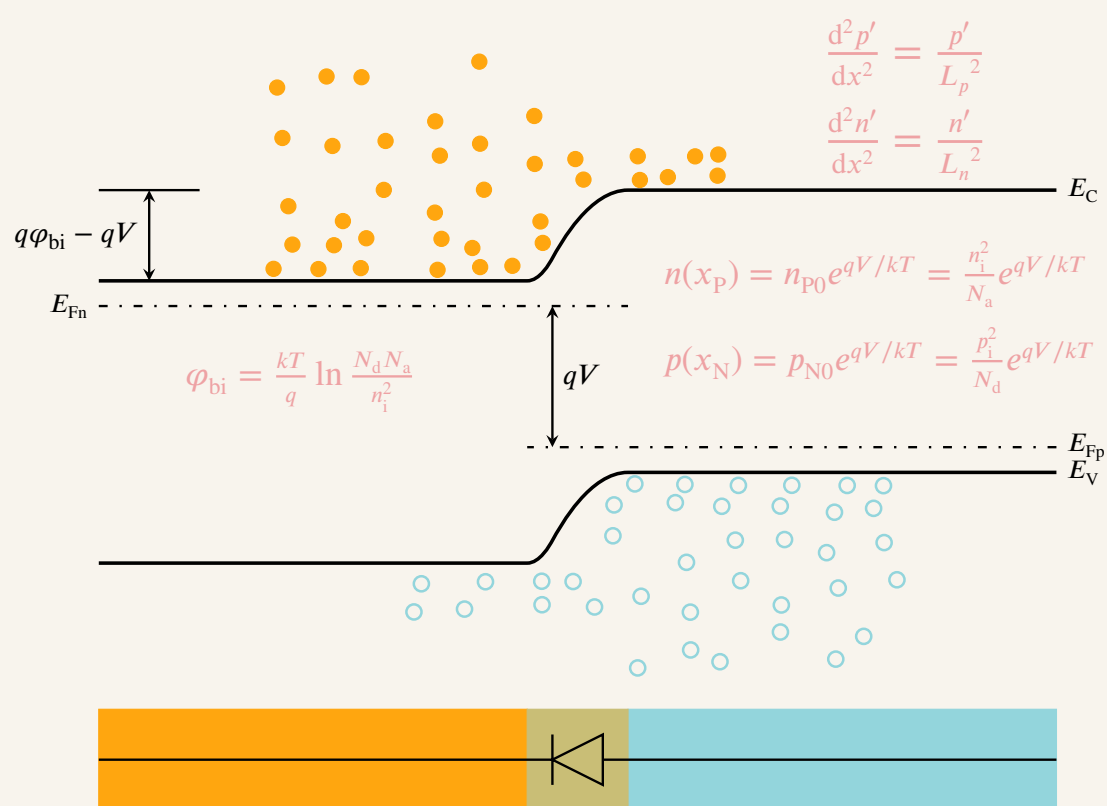


半導體器件物理

學習筆記



目录

1	基础知识	1
1.1	晶体结构	1
1.2	量子力学基础	3
1.3	能带模型	3

第一章 基础知识

1.1 晶体结构

固体是处于凝固状态下的物体，通常具有一定的质量和体积。按照其内部原子的排列情况可分为三种主要的结构类型，即**单晶**、**多晶**和**非晶**。

- **单晶**：长程有序（整体有序，宏观尺度，通常包含整块晶体材料，一般在毫米量级以上）；
- **多晶**：长程无序，短程有序（团体有序，成百上千个原子的尺度，每个晶粒的尺寸通常在微米量级）；
- **非晶**：基本无序（局部、个体有序，几个原子或分子尺度，纳米级）

