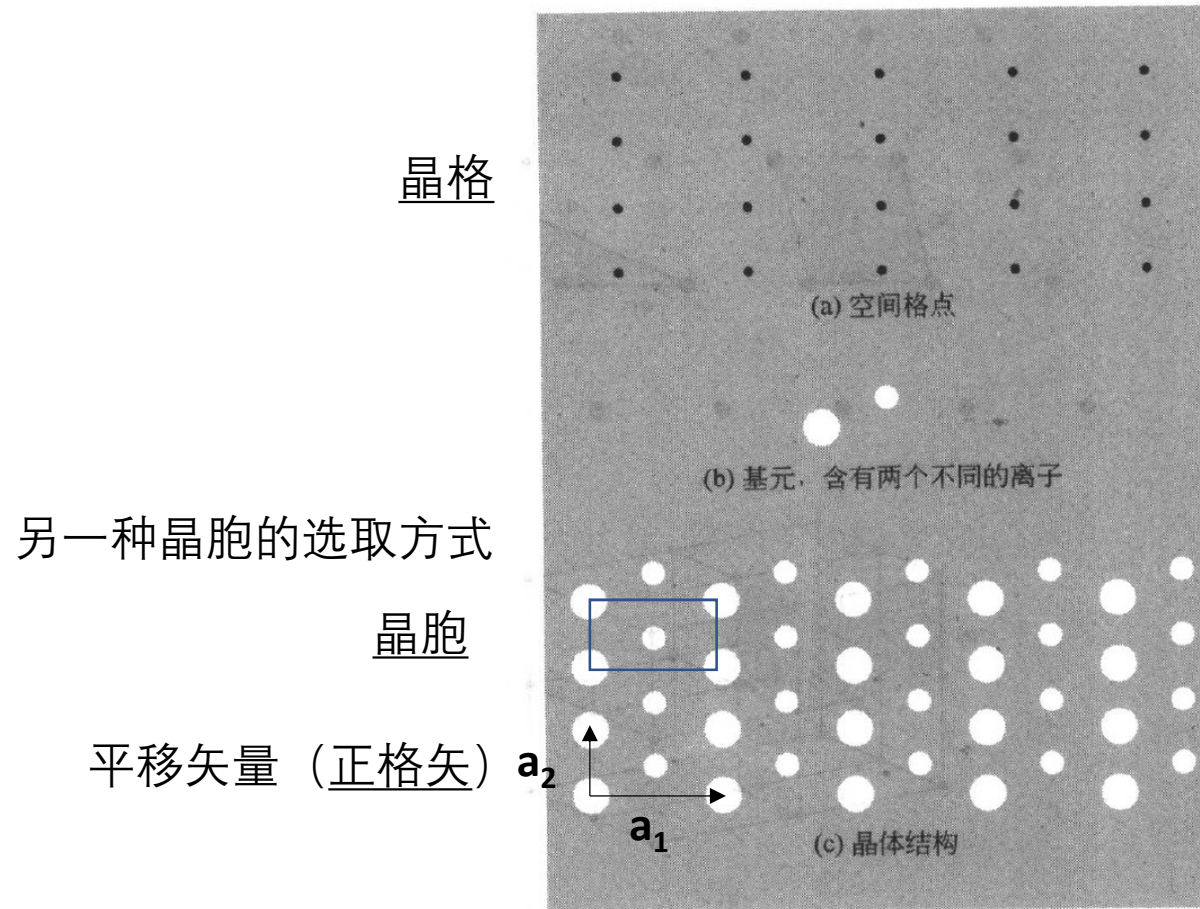
二维晶体示意（现实中并不存在这样的二维晶体）



晶胞边界的原子究竟算几个？

例子

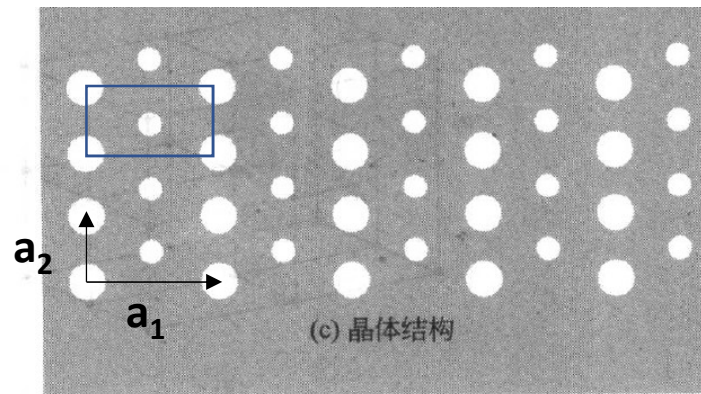
二维晶体示意（现实中并不存在这样的二维晶体）



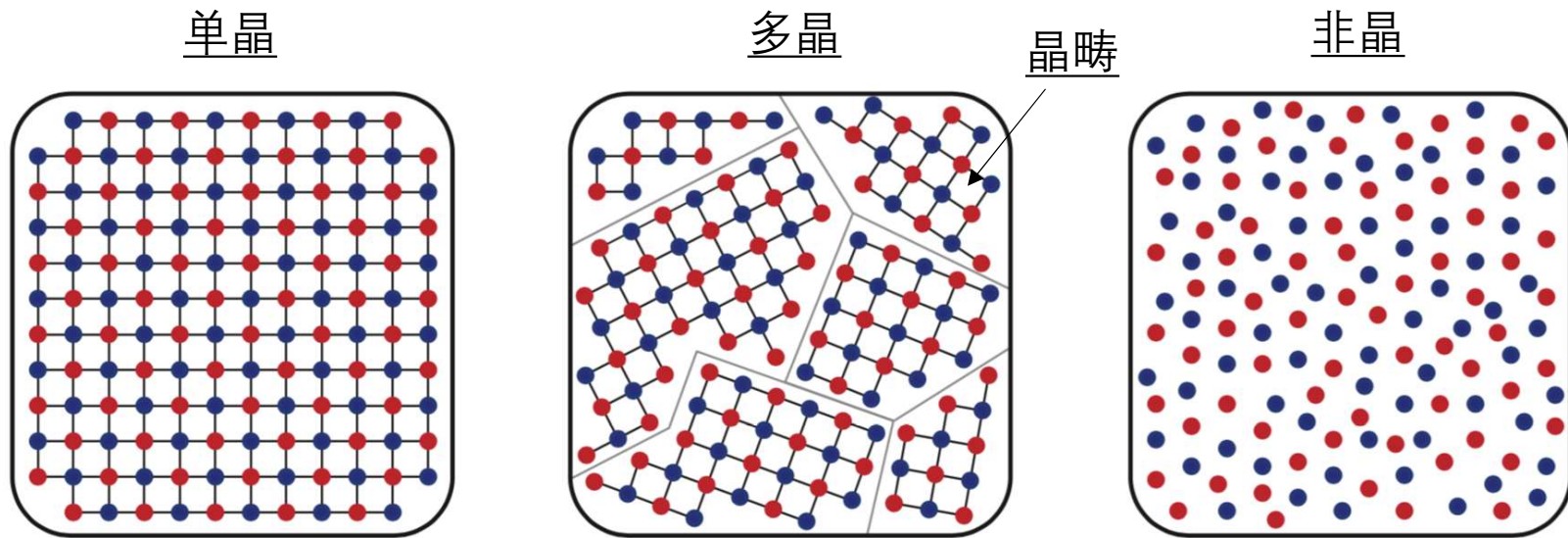
正格矢：线性无关，两个不共线，三个不共面

晶格常数

- 平移矢量（正格矢） \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 、 \mathbf{a}_3 的大小 a 、 b 、 c 通常称为晶格常数
