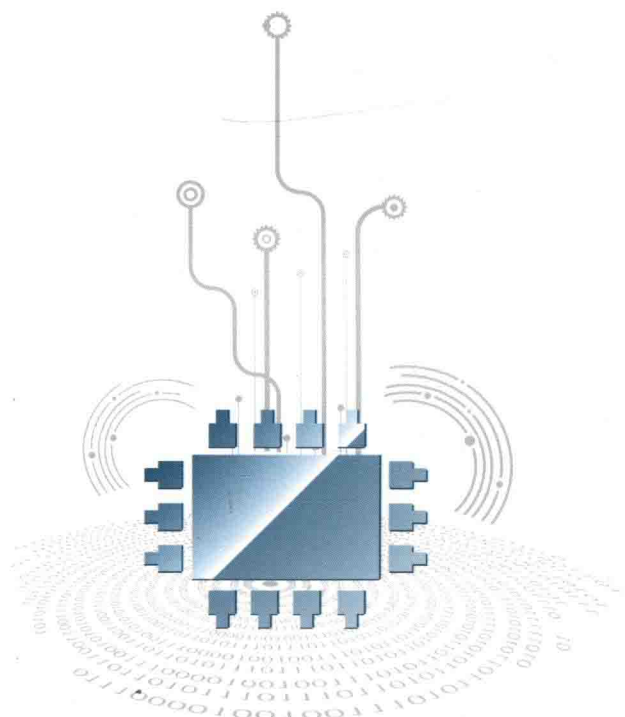


师

教育部 财政部职业院校教师素质提高计划成果系列丛书



集成电路芯片设计

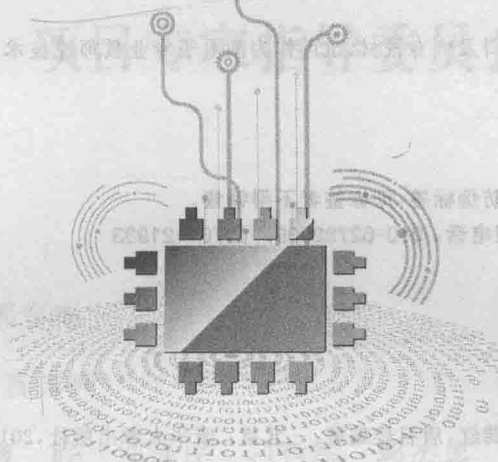
◎ 马奎 龚红 唐召焕 编著

清华大学出版社



内容简介

本书共分10章，主要介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第1章介绍集成电路设计的发展概况、设计方法和设计流程。第2章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第3章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第4章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第5章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第6章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第7章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第8章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第9章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。第10章介绍集成电路设计的基本概念、设计方法和设计流程。



集成电路芯片设计

◎ 马奎 龚红 唐召焕 编著

责任编辑：王...
封面设计：...
版式设计：...
校对：...

常州大学图书馆
藏书章

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书详细论述了半导体物理基础及PN结的结构与原理。通过三个实际设计实例：双极型器件及集成电路设计、场效应器件及MOS型集成电路设计、大功率器件及功率集成电路设计，将设计原理、设计思路、设计技巧等逐一展现给读者。从简到难边学边做，从不会到会，再到创新思维的培养。本书配置的图片都是首次应用，同时还配套了一些视频帮助读者理解集成电路设计的原理，读者可以扫描文中二维码直接观看。

本书可作为微电子专业本科及大专教材，也可作为微电子专业教师或技术人员入职培训用书，还可作为微电子技术人员参考用书。

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签，无标签者不得销售。

版权所有，侵权必究。侵权举报电话：010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

集成电路芯片设计/马奎,龚红,唐召焕编著. —北京:清华大学出版社,2018

ISBN 978-7-302-48769-2

I. ①集… II. ①马… ②龚… ③唐… III. ①集成芯片—设计 IV. ①TN430.2

中国版本图书馆CIP数据核字(2017)第272156号

责任编辑：王剑乔

封面设计：刘 键

责任校对：刘 静

责任印制：沈 露

出版发行：清华大学出版社

网 址：<http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址：北京清华大学学研大厦A座

邮 编：100084

社总机：010-62770175

邮 购：010-62786544

投稿与读者服务：010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈：010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

