

半导体材料

第二章：基本原理

材料学院

徐桂英

第二章：基本原理

- 在第一章中介绍的半导体材料的特征，只是根据它的主要性质来论述的，实际上这种论述并不是十分严格的。
- 例如当一些半导体材料的掺杂浓度很高时，其电导率也可以高出某些金属材料。
- 但作为第一步，使大家对半导体材料有一个初步的概念，这种介绍是必要的。
- 只有认识了半导体的微观结构以及这种微观结构与物性的关系，才能从根本上了解半导体的性质与性能及其与金属、绝缘体的区别，也才能理解半导体材料应用的根据。
- 为此要阐述半导体的能带结构、化学键、晶体结构等。这要求具备固体物理、固体化学、量子力学等近代科学理论，这就远远地超出了本课程的范围。
- 本课程试图深入浅出地对一些原理进行介绍，以便获得必要的概念。有了这些知识与概念才能对本课程以下各章节的内容有较深入的理解，并能了解它们之间的联系。

2.1 导电现象

2.1.1 为什么半导体的导电性不如金属

■所有材料的导电率（ σ ）可用下式表达：

$$\sigma = ne\mu \quad (2-1)$$

其中：

□ n 为载流子浓度，单位为个/cm³；

□ e 为电子的电荷，单位为C（库仑）， e 对所有材料都是一样， $e=1.6 \times 10^{-19}C$ 。

□ μ 为载流子的迁移率，它是在单位电场强度下载流子的运动速度，单位为cm²/V.s；

□ 电导率 σ 的单位为S/cm(S为西门子)。

我们先看看室温下半导体和金属导电的差别原因：

■(2-1)式中的迁移率的差别：而半导体材料的迁移率一般都高于金属，例如金属铜的室温电子迁移率为30 cm²/V.s，而硅为1500(cm²/V.s)，锑化铟则为78000cm²/V.s。

■**载流子浓度**：金属的电导率比半导体要高出几个数量级的原因从（2-1）式看，只能是载流子浓度的差别。

在金属中，价电子全部解离参加导电，例如导电性能好的**金属铜的载流子浓度为 $8.5 \times 10^{22}/\text{cm}^3$** ，而**半导体材料的载流子浓度则在 $10^6 \sim 10^{20}/\text{cm}^3$ 范围内**，与金属相差可达十几个数量级。于是，金属的电导率一般要高于半导体材料是显而易见的了。而**绝缘体因其载流子浓度接近于零**，所以不导电。

■既然**金属中的价电子全部参加导电，因此无法再增加载流子，也无法束缚住载流子**，所以金属的导电率难以在大范围内进行调节，掺入杂质和升温会在一定程度上能降低迁移率，使电导率降低一些。

