

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С.П.КОРОЛЕВА
(НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)»

В. А. КОЛПАКОВ, А. И. КОЛПАКОВ, С. В. КРИЧЕВСКИЙ

ОСНОВЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

*Рекомендовано к изданию редакционно-издательским советом
федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего профессионального образования
«Самарский государственный аэрокосмический университет
имени академика С.П. Королева
(национальный исследовательский университет)»
в качестве электронного учебного пособия*

Второе издание, переработанное

САМАРА
Издательство СГАУ
2013

УДК 539.2(075)
ББК 22.3я7
К 615

Рецензенты: канд. техн. наук, доц. В. И. Ч е п у р н о в
канд. техн. наук, доц. А. В. П и я к о в

Колпаков В.А.

К 615 **Основы физики твердого тела** [Электронный ресурс] : электрон. учеб. пособие / В. А. Колпаков, А. И. Колпаков, С. В. Кричевский. – 2-е изд., перераб. – Самара: Изд-во СГАУ, 2013. – 1 эл. опт. диск (CD-ROM).

ISBN 978-5-7883-0933-0

Учебное пособие соответствует программе направлений обучения 211000.1.62 Конструирование и технология радиоэлектронных средств, 200500.1.62 Лазерная техника и лазерные технологии. Содержит краткую теорию по физическим основам полупроводников, задачи с примерами подробного решения по каждому разделу, варианты контрольных работ и интернет-экзамен.

Представляет интерес для студентов заочной формы обучения, изучающих курс «Основы физики твердого тела».

УДК 539.2(075)
ББК 22.3я7

ISBN 978-5-7883-0933-0

© Самарский государственный
аэрокосмический университет, 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

	ВВЕДЕНИЕ.....	6
1	ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О СВОЙСТВАХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ.....	7
1.1	Планетарная модель атома.....	11
1.2	Состояние электронов в структуре атомов.....	14
1.3	Природа сил атомных связей в кристаллах.....	16
1.3.1	Механизм формирования сил Ван-дер-Ваальса.....	17
1.3.2	Ионная связь.....	21
1.3.3	Ковалентная связь.....	25
1.3.4	Металлическая связь.....	31
1.4	Трансляционная симметрия в кристаллах.....	32
1.5	Базис.....	34
1.6	Элементарная ячейка.....	35
1.7	Дефекты кристаллической решетки.....	38
1.7.1	Точечные дефекты.....	39
1.7.2	Линейные дефекты.....	43
1.7.3	Электрические свойства дислокаций.....	46
1.7.4	Плотность дефектов.....	48
1.8	Стехиометрия.....	50
2	ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ.....	51
2.1	Статистика Ферми-Дирака.....	51
2.2	Электронная теплоемкость.....	53
2.3	Температурная зависимость удельного сопротивления.....	61
2.3.1	Модель Эйнштейна.....	61
2.3.2	Модель Дебая.....	63
2.3.3	Оптические явления.....	64
2.3.4	Модель Друде.....	65
3	ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВ.....	69
3.1	Энергетические зонные диаграммы и носители заряда в полупроводниках.....	69
3.2	Собственные полупроводники.....	73
3.3	Примесные полупроводники.....	74
3.4	Энергия ионизации атомов в полупроводниках.....	78
3.5	Определение концентрации свободных носителей заряда.....	80

3.6	Закон действующих масс.....	82
3.7	Уровень Ферми в примесных полупроводниках.....	83
3.8	Температурные свойства полупроводников.....	85
4	КИНЕТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ....	88
4.1	Электропроводность полупроводников.....	88
4.2	Рассеяние свободных носителей заряда на тепловых колебаниях узловых атомов решетки (на фононах).....	91
4.3	Рассеяние на ионизированных атомах примеси.....	91
4.4	Собственная электропроводность полупроводников.....	93
4.5	Примесная электропроводность полупроводников.....	94
4.6	Рекомбинация свободных носителей заряда.....	96
4.6.1	Неравновесные носители заряда и их основные характеристики.....	96
4.6.2	Рекомбинация через локальные уровни энергии в запрещенной зоне.....	99
4.6.3	Поверхностная рекомбинация.....	102
4.7	Движение свободных носителей заряда в полупроводниках.....	103
4.8	Соотношение Эйнштейна.....	106
4.9	Диффузионная длина свободных носителей заряда.....	107
4.10	Поверхностные явления в полупроводниках.....	108
5	ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ.....	114
5.1	Эффект Пельтье.....	114
5.2	Эффект Томсона.....	117
5.3	Эффект Зеебека.....	117
6	МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ	125
6.1	Определение эффекта Зеебека.....	125
6.2	Определение количества теплоты Пельтье.....	128
6.3	Определение эффекта Томсона.....	131
6.4	Определение температурной зависимости термоЭДС.....	131
7	КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ.....	133
7.1	Эффект кулоновской блокады в наноразмерных телах.....	133
7.1.1	Протекание тока через туннельный переход.....	135

7.1.2	Эквивалентные схемы практической реализации эффекта кулоновской блокады.....	135
7.2	Кулоновская лестница.....	138
7.3	S_0 -туннелирование.....	140
7.4	Квантовые размерные эффекты.....	140
7.5	Влияние внешних переменных полей на квантовые кулоновские точки.....	141
7.6	Эффекты, связанные с кулоновской блокадой.....	142
7.7	Эффекты туннелирования через двухбарьерную структуру с квантовой ямой.....	142
7.8	Эффект отрицательного дифференциального сопротивления в наноразмерных структурах.....	148
7.9	Эффект сверхрешетки в структуре твердого тела.....	150
8	ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ.....	154
8.1	Физика полупроводников.....	154
8.2	Упражнения для самопроверки.....	174
9	ВАРИАНТЫ ДОМАШНИХ ЗАДАНИЙ.....	182
9.1	Вопросы к теоретической части домашнего задания.....	182
9.2	Варианты задач домашнего задания.....	183
10	ИНТЕРНЕТ-ЭКЗАМЕН.....	203
10.1	Интернет-экзамен в сфере профессионального образования.....	203
10.2	Домашние задания к интернет-экзамену.....	205
	СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	214

ВВЕДЕНИЕ

Процессы и явления, протекающие на атомно-молекулярном уровне в твердом теле, являются основой для формирования или преобразования функций, описывающих информационные сигналы в радиоэлектронике. В связи с этим необходимо изучать глубокую обратную связь между средами, являющимися материальными носителями информационных электрических сигналов, и достижениями в области физики твердого тела, физики полупроводников и новых технологий.

Это развитие новых технологий требует повышения качества подготовки специалистов в области физики твердого тела на основе изучения характерных особенностей строения кристалла и движения свободных носителей заряда в твердом теле в условиях активного воздействия на них электромагнитных полей. Исследования в данной области необходимы для разработки нового поколения сверхминиатюрных сверхбыстродействующих систем наноэлектроники, при этом необходимо учитывать, что по мере приближения размеров твердотельных структур к нанометровой области ($1\text{ нм} = 0,001\text{ мкм} = 10^{-9}\text{ м}$) в большей степени начинают проявляться квантовые свойства электрона, формируемые особенностями строения решетки кристалла. Преобладающими в этом случае становятся волновые процессы, характерные для таких квантовых частиц, как электрон, фонон, фотон, широко используемых в квантовой электронике. С одной стороны, это приводит к нарушению работоспособности классических приборов, а с другой – открывает перспективы создания новых уникальных переключающих, запоминающих, усиливающих элементов для информационных систем. В связи с вышеизложенным изучение физических процессов и явлений в твердом теле становится крайне необходимым при разработке и эксплуатации приборов и систем наноэлектроники, т.к. уже сегодня теоретически обоснована возможность создания приборов, способных запоминать и передавать 1 бит информации (0 и 1) с помощью одного электрона, локализация которого в пространстве может быть задана одним атомом.

1. ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О СВОЙСТВАХ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Электронные свойства таких материалов определяются их электропроводностью и степенью совершенства кристаллической структуры твердого тела. По этим критериям все материалы электронной техники подразделяются на три класса: проводники, полупроводники и изоляторы.

Электропроводность твердых тел характеризует движение свободных носителей заряда (электронов, ионов) в тепловых и электромагнитных полях. Критерием оценки такого движения служит удельная проводимость материала, измеренная при нормальных условиях внешней среды ($P = 760$ мм рт. ст. и $T = 300\text{K}$).

Металлы, обладая металлической связью, формируют кристаллическую решетку, содержащую структурно связанные положительно заряженные ионы и свободные электроны между ними. Способность электронов практически мгновенно изменять параметры своего движения позволяет изменять удельную проводимость металлов в достаточно малом диапазоне $1 - 10^2 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ ($10^2 - 10^1 \text{ См/м}$).

Полупроводники в большинстве практических случаев имеют ковалентную связь атомов в решетке кристалла. Отсутствие свободных электронов при $T = 0 \text{ K}$ приводит к значительно меньшей проводимости и очень широкому диапазону ее изменения при $T > 0 \text{ K}$ $10^{11} - 10^1 \text{ См/м}$ ($10^{-13} - 10^{-1} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$).

Изоляторы в кристаллической решетке содержат атомы, связанные ковалентной или ионной связями, обладающими значительно большей энергией ионизации, поэтому их проводимость изменяется в диапазоне $10^{-26} - 10^{-14} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ ($10^{-24} - 10^{-12} \text{ См/м}$) и имеет по сравнению с полупроводниками несколько меньший диапазон изменения.