 - 注意晶格常数通常不写作 a_1 、 a_2 、 a_3
 - a 、 b 夹角为 γ ， b 、 c 夹角为 α ， c 、 a 夹角为 β



单晶、多晶、非晶



Crystalline

(Monocrystalline)

Polycrystalline

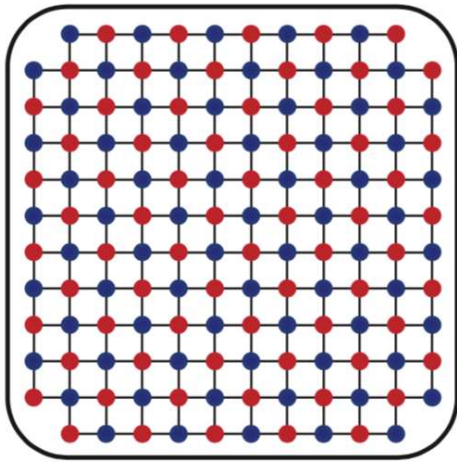
Amorphous

materialen.eu

如果不特别说明，本课程讨论的半导体均为单晶

单晶、多晶、非晶

单晶



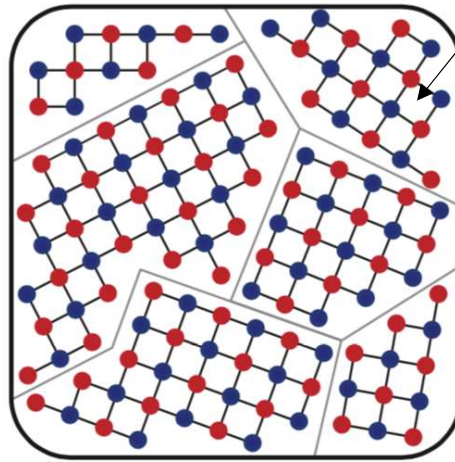
Crystalline

(Monocrystalline)