■而半导体的载流子浓度可通过升温、掺入杂质、辐照予以大幅度地增加，使其电导率发生显著变化。

■**为什么金属的价电子会全部解离，半导体的价电子只局部解离，而绝缘体又不解离？**这些将在能带结构等章节中加以说明。

2.1.1 存在两种载流子的证明

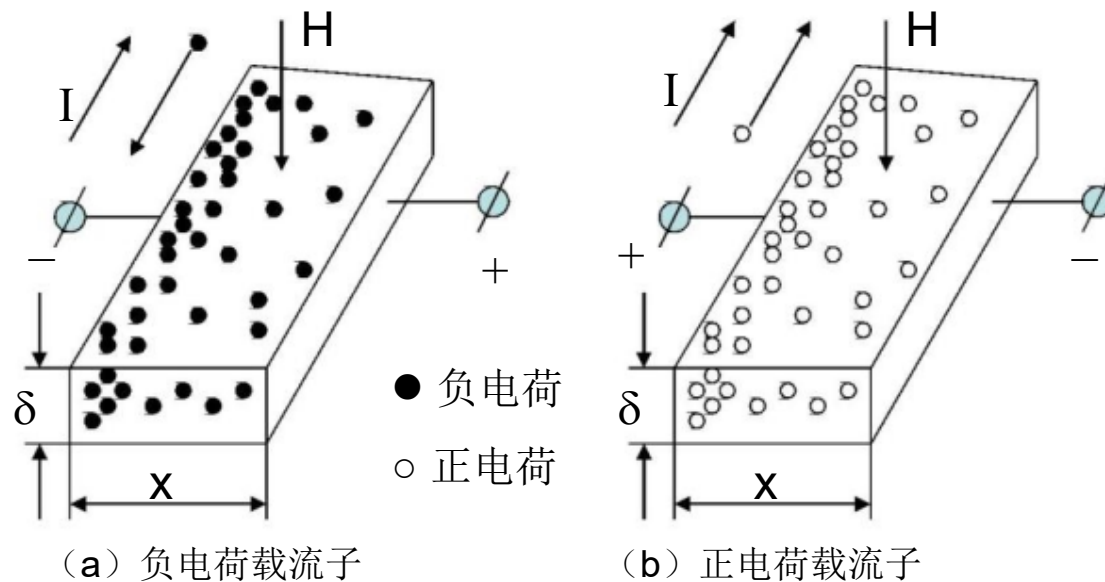


图2.1 霍尔效应原理

早在1879年霍尔)就发现: 将一块矩形样品在一个方向通过电流, 在与电流的垂直方向加上磁场(H), 那么在样品的第三个方向就可以出现电动势, 称霍尔电动势, 此效应称霍尔效应。

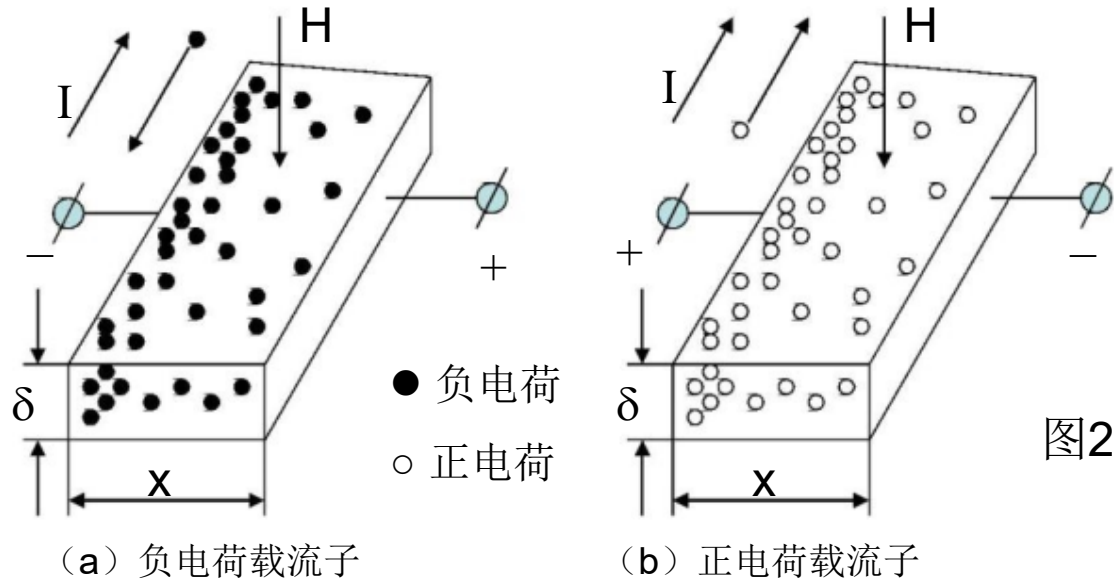


图2.1 霍尔效应原理

- 从这个电位差的正反，就可以知道载流子是带正电或负电。其原理是洛伦茨力作用的结果，也就是当电流通过磁场时，不管载流子是正还是负，只要电流方向一定，那么它的作用力的方向也就相同，这就使得载流子的分配偏在同一方向，如图2.1所示。
- 显然，载流子的电荷不同，它的霍尔电动势也不相同。可见，霍尔电动势的方向取决于载流子带的电荷是正还是负。
- 用此法测量金属时，证明绝大多数的金属都是靠带负电荷的载流子--电子进行导电的。

