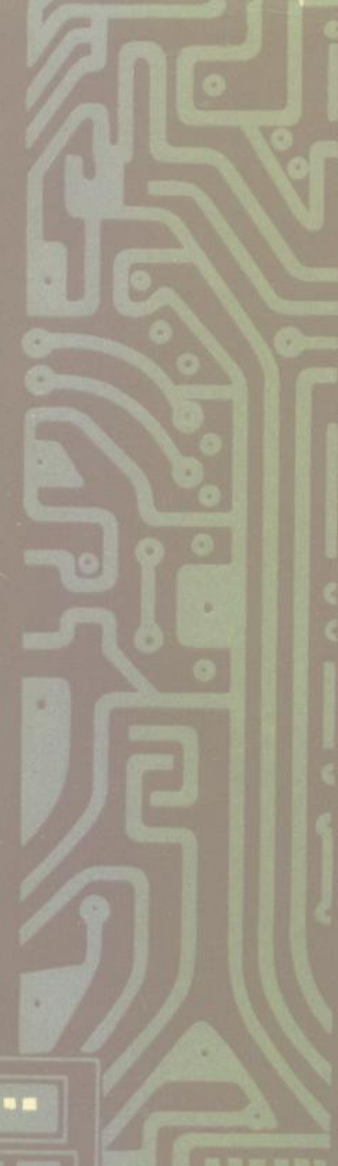


主 编 黄 敞
副主编 林达荃 伊春乐



大规模集成电路与 微计算机

上 册

科学出版社

73.755
577

大规模集成电路与微计算机

上 册

主编 黄 敞

副主编 林达荃 伊春乐



科学出版社

1985

8610161

内 容 简 介

本书主要介绍大规模集成电路和微型计算机的基础知识。全书共四篇，分上、下两册。

上册包括一、二两篇，共九章。第一篇为半导体器件物理及大规模集成电路的基础技术。其中，重点介绍了载流子总量分析方法及其应用；第二篇为微型计算机的基本原理。从数字计算机的基础知识出发介绍了微型计算机的功能分析、逻辑结构及接口。

下册包括三、四两篇，共八章。分别介绍了双极型大规模集成电路、MOS大规模集成电路及模拟集成电路。

本书可供从事半导体集成电路及数字电子计算机研制、生产的科技人员阅读参考，也可作为有关大专院校无线电、半导体、计算机等专业学生及研究生的参考用书。

大规模集成电路与微计算机

上 册

主编 黄 敞

副主编 林达荃 伊春乐

责任编辑 魏 玲

科 学 出 版 社 出 版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1985年11月第一版 开本：787×1092 1/16

1985年11月第一次印刷 印张：20 1/4

印数：0001—8,600 字数：468,000

统一书号：15031·680

本社书号：4484·15—7

定价：4.75 元

1810108

前 言

为了迎接在 1978 年召开的全国科学大会,骊山微电子公司的广大科技人员和工人团结一致努力攻关,做出了一定的成绩,得到了科学大会的奖励。在参加这些工作实践的同时,我们也学习和总结了一些有关大规模集成电路和微计算机的基础知识。经过一些同志的加工整理,编写成这本书。全书共四篇,分上下两册出版。上册包括一、二两篇。第一篇重点叙述半导体器件物理。从半导体器件中载流子运动的基本规律出发,介绍了载流子总量分析方法,并用该方法分析了 PN 结特性、双极晶体管以及注入逻辑电路。近年来我们也应用载流子总量方法分析了 MOS 电路,但在本书中所论述的长沟道 MOS 晶体管仍采用了通常的分析方法。本篇最后简要地介绍了几种大规模集成电路的基础技术;第二篇介绍了微型计算机的基本原理。从数字计算机的基本知识出发,介绍了微型计算机的功能分析、逻辑结构及接口。下册包括三、四两篇。第三篇介绍双极型大规模集成电路。从 TTL、ECL 及各种注入型数字电路出发,介绍了双极型固定、随机存储器以及双极微处理器大规模集成电路。因为结合实际工作,有实践的基础,所以从线路、工艺、版图、测试及批量生产等方面均进行了比较详细的讨论。第四篇介绍 MOS 大规模集成电路及模拟集成电路,从 MOS 数字电路基础出发,介绍了 MOS 存储器和微处理器大规模集成电路,其中,包括静态和动态随机存储器及固定存储器,并根据实践的体会,给出了 1K 存储器和 $5\mu\text{m}$ 的 N 沟硅栅器件的版图设计实例,同时,还介绍了微处理器的总线结构、输入/输出电路、算术逻辑电路和控制电路,模拟集成电路部分,叙述了运算放大器、数/模及模/数转换器等内容。