课件下载：<http://www.tup.com.cn>, 010-62770175-4278

印 装 者：三河市少明印务有限公司

经 销：全国新华书店

开 本：185mm×260mm

印 张：11.25

字 数：268千字

版 次：2018年1月第1版

印 次：2018年1月第1次印刷

印 数：1~2000

定 价：38.00元

产品编号：073506-01

项目专家指导委员会

主任：刘来泉

副主任：王宪成 郭春鸣

成员：（按姓氏拼音排列）

崔世钢 曹 晔 邓泽民 刁哲军 郭杰忠 韩亚兰 姜大源

李栋学 李梦卿 李仲阳 刘君义 卢双盈 刘正安 米 靖

孟庆国 石伟平 沈 希 汤生玲 王继平 王乐夫 吴全全

夏金星 徐 流 徐 朔 张建荣 张元利 周泽扬

出版说明

自《国家中长期教育改革和发展规划纲要(2010—2020年)》颁布实施以来,我国职业教育进入加快构建现代职业教育体系、全面提高技能型人才培养质量的新阶段。加快发展现代职业教育,实现职业教育改革发展新跨越,对职业学校“双师型”教师队伍建设提出了更高的要求。为此,教育部明确提出,要以推动教师专业化为引领,以加强“双师型”教师队伍建设为重点,以创新制度和机制为动力,以完善培养培训体系为保障,以实施素质提高计划为抓手,统筹规划、突出重点、改革创新、狠抓落实,切实提升职业院校教师队伍整体素质和建设水平,加快建成一支师德高尚、素质优良、技艺精湛、结构合理、专兼结合的高素质、专业化的“双师型”教师队伍,为建设具有中国特色、世界水平的现代职业教育体系提供强有力的师资保障。

目前,我国共有60余所高校正在开展职教师资培养,但由于教师培养标准的缺失和培养课程资源的匮乏,制约了“双师型”教师培养质量的提高。为完善教师培养标准和课程体系,教育部、财政部在“职业院校教师素质提高计划”框架内专门设置了职教师资培养资源开发项目,中央财政划拨1.5亿元,系统开发用于本科专业职教师资培养标准、培养方案、核心课程和特色教材等系列资源。其中包括88个专业项目以及12个资格考试制度开发等公共项目。该项目由42家开设职业技术师范专业的高等学校牵头,组织近千家科研院所、职业学校、行业企业共同研发,一大批专家学者、优秀校长、一线教师、企业工程技术人员参与其中。

经过三年的努力,培养资源开发项目取得了丰硕成果。一是开发了中等职业学校88个专业(类)职教师资本科培养资源项目,内容包括专业教师标准、专业教师培养标准、评价方案以及一系列专业课程大纲、主干课程教材及数字化资源;二是取得了6项公共基础研究成果,内容包括职教师资培养模式、国际职教师资培养、教育理论课程、质量保障体系、教学资源中心建设和学习平台开发等;三是完成了18个专业大类职教师资标准及认证考试标准开发。上述成果,共计800多本正式出版物。总体来说,培养资源开发项目实现了高效益:形成了一大批资源,填补了相关标准和资源的空白;凝聚了一支研发队伍,强化了教师培养的“校一企一校”协同;引领了一批高校的教学改革,带动了“双师型”教师的专业化培养。职教师资培养资源开发项目是支撑专业化培养的一项系统化、基础性工程,是加强职教师资培养培训一体化建设的关键环节,也是对职教师资培养培训基地教师专业化培养实践、教师教育研究能力的系统检阅。

自 2013 年项目立项开题以来,各项目承担单位、项目负责人及全体开发人员做了大量深入细致的工作,结合职教教师培养实践,研发出很多填补空白、体现科学性和前瞻性的成果,有力推进了“双师型”教师专门化培养向更深层次发展。同时,专家指导委员会的各位专家以及项目管理办公室的各位同志克服了许多困难,按照两部对项目开发工作的总体要求,为实施项目管理、研发、检查等投入了大量时间和心血,也为各个项目提供了专业的咨询和指导,有力地保障了项目实施和成果质量。在此,我们一并向他们表示衷心的感谢。

编写委员会
2017 年 5 月

... 项目承担单位、项目负责人及全体开发人员做了大量深入细致的工作,结合职教教师培养实践,研发出很多填补空白、体现科学性和前瞻性的成果,有力推进了“双师型”教师专门化培养向更深层次发展。同时,专家指导委员会的各位专家以及项目管理办公室的各位同志克服了许多困难,按照两部对项目开发工作的总体要求,为实施项目管理、研发、检查等投入了大量时间和心血,也为各个项目提供了专业的咨询和指导,有力地保障了项目实施和成果质量。在此,我们一并向他们表示衷心的感谢。