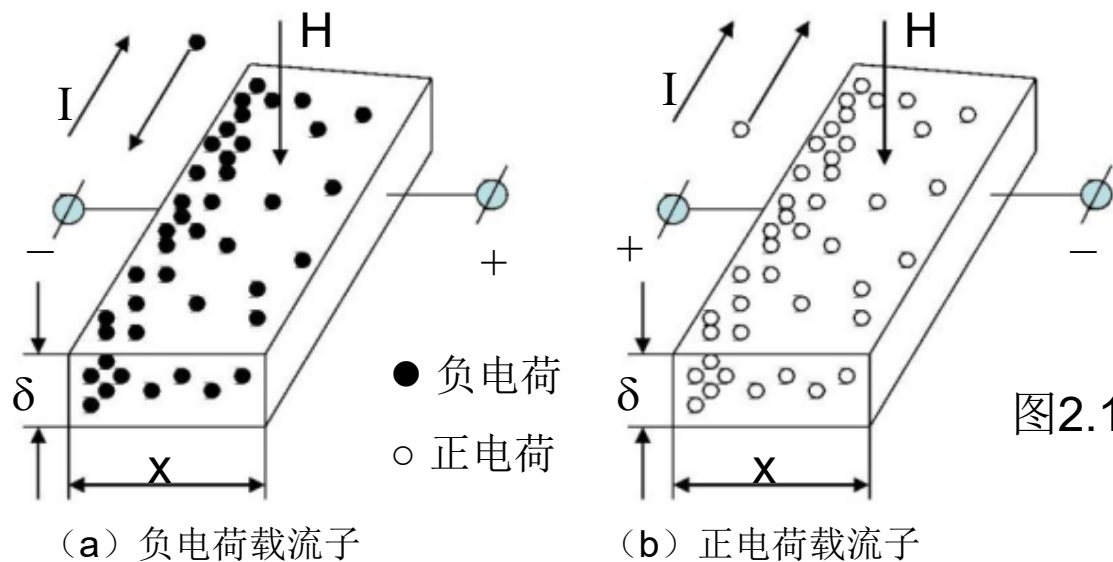


图2.1 霍尔效应原理

■测量半导体时发现，一种材料既可以靠带负电荷的电子进行导电，又可以靠带正电荷的载流子进行导电。**这种带正电荷的载流子称为空穴。**

■**那么空穴的本性是什么？为什么半导体能产生空穴？**这要在下面的关于能带结构和化学键的两节中加以说明。

■既然半导体中可以存在两种载流子，那么式(2-1)可以写成

$$s = ne\mu_e + pe\mu_p \quad (2-2)$$

■其中n为电子浓度；p为空穴浓度； μ_e, μ_p 分别为电子与空穴的迁移率。

■如果 $n \gg p$ ，则， $s = ne\mu_e$ ，e

■反之，若 $p \gg n$ ， $s = pe\mu_p$

2.2 能带结构

我们首先看看单个原子的情况。

■大家都知道原子是由原子核及其周围的电子构成的，外围的电子数等于原子核内的质子数。

■这些电子都有自己的能量，根据现代量子力学的理论，这些能量是量子化的，即有一定的数值，而且是不连续的，这些彼此不连续而有一定数值的能量称为能级。

■一个电子的能量只能从一个能级跳到另一个能级，不可能连续地变化，伴随这种跳跃会吸收或放出一定的能量。

■根据鲍林 (L.Pauling) 的不相容理论，不可能有两个电子的量子数完全相同。这样，在原子的一个能级上，只能有两个电子，它们的量子数区别在于其自旋 (spin) 的正与反。