低能量，低熵

单晶生长

多晶



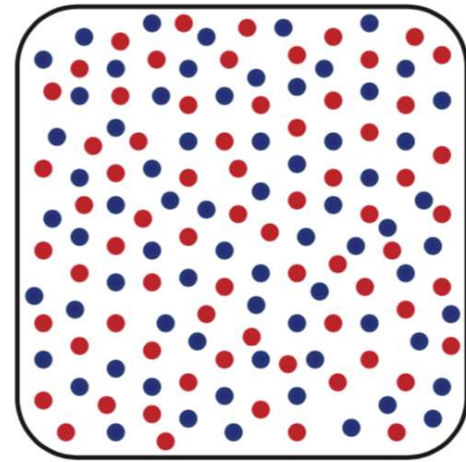
Polycrystalline

较低能量，高熵

缓慢冷却

晶畴

非晶



Amorphous

高能量，高熵

急速冷却（淬火）

晶胞、晶格的意义

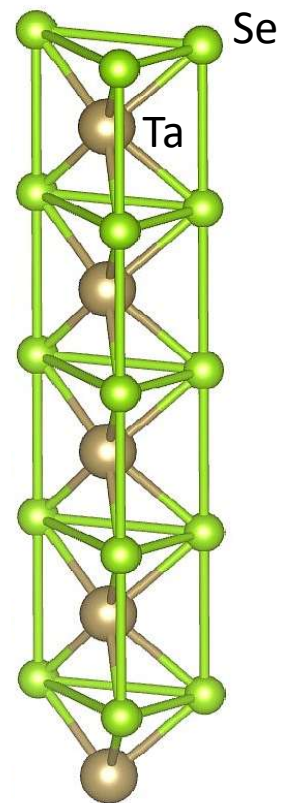
- 对单晶而言：已知晶胞，可通过平移对称性（晶格）推断出物质的结构
- 对多晶而言：知道晶畴的结构，但是晶畴的接合方式未知
- 对非晶而言：非晶没有晶胞和晶格

小结：晶体结构

- 晶体具有平移不变性
 - 三个线性无关的矢量：平移矢量（正格矢）称为 \mathbf{a}_1 、 \mathbf{a}_2 、 \mathbf{a}_3
- 重复单元称为晶胞
- 每个晶胞对应一个点，称为晶格
 - 晶格可由 $h\mathbf{a}_1 + k\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3$ 产生
- 晶格常数
- 单晶、多晶、非晶