序

PREFACE

《集成电路芯片设计》教材是“‘十二五’教育部、财政部职业院校教师素质提高计划职教师资培养资源开发项目微电子科学与工程专业职教师资培养资源开发(VTNE028)”的成果之一。项目牵头单位为贵州大学,项目负责人为王开建,本项目针对微电子科学与工程专业职教师资人才培养开发教学资源。根据教育部的统一要求,该项目系列成果包含《微电子科学与工程专业调查报告》《中等职业学校微电子技术(类)专业教师指导标准》《中等职业学校微电子技术(类)专业教师培养指导标准》《中等职业学校微电子技术(类)专业教师培养质量评价指导体系》《中等职业学校微电子技术(类)专业课程教学指导标准》《集成电路芯片设计》(教材)、《集成电路芯片制造》(教材)、《微电子器件封装与测试技术》(教材)、《微电子科学与工程专业教学法》(教材)以及微电子科学与工程专业教学媒体库。

微电子技术被比喻为工业的心脏和大脑,在智能化时代,任何领域都离不开微电子技术。世界各国争相发展微电子行业,同时提出“谁具有微电子技术优势,谁就控制了21世纪的主动权”。近几年国务院颁布了几个关于发展我国微电子产业的文件,国家对该行业发展给予了很大投入。微电子企业如雨后春笋般地发展起来。2010年教育部调整了中职学校专业目录,设置了两个微电子类专业。2011年开始,部分中职学校增设了微电子类专业,因此中、高职职业教育对微电子类专业教师都有了迫切的需求。本系列教材是针对现代职业教育体系,社会与科技发展对职教师资提出的新要求而编写的。

本系列教材共4本。其中《微电子科学与工程专业教学法》简单介绍了专业教学理念,详细介绍了微电子行业各岗位的能力要求,根据企业各岗位的需求介绍了专业课程设计思路与内容,以及教学方法的选用与教案开发等。《集成电路芯片设计》《集成电路芯片制造》因为理论知识较多,沿用传统的知识体系模式与设计(制造)案例相结合的撰写方式,采用了大量的原创图片,链接了多个视频微课,全面展示了集成电路芯片设计和集成电路芯片生产的全过程。《微电子器件封装与测试技术》侧重操作,采用工作过程导向的编写方法,同样使用了大量原创生产操作图片,并链接了多个视频微课,全面展示了微电子器件封装生产的全过程。

由于微电子生产需要超净环境,同时微电子生产具有高技术密集型等特点,企业不能安排生产现场教学或参观。只有少量企业设计了参观通道,接待参观者远距离观看。为了解决这个难题,在振华集团永光电子有限公司的大力支持下,我们录制了微电子芯片生产和微电子器件封装生产的全过程并转换成二维码,链接到与本系列教材内容对应的位置。读者

只要用手机扫描二维码就可以观看各个岗位的操作技术。为此非常感谢中国振华集团永光电子有限公司的大力支持,感谢永光公司的技术人员为本项目系列教材录制素材付出的辛勤劳动,使这套系列教材能让学生仔细观看生产操作过程,填补了微电子专业师生无法到生产现场参观实习的缺憾与空白。

本系列教材旨在培养本科层次微电子类专业职教师资,可以作为微电子专业本科、大专教材,以及相关专业教师的参考用书。

参加本教材编写的单位有:贵州大学、贵州工业学院、贵州轻工职业技术学院、贵州电子信息职业技术学院、茅台学院、重庆电子信息工程学院、贵州交通职业技术学院、贵州绥阳县职业学校、贵州工业职业技术学院以及部分企业工程技术人员,在此对他们辛勤的劳动表示感谢!特别向撰写过程中给予指导的教育部项目专家指导委员会的专家们表示由衷的感谢!此外,清华大学出版社对本系列教材的出版给予了很大支持,在此深表感谢!

王开建

2017年11月9日

前 言

FOREWORD

微电子芯片技术自出现以来以惊人的速度发展,是人类历史上发展最快的技术之一。所有传统产业只要能够与微电子技术结合,并利用集成电路芯片进行智能改造,就会使传统产业焕发青春。器件尺寸越来越小,尺寸达到深亚微米甚至超深亚微米,而器件特性一直是永远探究不到的谜底。