По характеру изменения проводимости при воздействии на твердые тела внешних источников энергии (теплоты, радиации, света и т.д.) полупроводники резко отличаются от металлов и изоляторов. Так, например, при повышении температуры удельная проводимость металлов изменяется по линейному, а полупроводников и изоляторов по экспоненциальному законам (рис. 1.1).

Однако и в этом случае полупроводники стоят в особом ряду. Например, только они способны значительно изменять свою проводимость при взаимодействии с потоками: света, радиации, введения в

структуру кристаллической решетки чужеродных атомов, которые даже в количестве 10^4 атомов на 1 % матричных атомов изменяют проводимость полупроводника в десятки раз, воздействия различных жидкостей и газов при $t > 500$ °С. Поэтому при изготовлении полупроводниковых приборов приходится считаться с огромным количеством явлений, которые порой противоречат друг другу и даже зачастую не зависят от режима их работы. Еще большие противоречия возникают при разработке электронных схем, когда необходимо согласовывать полупроводниковые приборы, выполненные по различным технологиям и из различных материалов.

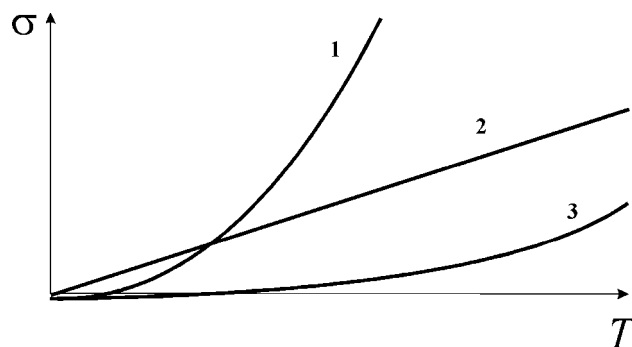


Рис.1.1. Температурные зависимости проводимости:
1 — полупроводника, 2 — металла, 3 — изолятора

Совершенство кристаллической структуры твердого тела определяют по степени периодичности расположения атомов в трехмерной кристаллической решетке. По данному критерию все материалы подразделяются на монокристаллы, поликристаллы и кристаллы с аморфной структурой.

Монокристаллы — в идеальном случае, обладают абсолютной периодичностью расположения бесконечно повторяющейся конструкции атомов, связанных по определенному алгоритму, структура которого в значительной мере определяет свойства твердых тел. Данную конструкцию атомов называли элементарной ячейкой. Для алмазоподобных полупроводников (кремний, германий, арсенид галлия и т.д.) в качестве модели элементарной ячейки используют куб (рис. 1.2).

Поликристаллы — содержат несколько областей (рис.1.3,а), внутри которых они имеют монокристаллическую структуру (рис.1.3,б).

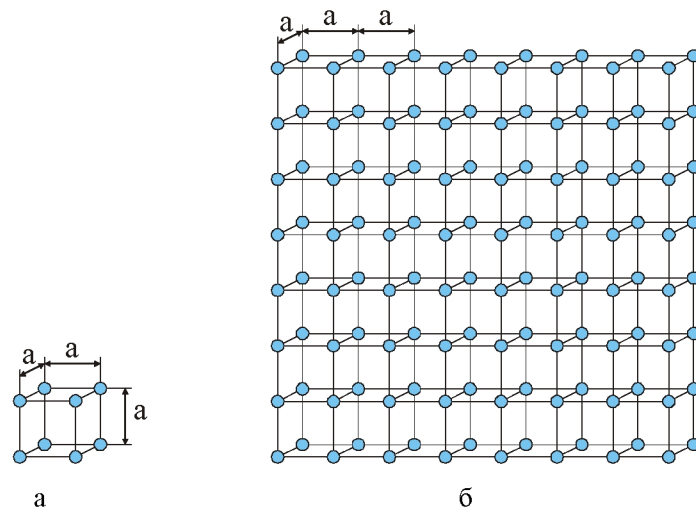


Рис.1.2. Структура полупроводникового кристалла с алмазоподобной решеткой кристалла: а – элементарная ячейка, б – расположение элементарных ячеек в структуре монокристалла

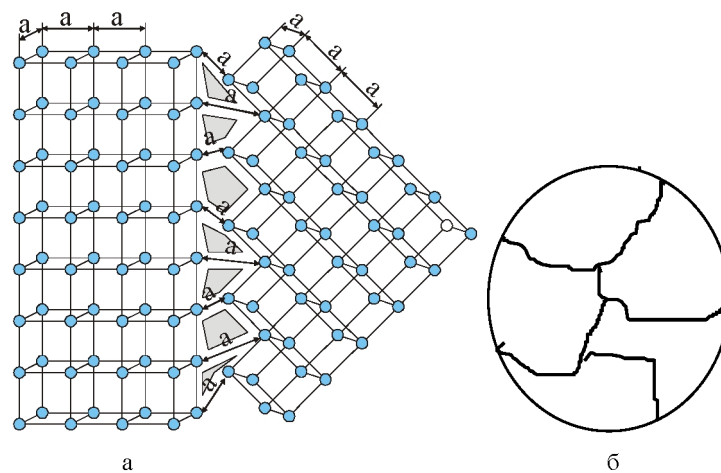


Рис.1.3. Полупроводник в поликристаллической фазе: а – внешний вид расположения монокристаллических областей; б – структура кристалла в области границ монокристаллических областей

Однако кристаллографические оси таких монокристаллических областей не совпадают друг с другом и образуют границы несоответствия электронных связей атомов различных областей. Это несоответ-

ствие приводит к возникновению в области границ большого количества свободных энергетических уровней (разорванных связей), склонных к захвату свободных электронов и образованию потенциальных барьеров. В результате границы монокристаллических областей приобретают специфические свойства: являются идеальными изоляторами в направлениях, перпендикулярных к ним, при этом вдоль границ наблюдается эффект высокой проводимости.

Аморфный кристалл – материал, в котором так же, как и в монокристалле и поликристалле, структура состоит из элементарных ячеек (рис. 1.2,а), имеющих постоянную кристаллическую решетку. Однако структуру кристалла в этом случае образуют хаотично расположенные одиночные и комплексно-связанные элементарные ячейки. Хотя кристаллографические плоскости элементарных ячеек по своему направлению не совпадают, однако расстояние между атомами соседних ячеек в идеальном случае сохраняется равным постоянной решетки a , т.к. невыполнение этого условия означало бы кардинальное изменение свойств материала. Например, в реальных кристаллах аморфного типа расстояние между элементарными ячейками и их комплексами может значительно превышать постоянную решетки, что приводит к образованию микропор. Поэтому аморфные полупроводники обладают меньшей плотностью материала.

С периодическим расположением атомов в твердом теле связаны и его фундаментальные физико-химические свойства: тепловые, электромагнитные, гальваномагнитные, дифракция частиц, движущихся внутри кристалла или попавших в него извне, например, таких как электроны, фотоны, нейтроны и т.д. Следовательно, при управляемом нарушении периодичности кристаллической решетки становится возможным изменение параметров перечисленных свойств. Например, введение в структуру решетки чужеродных атомов приводит к образованию дефектов, называемых примесными атомами. С другой стороны, удаление матричного атома из узла кристаллической решетки также приводит к образованию дефектов атомного уровня – вакансий. Обработка твердого тела порождает также макродефекты в виде краевых и винтовых дислокаций, распространяющихся на единицы, десятки микрон, способных значительно ухудшить параметры полупроводниковых приборов. Указанное подтверждает необходимость изучения физических основ строения кристалла, позволяющих полнее освоить механизмы возникновения различных свойств в твердых телах, представленных в последующих разделах данного учебного пособия.

1.1 Планетарная модель атома

Физика твердого тела является основой квантовой электроники, т.к. изучение структуры кристалла связано с изучением фононов, позитронов, атомов и совокупности атомов, являющихся квантовыми частицами. В качестве базовой квантовой частицы можно взять атом, свойства которого в кристалле и вне его обладают значительными различиями. Например, атомы в кристалле способны вступать во взаимодействие с другими атомами, испаряться, сублимировать, перераспределять свои атомные связи и т. д. Это означает неустойчивое положение атомов в кристалле, нарушаемое при любом внешнем воздействии на его структуру. Отдельный атом, избавившись от внешних воздействий, обладает минимальным количеством энергии, т.е. находится в потенциальной «яме». Устойчивое положение отдельных атомов позволяет располагать их на расстоянии, равном половине длины волны, что обеспечивает сверхпроводимость в цепочке таких атомов. В связи с этим становится необходимым изучение свойств отдельного атома, структуру которого можно представить в виде планетарной модели Резерфорда (рис.1.4).

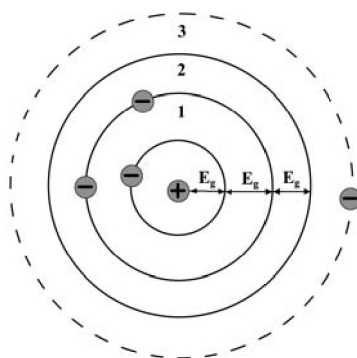


Рис.1.4. Планетарная модель атома Резерфорда

Согласно модели Резерфорда в центре структуры атома располагается позитрон, вокруг которого непрерывно перемещаются по орбитальным электроны. В области между орбиталями электрону запрещено всякое продольное движение и разрешено движение по нормали, т.е. разрешено переходить с орбитали на орбиту (см. рис.1.1 переходы 2-1, 1-2). Образование вакантного места на орбитали 1 приводит к необходимости перехода электрона с орбитали 2 на освободившееся место, восстанавливая тем самым энергетическое равновесие. В связи с этим

пространство между орбиталями называли *запрещенной зоной* и обозначили E_q .