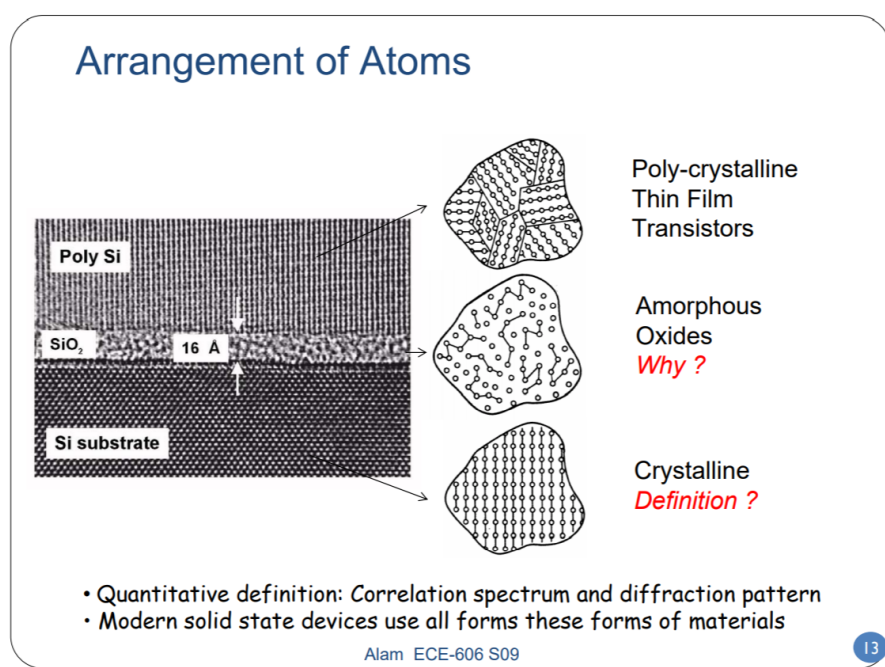


图 1.1: 现代固态器件上拥有所有晶体形态

图1.1展示了三种晶体的结构示意图，在现代半导体器件工艺中，通常三种晶体都会被用到，如图中多晶硅栅极、非晶氧化绝缘层和单晶硅衬底。通常若不特别说明，晶体特指单晶。

1.1.1 原胞与晶胞

晶体在几何空间上，有着很强的周期性。为了描述这种特殊的原子排列，引入**格点**可以更好的分析，同时与之相关的概念还有**晶格**、**晶胞**和**原胞**。其示意图见图1.2和图1.3。

- **晶格 (Lattice)**：晶体中原子的周期性排列情况，分为简单晶格¹和复式晶格²两大

¹Cu, Fe, Ag

²NaCl

类。

- **格点 (Lattice Point)**: 晶格中用来表示原子阵列的点。
- **晶胞 (Unit Cell)**: 也称为单胞, 通常是以格点为顶点、以三个独立方向上的周期为边长所构成的平行六面体。它是晶体中的一个小的单元, 可以用来不断重复, 从而得到整个晶体, 通常能够反映出整块晶体所具有的对性;
- **原胞 (Primitive cell)**: 能够不断重复得到整个晶体的最小晶胞。通常未必能够反映出整块晶体所具有的对性;
- **基矢 (Basis vector)**: 即晶胞的三个相互, 独立的边矢量。

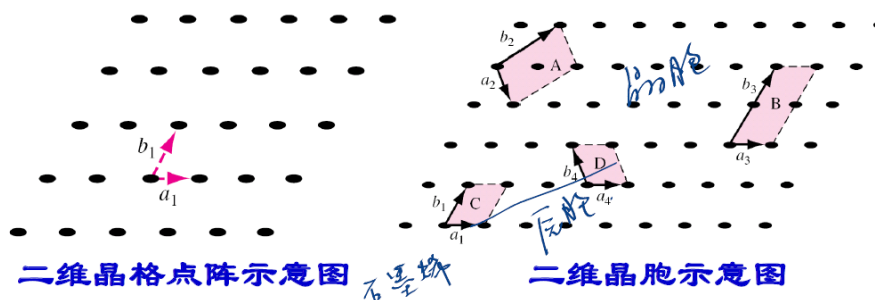


图 1.2: 二维晶胞和晶格

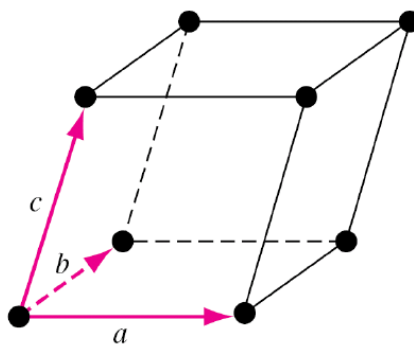


图 1.3: 晶胞基矢示意图

常见的三个基本立方结构分别是简单立方 (SC, Simple Cubic)、体心立方 (BCC, Body-Centered Cubic)、面心立方 (FCC, Face-Centered Cubic)。立方体的边长即为晶格常数。