当前,我国正要把大规模集成电路和微计算机形成工业化生产并进行推广应用,我们希望本书所介绍的不成熟的学习总结和经验体会能为从事这方面工作的同志提供参考。

本书是在骊山微电子有限公司各级领导的大力支持下,由职工大学协助组织编写的,部分内容曾用作职工大学学生及研究生的教材,也曾用作教学参考书。各章的执笔者如下。第一章:黄 敞、伊春乐、林达荃,第二、三章:黄 敞、伊春乐,第四章:刘玉书、林达荃,第五章:林达荃、宋 俊,第六、七、八、九章:沈绪榜,第十、十二、十三章:陈沪生、郑木财,第十一章:沈文正、郑木财,第十四、十六章:颜学能,第十五章:高宝嘉,第十七章:孙泰仁。

在写作过程中,还得到过刘明廷、于伦政、张成勋、佟慧茹等同志的帮助;两位副主编林达荃、伊春乐同志分别在文字和技术方面整理和审阅了全稿。

书中有一些新的观点,但也一定存在不少错误。衷心希望广大读者批评指正。

黄 敞

1983 年 12 月于陕西临潼

目 录

第一篇 器件物理与基础技术

第一章 半导体器件中载流子运动的基本规律	1
第一节 能带理论	1
1-1-1 原子中电子的能级	1
1-1-2 晶体中电子的能带	2
第二节 载流子运动规律	4
1-2-1 半导体的导电机构	4
1-2-2 电子和空穴的统计分布	5
1-2-3 载流子的运动规律	14
主要参考文献	23
第二章 载流子总量分析方法	24
第一节 晶体管与集成电路的工艺、生产及理论	24
2-1-1 晶体管工艺与生产的发展概况	24
2-1-2 晶体管理论的发展概况	25
2-1-3 集成电路的理论分析	27
第二节 “载流子总量”分析方法	28
2-2-1 杂质分布的控制	28
2-2-2 平衡情况下的载流子密度分布	28
2-2-3 非平衡载流子密度分布	29
2-2-4 “载流子总量”分析方法	30
第三节 PN 结特性的“少数载流子总量”分析方法	32
2-3-1 平衡状态下的 PN 结	32
2-3-2 PN 结的电流-电压特性	41
2-3-3 PN 结电容及导纳	49
参考文献	56
第三章 双极型器件物理	60
第一节 用“少数载流子总量”方法分析多个 PN 结之间的相互作用	60
3-1-1 多个 PN 结之间的相互作用	60
3-1-2 双极晶体管和注入型电路的“少数载流子总量”分析方法	61
第二节 双极晶体管的“少数载流子总量”分析方法	61
3-2-1 晶体管直流放大系数 α_0	62
3-2-2 晶体管的频率特性	69
3-2-3 瞬态特性	75
第三节 注入型电路的“少数载流子总量”分析方法(三个 PN 结的相互作用)	82
3-3-1 注入型电路的特点及其工作原理	82
3-3-2 注入型电路的“少数载流子总量”分析方法	84

参考文献	101
第四章 MOS 器件物理	103
第一节 MOS 晶体管的基本结构和工作原理	103
第二节 栅下硅表面空间电荷区的基本特性	105
第三节 MOS 晶体管特性	109
4-3-1 直流特性	109
4-3-2 交流特性	119
4-3-3 开关特性	123
4-3-4 MOSFET 的穿通特性	126
4-3-5 MOSFET 的短沟道特性	130
第四节 影响 MOS 晶体管特性的几种效应	137
4-4-1 温度效应	137
4-4-2 老化效应	139
4-4-3 辐照效应	141
4-4-4 热电子效应	142
参考文献	144
第五章 大规模集成电路的基础技术	145
第一节 隔离技术	145
5-1-1 集电极扩散隔离	145
5-1-2 局部氧化隔离	146
5-1-3 V 形槽隔离技术	148
第二节 微细加工	148
5-2-1 电子束曝光	148
5-2-2 离子注入技术	152
5-2-3 干法腐蚀	157
第三节 等平面硅栅工艺	164
5-3-1 硅栅工艺	165
5-3-2 自对准	165
第四节 薄膜工艺	168
5-4-1 氮化硅工艺	168
5-4-2 三氧化二铝工艺	173
5-4-3 多晶硅工艺	176
主要参考文献	177

第二篇 微型计算机的基本原理

第六章 数字计算机的基本知识	179
第一节 常用代码	179
6-1-1 十进制码	179
6-1-2 二-五码与五-二码	180
6-1-3 原码、反码、补码与偏移码	181
6-1-4 葛莱码 (Gray Code)	182
6-1-5 约翰逊码 (Johnson Code 或 Möbius Code)	183