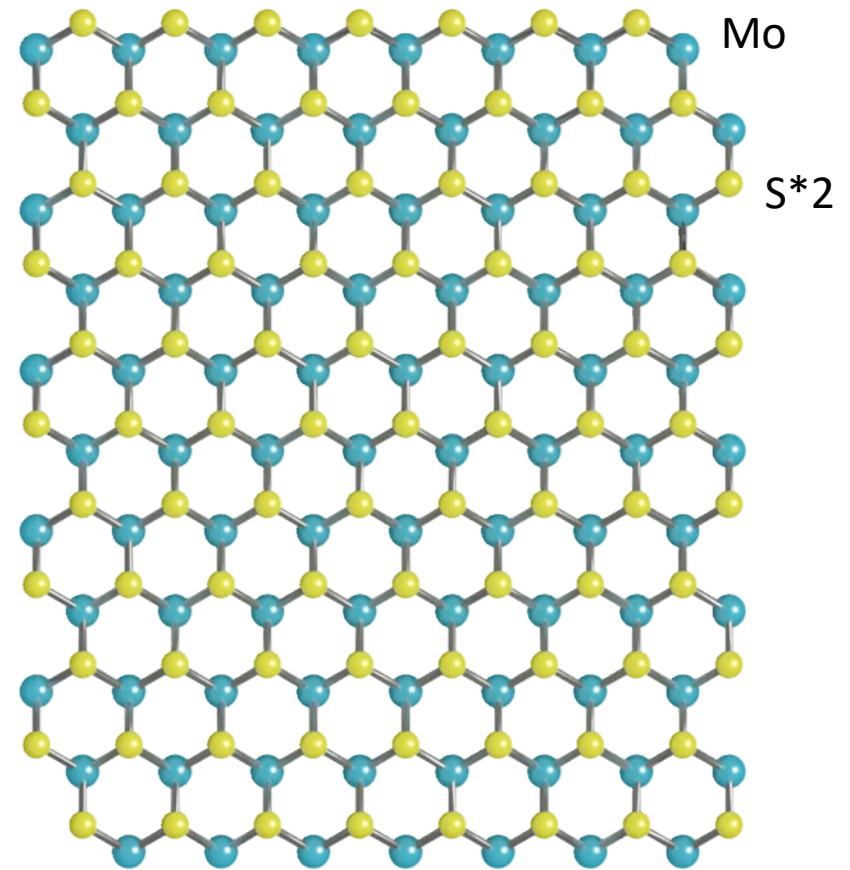
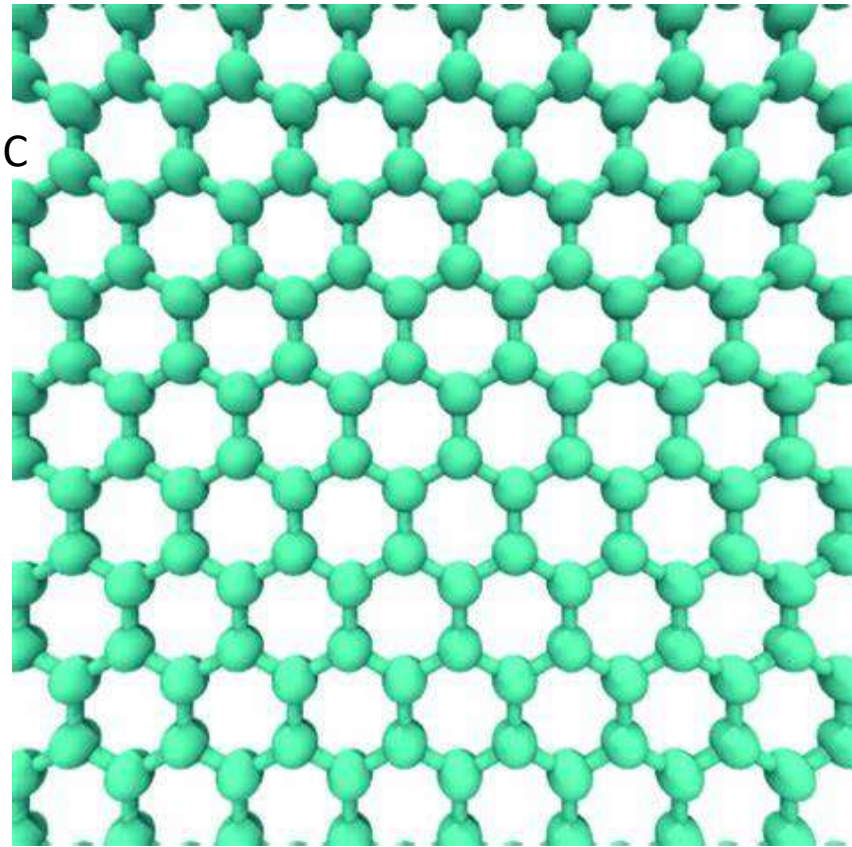
例：“一维晶体”三硒化钽