Физико-химические свойства атомов при их взаимодействиях в кристалле определяются параметрами электронов, находящихся на энергетическом уровне внешней орбитали, называемой *валентной* и обозначаемой E_v . Если электрону, находящемуся на валентной орбитали, сообщить энергию равную E_{qg} , то он переходит на некоторый энергетический уровень, в области которого он способен перемещаться под действием внешних источников энергии, т.е. электрон становится свободным. Такие электроны в кристалле образуют электрический ток, вследствие чего орбиталь назвали энергетическим уровнем *проводимости* и обозначили E_c . Характерной особенностью валентных электронов является равенство их параметров в любой точке орбитали. Следовательно, мы можем выделить участок dx , в области которого орбитали имеют направление, близкое к прямолинейному. Если ввести понятие середины запрещенной зоны E_i , то можно изобразить процесс перехода электрона с валентной орбитали на энергетический уровень проводимости энергетической диаграммой вида (рис.1.5):

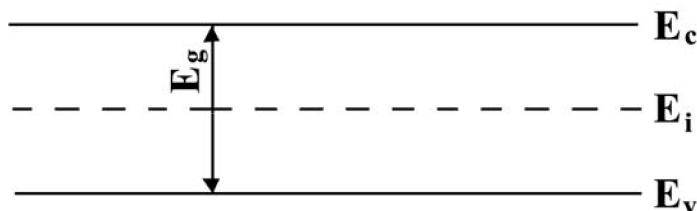


Рис.1.5. Простейшая энергетическая диаграмма дискретного атома

Из анализа диаграммы вытекают два случая:

1. Поскольку движение электрона разрешено только вдоль энергетических уровней орбиталей, то электрическое поле условно прикладывается к торцам диаграммы (рис.1.5);
2. Величину своей энергии электроны изменяют, перемещаясь по нормали к энергетическим уровням E_c и E_v .

Подобные энергетические диаграммы справедливы только для дискретных атомов, находящихся в потенциальных ямах и располагающихся на расстоянии r , обеспечивающего отсутствие их взаимодействия из-за возникновения барьера δ (рис. 1.6,а).

Пространство каждого атома ограничено потенциальной кривой $E(r)$.

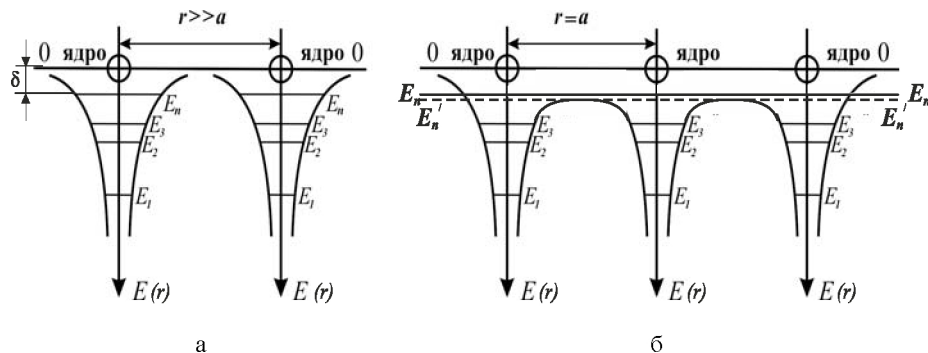


Рис. 1.6. Структура расположения атомов при выполнении условий $r \gg a$ и $r = a$:
 a – расстояние между атомами в кристалле, $E(r)$ – потенциальная энергия
 взаимодействия электрона с ядром

Поэтому электроны, находящиеся на энергетических уровнях $E_1, E_2, \dots, E_n$ обладают отрицательной энергией, а валентные электроны лишены возможности переходить на энергетические уровни соседних атомов ввиду наличия барьера δ . Если атомы сближать относительно друг друга, то потенциальные энергии, характеризующие потенциальную яму, начнут взаимодействовать друг с другом и на расстоянии $r = a$ происходит их объединение, приводящее к опусканию уровня энергии E_n' ниже уровня E_n и устранению барьера δ (см. рис. 1.6, б).

Появление возможности перехода валентных электронов по уровню E_n к соседнему атому и обратно создает условие возникновения неопределенности, выражаемое в том, что атомы не в состоянии определить «свой» валентный электрон. Это означает появление на энергетической диаграмме двух дополнительных энергетических уровней E_{c1} и E_{v1} (рис. 1.7, а).

При взаимодействии нескольких атомов, имеющих на валентных орбиталях более одного электрона, на энергетической диаграмме возникают дополнительные энергетические уровни, что приводит к образованию энергетических зон, называемых зоной проводимости и валентной зоной (рис. 1.7, б). При $T = 0$ К все энергетические уровни в зоне проводимости свободны, а в валентной зоне все уровни заняты электронами, причем их положение в этих зонах формирует конкретные свойства атомов в структуре кристалла.

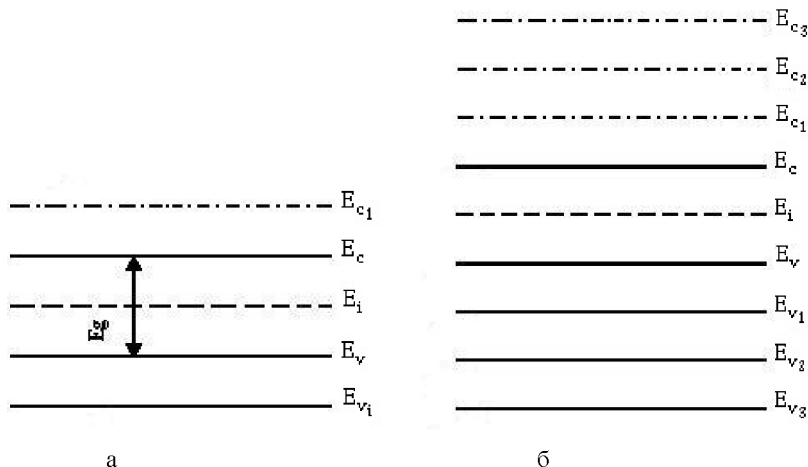


Рис.1.7. Энергетическая диаграмма при взаимодействии: а – двух атомов водорода; б – при наличии на валентных орбиталях двух атомов 4 электронов

1.2. Состояние электронов в структуре атома

В общем случае квантовое состояние электронов в структуре атома определяется совокупностью четырех квантовых чисел: главным квантовым числом (n), азимутальным квантовым числом (l), магнитным квантовым числом (m), спиновым квантовым числом (s).

Главное квантовое число n может принимать только целые положительные значения. Совокупность электронов, характеризующихся одинаковым главным квантовым числом, образует электронную оболочку (орбиталь) атома.

Квантовое число l определяет величину движения электронов и может иметь $(n-1)$ различных значений $l = 0, 1, 2, \dots, (n-1)$. В отсутствие внешних магнитных или электрических полей энергия электрона описывается равенством $E = E(n, l)$.

Электроны с одинаковым квантовым числом l образуют группу электронов, являющихся частью орбитали атома. Различные электронные оболочки принято еще обозначать латинскими буквами по следующей схеме:

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$s, p, d, f, \dots$$

В соответствии с этим совокупность электронов, принадлежащих к определенной оболочке атома и определенной его группе, будем обо-

значать главным квантовым числом n и буквенным обозначением группы, а индексом сверху – указываем число имеющихся в атоме таких электронов. Например, $3p^2$ означает, что в атоме имеется два электрона в квантовом состоянии, характеризуемом квантовыми числами $n = 3, l = 1$.

Третье квантовое число m устанавливает возможные пространственные направления вектора момента количества движения при наличии какого-либо физически выделенного направления и может принимать $(2l+1)$ выделенных значений, т.е. $m = -l, -(l-1), \dots, 0, \dots, (l-1), l$.

Четвертое квантовое число s обусловлено наличием у самого электрона, независимо от его положения на орбитали атома, определенного механического момента количества движения, так называемого «спина», и связанного с ним магнитного момента. Для собственного механического момента электрона также имеет место пространственное квантование. Однако спиновое квантовое число способно принимать только два различных значения $s = \pm 1/2$. Согласно принципу Паули, в атоме в одном и том же квантовом состоянии не может быть более 1 электрона. Это приводит к определенной конечной вместимости электронных групп и оболочек. Согласно указанному, вместимость групп при $l = \text{const}$ равна числу различных значений m , умноженных на 2 (вследствие двух возможных значений s), т.е. вместимость равна $2 \cdot (2l+1)$. Это дает для различных групп электронов следующую схему значений (табл. 1.1):

Т а б л и ц а 1.1

Группа	s	p	d	f	...
l	0	1	2	3	...
Вместимость	2	6	10	14	...