1.1.2 晶向、晶面和密勒指数

设 $\vec{a}\vec{b}\vec{c}$ 是晶体的三个独立基矢, 则连接任意两个格点的矢量可表示为:

$$\vec{r} = l\vec{a} + m\vec{b} + n\vec{c}$$

取与 l 、 m 、 n 成比例的三个互质整数 u 、 v 、 w , 并将他们放在方括号内, 即 $[u\ v\ w]$, 用来表示特定的晶向。由晶体中的原子排列所构成的平面称为晶面。

设某晶面与 $\vec{a}\vec{b}\vec{c}$ 轴的截距分别是 p 、 q 、 s , 且 p 、 q 、 s 为整数³, 取与 p 、 q 、 s 各自的

³原点是任意的

倒数成比例的三个互质的整数 h 、 k 、 l ，即

$$h : k : l = \frac{1}{p} : \frac{1}{q} : \frac{1}{s}$$

将它们放在圆括号内，即 (h, k, l) ，用来表示特定晶面的取向。这组晶面指数就是密勒指数。如图1.4为几个特定的晶向和晶面示意图。

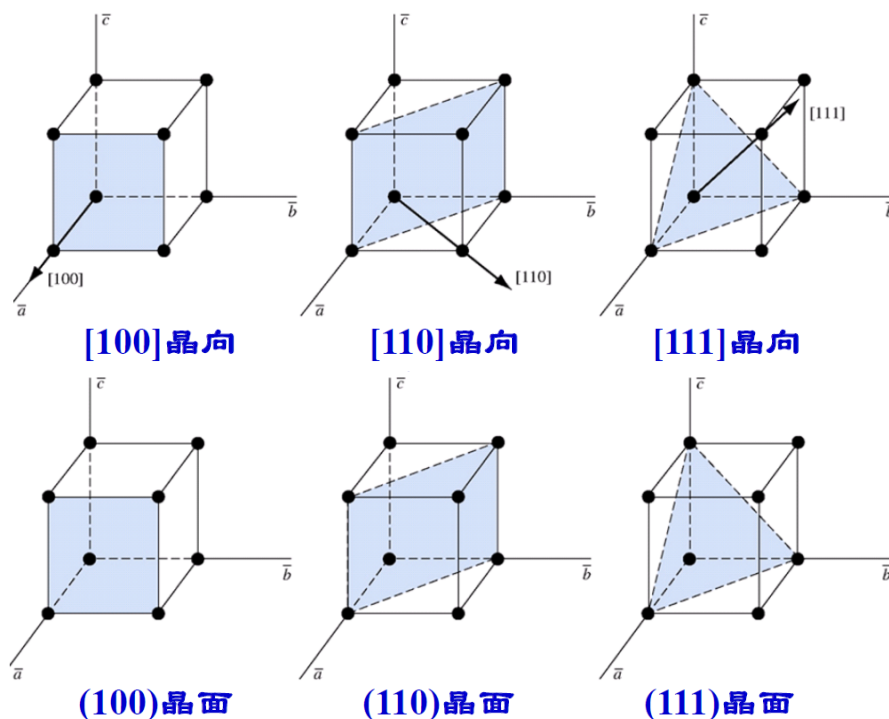


图 1.4: 晶向指数和晶面指数

1.1.3 金刚石结构

硅、锗等半导体材料都是金刚石结构，如图所示。Si 的晶格常数为 5.43\AA ，Ge 的晶格常数为 5.65\AA 。

1.2 量子力学基础

1.3 能带模型