怎样选择晶胞？晶格是什么样的？



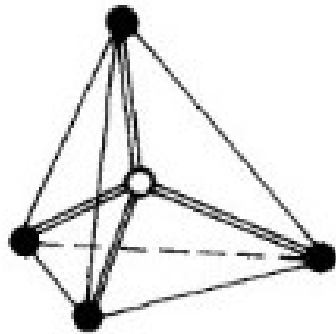
例：二维晶体石墨烯/二硫化钼

怎样选择晶胞？晶格是什么样的？

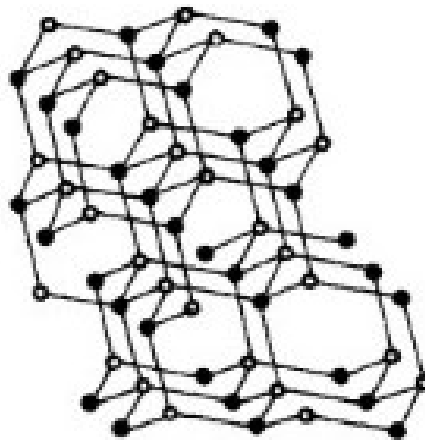


硅单晶的结构

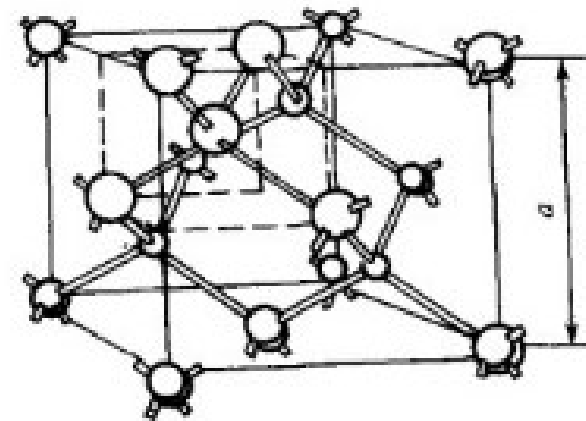
- 硅为金刚石型结构，晶胞为立方体（“立方晶系”）
- 晶格为立方点阵， $\underline{a_1}$ 、 $\underline{a_2}$ 、 $\underline{a_3}$ 互相垂直，大小相等
- 晶格常数 $a = b = c = 0.543 \text{ nm}$ ， $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



(a) 正四面体结构

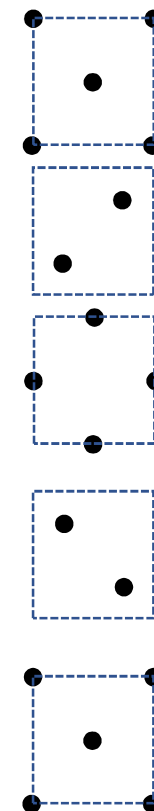
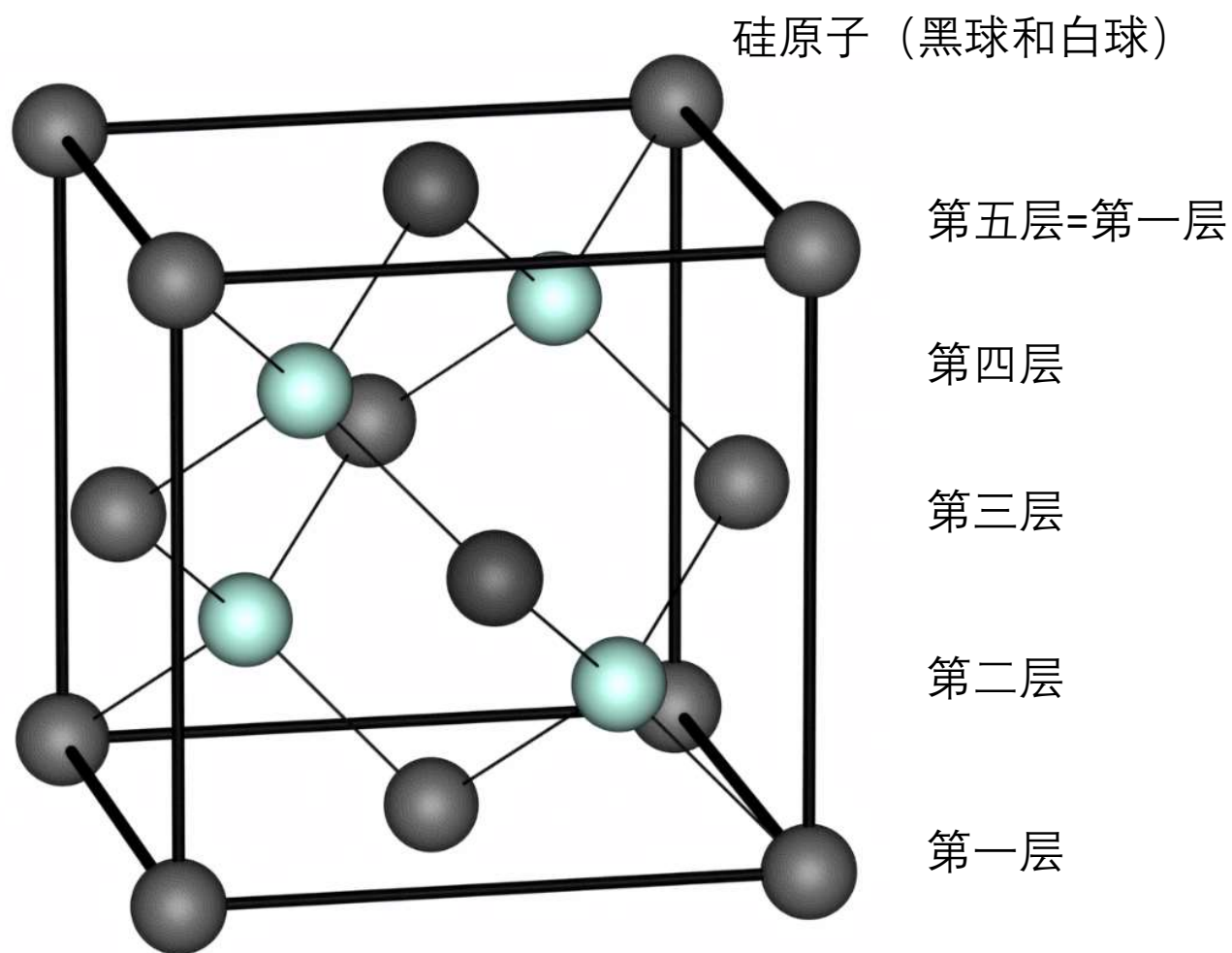