许多原子形成晶体的情况：

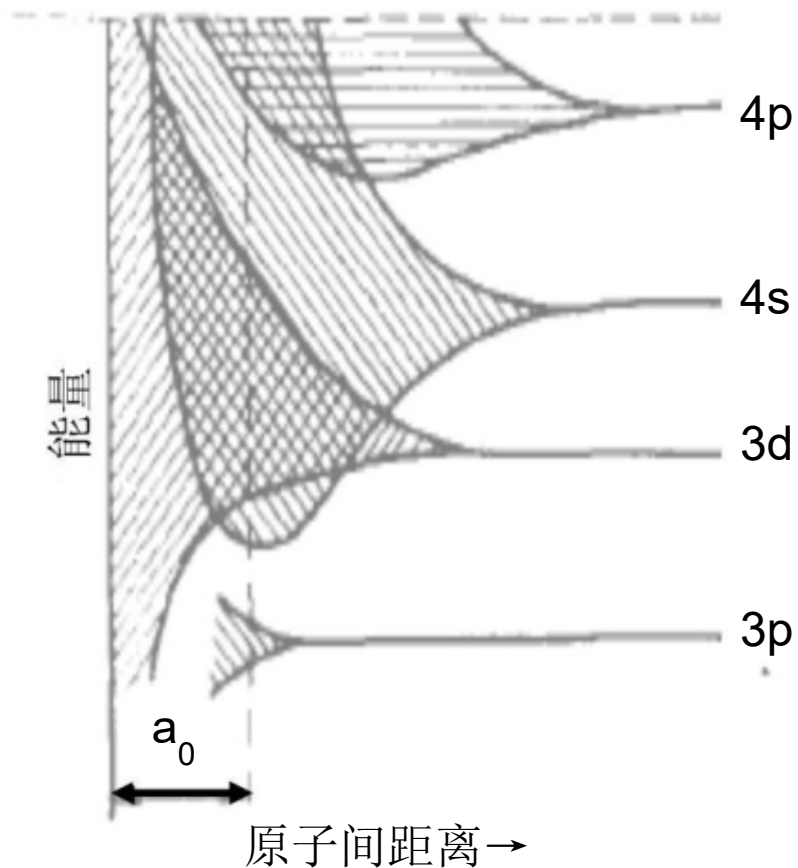


图2.2元素铜的能带形成
(其中 a_0 为晶格常数)