6-1-6 奇偶数	183
6-1-7 海明码 (Hamming Code)	184
6-1-8 余数码	186
6-1-9 多项式码	186
6-1-10 字符码	187
第二节 组合逻辑	188
6-2-1 基本逻辑运算及其运算规则	188
6-2-2 混合逻辑符号	189
6-2-3 逻辑功能的描述	191
第三节 时序逻辑	198
6-3-1 触发器	199
6-3-2 计数器	202
主要参考文献	208
第七章 微型计算机的功能分析	209
第一节 数的运算	210
7-1-1 数的形式	210
7-1-2 数的表征	216
7-1-3 数的运算	217
第二节 寄存器的结构	221
7-2-1 Intel 8086 的寄存器结构	221
7-2-2 TMS 9900 的工作寄存器结构	223
7-2-3 寄存器结构的选择	224
第三节 指令形式	225
7-3-1 字节式指令形式	225
7-3-2 整字式指令形式	228
7-3-3 指令形式的选择	232
第四节 地址方式	234
7-4-1 地址形成方式	234
7-4-2 地址方式的选择	240
第五节 操作的种类	241
7-5-1 操作的种类	241
7-5-2 操作的选择	246
7-5-3 机器语言	247
参考文献	248
第八章 微型计算机的逻辑结构	249
第一节 微型计算机的结构	249
8-1-1 总线结构	250
8-1-2 通讯方式	251
8-1-3 地址编号	252
8-1-4 总线驱动器的安排	253
8-1-5 结构的选择	253
第二节 微处理机的设计	255

8-2-1 微指令集合的选择	255
8-2-2 微处理机的结构	259
8-2-3 运算功能的实现	260
8-2-4 控制功能的实现	269
第三节 微程序设计	276
参考文献	283
第九章 微型计算机的接口	284
第一节 中断控制接口电路	284
9-1-1 中断转移的过程	285
9-1-2 中断请求信号的举例	287
9-1-3 中断控制接口电路	289
第二节 并行传送接口电路	293
9-2-1 并行传送接口电路的结构	293
9-2-2 并行传送接口电路的应用	294
第三节 串行传送接口电路	297
9-3-1 寄存器及其作用	297
9-3-2 信号线及其作用	301
9-3-3 发送与接收的实现	302
第四节 调制解调接口电路	305
9-4-1 调制解调的方法	306
9-4-2 发送与接收的过程	307
第五节 直接传送接口电路	312
9-5-1 DMA 控制器的框图	312
9-5-2 DMA 传送技术的应用	312
第六节 虚拟式输入/输出	315
参考文献	316

第一篇 器件物理与基础技术

第一章 半导体器件中载流子运动的基本规律

多年来,人们对半导体物理、半导体器件物理及半导体器件技术进行了广泛的研究,半导体器件从二极管、三极管发展到小、中、大规模集成电路,目前已进入超大规模集成电路阶段。

通过对各种分立元件及集成电路的研制,人们加深了对半导体器件中载流子运动规律的认识与理解,同时在新器件与新电路的研制过程中又暴露出了新的问题和矛盾,反映了器件、电路在性能上所受到的限制。作为以下各篇章中有关器件与电路分析的基础,本章将重点论述半导体器件中载流子的运动规律。

在下面的分析中,我们将会看到,虽然在半导体结型器件中载流子运动的基本规律是相同的,但当运用不同的物理机构制作各种器件时,则必须从这些独特的物理机构出发,引用某些与客观规律基本相符的近似假设来简化分析,以便于解决主要矛盾。

第一节 能带理论

1-1-1 原子中电子的能级

研究电子、原子的运动规律属于微观物理的范畴。目前,可用量子力学的能带理论较完满地阐明大多数半导体(晶体)中电子的行为。由单电子运动概念出发,近似地研究晶体中电子能量状态的理论称为能带论。由能带论所作的许多推断已为后来的实践所证实,它是目前人们认识物体导电机理的有效方法,也是半导体理论的基础。能带论是单电子理论,每个电子在一个晶格周期性排列的势场中运动,各个电子的运动可以看作基本上是相互独立的,不束缚于个别原子,而是在整个晶体内运动。在半导体中,能带论是比较好的近似理论;在金属中,它也可以作为半定量的系统理论而起重要作用。但是,必须指出,由于能带论只是一种近似方法,因而有其一定的局限性,例如,对于无序半导体中的许多新问题并不能用能带理论来解释。能带论的适用范围目前主要由实验结果判断。

对微观粒子研究的大量科学实验和理论推导证实了原子中的电子运动规律具有如下几个特点^[1,2]:

(1) 能量的量子化 原子中电子的能量只能取一系列不连续的特定值,称为能量的量子化,每一个这样的能量特定值称为一个能级。电子可以处在某一能级上,也可以从一个能级跃迁到另一个能级上。除了能量的量子化之外,电子的轨道运动角动量、轨道在空间的取向和它的自旋方向也都是量子化的。

(2) 分布几率与“测不准”关系 由于微观粒子具有粒子与波动的两重性,因此,所谓的电子绕核运动,只是说它以一定的几率出现在某一特定轨道上,而不是完全沿着一确

定的轨道运行。即以分布几率的概念代替了完全确定的位置，这是微观粒子运动规律的一个特点。所以，尽管人们在讨论原子中电子运动时仍然使用“轨道”一词，然而，它并不代表一个完全确定的轨道，而只是代表电子出现几率较大的那一部分区域。

同样，与电子位置的不确定相联系，进一步的实验证明，电子的动量(或速度)也是不完全确定的。因为微观粒子的坐标和动量不能同时具有确定值，因此，电子位置的不确定量 Δx 、 Δy 、 Δz 与电子动量的不确定量 ΔP_x 、 ΔP_y 、 ΔP_z 之间存在着“测不准”关系，这是微观粒子的波粒二象性的一个客观反映。