(b) 金刚石型结构



(c) 金刚石型结构的晶胞

硅晶胞的详细结构



第一层有几个硅原子？

晶胞有哪些选择？

晶体结构库: Springer Materials

- <https://materials.springer.com/>
- 可从学校页面i.ustc.edu.cn访问



晶体结构库: Springer Materials

• 搜索化学式

Springer Materials

Si

248 results for
Substance: si
Filtered by: crystal structure

Search instead using the phase

Properties

Search

☒ crystal structure

☐ a-value

☐ absorption spectrum

☐ acentric factor

☐ activation energy

☐ adsorbate coverage

☐ angular frequency

☐ annealing effect

☐ atomic defect properties

☐ atomic environment

Data collections

☐ Inorganic Solid Phases 80

☐ Landolt-Börnstein 115

☐ MSI Eureka 53

Inorganic Solid Phases

Si Crystal Structure

Element system Si, Phase prototype C, Space group *cF8*, 227, Powder, Data on Cell parameters, Published and standardized atom coordinates

Inorganic Solid Phases

Si Crystal Structure

Element system Si, Phase prototype C, Space group *cF8*, 227, Powder, Data on Cell parameters, Published and standardized atom coordinates

Inorganic Solid Phases

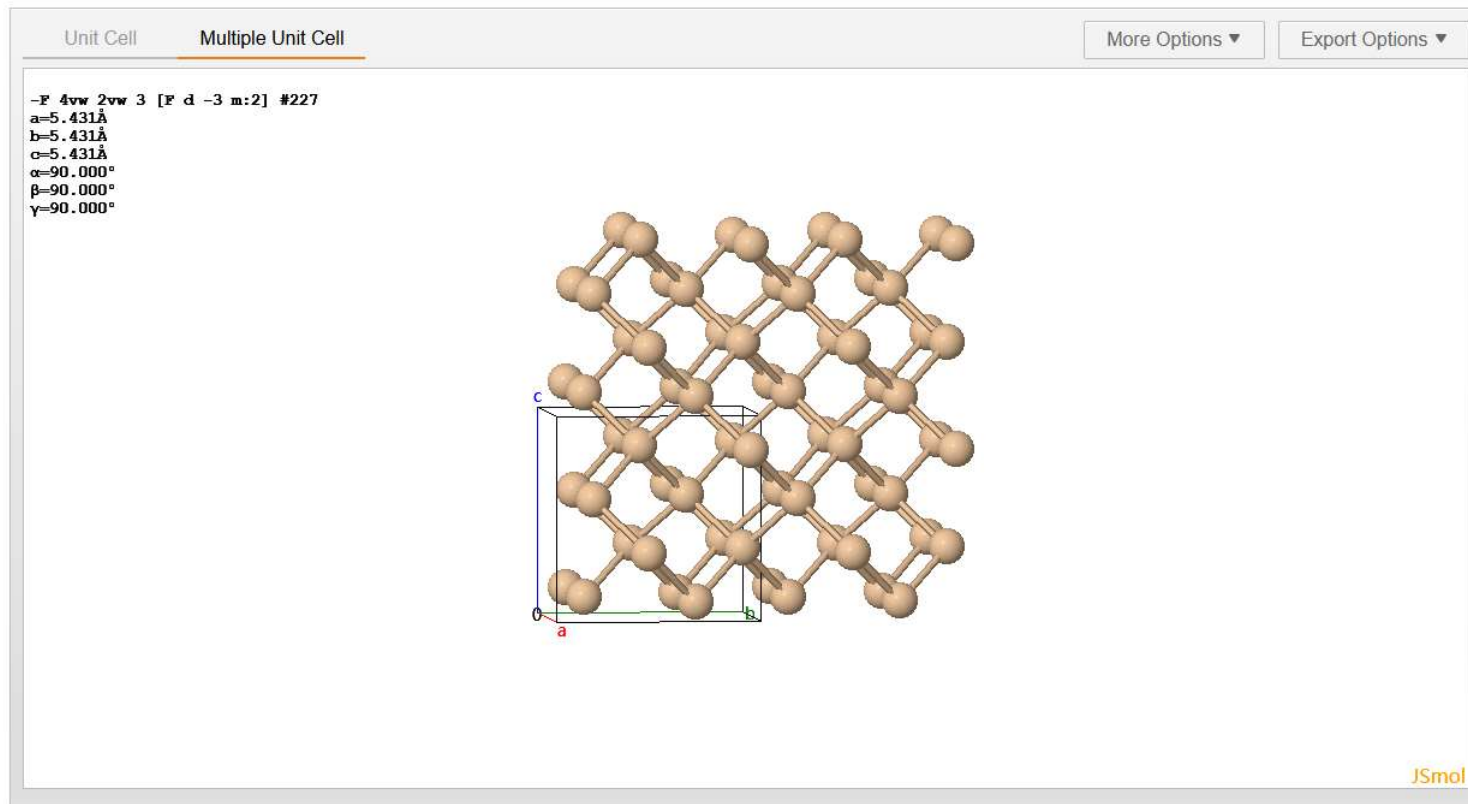
Si Crystal Structure

Element system Si, Phase prototype C, Space group *cF8*, 227, Powder, Data on Cell parameters, Published and standardized atom coordinates