■当许多原子彼此靠近而形成晶体时，各原子的电子间发生相互作用，各原子间原来在分散状态的能级扩展成为能带，

■这能带是由彼此能量相差比较小的能级所组成的准连续组。因为只有这样才能保持电子能量的量子化并符合鲍林的不相容原理。

■图2.2 示出了元素铜的能带形成过程，当原子相靠近时能级扩展为能带的情形以及在形成晶体时，在晶体内的原子间距（即晶格常数）上，能带发生的搭接的现象。

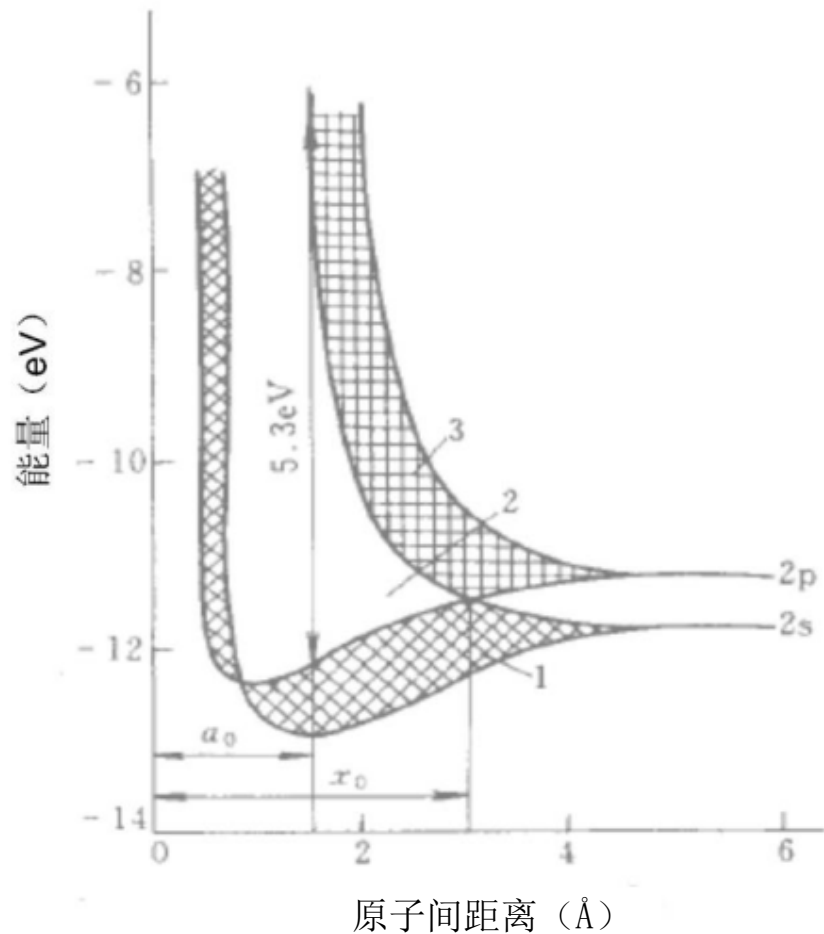


图2.3 碳原子彼此接近形成金刚石的能带示意图

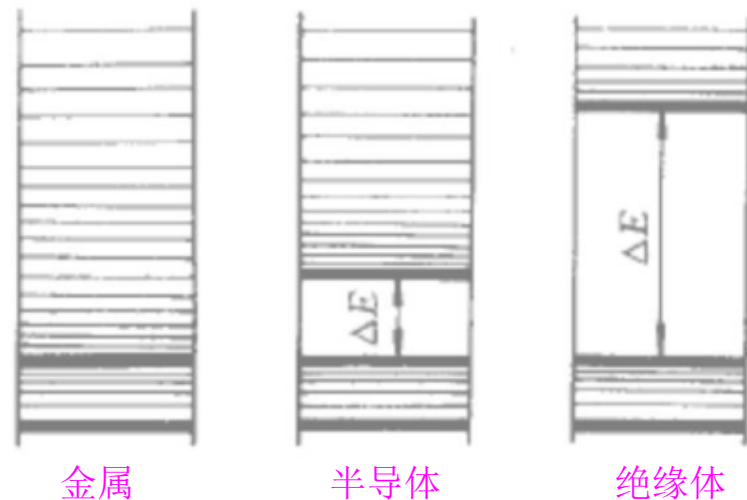
1—价带；2—禁带；3—导带；

a_0 —金刚石晶格常数；

x_0 —能带搭接时的原子距离

■图2.3 示出了碳原子形成金刚石晶体时能带的形成，以及能带间禁带的形成。

■按照能带搭接或分立的情况，我们可以把金属、半导体、绝缘体的能带结构的区别用图2.4加以简单表示。



金属

半导体

绝缘体

图2.4 金属、半导体和绝缘体的能带结构示意图
(ΔE 称为禁带宽度或带隙)