(3) 不相容原理 微观粒子的另一重要特性是，对一个系统(例如一个原子或原子集团)来说，不可能有两个电子具有完全相同的运动状态。根据量子力学原理，孤立原子中的电子运动状态是由四个量子数决定的，即：主要决定电子能量的主量子数 n ；决定轨道动量矩的角量子数 l ；决定轨道在空间取向的轨道磁量子数 m ；决定电子自旋方向的自旋磁量子数 s 。在一个系统中，不允许有两个以上上述四个量子数都相同的电子，这就是泡利(W. Pauli)不相容原理。在复杂原子中，电子可取的能量除了与 n 有关外，还与 l 、 m 有关。所以，可以认为，主量子数、轨道角动量和轨道空间取向不同的电子有不同的能级。换言之，在同一能级中，最多只能容纳两个自旋方向相反的电子。

(4) 能量最小原理 根据不相容原理，在一个具有多个电子的复杂原子中，这些电子不能同时都处在同一能级上。对于原子的基态来说，它的电子在能量分布上将按能量由低到高的次序首先填满能量最低的一些能级，这就是能量最小原理。

图 1-1 示意地表示单原子的能级和在晶体中分裂为能带的对应关系。图左边的纵坐标 E 代表电子的能量，横坐标 r 表示电子与原子核的距离。由于电子受原子核库仑势场的束缚，只在一定的空间范围内出现，电子的能级也就只在一定的空间范围内存在。可见， E_1 能级的电子受核束缚最紧，运动轨道距核最近，因而 E_1 能级也就只存在于距核较近的小范围中。而外层电子距核远，受核作用弱，所以受外场的影响特别显著。

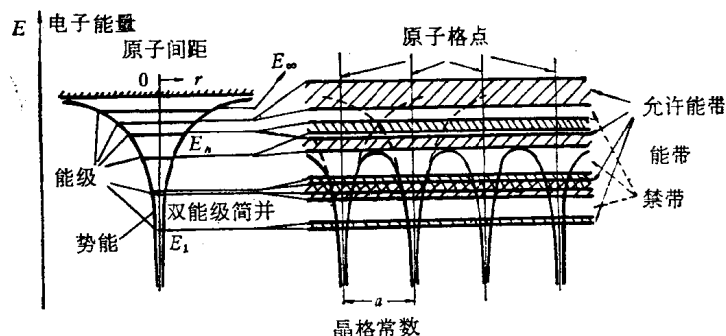


图 1-1 晶体中单原子能级(左)及分裂的能带(右)^[13]

1-1-2 晶体中电子的能带

大多数制造半导体器件和集成电路的基础材料，在结构形式上都是晶体，而半导体中电子的行为和性质与晶体结构有着密切的关系。

晶体与非晶体的主要区别在于：一个完整的晶体可以看作是由相同结构的单元在空

间作无限多的、有规则的重复排列所构成,而非晶体中则无这种规律性。因此,晶体中的原子是按一定的规律周期性地排列的。

当原子间相距较远时,电子分属于各自的原子,它们的行为近似于孤立原子的情形。但当原子结合成晶体时,原子间距很小,致使不同原子的各层电子轨道相互间有不同程度的交叠。此时,晶体中的电子显然不会再完全局限于某一原子,而是为整个晶体所共有,它可以在整个晶体中运动,晶体中电子的这一重要特性称为电子的共有化。但是,因为只有最外层价电子的轨道交叠最多,因而共有化特征才最显著。

随着晶体中价电子共有化运动的形成,表征这些电子运动情况的能量状态也必然要发生变化。设晶体由 N 个原子组成,由于价电子的共有化,它可在整个晶体中运动,原来分别束缚于各个原子的分立能级发生变化,形成了一些属于整个晶体的能级。但是,根据不相容原理,晶体中电子的运动状态不能相同。所以,为了容纳原来属于 N 个单原子的所有价电子,原先分属于 N 个孤立原子的相同的价电子能级必须分裂成属于整个晶体的 N 个能量稍有差别的能级。这些能级互相靠得很近,分布在一定的能量区域,通常就把这 N 个能级所占据的能量区域称为能带。如前所述,因为内层电子轨道交叠较少,共有化运动较弱,因此,内层电子的能带也就较窄(见图 1-1)。

然而,必须指出,能带的宽窄由晶体的性质决定,与晶体所包括的原子数 N 无关。 N 增加,能带中共有化能级数目增加,这只增加了它们的密集程度,与共有化程度无关,只有能带的宽窄才反映共有化运动的强弱。

从图 1-1 的右边看出,原子外层能级所分裂的能带很宽,致使不同能带相互重叠起来,因此,晶体的能带与孤立原子能级之间不一定一一对应,较高的能级往往混合起来,组成允许能带。两个允许能带之间有一个不存在电子能级的区域,这个区域称为“禁带”,表示晶体中电子不可能具有的能量范围。