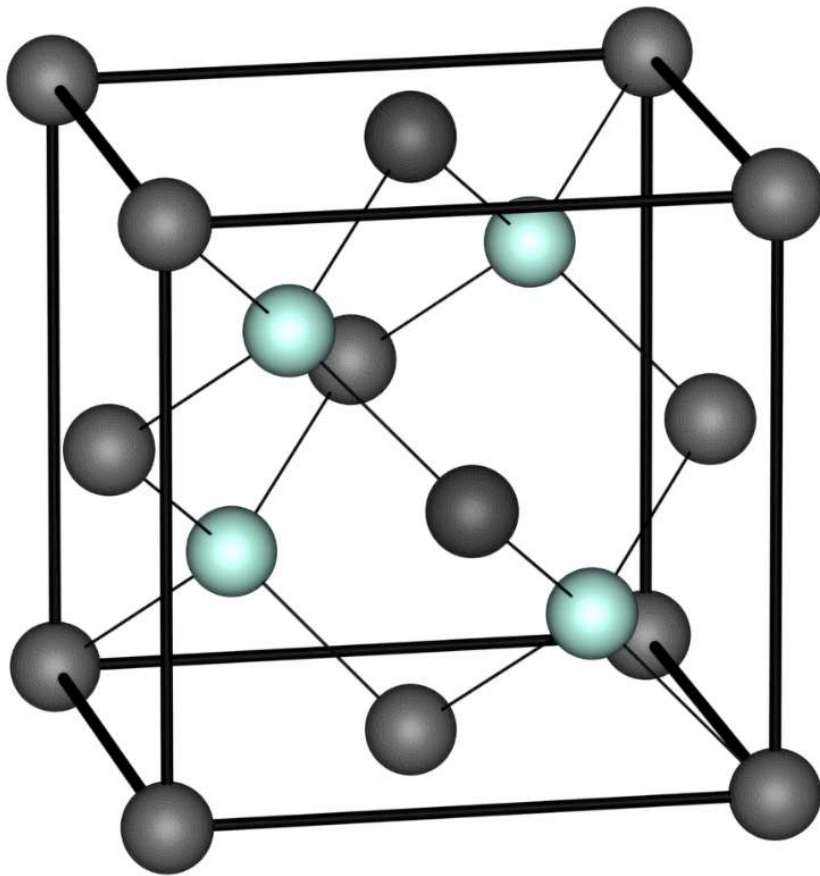
晶体结构库: Springer Materials

- 可查看晶体结构、晶格常数、可视化等

▼ 3D Interactive Structure



如何理解硅的晶体结构？

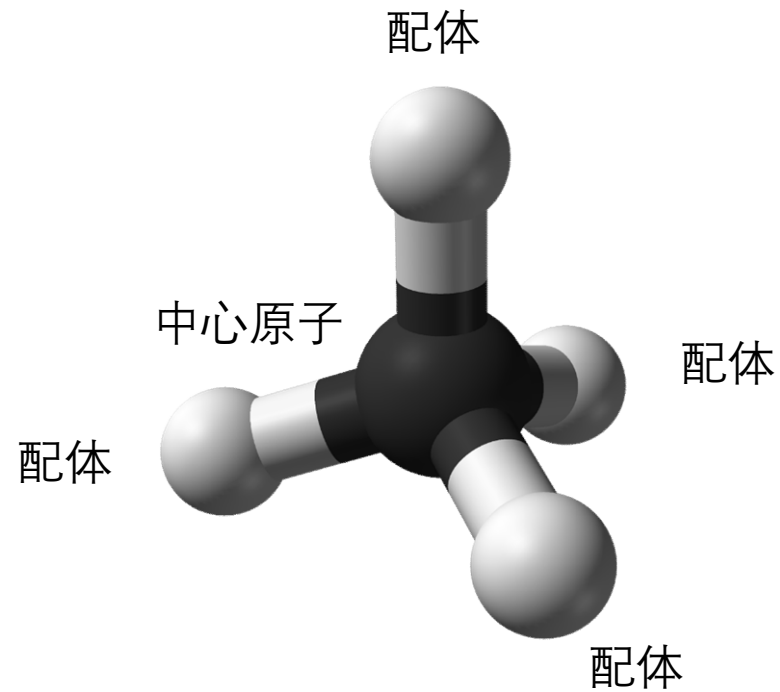


- 硅原子之间通过共价键相连
 - 共价键：通过共用电子而实现两个原子之间相互吸引的机制
- 一个硅原子与其它4个硅原子连接
 - “正四面体配位”