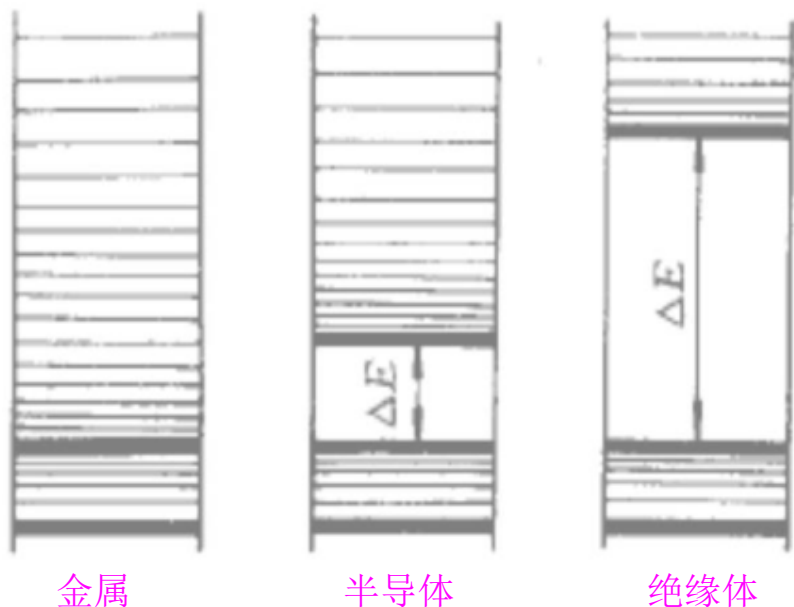


图2.4 金属、半导体和绝缘体的能带结构示意图
(ΔE 称为禁带宽度或带隙)

■根据能带结构图2.4，可以把固体材料分成两大类：

- 一类是价带与导带相互搭接，这是导体；
- 另一类则在价带与导带之间存在着禁带，这包括半导体与绝缘体。

■在导体中：

- 一类材料是由于电子在价带中并未填满，电子可以在带内的各个能级上自由流动，这需要的能量非常之小；
- 另一类材料虽然在价带中被填满，但由于能带之间的相互搭接，所以价电子很容易从价带进入到导带成为自由电子而导电。

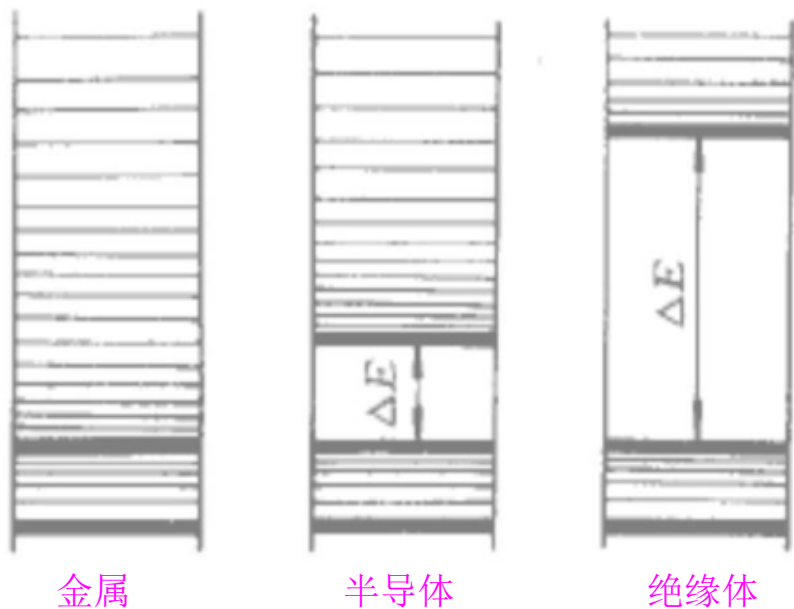


图2.4 金属、半导体和绝缘体的能带结构示意图
(ΔE 称为禁带宽度或带隙)

■而半导体材料则因其价带已填满，在价带和导带间存在有禁带，价电子必须要具有足够的能量跃过禁带才能进入导带而导电，在常温或更高一些温度下，由于能量的不均匀分布，总有一部分价电子能进入导带，使其具有一定的电导率。