全书共4章,第1章以半导体物理基础及PN结简介为基础,为微电子芯片设计奠定了必要的理论基础。第2章双极型器件及集成电路设计,介绍了双极型晶体管的结构、双极型晶体管的工作原理、双极型晶体管内载流子的输运过程、晶体管的直流特性、双极型晶体管设计、NPN双极型晶体管的设计要求及预期参数、参数设计、仿真分析、双极型集成电路设计、双极型集成电路设计基础、双极型集成电路设计实例。这一章是以双极型晶体管为载体,从理论到实用技术完整的体现。让学生在在学习过程中不知不觉地将知识与技术有机地融合在一起,方便教师以实际案例让学生在学中做,在做中学。极大激发学生的学习兴趣。第3章场效应器件及MOS型集成电路设计和第4章大功率器件及功率集成电路设计,都是用同样的方法展现了设计理论、设计思路、设计方法和设计实例。通过这一独特的理论与工作思路和工作方法的完美结合,有效地带领读者学习基础知识和掌握设计技能。附录中有硅芯片制作、MOS管芯片制造原理、集成电路芯片设计参考视频,可扫描二维码直接观看。

本书可作为微电子专业本科及大专教材,也可作为微电子专业教师和技术人员入职培训用书,还可作为微电子技术人员参考用书。

本教材由马奎、龚红、唐召焕编著,参加编写的人员还有:杨发顺、李国良、刘杰。本书撰写过程中,有多名博士生和硕士生协助做仿真实验并给予很大支持,在此一并表示谢意。

由于编者水平有限,书中疏漏之处,还请读者批评、指正,以便修订时改进。联系邮箱:csee_wangjiangiao@163.com。

编著者

2017年3月8日

目 录

CONTENTS

第 1 章 半导体物理基础及 PN 结简介	1
1.1 半导体物理基础	1
1.1.1 晶体结构体	1
1.1.2 基元、点阵和晶格	2
1.1.3 原胞、基矢、晶向和晶面	2
1.1.4 能带的形成	4
1.1.5 锗、硅和砷化镓的能带结构	6
1.1.6 绝缘体、半导体和导体	7
1.1.7 本征半导体、半导体中的载流子、空穴	7
1.2 载流子的输运	8
1.2.1 扩散运动	8
1.2.2 漂移运动	10
1.3 PN 结简介	15
1.3.1 PN 结的形成及其基本特性	15
1.3.2 平衡 PN 结的能带结构和载流子分布	18
1.3.3 非平衡 PN 结的能带结构和载流子分布	20
1.3.4 PN 结的电场和电势分布	23
1.4 PN 结的有关特性	28
1.4.1 PN 结的直流特性	28
1.4.2 PN 结的电容特性	33
1.4.3 PN 结的小信号交流特性	37
1.4.4 PN 结的开关特性	37
1.4.5 PN 结的击穿	39
第 2 章 双极型器件及集成电路设计	45
2.1 双极型晶体管的结构	45
2.2 双极型晶体管的工作原理	47

2.2.1	双极型晶体管内载流子的输运过程	47
2.2.2	晶体管的直流特性	50
2.3	双极型晶体管设计	65
2.3.1	NPN 双极型晶体管的设计要求及预期参数	65
2.3.2	参数设计	66
2.3.3	仿真分析	67
2.4	双极型集成电路设计	71
2.4.1	双极型集成电路设计基础	71
2.4.2	双极型集成电路设计实例	71
第 3 章	场效应器件及 MOS 型集成电路设计	79
3.1	MOSFET 结构及工作原理	79
3.1.1	半导体表面的特性和理想 MOS 结构	79
3.1.2	MOSFET 结构及其工作原理	87
3.1.3	MOSFET 的阈值电压	91
3.1.4	MOSFET 的电流、电压关系	96
3.1.5	MOSFET 的击穿电压	102
3.1.6	MOSFET 的高频等效电路和频率特性	106
3.2	JFET 结构及工作原理	109
3.2.1	结型场效应晶体管的工作原理	109
3.2.2	JFET 的电流—电压方程	111
3.2.3	JFET 的直流参数和频率参数	114
3.3	场效应器件设计	118
3.3.1	MOSFET 的设计要求及预期参数	118
3.3.2	材料参数设计	119
3.3.3	仿真分析	119
3.4	MOS 型集成电路设计	121
3.4.1	MOS 型集成电路设计基础	121
3.4.2	MOS 型集成电路设计实例	121
第 4 章	大功率器件及功率集成电路设计	131
4.1	大功率器件简介	131
4.2	大功率器件设计	132
4.2.1	VDMOS 耐压层的设计	132
4.2.2	VDMOS 原胞的设计及仿真分析	134
4.2.3	VDMOS 的终端结构设计	138
4.3	功率集成技术简介	143
4.4	功率集成电路设计实例	144
4.4.1	系统方案设计	144

4.4.2 检测、比较电路模块	144
4.4.3 控制电路模块	146
4.4.4 驱动电路模块	148
4.4.5 保护电路模块	151
4.4.6 整体电路设计	157
4.4.7 集成智能功率模块版图设计	157
参考文献	161
附录 A 硅芯片制作、MOS 管芯片制造原理、集成电路芯片设计参考视频	162
附录 B 常用物理常数	163
附录 C 主要符号表	164