前面已经指出,孤立原子的状态是电子处在能量最低的基态上。在晶体中情况也相类似,如果没有外界的作用,电子也应依次填满能量最低的能级和能带。但是,由于不相容原理,电子不可能都集中在能量最低的一个能级上,而是由低到高地依次填满各个能级和能带。只有当它们受到外界的作用(激发)时,低能级的电子吸收能量之后才跃迁至高能级。

为价电子所填满的能带称为“价带”或“满带”,往上经过禁带便是电子受激发后跃迁至其上的激发能带,在电子未受激发跃迁时,此能带一般是空的,所以称为“空带”;又因激发至激发能带的电子是比较自由的,在外加电场作用下能产生定向运动,形成电流,因此又称为“导带”。

因为不同晶体的原子不同,这些原子结合成晶体的方式也不相同。因此,一般来说,不同晶体的能带结构是不同的,主要表现为能带的宽窄、禁带宽度和电子填充情况的不同,从而把晶体分为导体、绝缘体和半导体。绝缘体具有被电子填满的价带,禁带较宽;而导体的能带或者是它的价带没有被电子完全填满,或者是它的价带与导带相重叠;至于半导体,其能带与绝缘体有些类似,在绝对零度(即没有任何的热激发)时,它也有填满电子的价带和完全空的导带,但它的禁带较窄,因此,在一定温度下,有一部分价带电子会激发到导带中去,半导体的许多重要特性就是由此而引起的。

第二节 载流子运动规律

1-2-1 半导体的导电机构

物体中的电流主要是体内电子在外加电场作用下产生的定向运动。通常,由于晶体中的内层电子受核束缚较紧,共有化运动很弱,只有价电子的运动轨道有明显的交叠,使价电子能在晶体中自由运动,因而只有价电子才有可能对电流有贡献。然而,需要着重指出的是,半导体中的价电子既可如绝缘体那样处在价带中,也可以象导体那样处在导带中,而在这两种情况下,电子的运动规律是不相同的。

金属的导电主要依靠在外加电场的作用下价电子的定向运动。对于晶体中的电子来说,能量跃迁通常要受到一定的限制,因为根据不相容原理,晶体中每个能级最多只能容纳两个自旋方向相反的电子。如果某一能级已被这样的两个电子所占据,则其它电子就不允许再取这个能量值。所以,如果要改变一个晶体中电子的能量状态,并使它得以跃迁至新的能级中去,不仅需要存在向电子提供能量的外界作用,而且电子要跃入的能级应该是空的。对于金属来说,这两个条件均能满足,因为或者它的价带没有被电子完全填满,或者价带与导带已相重叠,都存在大量的空能级,而各能级间距又很小,相邻两能级间的过渡只需要极小的能量,因此,只要有那怕是相当微弱的外加电场的作用,都能产生一定的定向运动,形成电流。

然而,对于绝缘体来说,因为满带中的每一个能级都已经填满了电子,没有空能级,所以,即使有外加电场的作用,电子增加能量的跃迁亦无法完成,也就无法形成电子的定向运动和电流。至于在强场作用下电子越过禁带跃入导带而发生的绝缘体击穿现象,已不属本书讨论的范围。

下面我们讨论半导体的情况,我们暂时把讨论只局限在纯净的、结构完整的“本征半导体”范围,至于杂质半导体,我们将在以后讨论。

图 1-2 示意地画出了本征半导体的能带图形。其中,图(a)表示当半导体处在绝对零度、没有外界作用时,半导体的价电子全部填满了价带,导带是空的。这时,与绝缘体相似,价带电子不能导电,导带中又没有电子,所以,处在绝对零度而又没有外界作用时的本征半导体是不导电的。

但是,当温度稍微升高,例如,在通常的室温条件下时,由于晶格的热运动,特别是有些格点原子的热运动能量大大超过平均能量,晶体中的价电子通过与晶格原子的相互作用而交换并吸取足够的能量,从而使它们有可能突破共价键的束缚,从满带激发至导带,这一过程称为本征激发。从图 1-2(b)可以看出,由于电子自价带激发至导带,不仅使导带中出现了少量的导电电子,使导带有了导电的功能,而且,原来的价带由于有一些状态空了出来(简称空状态),这就为在外界作用下价带中其余电子能量的变化提供了条件。在外加电场的作用下,价带中其它电子就可以跃入这些空状态,同时又留下新的空状态,之后,其它电子又可再跃入那些新的空状态,这样,价带也获得了一定的导电功能。这个事实在本半导体物理中具有十分重要的意义。在能带论中,我们利用“空穴”的概念来描述价带中有空状态时的导电作用。 $\vec{k}$ 状态空出时,价带电子的总电流就如同一个带正电 e 和正的有效质量 m_x^* 、 m_y^* 、 m_z^* 的粒子,它的速度等于 $\vec{k}$ 状态的电子速度 $v(\vec{k})$ 。