В каждой заполненной группе всегда имеется четное число электронов и при этом каждому электрону с определенными квантовыми числами n, l, m всегда соответствует другой электрон с такими же квантовыми числами, но с противоположным спином. При выполнении условия $n=\text{const}$ вместимость оболочек описывается равенством:

$$\sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2n^2.$$

Данное равенство позволяет получить расчетные значения квантовых чисел, приведенные в табл. 1.2

Т а б л и ц а 1.2. Значения квантовых чисел

Оболочка	K	L	M	N	O	P
n	1	2	3	4	5	6
Вместимость	2	8	18	32	50	72

Заполненные электронные группы обладают особой устойчивостью, поэтому атомы благородных газов характеризуются значительной химической инертностью, а металлы, характеризующиеся небольшим количеством электронных групп, наоборот – высокой химической активностью. Именно это свойство металлов позволяет электронам легко переходить из одной группы электронов в другую, изменяя кардинальным образом свойства материалов. Рассмотрим типичный атом металла натрия ($Z=11$), который обладает 11 электронами, расположенными согласно электронной структуре:

$$Na^{11} = (1s)^2(2s)^2(2p)^6(3s)^1 = (Ne)^{10}(3s)^1.$$

У атома натрия имеется только один валентный электрон с квантовыми параметрами $(3s)^1$, и поэтому натрий является одновалентным. С другой стороны, у атома металлоида валентная оболочка почти заполнена, вследствие чего он легко принимает электрон из окружающей среды, становясь отрицательным ионом. В связи с этим, все металлоиды имеют ионную связь. Типичным металлоидом является хлор, схема структуры атома которого имеет вид

$$Cl^{17} : (Ne)^{10}(3s)^2(3p)^5.$$

Здесь для заполнения группы электронов $3p$, валентность которой равна шести, не хватает одного электрона, поэтому атом хлора также одновалентен.

Таким образом, и атом натрия, и атом хлора свои свойства формируют только одним электроном, что дает право отнести их в одну группу.

1.3. Природа сил атомных связей в кристаллах

При сближении атомов между ними возникают силы взаимодействия, конечной целью которых является образование правильной структуры кристалла, характерные особенности которой также участвуют в формировании свойств твердых тел. Наиболее распространенными типами связей атомов в твердых телах являются: силы Ван-дер-Ваальса, ионная, ковалентная и металлическая связи.

1.3.1. Механизм формирования сил Ван-дер-Ваальса

Силы Ван-дер-Ваальса являются наиболее общими и возникают между любыми атомами, взаимодействующими в структурах различных материалов. Характеризуются слабой связью с энергией порядка 1 ккал/моль, поэтому все структуры, образуемые ими, малоустойчивы, легколетучи, имеют низкие значения температуры плавления. В электрическом отношении они являются изоляторами. Многие кристаллы прозрачны вплоть до ультрафиолетовой области спектра. Сущность данных сил состоит в том, что постоянный дипольный момент нейтральных атомов или молекул равен нулю, поэтому они притягиваются друг к другу электрическими силами. Механизм притягивания возникает при нулевых колебаниях частиц, существующих в силу принципа неопределенности. Это приводит к созданию у каждого атома структурирующего дипольного момента с постоянной механической амплитудой. Образовавшееся поле убывает пропорционально кубу расстояния таким образом, что между двумя ядрами атомов в каждый момент времени диполь одного из них создает мгновенное поле, пропорциональное отношению $(1/r)^3$, где r – расстояние между ядрами. Тогда потенциальная энергия взаимодействия таких диполей может быть определена из выражения

$$E_{прит} = -\frac{A}{r^6}. \quad (1.1)$$

С уменьшением расстояния между атомами возникают силы их отталкивания, обусловленные перекрытием электронных оболочек атома. Численное значение данного отталкивания определяется расстоянием между атомами и описывается либо степенным законом вида $(r^{-11} \dots r^{-12})$, либо с помощью характеристического параметра

$$E = -\frac{A}{r^6} + B \cdot \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right). \quad (1.2)$$

Энергии образующейся связи E и равновесного состояния между связанными атомами определяются параметрами A , B и ρ . Графическое изображение равенства (1.2) представлено на рис.1.8:

Из представленной зависимости видно, что устойчивая связь образуется при межъядерном расстоянии, равном r_0 . Характеристическая длина мала по сравнению с межатомным расстоянием в равновесной конфигурации структуры атомов и отвечает минимуму энергии E , причем член равенства (1.2), соответствующий силе отталкивания, вносит весьма малый вклад в значение E .



Рис.1.8. Графическое представление решения уравнения (1.2): r_0 — расстояние между атомами в равновесном состоянии, r — в текущем состоянии

Вышеизложенное относится к механизму взаимодействия двух атомов. В целом в выражении (1.2) представлены эффекты дипольного притяжения и отталкивания, определяющие полное значение энергии связи для трехмерных кристаллов. Поскольку ограничение на направление связи отсутствует, то твердые тела, в которых связи обусловлены силами Ван-дер-Ваальса, стремятся образовать плотноупакованные кристаллические структуры с максимально возможным числом ближайших соседей у каждого атома. Однако силы притяжения быстро уменьшаются с увеличением расстояния между атомами. Это означает, что все остальные атомы, кроме ближайших соседей, оказывают несущественное влияние на механизм взаимодействия атомов, т.е. силы Ван-дер-Ваальса действуют только на одно межатомное расстояние. Кристаллы инертных газов являются прекрасными примерами материалов, в которых связи обусловлены исключительно силами Ван-дер-Ваальса. Следует также заметить, что значительно чаще встречаются кристаллы, в которых силы Ван-дер-Ваальса связывают между собой молекулы с насыщенными связями, в то время как внутри самой молекулы между атомами действуют более сильные механизмы связи. Чаще всего это проявляется у молекул типа H_2 , N_2 , O_2 , F_2 , Cl_2 , Br_2 , I_2 . Так, например, Cl_2 имеет энергию диссоциации 0,2 Эв на молекулу, в то время как энергия диссоциации атомов, содержащихся в самой молекуле, составляет 2,5 Эв. Это связано с тем, что молекулы в кристалле связаны силами Ван-дер-Ваальса, а атомы в молекуле — ковалентной связью. Силы Ван-дер-Ваальса формируют три типа связей между молекулами: дисперсионную, ориентационную и индукционную.

Дисперсионная связь возникает в каждый момент времени, когда электроны на орбитали располагаются в определенных точках ее пространства. Это приводит к тому, что при взаимодействии каждый атом создает мгновенные диполи (рис. 1.9). Подобные образования создают диполь, т.к. отсутствие электрона в какой-либо точке орбитали означает «+», а его присутствие на противоположной стороне орбитали – «-». Величина положительного заряда в этом случае равна заряду электронов, формирующих отрицательный заряд. Этот мгновенный дипольный момент способен индуцировать подобные моменты у соседних атомов, находящихся на расстоянии r друг от друга.

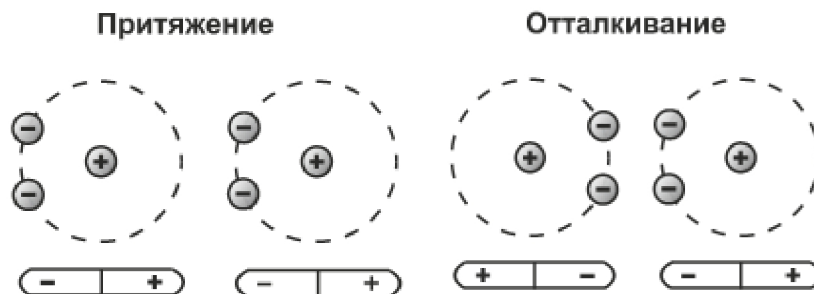


Рис. 1.9. Модельные представления сил Ван-дер-Ваальса

Потенциальную энергию, притягивающую взаимодействующие атомы, можно определить из равенства

$$\phi_w(r) = -\frac{C}{r^6}, \quad (1.3)$$

где C – константа, зависящая от поляризуемости атомов, типичные значения которой приведены в табл. 1.3.

Т а б л и ц а 1.3. Значения констант поляризуемости атомов

Элемент	Kr	Li	Cu	Na	K	Rb	Cs
$C \cdot 10^{60}, \text{ эрг} \cdot \text{см}^6$	0,01	0,07	0,41	1,68	24,3	59,4	152,0

Анализ (1.3) показывает непрерывное увеличение $\phi_w(r)$, т.е. при уменьшении r происходит неограниченное сжатие твердого тела. В реальных кристаллах этому сжатию противодействует сила отталкивания, описываемая выражением

$$\phi_r(r) = \frac{A}{r^n},$$

где A – константа, $n \approx 12$. Данная сила имеет кулоновскую природу и возникает за счет перекрывающихся электронных облаков. Таким образом, полная потенциальная энергия представляет сумму противодействующих энергий, описываемую потенциалом Леннарда-Джонса:

$$\phi_r(r) = \phi_0 \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]. \quad (1.4)$$

В случае одномерного кристалла (1.4) можно представить равенством

$$\phi_r(r) = \phi_0 \left[\left(\frac{\sigma}{x} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{x} \right)^6 \right],$$

где x – текущая координата расстояния между соседними атомами. Потенциал межатомного взаимодействия позволяет получить численные значения энергии сцепления атомов в кристалле, их сжимаемость и коэффициент теплового расширения.

Ориентационная связь существует у молекул, обладающих постоянным дипольным моментом, т.е. являющихся полярными. Тогда при взаимодействии атомов и молекул между ними возникает электростатическое поле, стремящееся расположить молекулы в строгом порядке, при котором энергия системы минимальна. Подобную связь называют ориентационной, а ее структура имеет вид (рис.1.10).

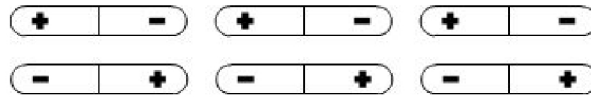


Рис. 1.10. Структура ориентационной связи полярных молекул

Правильность ориентации молекул нарушается при $T > 0K$ или при воздействии на систему других внешних источников энергии.

Индукционная связь возникает у полярных молекул с высокой поляризуемостью за счет наведения момента под действием поля постоянных диполей соседних атомов с заполненными электронными оболочками (рис.1.11).