 - “ sp^3 杂化”
- 晶胞面上、角上的共价键未画完整

第二章会详细解释共价键和 sp^3 杂化

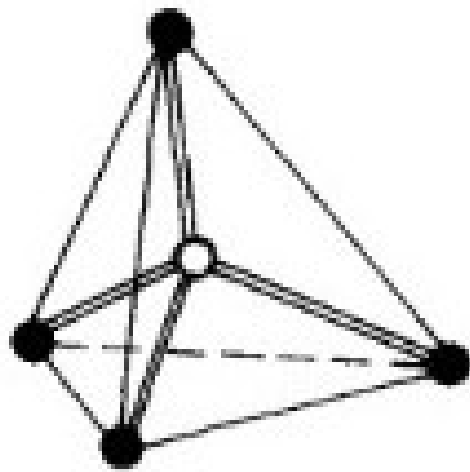
配位

- 配位：中心原子与周围和它成键的原子（配位原子/配体）的相对位置关系



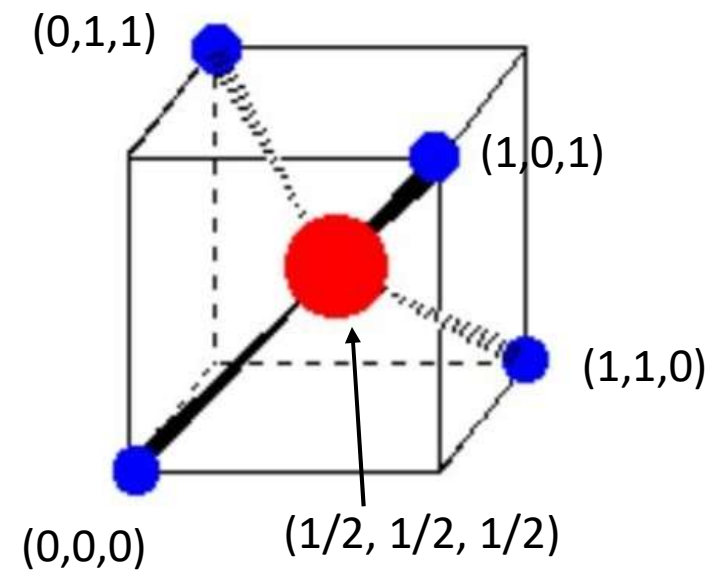
正四面体配位

中心原子位于正四面体中心，配位原子位于正四面体四个顶点



(a) 正四面体结构

正四面体配位的另一种表示方法



可以此计算键长、键角等