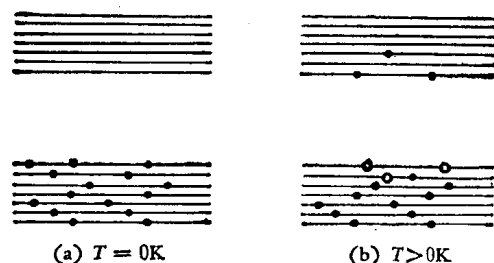


图 1-2 本征半导体电子填充能带的情况

根据这样一个假想的粒子不仅可以简便地描述价带(未完全充满)电流,而且还可以通过它在外电场下的加速来描述电场存在时电流的变化。

综上所述,我们可以看出,在热激发的条件下,本征半导体导电机构的特点是价带中的一部分电子被激发到了导带,同时在价带中出现了相同数量的空穴。因此,本征激发的结果是产生电子-空穴对。它们均能在外加电场的作用下产生定向运动,形成电流。在运动过程中,导带电子可以释放出它的多余能量而跳回到价带中的空能级上,这种过程称为电子与空穴的复合。显然,电子与空穴由于复合而消失的过程也是成对的,因而,本征半导体的导带电子与价带空穴的数目总是相等的,即

$$n = p \quad (1.1)$$

式中, n 、 p 分别表示导带电子、价带空穴的载流子浓度。

但是,需要指出的是,本征激发所产生的本征电流是很微弱的,以后我们将会看到,实际上半导体所运用的是杂质导电而并非本征电流。

1-2-2 电子和空穴的统计分布

分析半导体中载流子的运动规律,必须了解它们的浓度分布情况。由于微观粒子的能量量子化以及它的不可辨认性,因而微观粒子的运动服从量子统计分布规律。所以,我们需要了解的就是载流子浓度按能量大小的统计分布状态。

一、半导体的热平衡状态

本征半导体中,在温度 $T > 0K$ 的情况下,由于热激发的结果,产生电子-空穴对。然而,激发至导带中的电子又可能与价带空穴复合。半导体的热激发载流子的产生率由温度 T 所决定;而载流子的复合率则依赖于电子-空穴对的浓度。假设产生率高于复合率,则载流子浓度就要增加,而随着载流子浓度的增加复合过程就会加强,最后达到一个稳定的动平衡状态,称之为半导体的热平衡状态。这时,半导体的载流子浓度具有一恒定的数值,就是本征半导体的载流子浓度 n_i 。只有当温度改变之后,这种平衡才会遭到破坏,达到另一恒定温度下的新的平衡。由此可知,半导体中平衡载流子的浓度随温度的升高而增加。

二、有效质量和状态密度^[4-8]

由量子力学知道,电子在晶体中运动的加速度有如下结果:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{1}{h^2} \nabla_K \nabla_K E \cdot \vec{F} \quad (1.2)$$

其中 $\vec{v}$ 是电子平均速度。将(1.2)式写成张量形式:

$$\begin{pmatrix} \frac{dv_x}{dt} \\ \frac{dv_y}{dt} \\ \frac{dv_z}{dt} \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 E}{\partial K_x^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial K_x \partial K_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial K_x \partial K_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial K_x \partial K_y} & \frac{\partial^2 E}{\partial K_y^2} & \frac{\partial^2 E}{\partial K_y \partial K_z} \\ \frac{\partial^2 E}{\partial K_x \partial K_z} & \frac{\partial^2 E}{\partial K_y \partial K_z} & \frac{\partial^2 E}{\partial K_z^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}$$

或者

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial v_x}{\partial t} \\ \frac{\partial v_y}{\partial t} \\ \frac{\partial v_z}{\partial t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_{xx}} & \frac{1}{m_{xy}} & \frac{1}{m_{xz}} \\ \frac{1}{m_{yx}} & \frac{1}{m_{yy}} & \frac{1}{m_{yz}} \\ \frac{1}{m_{zx}} & \frac{1}{m_{zy}} & \frac{1}{m_{zz}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}$$

有效质量张量定义为

$$\frac{1}{m_{ij}} = \frac{1}{h^2} \frac{\partial^2 E}{\partial K_i \partial K_j} \quad (i = x, y, z; j = x, y, z) \quad (1.3)$$

可以选择适当的坐标轴,使有效质量张量对角化。

$$\begin{pmatrix} \frac{dv_x}{dt} \\ \frac{dv_y}{dt} \\ \frac{dv_z}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_{xx}^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_{yy}^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_{zz}^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_x \\ F_y \\ F_z \end{pmatrix}$$

$$\frac{1}{m^*} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_{xx}^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_{yy}^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_{zz}^*} \end{pmatrix}$$

$$\left. \begin{aligned} m_{xx}^* \frac{dv_x}{dt} &= F_x \\ m_{yy}^* \frac{dv_y}{dt} &= F_y \\ m_{zz}^* \frac{dv_z}{dt} &= F_z \end{aligned} \right\} \quad (1.4)$$

将(1.4)式与牛顿第二定律 $\vec{F} = m\vec{a}$ 相比较,两者的形式是相同的,但必须用电子有效质量 m^* 代替电子的惯性质量. m_{xx}^* 、 m_{yy}^* 和 m_{zz}^* 如同电子沿 x 、 y 和 z 轴方向运动的质量. 我们称 m_{xx}^* 、 m_{yy}^* 和 m_{zz}^* 为电子沿 x 、 y 和 z 轴方向运动的有效质量.