■对绝缘体而言，其禁带宽度大，以致在常温或较高温度下均不能使其价电子进入导带所以不能导电。

2.3 化学键

■**能带理论**是从固体的整体出发，主要考虑到**晶体结构的长程序的周期性**。用这个理论容易说明导体、半导体、绝缘体之间的区别以及半导体材料的一些本性。

■**化学键理论**主要**从物质的化学组成、晶体结构等短程序排列**来说明半导体材料的物性与化学组成、杂质行为等问题。

■固体的化学键主要有离子键、共价键、金属键、分子键等。

■它们的特征列入表2.1 中。

表2.1 化学键的构造及其物理性质

化学键	键结构	键强度	力学性质	热学性质	电学性质	光学性质
离子键	带电离子间静电吸引, 无方向性	强, 中强	可具有不同硬度, 压延性差	熔点高, 热膨胀系数小	固态绝缘体 熔融态导电	光吸收与折射基本与离子相同
共价键	相邻原子间共有电子对, 有方向性	强, 中强	一般强度高, 压延性差	熔点高, 膨胀系数小	绝缘体或半导体	具有高的折射率, 半导体对不同波长的吸收不同
金属键	自由电子弥散在晶体的阳离子之间, 无方向性	不同强度	不同硬度, 压延性好	熔点不同	导体	不透明, 反射率大, 有金属光泽
范德华键	分子并置引起偶极而产生的弱力, 无方向性	弱	硬度极小	熔点低	绝缘性	性质为各分子叠加性质