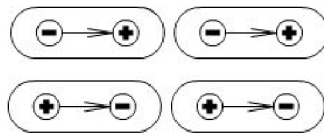


Рис.1.11. Индукционная связь полярных молекул

Ее появление связано с наличием у атома мгновенного флуктуационного дипольного момента, формируемого мгновенным положением электронов на их орбитах, т.е. определяемого дисперсионной связью. Индуцирование дисперсионной связью дипольного момента у соседнего атома приводит к возникновению притягивающего потенциала.

Энергия индукционного взаимодействия имеет чисто электрическую природу, поэтому его величина практически не зависит от температуры. Экспериментально установлено, что индукционное взаимодействие полярных молекул для всех веществ чрезвычайно слабое и составляет $\frac{3}{4}$ или $\frac{1}{2}$ энергии ориентационного взаимодействия диполей.

У неполярных молекул связи между атомами определяются энергией дисперсионных взаимодействий, примером которых служит соляная кислота (HCl).

Силы Ван-дер-Ваальса характеризуются слабой связью с энергией порядка ккал/моль, поэтому все структуры, образуемые ими, малоустойчивы, легколетучи, имеют низкие значения температуры плавления. В электрическом отношении они являются изоляторами. Многие кристаллы прозрачны вплоть до ультрафиолетовой области спектра.

1.3.2. Ионная связь

Ионный кристалл состоит из положительных и отрицательных ионов, расположенных так, что кулоновское отталкивание одноименных заряженных ионов оказывается меньше кулоновского притяжения ионов с противоположным зарядом. Реализация этого механизма происходит путем перехода электрона атома металла на валентную орбиталь атома металлоида, т.е. в процессе образования ионной связи осуществляется перезарядка атомов. Например, молекула $NaCl$ кристаллизуется в виде структуры Na^+Cl^- . Это обусловлено малостью потенциала ионизации щелочного металла. Поэтому электрон от атома Na^+ легко переходит к хлору, у которого для полного заполнения атомных орбиталей не хватает одного электрона, т.е. хлор электроотрицателен по отношению к натрию. Поскольку для превращения натрия в катион натрия конфигурации заполненной электронной оболочки необходимо совершить работу, а галоген хлор имеет сродство к электрону, то происходит выделение энергии в момент, когда атом хлора захватывает электрон и становится ионом Cl^- . Аналогичным образом заполняются и электронные оболочки соседних атомов в кристалле. Энергию связи E_a в этом случае, можно определить, используя выражение

$$E_a = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (1.5)$$

Благодаря отталкиванию, возникающему вследствие принципа Паули, формируется перекрытие заполненных оболочек аниона и катиона. Тогда расстояние, на которое могут сблизиться данные ионы, ограничено энергией отталкивания, определяемой из равенств:

$$E_{om} = \frac{A}{2^n} (n \approx 12) \quad (1.6)$$

или

$$E_{om} = B \cdot \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) \quad (1.7)$$

Однако ни одно из этих выражений не соответствует квантовомеханическому механизму, приводящему к процессу отталкивания атомов при их взаимодействии.

Суммировав (1.7) и (1.5), получим

$$E_i = E_a + E_{om} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + B \cdot \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) \quad (1.8)$$

Минимум энергии на зависимости, представленной на рис. 1.12,б, соответствует устойчивой связи между ионами Na^+ и Cl^- .

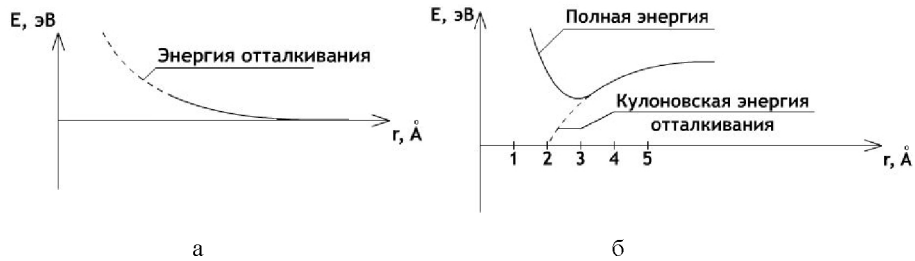


Рис.1.12. Зависимости, представляющие собой решения (1.8)

Анализ зависимостей, представленных на рис. 1.12, а,б, показывает: член равенства, соответствующий силе отталкивания, в большей степени зависит от r , чем от кулоновской энергии, осуществляющей отталкивание атомов, поэтому энергия связи меньше; возвращающиеся силы, действующие на атом при r отличном от r_0 определяются величинами B и ρ . Данный механизм образует связи между отдельными ионами натрия и хлора. Он справедлив также и для кристалла хлорида натрия, в котором каждый катион Na^+ имеет в качестве ближайших

соседей σ анионов Cl^- и взаимодействие состоит из кулоновских сил притяжения и отталкивания. Между собой ни катионы, ни анионы не соприкасаются, что свидетельствует о существовании только кулоновских сил. Поскольку у кристалла энергия связи должна быть нейтральной, то сумма отрицательных и положительных слагаемых должна компенсировать энергию отталкивания, возникающую из-за перекрытия волновых функций атомов. Для кристалла хлорида натрия катион Na^+ окружен ближайшими соседями Cl^- , располагающимися на расстояниях r_0 и $\sqrt{r}$ – двенадцатью ионами Na^+ и на расстоянии $\sqrt{3}r_0$ – восемью ионами хлора. Таким образом, полная кулоновская энергия, приходящаяся на одну пару ионов, равна сумме бесконечного ряда ионов натрия и хлора, численное значение которой можно определить из равенства

$$E_i = -\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}\right) \left[6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \dots\right] = -1.748 \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}\right) = -\alpha \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}\right), \quad (1.9)$$

где α – постоянная Маделунга.

Упрощая (1.9) и используя (1.7), получим

$$E_i = \frac{\alpha \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} + C \cdot \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right), \quad (1.10)$$

где численные значения C и ρ могут быть получены только с помощью расчетных методик квантовой химии. Однако одну из этих констант можно исключить, если учесть, что при равновесном значении расстояния r_0 между ближайшими соседями атомов их энергии имеют минимум. Тогда, дифференцируя (1.10), получим

$$\frac{dE_i}{dr} = \frac{\alpha \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} - \frac{C}{\rho} \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right). \quad (1.11)$$

Условие минимума энергии

$$\left(\frac{dE}{dr}\right)_{r_0=0} = 0$$

позволяет приравнять правую часть (1.11) к нулю и получить равенство

$$C = \frac{\alpha \cdot \rho \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \exp\left(\frac{r_0}{\rho}\right). \quad (1.12)$$

Таким образом, при любом расстоянии r между ионами энергия связи равна

$$E_i = -\frac{\alpha \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left[1 - \left(\frac{r\rho}{r_0^2} \right) \cdot \exp\left(\frac{r_0 - r}{\rho} \right) \right]. \quad (1.13)$$

При условии равновесного состояния атомов, находящихся на расстоянии r , можно определить энергию такого состояния:

$$E_{рав} = -\frac{\alpha \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left[1 - \left(\frac{\rho}{r_0} \right) \right]. \quad (1.14)$$

Поскольку значение ρ невелико и составляет несколько процентов от r_0 , то длина этой связи определяется главным образом энергией Маделунга.

Рассмотрим одномерный ионный кристалл, состоящий из $2N$ атомов с чередованием заряда $\pm e$. Потенциал межатомного взаимодействия в этом случае можно записать в виде равенства

$$\phi(ij) = \begin{cases} \frac{A}{x^n} - \frac{e}{x}, \\ \pm \frac{e^2}{x\rho_{ij}} \end{cases}, \quad (1.15)$$

где A – константа; n – целое число; $x_{ij} = x\rho_{ij}$ – расстояние между атомами i -го и j -го порядка; x – расстояние непосредственно между соседними атомами (рис. 1.13).

Разность в правой части (1.15) позволяет определить потенциальную энергию для ближайших соседей атома, а второе равенство – для всех остальных случаев.



Рис.1.13. Линейная цепочка атомов ионного кристалла

Численное значение константы A можно определить из условия равновесного состояния решетки, т.е. из условия выполнения равенства $d\phi/dx = 0$. Если в качестве начала отсчета принять положение одного из отрицательных ионов, то постоянную Маделунга можно определить, используя равенство

$$\frac{\alpha}{x} = \sum_j' \frac{\pm 1}{x_{ij}} = 2 \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{2x} + \frac{1}{3x} - \frac{1}{4x} + \dots \right).$$

Штрих над знаком суммы означает, что слагаемые с $i = j$ необходимо исключить из процесса суммирования, т.к. они при этом обращаются в бесконечность. С физической точки зрения множитель 2 перед скобками в правой части равенства учитывает нахождение на некотором расстоянии справа и слева от фиксированного иона таких же ионов. Разлагая сумму в степенной ряд, можно получить выражение

$$\frac{\alpha}{x} = \left(\frac{2}{x} \right) \ln(1+y).$$

При $y = 1$ постоянная Маделунга описывается равенством $\alpha = 2 \ln 2$.

1.3.3. Ковалентная связь

Ковалентную связь называют валентной или гомеоплярной, т.к. ее образование происходит при взаимодействии атомов и обобществлении ими по одному валентному электрону. Это приводит к увеличению плотности электронного заряда, препятствующего образованию каждым атомом излишнего числа ковалентных связей, определяемого величиной отклонения числа внешних электронов от числа электронов, необходимых для полного заполнения электронной оболочки.