本书可作为微电子设计人员应掌握的理论知识, 也是从事

半导体物理是描述电子材料在宏观性的学科, 了解这门学科

有大用处外, PN 结是微电子器件中的基础结构之一, 掌握

进行微电子器件设计工作所必需的。

在: 在进行微电子器件设计之前, 了解和掌握包含基础知识的

制作在半导体材料上的, 其内部载流子的输运状况对其宏观特性

稳定性分析半导体的导电类型和载流子浓度的高低, 进而分析

方程从宏观到半导体内部电场分布, 载流子分布和载流子浓度分布,

构造, 器件和设计的参考打下基础, 微电子器件的基础结构之一。

采用电荷区的形成及其稳定性, PN 结的能带结构, 并力定控分

联, 用欧姆方程和电流连续性方程分析了 PN 结的基本特性, 并

称为定量表征半导体器件的特性或定性基础的数学方法。

本书可作为

第 1 章 半导体物理基础

1.1 晶体结构

按照原子或分子的排列状况, 可将固体材料分为晶体和非晶体两种。

排列的周期性或有序性, 又可将晶体分为单晶和多晶。如图 1-1 所

部原子或分子的排列在整块固体材料中是严格一致的周期性, 整块材

料的排列只在小范围内周期性而在大范围不具备周期性, 原子或分子

性的无序排列。

半导体单晶材料(以下统称半导体材料)是固体材料的一个重要分支, 在

金属和绝缘体之间, 这类材料的显著特点是可以通过对入参量部分改变

电类型, 这是由半导体材料的晶体结构、能带结构和电学特性决定的。

这些特点, 使得半导体材料被广泛应用于制作各种微电子器件和集成电路。

半导体物理基础及PN结简介

本章是微电子设计人员应掌握的基本知识。半导体材料是微电子器件的衬底材料,半导体物理学是描述半导体材料相关特性的学科,了解这门学科的基础知识对设计微电子器件大有益处。PN结是微电子器件中的基础结构之一,掌握PN结的形成机理及相关特性是进行微电子器件设计工作所必需的。

在进行微电子器件设计之前,了解和掌握相关基础知识是十分必要的。微电子器件是制作在半导体材料上的,其内部载流子的输运状况对其宏观特性有着直接影响。学会通过能带图定性分析半导体的导电类型和载流子浓度的高低,能够定量求解连续性方程和泊松方程从而得到半导体中的电场分布、电势分布和载流子浓度分布,将为后续各类器件的结构、原理和设计的学习打下基础。微电子器件的基础结构之一是PN结,了解和掌握PN结空间电荷区的形成及其基本特性,PN结的能带结构,将为定性分析其他半导体器件打下基础。用泊松方程和电流连续性方程分析PN结的基本特性,导出PN结的电流、电压关系,将为定量表征半导体器件特性建立起基本的数学方法。

1.1 半导体物理基础

1.1.1 晶体结构体

按照原子或分子的排列状况,可将固体材料分为晶体和非晶体两种。根据原子或分子排列的全局周期性和局部周期性,又可将晶体分为单晶和多晶。如图1.1所示,单晶材料内部原子或分子的排列在整块固体材料中都呈现严格一致的周期性,多晶材料内部原子或分子的排列只在小范围呈现周期性而在大范围不具备周期性,原子或分子排列没有任何周期性的是非晶材料。

半导体单晶材料(以下简称半导体材料)是固体材料的一个重要分支,其导电能力介于金属和绝缘体之间。这类材料的显著特点是可以通过掺入杂质等办法改变其导电能力或导电类型,这是由半导体材料的晶体结构、能带结构和电荷的输运性质决定的。正是因为这一显著特点,使得半导体材料被广泛应用于制作各类微电子器件和集成电路。

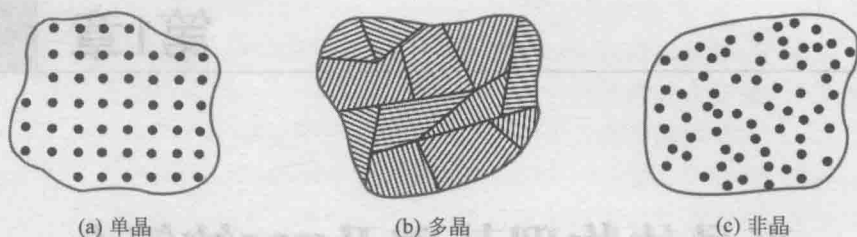


图 1.1 单晶、多晶与非晶原子排列示意图

1.1.2 基元、点阵和晶格

在晶体的周期性排列结构中有一个基本的结构单元,称为基元。基元可以是一个原子、一个分子,也可以是由若干原子组成的原子团。基元在空间三个不同方向上分别按一定距离进行周期性重复排列,就构成了晶格。基元以及周期性重复排列的间距不同,所构成的晶体也就不同。