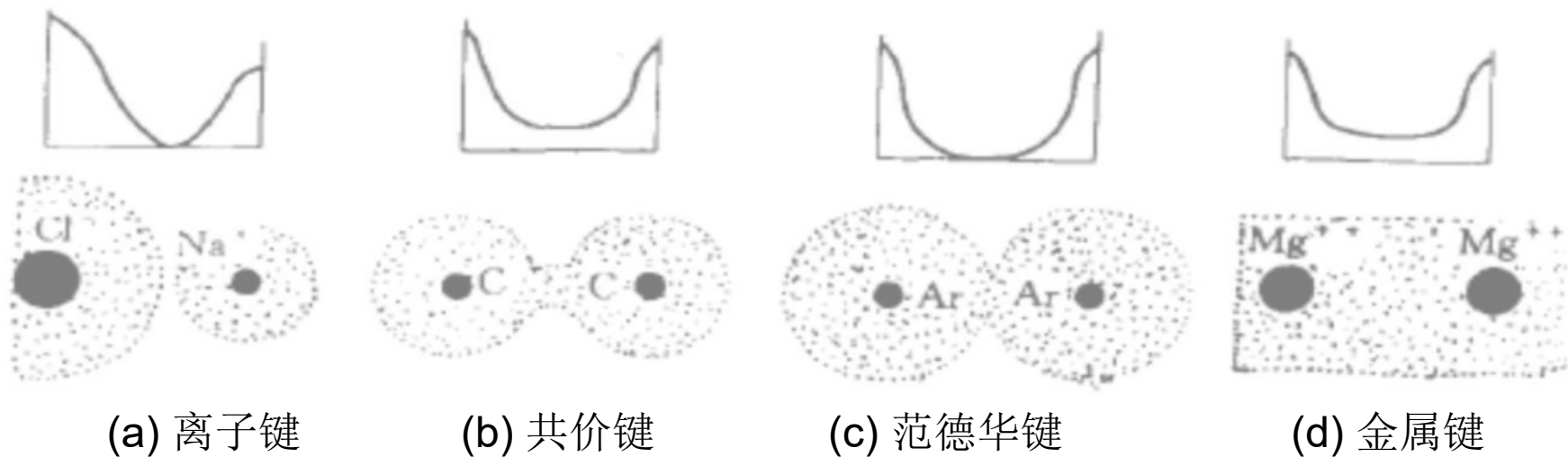


图2.5 不同化学键的电子分布

■ 各种键的本质区别在于价电子对各个原子间的不同分配关系，图2.5示出了前四种化学键的价电子分配关系。

□ 在离子键中，如NaCl，Na原子将其价电子完全给了Cl而形成Na⁺离子与Cl⁻离子。这种物质在常温下为绝缘体，但在熔融状态则靠离子导电。

□ 以金刚石为代表的是外围价电子共用的共价键。

□ 以Ar为代表的范德华键是靠瞬时电偶极矩的感应和引力形成的键。

□ 以金属Mg的外围电子形成自由电子为正离子Mg²⁺所共享，并被正离子产生的库仑力所吸引。

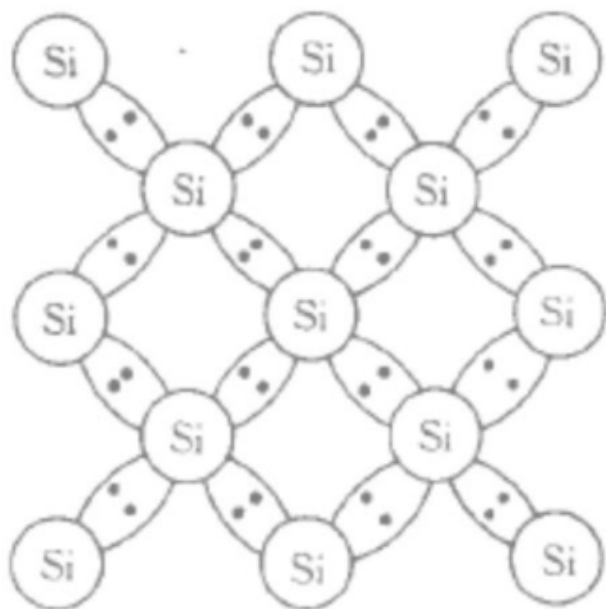


图2.6 硅的共价键

将硅作为半导体的代表，其共价键的示意图见图2.6。

- 从图2.6 中可看出每个硅原子共有4个共价键，有8个电子。
- 按照鲍林的不相容理论，每个能级上只有一对电子。
- 这可用杂化轨道来解释，即在组成晶体时，原子的势场受到周围原子的影响而产生微扰，从而杂化组成新的轨道。
- 从图中可以看到，在这种共价键的结构中没有自由电子，这反映在绝对零度的温度条件下，半导体是呈绝缘体的情形。

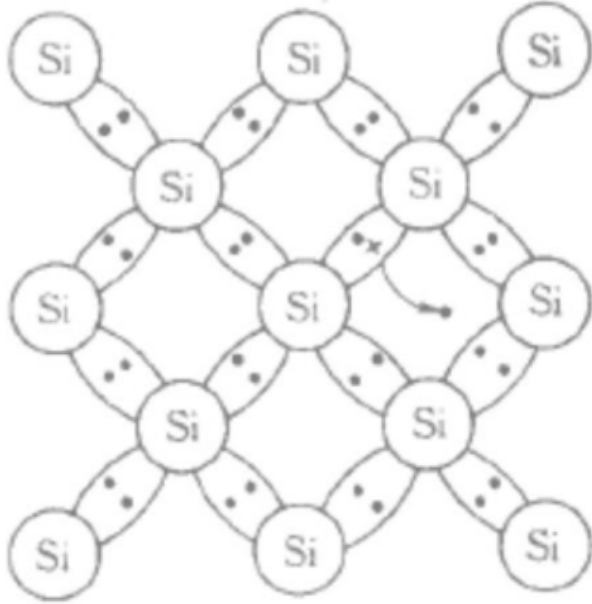


图2.7 硅的本征激发示意图

- 随着温度的升高，电子的能量也随之增高，但能量在电子之间并非是均匀分布的，其中能量高的电子就可能挣脱共价键的束缚而成为自由电子，如图2.7所示。
- 这反映在能带结构上，就是电子从价带进入到导带的空闲着的能级上。

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/806041214012010223>