Наиболее простым веществом с ковалентной связью является молекула водорода H_2 (рис. 1.14).

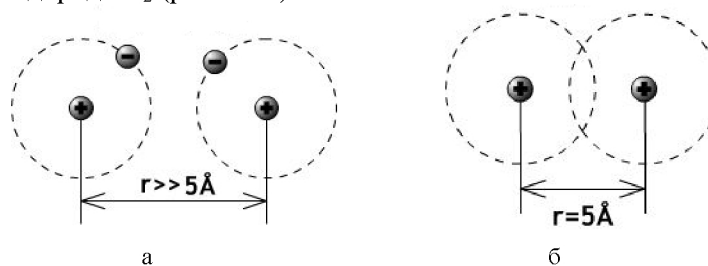


Рис. 1.14. Расположение атомов водорода при условии отсутствия взаимодействия валентных электронов (а) и при возникновении ковалентной связи между ними (б)

Плотность электрического облака, характеризующая состояние электрона в атоме, быстро падает с увеличением расстояния между ними. Поэтому принадлежность электрона одного атома другому маловероятна. Расчеты показывают, что при $r = 50 \text{ Å}$ каждый электрон может побывать на орбитали соседнего атома 1 раз за 100 млрд. лет,

т.е. атомы практически изолированы друг от друга. По мере сближения атомов до расстояния, равного $5\text{\AA}$, наступает перекрытие электронных орбиталей атомов и частота перехода электронов обоих атомов увеличивается до 10^{14} атомов в секунду. При дальнейшем перекрытии орбиталей число переходов растет и при некоторой частоте обмена электронами в данных атомах теряется смысл говорить о принадлежности электрона к какому-либо конкретному атому. Это способствует образованию нового состояния, в котором каждый электрон принадлежит одновременно обоим атомам, т.е. происходит обобществление. Данный вид связи называется ковалентной связью. Согласно квантовой механике, задача образования ковалентных связей между взаимодействующими атомами значительно усложняется при переходе к структурам многоэлектронных атомов, однако качественно картина остается такой же, что и при образовании ковалентной связи атомов водорода.

Сближение атомов ограничивается силами кулоновского отталкивания ядер, а в более тяжелых атомах к данным силам добавляется сила отталкивания за счет перекрытия заполненных внутренних оболочек. К веществам с ковалентной связью относятся:

- 1) большинство органических соединений;
- 2) твердые и жидкие вещества, у которых связи образуются между парами атомов галогенов, а также между парами атомов кислорода, азота и водорода;
- 3) элементы 4,5,6-й групп таблицы Менделеева;
- 4) соединения, подчиняющиеся правилу $8N$, такие, например, как антимонид индия ($InSb$), когда образующие соединение элементы расположены не слишком далеко друг от друга по горизонтали таблицы Менделеева.

Нередко в процессе кристаллизации твердых тел с ковалентной связью могут образовываться различные кристаллические структуры, энергия связей которых практически одинакова. Изменением температуры или давления в некоторых материалах можно заменить его первоначальную структуру на энергетически более выгодную, образуя кристалл с новыми свойствами (рис. 1.15).

Такое свойство подобных веществ называют аллотропией или полиморфизмом. Так, например, структура сернистого цинка (ZnS) может быть кубической (цинковая обманка) или гексагональной (вюрцит). Расположение в таблице Менделеева ближайших соседей в цинковой обманке и вюрците одинаково, а небольшое различие этих двух структур определяется расположением атомов, следующих за ближайшими соседями. Аналогичные свойства имеет карбид кремния (SiC), имеющий целый ряд «политипов» с раз-

личным типом структуры, изменение которой начинается с чисто кубической и заканчивается чисто гексагональной со слабо различимыми электронными свойствами.

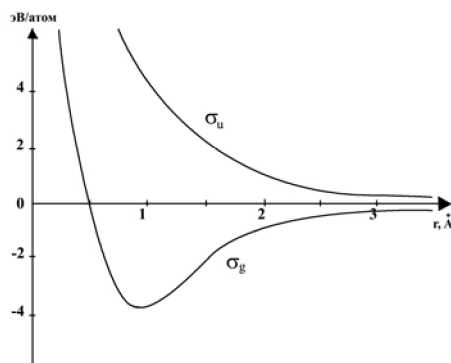


Рис. 1.15. Зависимость энергии молекулы водорода от междядерного расстояния, обусловленной состояниями: σ_g – связывающими, причем в этом состоянии находятся два электрона с антипараллельными спинами; σ_u – антисвязывающими

Все многочисленные кристаллические модификации *InS* и *SiC* могут существовать при комнатной температуре без особого риска спонтанного перехода в более выгодные электронные состояния. В других веществах спонтанный переход происходит достаточно легко. Например, при быстром охлаждении от точки плавления (218°C) до комнатной температуры (23°C) селен оказывается аморфным, однако при нагреве до температуры $60\text{--}70^\circ\text{C}$ происходит кристаллизация его структуры, которая сохраняется в процессе последующего охлаждения до комнатной температуры. Другим примером вещества, способного к аллотропному превращению, является олово. Так, при температуре ниже 17°C олово находится в стабильном состоянии в виде серого металла ($\alpha - S_n$) с тетраэдрической структурой алмаза, а при температуре выше 17°C – переходит в более плотное металлическое состояние, т.е. в белое олово ($\beta - S_n$) с тетрагональной решеткой. Особенностью такой структуры является наличие у каждого атома шести ближайших соседей. Более того, если в последнем случае к олову приложено давление, то белое олово образуется даже ниже температуры в 17°C .

Характерной особенностью ковалентной связи является насыщаемость, выражаемая в том, что каждый атом способен образовывать ковалентную связь только с определенным числом своих соседей. Это наглядно подтверждается при образовании ковалентной связи между атомами водорода, при

которой взаимодействующие атомы могут устанавливать связь лишь с одним своим соседом. Пара электронов, образующих данную связь, обладает антипараллельными спинами и занимает одну квантовую ячейку. Третий атом будет не притягиваться, а отталкиваться, в этом и заключается насыщенность. Другим важным свойством ковалентной связи является ее направленность. Так, например, углерод может образовывать связи по направлениям вдоль ребер тетраэдра под углами $109,5^\circ$. Подобная направленность характерна для тетрагональной структуры, наблюдаемой в кристаллическом алмазе и многочисленных органических соединениях. Например, углерод, кремний и германий имеют структуру типа алмаза, в которой связь каждого атома образует тетраэдрические углы. Это обусловлено тем, что нейтральный атом углерода имеет электронную конфигурацию типа $1S^2 2S^2 2p^2$, а атом углерода в кристалле с тетраэдрическим расположением связи с ближайшими соседями – конфигурацию $1S^2 2S^2 2p^3$. Рассмотрим механизм формирования такой связи у атомов олова в его кристаллической решетке. Пусть четыре орбитали, соответствующие конфигурации $1S^2 2S^2 2p^2$, имеют обозначение в виде структуры

$$|S\rangle, |P_x\rangle, |P_y\rangle, |P_z\rangle,$$

где $|s\rangle = (4\pi)^{-1/2}$,

$$\begin{aligned} |P_x\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}(y_{11} + y_{1-1}) = \left(\frac{3}{4}\pi^{-1}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\Theta \cos\varphi, \\ |P_y\rangle &= -\sqrt{\frac{1}{2}}i(y_{11} - y_{1-1}) = \left(\frac{3}{4}\pi^{-1}\right)^{\frac{1}{2}} \sin\Theta \sin\varphi, \\ |P_z\rangle &= y_{10} = \left(\frac{3}{4}\pi^{-1}\right)^{\frac{1}{2}} \cos\Theta \end{aligned} \quad (1.16)$$

и угловые функции нормированы относительно единицы. Четыре функции, соответствующие конфигурации $1S^2 2S^2 2p^3$, называемые тетраэдрическими орбиталями, являются линейными комбинациями следующих функций:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{2}(|s\rangle + |P_x\rangle + |P_y\rangle + |P_z\rangle), \\ \psi_2 &= \frac{1}{2}(|s\rangle + |P_x\rangle - |P_y\rangle - |P_z\rangle). \end{aligned} \quad (1.17)$$

К функциям (1.17) необходимо добавить еще две функции ψ_3 и ψ_4 , ортогональные рассматриваемым функциям. Квадрат модуля функции ψ_1 , определяющий угловое распределение электронов в этом состоянии, принимает максимальное значение в направлении пространственной диагонали октанта, соответствующего положительным направлениям осей x , y , z . Это и есть направление ковалентной связи. Аналогично $|\psi_2|^2$ имеет максимум в направлении пространственной диагонали октанта, образованного осями x , $-y$, $-z$, а $|\psi_3|^2$ – в направлении диагонали октанта с осями x , $-y$, z . Связывающие орбитали характеризуются сравнительно низкой энергией, распределение электронной плотности для них смещено в сторону атома с большим числом валентных электронов и вытянуто в направлении ближайших соседей, если атом с меньшей валентностью взаимодействует с атомами большей валентности. При обратном взаимодействии наблюдается появление “разрыхляющих” орбиталей, в области которых распределение плотности электронов сосредоточено на атоме с меньшей валентностью и вытянуто в направлении к атому с большим числом валентных электронов. В качестве примера рассмотрим образование ковалентной связи в двухатомной молекуле водорода. Обозначим потенциальную энергию электрона в такой молекуле через функцию $V(x)$, а молекулу водорода в виде двух одинаковых и линейно расположенных δ -образных потенциальных ям, находящихся на расстоянии $2a$ друг от друга. Тогда энергию ковалентной связи атомов молекулы водорода можно определить из решения уравнения Шредингера вида

$$H(x)\psi(x) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x),$$

где $V(x) = -A\delta(x-a) - A\delta(x+a)$.