为直观起见,可把每个基元抽象为一个点,用假想的线将这些点连接起来,构成有规律性的空间架构,称为点阵。每个抽象的点又叫作格点,这种空间点阵又称为布喇菲格子(Bravais Lattice)。可以推断,点阵中抽象的点在空间分布的周期性与晶体中原子排列的周期性完全相同。

基元是晶体中最小的周期性重复单元,每个基元中的原子数就是构成晶体的原子种类数。点阵从全局的角度描绘了晶体的空间架构。把点阵和基元组合起来,就构成了晶体结构,简称晶格。若晶体材料只由一种原子构成,其晶格就是布喇菲格子;若是由两种或两种以上的原子构成,那么各种原子在空间的分布亦相同,并且与该晶体的空间点阵的分布情况一致,因为只有这样,晶体中总的原子排列才具有统一的周期性。对于这种情况,可以分别把每种原子各自的分布看成一套空间点阵,而晶体中总的原子排列则可以看出成由两套或两套以上分布情况完全相同的空间点阵套在一起构成,这种晶格又称为复式格子。

1.1.3 原胞、基矢、晶向和晶面

在描述晶体内部结构周期性时,采用的另一种方法是把晶体划分成一些周期性重复区域——原胞或单胞。原胞是晶体的最小周期性单元,每个原胞只有一个布喇菲格点,空间点阵的格点只能在原胞的顶角点上。由于原胞是体积最小的周期性重复单元,所以用原胞来描述晶体内部结构的周期性可能描述得最充分、最仔细。但在很多情况下,原胞的形状不便于反映晶体中原子排列的对称性。因此为了既能描述原子排列的周期性,又便于反映它们的对称性,在习惯上有时不得不采用体积较大的晶体学原胞(晶胞)。通常的做法是选择晶体学原胞的对称性与晶体的空间点阵的点群对称性一致。

基矢是为便于进行数学分析而设置的一组描述晶体结构周期性的基本平移矢量。原胞基矢量为三个不共面的独立矢量,其方向与原胞结构的空间方向一致,长度等于原胞边长(称为晶格常数),通常用符号 a 、 b 、 c 来表示。利用原胞基矢,晶格中的任一点可表示为

$$r = pa + qb + sc \quad (1.1)$$

式中： p, q, s 为整数。如果在晶体中有两点 r 和 r' ，满足：

$$r' = r + (m_1 a + m_2 b + m_3 c) \quad (1.2)$$

式中： m_1, m_2, m_3 为整数，从这两点上看， r 和 r' 位置上原子的分布情况完全相同。因此，这两点的微观物理性质完全一致，这一特征称为晶体的平移对称性（或称平移不变性），这是晶体结构周期性的必然结果。以图 1.2 的二维晶格为例，单胞 $ODEF$ 与 $O'D'E'F'$ 具有完全相同的结构和物理性质。

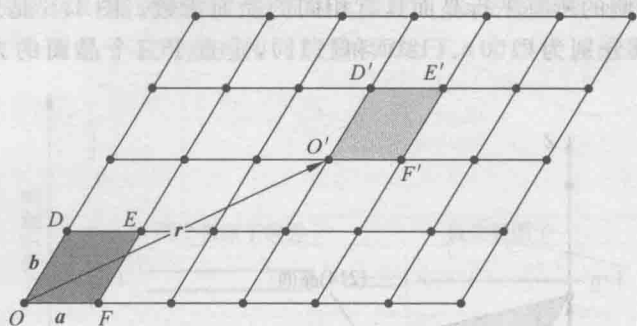


图 1.2 二维晶格的平移操作 ($r = 3a + 2b$)

原胞中原子排列的具体形式称为晶格结构。不同的排列规则形成不同的晶格结构。不同的原子排列和不同的晶格对称性，可以划分为 7 大晶系、14 种布喇菲格子。任何一种晶体都是 14 种晶格结构中的一种，知道晶体所属的晶格结构，也就知道了晶体的对称性。晶体结构的周期性（平移不变性）和对称性是研究晶体材料物理性质的基本出发点。