上面曾经提到,晶体中的电子在外力作用下运动时,它同时受到外界力场和晶格场的共同作用,而找出晶格场(晶格原子和其它电子的作用)的具体形式是很困难的,引入有效质量 m^* 之后,就可以使问题得到简化. m^* 概括了晶格场的作用,也就是说,在外电场作用下,半导体中的电子可看成质量为 m^* 的粒子,其运动规律与自由电子运动相似,可写成 $\vec{F} = m^* \vec{a}$. 其中 $\vec{F}$ 是电子受到的外力,不包括半导体内部的晶格场作用力. 因此,计算就大大地简化了,可以很简单地根据外力的作用直接写出电子的加速度.

用回旋共振实验可以精确测量有效质量 m^* , 由 m^* 的测定可验证有效质量理论的正确性并推出半导体的能带结构^[7].

在半导体中,虽然电子与空穴的电量相同(符号相反),然而,其有效质量 m_e^* 与 m_h^* 并不相等. 而且, m_e^* 的大小还与运动方向有关(m_e^* 的各向异性),因为 m^* 概括了半导体内部势场作用的结果. 对于不同的半导体来说,由于晶格作用不同,所以,不同的半导体材料中的电子和空穴的有效质量也不相同. 因此,有效质量和惯性质量有很大差别.

在探求载流子的统计分布之前,还必须先求出在能量为 E 到 $E + dE$ 之间的能级数或能量状态密度.

由固体物理学可知,单位体积能量在 E 到 $E + dE$ 之间的能级数为^[7]

$$dN(E) = \frac{2\pi(2m_e^*)^{3/2}}{h^3} (E - E_c)^{1/2} dE \quad (1.5)$$

式中, E_c 为导带底的能量. 由于每一个能级允许容纳两个自旋方向相反的电子, 因此,在考虑了电子的自旋之后,就可得到在能带中能量 E 附近每单位能量范围内所包含的状态数为

$$2 \frac{dN(E)}{dE} = \frac{4\pi(2m_e^*)^{3/2}}{h^3} (E - E_c)^{1/2} \quad (1.6)$$

同样,对于价带空穴来说,可作相类似的分析,得到:

$$2 \frac{dN(E)}{dE} = \frac{4\pi(2m_h^*)^{3/2}}{h^3} (E_v - E)^{1/2} \quad (1.7)$$

式中, E_v 为价带顶的能量.

注意(1.6)及(1.7)式电子与空穴的差别,因为空穴与电子的带电符号相反,空穴的能量坐标也是与电子方向相反的. 对空穴来说,价带顶能量最小,从价带顶向下,空穴的能量愈来愈大. 根据能量最小原理,价带电子填充低能级时所对应的系统能量较小,而电子的空状态(即空穴)出现在高能级,所以,空穴在价带顶时所对应的系统能量是最小的. 空穴能量大小的标准正好与电子相反(见图 1-3)

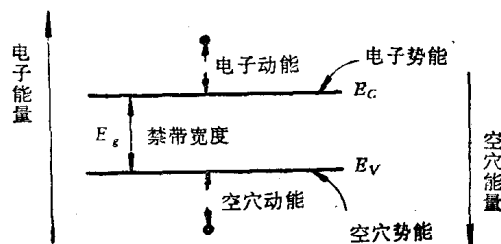


图 1-3 半导体中能带示意图^[9]

三、统计分布

如上所说,半导体中的电子是微观粒子,微观粒子的运动服从量子的统计分布规律.在微观粒子量子论的基础上,产生了量子统计学,它保留了麦克斯韦-玻耳兹曼(Maxwell-Boltzmann)经典统计分布的成就,而克服了经典统计学的困难.量子统计包括玻色-爱因斯坦(Bose-Einstein)统计和费米-狄拉克(Fermi-Dirac)统计.

统计物理学表明^[40],对于发生于整数自旋的粒子,例如光量子,这种由对称波函数描述的粒子遵循玻色-爱因斯坦统计分布;对于发生于半整数自旋的粒子,即由反对称波函数来描述的粒子系统,这种系统遵循泡利不相容原理,并服从以此原理为基础的费米-狄拉克统计.例如,晶体中的电子行为是服从费米-狄拉克统计分布的.

为了能够定量地描述半导体中电子与空穴的统计分布,引入了分布函数的概念.在热平衡情况下,电子处在能量为 E 的状态几率是

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1} \quad (1.8)$$

式中, $f(E)$ 是能量状态 E 被电子占据的几率,称为费米-狄拉克分布函数,或者简称为费米分布函数; E_F 称为费米能级或电子化学势,它表示体积不变,系统中引入一个电子时系统自由能的增加,因而 E_F 表征半导体中电子填充的最高能量的水平,表现为温度和总电子数的函数.