Поскольку гамильтониан системы $H(x)$ не изменяется при замене x на $-x$, то при вводе оператора пространственной инверсии J второй раз будет справедливо равенство $JH = HJ$. Это означает, что для любой собственной функции гамильтониана $H(x)$, соответствующей невырожденному состоянию с энергией E , можно получить другую собственную функцию вида $(J\psi)$, т.к. справедливы выражения

$$(JH)\psi = E(J\psi) \quad \text{или} \quad H(J\psi) = E(J\psi).$$

Таким образом, функции $(J\psi)$ и ψ эквивалентны и можно написать равенство $J\psi = c\psi$, где коэффициент c представляет собой скалярную величину. Используя оператор J , полученный при вторичном вводе

оператора пространственной инверсии, осуществим переход к первоначальной функции, позволяющей записать равенство $J^2\psi = c^2\psi = \psi$. Решая данное выражение относительно коэффициента c , получим $c = \pm 1$. Из этого равенства вытекает, что функция ψ существует либо в четном $\psi(-x) = +\psi(x)$, либо нечетном $\psi(-x) = -\psi(x)$ видах. В простейшем случае представления энергии $V(x)$ волновое уравнение имеет точное решение, которое для связанных состояний принимает вид

$$\psi(x) = \begin{cases} B \exp(\chi x) & (x < -a), \\ C \exp(\chi x) + D \exp(-\chi x) & (-a \leq x \leq +a), \\ F \exp(-\chi x) & (x > a). \end{cases}$$

Данное равенство имеет решение, если функция $\psi(x)$ непрерывна, а производная $d\psi/dx \equiv \psi'$ в точках $x = \pm a$ терпит разрыв. Следует отметить, что последнее условие может существовать только при выполнении равенства

$$\psi'(\pm a + 0) - \psi'(\pm a - 0) = -2\mu\psi(\pm a),$$

где $\mu = mA/\hbar^2$; $\hbar$ – модифицированная постоянная Планка. Эти условия справедливы только при строгом разграничении четных и нечетных функций. Из указанного следует равенство коэффициентов $B=F$, $C=D$ для четных решений функции $\psi(x)$ и $B=-F$, $C=-D$ – для нечетных. Учитывая представленные равенства, условие непрерывности функции $\psi(x)$ и наличие скачка функции $\psi'(x)$, можно получить выражения, определяющие собственные значения энергии: $\beta = \gamma(1 + th\gamma)$ для четных решений и $\beta = \gamma(1 + cth\gamma)$ – для нечетных решений, где $\beta = 2\mu a$, $\gamma = \chi a$. В таком случае величина энергии может быть описана равенством

$$E = -\frac{\hbar^2 \chi^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \gamma^2.$$

Анализ данного выражения показывает, что при постоянстве величины A значение энергии определяется только межатомным расстоянием $2a$. Величина энергии, приходящаяся на один атом, определяется из выражения

$$E_B = E - E_\infty,$$

где $E_\infty = -\hbar^2 \mu^2 / 2m$ – энергия электрона в поле одной δ – образной потенциальной ямы. Зависимости $E_B = f(\beta)$ и вид волновых функций при $\beta = 2$ приведены на рис. 1.16.

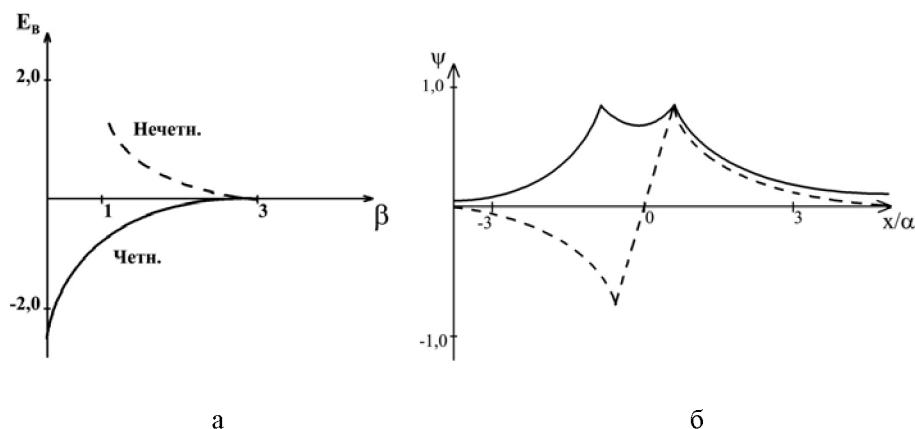


Рис. 1.16. Характер зависимости энергии связи от величины межатомного расстояния β (а) и вид волновых функций электрона при $\beta = 2$ (б)

При малых величинах межатомного расстояния четная функция описывает связанные состояния. В этом случае электронное распределение, определяемое как $|\psi|^2$, имеет направленный характер, указывающий на связывание валентных электронов взаимодействующих атомов. Нечетная, а следовательно и антисимметричная функция, соответствует несвязанным состояниям системы электронов, распределение которых относится уже к разрыхляющему типу. Следует отметить, что при $\beta \rightarrow \infty$ (большие межатомные расстояния) $E_{\text{четн}} = E_{\text{нечетн}} \rightarrow E_{\infty}$ и связывание в принципе отсутствует.

1.3.4. Металлическая связь

Металлическая связь обусловлена относительно слабой связью валентных электронов в атомах металла. Степень слабости каждой отдельной связи проявляется в том, что межатомное расстояние металлов больше, чем у двухатомных молекул. Например, расстояние между атомами в молекулах Li-Li в кристалле составляет 3,04 Å, а в молекуле Li₂ с ковалентной связью оно равно 2,67 Å. Особенности структуры определяют и физические свойства металлов: электропроводность, теплопроводность, пластичность. Эти свойства определяются электронной структурой атомов, образующих кристаллическую решетку металлов. Например, структурная система атома натрия содержит ядро с порядковым номером $Z=11$ и 11 орбитальных электронов, из которых десять образуют конфигурацию, сильно связанную с ядром атома

$1s^2 2s^2 2p^6$. В отсутствие 11-го электрона данная структура образует положительный ион натрия. Одиннадцатый электрон расположен на 3s- оболочке, т.е. является действительно слабо связанным с ядром атома.

Согласно законам квантовой механики, при образовании металла положительно заряженные «ионные остова», составляющие 10-20% объема всего кристалла, формируют каркас кристаллической решетки, в котором между остовами ионов подобно атомам газа свободно перемещаются валентные электроны. Их удержание в структуре кристалла обусловлено высоким значением работы выхода электрона «электронного газа», достигающей величин порядка 2 эВ. Равенство положительного и отрицательного зарядов, образующих электронейтральную систему атома, справедливо только при выполнении условий: волновые функции электронов, составляющих этот газ, должны сильно перекрываться, быть полностью делокализованными, а при наличии ионного потенциала представлять собой блоховские функции; не все электроны, участвующие в образовании связи, имеют одну и ту же энергию; связь в металлах обуславливается тем, что средняя энергия валентного электрона в структуре металла меньше, чем у изолированных атомов. Для более строгого рассмотрения металлической связи необходимо учесть электростатическое отталкивание электронных остовов, экранированных электронным газом, Ван-дер-Ваальсовое притяжение между ионами и их отталкивание за счет перекрытия электронных оболочек, связь, обусловленную заполненностью внутренних оболочек атома, и корреляцию электронов внутри электронного газа.

Наиболее важными особенностями металлов являются высокие тепло- и электропроводности, обусловленные наличием свободных электронов и высокой пластичностью, формируемой способностью атомов смещаться без разрушения кристалла и, следовательно, без нарушения характерного распределения его потенциального поля. Наличие свободных электронов определяет также непрозрачность и высокую отражающую способность металлов. Следует отметить также, что в кристаллах существуют все виды связи, однако одна из них всегда преобладает. Например, металл имеет металлическую связь, а его оксиды могут иметь ковалентную связь.

1.4. Трансляционная симметрия в кристаллах

Идеальный монокристалл представляет собой бесконечное повторение в трехмерном пространстве идентичных блоков одинаковой ориентации, т.е. одинаковых по конструкции. Каждый блок, называемый

базисом, может представлять собой как отдельные атомы и молекулы, так и их группы, связанные между собой по определенному алгоритму. Таким образом, базис определяется количеством вещества, содержащегося в элементарной ячейке, имеющей форму прямоугольного параллелепипеда. Перемещением параллелепипеда на определенное дискретное расстояние во всех направлениях можно заполнить пространство кристалла. В этом случае, согласно требованиям трансляционной симметрии, можно выбрать три вектора трансляции: a , b , c . Это позволяет описать оператор трансляции выражением вида

$$T = n_1 a + n_2 b + n_3 c, \quad (1.18)$$

где n_1, n_2, n_3 – произвольные целые числа. Оператор трансляции T будет соединять два положения в кристалле, имеющие одинаковые атомные блоки. Вектора трансляции a , b , c , в этом случае должны быть направлены вдоль трех смежных ребер элементарной ячейки, имеющей форму параллелепипеда. Кроме этого, для реализации трансляционной симметрии необходимо выполнение следующих условий:

1. Расположение атомов на противоположных границах атомной ячейки должно быть одинаковым.