许多半导体材料具有四面体键的金刚石结构和闪锌矿结构，金刚石结构是一种由相同原子组成的复式格子，可看作两个面心立方晶格沿立方对称原胞体对角线移动 $1/4$ 长度套构而成。半导体 Si、Ge、 α -Sn 都具有金刚石结构。多数 III ~ V 族化合物半导体具有闪锌矿结构，闪锌矿晶格也是由两个面心立方格子沿体对角线平移 $1/4$ 长度套构而成的，每个子晶格由同种元素组成。

由于具有周期性，晶格中的格点可以被认为处在一系列方向相同的直线上，这种直线称为晶列。在同一晶格中存在许多不同的晶列。相互平行的晶列组成各种晶面系，不同的晶面系有不同的取向，如图 1.3 和图 1.4 所示。晶体中任一晶列的方向可由连接晶列中相邻格点的矢量的方向来表示：

$$r_1 = l_1 a + l_2 b + l_3 c \quad (1.3)$$

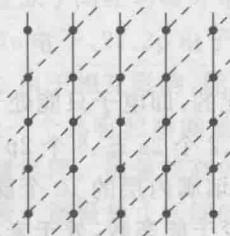


图 1.3 晶列

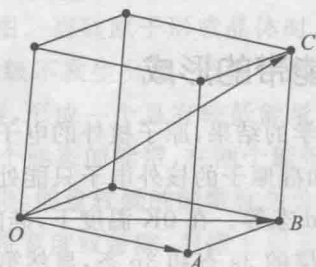


图 1.4 晶向

式中： l_1, l_2, l_3 为互质的整数。对于任一确定的晶格， a, b, c 是确定的，晶列方向只需用这三个互质整数 l_1, l_2, l_3 来标识，记作 $[l_1, l_2, l_3]$ ，称为晶向指数。对于图 1.4 所示的立方晶格， OA 的晶向是 $[100]$ ， OB 的晶向是 $[110]$ ， OC 的晶向是 $[111]$ 。

晶面是晶格结构中的截面，晶面的位置和取向用该晶面沿基矢 a, b, c 出发的矢量上的截距来表示。截距的大小用各单位矢量(点阵常数)来度量，然后取截距的倒数，并把它们化为最小整数。设这三个整数为 h_1, h_2, h_3 ，记作 $(h_1 h_2 h_3)$ ，称为晶面指数(密勒指数)。例如图 1.5 所示，晶面在三个轴上的截距为 $(2, 0, 0)$ 、 $(0, 4, 0)$ 和 $(0, 0, 1)$ ，则晶面指数为 (214) 。显然，位于原点同一侧的所有平行晶面具有相同的晶面指数。图 1.6 是立方晶格的三种典型晶面，其晶面指数分别为 (100) 、 (110) 和 (111) ，垂直于三个晶面的方向分别为 $[100]$ 、 $[110]$ 和 $[111]$ 晶向。