下面分析费米分布函数的性质.由(1.8)式看出

(1) 当 $T = 0K$ 时,

若 $E < E_F$, 则 $f(E) = 1$, 即能量低于 E_F 的能级全是满的;

若 $E > E_F$ 则 $f(E) = 0$, 即能量高于 E_F 的能级全是空的;

上面,我们已经得到单位能量范围内所包含的状态数 $2 \frac{dN(E)}{dE}$ 的表达式(1.6)以及电子填充能级 E 的几率——费米分布函数 $f(E)$ [(1.8) 式]. 据此,我们就可以求得在 E 到 $E + dE$ 范围内的电子数为

$$dn = 2 \frac{dN(E)}{dE} f(E) dE \quad (1.9)$$

由于当 $T = 0K$ 、且 $E < E_F$ 时, $f(E) = 1$; 且 $E \gg E_F$ 时 $f(E) = 0$. 因此,将(1.6)、(1.8)式代入(1.9)式并化简,得到

$$dn = \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} E^{1/2} dE \quad (T = 0K) \quad (1.10)$$

取积分范围为 $E = 0$ 到 $E = E_F^0$ 之间,即可得到

$$\begin{aligned} n &= \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} \int_0^{E_F^0} E^{1/2} dE \\ &= \frac{2}{3} \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} (E_F^0)^{3/2} \end{aligned} \quad (1.11)$$

式中, E_F^0 为 $T = 0K$ 时的费米能级.并可求得

$$E_F^0 = \frac{h^2}{2m_e^*} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3} \quad (1.12)$$

根据硅晶体中的原子数为 10^{22}cm^{-3} 数量级, $m_e^* = 1.1m_0 \approx 9 \times 10^{-28}$ 克, 那么, E_F^0 大约等于数电子伏。

(2) 当 $T > 0\text{K}$ 时

(i) 若 $E = E_F$, 则 $f(E) = 1/2$, 即在能量等于费米能量的能级上, 电子占据的几率是 $1/2$ 。几率为 $1/2$ 的费米能级通常是在禁带之中;

(ii) 若 $E < E_F$, 则 $f(E) > 1/2$, 特别是当 $E_F - E \gg kT$ 时, $f(E) \rightarrow 1$;

(iii) 若 $E > E_F$, 则 $f(E) < 1/2$, 特别是当 $E - E_F \gg kT$ 时, $f(E) \approx e^{(E_F - E)/kT}$, 此时, 费米统计分布近似等于玻耳兹曼分布。这种近似是很自然的, 因为费米-狄拉克统计与经典的玻耳兹曼统计的基本区别就在于要考虑泡利不相容原理。对于 $E - E_F \gg kT$ 的能级, $f(E) \ll 1$, 表示此能级被电子占据的几率很小, 故即使不考虑泡利不相容原理的限制, 对结果也不会引起显著的误差。因此, 对于离开 E_F 至少数 kT 的能量, 玻耳兹曼统计是费米-狄拉克统计的一个极好的近似。只有在简并化的情况(费米能级 E_F 进入导带或价带)下才不能用玻耳兹曼统计而必须采用费米-狄拉克统计来分析。

不同温度下的费米分布函数如图 1-4 所示。

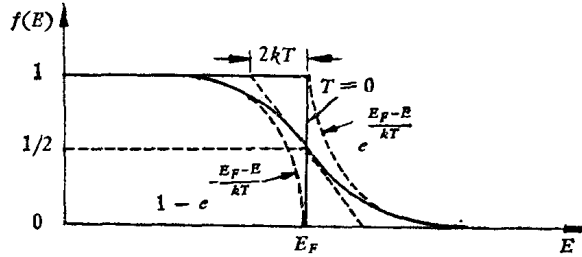


图 1-4 在不同温度下的费米分布函数^[3]

重新将(1.6)、(1.8)式代入(1.9)式, 得到

$$dn = \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \frac{1}{e^{(E - E_F)/kT} + 1} \quad (T > 0\text{K}) \quad (1.13)$$

于是, 导带电子浓度就可由(1.13)式从 E_c 至 ∞ 整个导带能量范围内积分, 得到

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \frac{4\pi}{h^3} (2m_e^*)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \frac{1}{e^{(E - E_F)/kT} + 1} dE \quad (1.14)$$

经过简化和简单的变换, 积分后得到导带电子浓度的表达式:

$$n = \frac{2(2\pi m_e^* kT)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_c - E_F)/kT} = N_c e^{-(E_c - E_F)/kT} \quad (1.15)$$

其中

$$N_c = \frac{2(2\pi m_e^* kT)^{3/2}}{h^3} \quad (1.16)$$

称为导带的有效能级密度。同样, 通过类似的计算可以得到价带空穴浓度的表达式:

$$p = \frac{2(2\pi m_h^* kT)^{3/2}}{h^3} e^{-(E_F - E_v)/kT} = N_v e^{-(E_F - E_v)/kT} \quad (1.17)$$

其中

$$N_v = \frac{2(2\pi m_h^* kT)^{3/2}}{h^3} \quad (1.18)$$