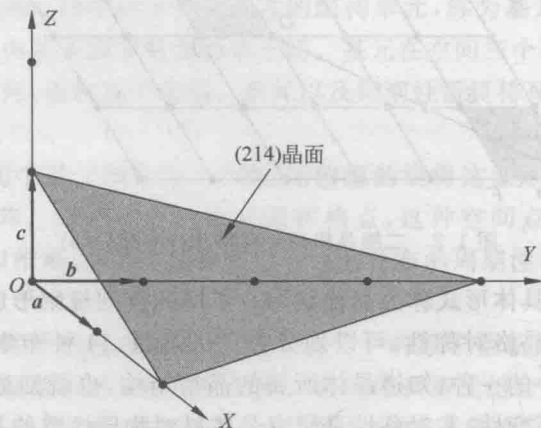


图 1.5 (214)晶面的图示

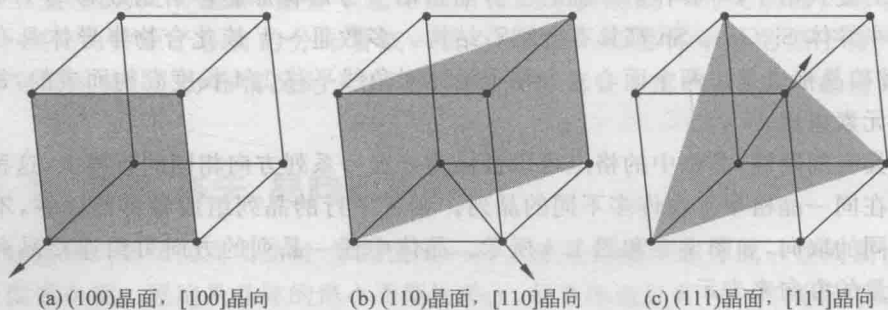


图 1.6 立方晶格的三种典型晶面和晶向

1.1.4 能带的形成

根据量子力学的结果，原子核外的电子能量是量子化的，即电子只能处于某些孤立的能态(能级)上，例如硅原子的核外电子只能处于 2 个 $1s$ 态、2 个 $2s$ 态、6 个 $2p$ 态、2 个 $3s$ 态、6 个 $3p$ 态、10 个 $3d$ 态等。在 $0K$ 温度下，硅的核外电子除填满内层的 10 个能态外，剩余的 4 个电子填到第三层的 $3s$ 态和 $3p$ 态，显然第三层电子数少于能态数，处于未填满状态。这 4 个电子称为硅的价电子。

原子间的距离很远时,核外电子互不影响,各自处于相应的能态上。当 n 个原子周期性重复排列形成密度为 n 的晶体时,原子的库仑势场相互影响,发生了波函数的交叠。价电子不再属于单个原子而是发生了共有化运动。 n 个原子的能级分裂为靠得很近的密集的能级,能级间能量差为 10^{-22} eV 数量级,实际上可把这一能态区域看作连续的能带。当原子间距为晶体结构的平衡距离时,发生能级分裂的是外层价电子能级,而内层电子被原子核束缚在原来的孤立原子能级上,不发生共有化运动。图 1.7 表示两个氢原子靠近时,由于波函数交叠,电子的相互作用, $n=1$ 的单一能级分裂为两个能级。图 1.8 表示 n 个同种原子(假设含一个价电子)形成晶体时能级分裂为能带的示意图。形成晶体前, n 个价电子处于相同能级。形成晶体后, n 个价电子不再具有相同能量,而处于 n 个很接近的新能级上。

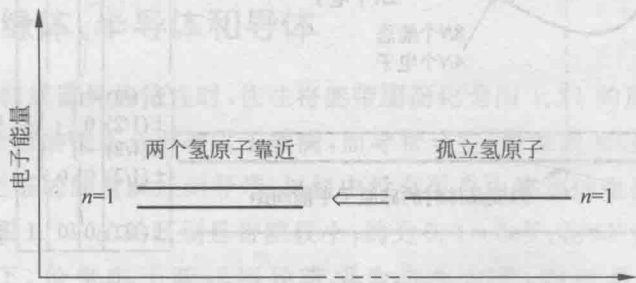


图 1.7 两个氢原子靠近时, $n=1$ 能态的分裂示意图

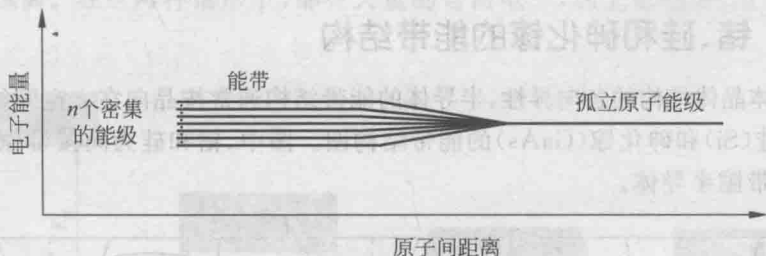


图 1.8 原子密度为 n 的晶体,单一价电子能级分裂为能带的示意图

晶体能带结构的定量关系,即能量—动量的定量关系,可在一定的近似条件下求解晶体中电子的薛定谔方程得到。例如,求解描述晶体中大量电子的薛定谔方程时,做绝热近似把晶格运动与电子运动分开,做单电子近似把大量电子的薛定谔方程化为单电子的薛定谔方程。人们已经采用各种数值方法对固体的能带进行了理论研究。对半导体常用的计算方法有正交化平面波法、增广平面波法、赝势法等。

图 1.9 是硅原子间距与核外电子能级关系图。当硅原子形成晶体时,可以近似地认为硅原子的内层 $1s$ 电子、 $2s$ 、 $2p$ 电子互不影响,能级不发生分裂,仍具有孤立的相同的能级。但价电子 $3s$ 、 $3p$ 由于相互影响,能级发生了分裂,形成一个具有较低能量的、含有 $4N$ 个能态的能带,以及一个具有较高能量的、含有 $4N$ 个能态的能带,在两个能带之间是一个禁止电子具有的能量区间。能量较高的能带称为导带,能量较低的能带称为价带,电子能量的禁止区间称为禁带。能量禁止区间的大小称为禁带宽度或带隙,习惯上用 E_g 表示。在 $0K$ 温度下,价带被电子填满,导带没有电子。