2. Локальное расположение атомов вблизи любой точки r (совпадающей или несовпадающей с положением атомов) должно быть тем же самым, что и вблизи множества точек r' , связанных с r соотношением

$$r' = r + T. \quad (1.19)$$

Множество операторов трансляции T , с геометрической точки зрения, определяет пространственную решетку, называемую решеткой Браве. Реальная кристаллическая решетка формируется заполнением базисами всего пространства вокруг решетки Браве. Следует отметить, что для двумерного кристалла можно составить пять решеток Браве. При переходе к трехмерной структуре число возможных решеток Браве становится уже равным четырнадцати. Следует также отметить, что лишь для определенных типов решеток можно выбрать вектора a , b , c одинаковой длины и лишь для некоторых простых решеток они являются взаимно перпендикулярными. Решетка, составленная из точек r' и векторов трансляции a , b , c , называется примитивной, если каждая точка из этой совокупности точек r' эквивалентна r . Примитивным базисом называется минимальное число атомов или молекул, которых достаточно для определения данной кристаллической структуры, т.е. это есть количество вещества в примитивной (насыщенной) элемен-

тарной ячейке. Для некоторых типов кристаллических структур выбор примитивных векторов трансляции можно привести несколькими способами (рис. 1.17).

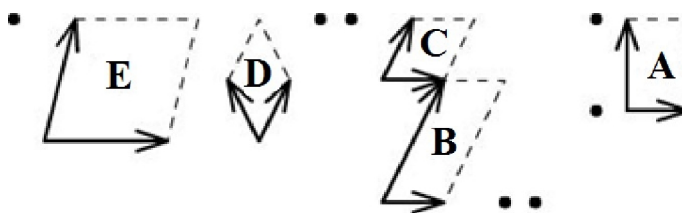


Рис. 1.17. Положения и направления примитивных векторов трансляции в элементарной ячейке двухмерной кристаллической структуры: А, В, С, D – примитивные; Е – непримитивные

В заключение необходимо отметить, что для некоторых типов кристаллических структур выбор примитивных векторов трансляции можно выполнить бесконечным числом способов расположения данных векторов.

1.5. Базис

Пространственная решетка, называемая решеткой Браве, описывает лишь геометрическое расположение точек в пространстве. Поэтому для описания кристаллической структуры необходимо еще и определить симметрию атомов, расположенных в каждой точке решетки кристалла, т.е. определить ее базис. Его основу составляет совокупность координат атомов, расстояние между которыми и направление связей повторяются как единое целое в окрестностях каждой точки решетки кристалла. Это позволяет учитывать параметры каждого атома в структуре кристалла.

Базис примитивной решетки содержит минимальное количество атомов, способных поддерживать существование заданных свойств кристалла. Так, например, для аргона и натрия, представляющих класс простых кристаллов, базис состоит лишь из одного атома. В соединениях более сложного состава структура базиса может содержать несколько атомов. Это справедливо для базисов кремния и галлия, конструкция которых состоит из двух атомов. Более того, в некоторых сложных органических соединениях один базис может включать в себя несколько тысяч атомов. При таких условиях высшая симметрия кристаллической решетки твердого тела определяет и высшую симметрию, которой может обладать ее базис.

Таким образом, базис определяет количество вещества, содержащееся в элементарной ячейке.

1.6. Элементарная ячейка

Кристалл моделируется совокупностью повторяющихся в трехмерном пространстве одинаковых блоков, представляющих собой либо атомный базис, либо параллелепипед, составленный из векторов a, b, c ($V = a \times b \times c$) и называемый элементарной ячейкой. Высокая кубическая симметрия проявляется при выборе в качестве элементарной ячейки элементарного куба с тремя взаимно перпендикулярными векторами трансляции L . Поскольку объем элементарного куба составляет L^3 , а объем ромбоэдрической ячейки равен $L^3/4$, то в элементарной ячейке содержится такое же количество вещества, что и в четырех примитивных базисах. Однако элементарная ячейка в виде куба значительно проще выявляет кубическую симметрию кристалла, чем примитивная ромбоэдрическая ячейка с соответствующими примитивными векторами длиной $L\sqrt{3}/2$. Объем примитивной ячейки, равный $L^3/2$, составляет половину объема куба. В объемно-центрированной кубической решетке можно использовать другую примитивную комбинацию векторов и составить примитивную элементарную ячейку другой формы, однако объем ее будет равен $L^3/2$. Можно получить любое число различных элементарных ячеек с объемом большим или равным L^3 , тем не менее изображение элементарной ячейки в виде куба является наиболее удобным. Формы и размеры элементарной ячейки, а также распределение атомов внутри ее дают полное кристаллографическое описание твердого тела. Следует отметить, что некоторые атомы, расположенные внутри элементарной ячейки, принадлежат ей не полностью. Например, атом, располагающийся на поверхности ячейки, принадлежит ей только частично, т.к. одновременно принадлежит и поверхности соседней элементарной ячейки. Из этого следует, что для каждого из восьми атомов, расположенных в углах куба, учитывается лишь их 1/8 часть.

Изображение элементарной ячейки в виде куба позволяет задать определенную кристаллографическую плоскость или определенное направление в реальном трехмерном пространстве. В трехмерной решетке длины векторов трансляции a, b, c могут быть произвольными, а углы между парами векторов необязательно должны быть равны 90 градусам. Тогда часть такой решетки можно моделировать точками O, A, B, C , соответствующими узлам решетки (1.18).

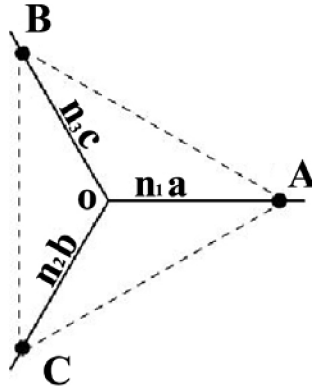


Рис.1.18. Плоскость, проходящая через точки решетки A,B,C:
 a, b, c – примитивные векторы; n_1, n_2, n_3 – произвольные целые числа

Их выбор осуществляют таким образом, чтобы векторы $\vec{OA}, \vec{OB}, \vec{OC}$ совпадали по направлению с противоположными векторами, а расстояния $|OA|, |OB|, |OC|$ в целое число раз n_1, n_2, n_3 превосходили длины соответствующих примитивных векторов элементарной ячейки. Для задания плоскости ABC было бы достаточно указать их проекции $n_1|a|, n_2|b|, n_3|c|$, однако ввиду громоздкости такого обозначения его используют достаточно редко. Более удобно обозначить плоскость ABC буквами h, k, l , представляющими собой набор целых чисел, определяющих отношения:

$$h : k : l = n_1^{-1} : n_2^{-1} : n_3^{-1}. \quad (1.20)$$

Таким образом, плоскость, удовлетворяющая (1.20), имеет индексы h, k, l , называемые индексами Миллера. Более наглядно данные индексы можно продемонстрировать на кубической решетке (рис.1.19).

Плоскость, обозначенная $(h \ k \ 0)$, пересекает ось c на бесконечно большом расстоянии. Очевидно, такая плоскость параллельна оси c (направление $\vec{OC}$ на рис. 1.18). Аналогично плоскость, параллельная осям b и c , обозначается как $(h \ 0 \ 0)$. В соответствии с принципом использования наименьшего из целых чисел любая плоскость $(h \ 0 \ 0)$, если о ней не нужно сообщать дополнительной информации, обозначается как $(1 \ 0 \ 0)$. Если рассматриваемая плоскость пересекает ось a в области отрицательных значений координат, то в соответствии с терминологией Миллера используют обозначение $(\bar{h} \ k \ l)$. Плоскости (100) и $(\bar{1}00)$ связаны между собой трансляционной симметрией. В силу

этой же симметрии символы типа $\{hkl\}$, обозначающие все плоскости, эквивалентны плоскости (hkl) (рис.1.19). Обозначение $(2\ 0\ 0)$ указывает на то, что данная плоскость отсекает на оси a отрезок длиной $(1/2)a$. Аналогичным образом связаны плоскости (111) и (222) (см. рис.1.19).

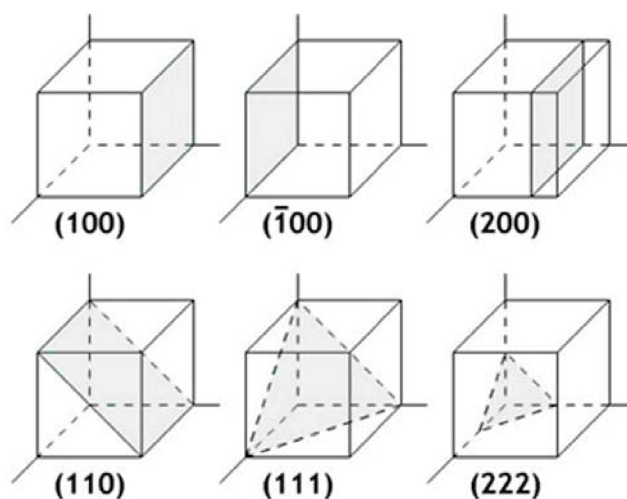


Рис. 1.19. Кристаллографические плоскости в кубической решетке, выражаемые индексами Миллера

В гексагональных и тригональных кристаллах положение кристаллографических плоскостей можно задавать тремя индексами Миллера. Однако для этих кристаллографических классов целесообразнее использовать набор четырех индексов Миллера, представляющих собой обратное значение координат точек пересечения плоскости с осями a_1 , a_2 , a_3 и с осью c (рис.1.20).

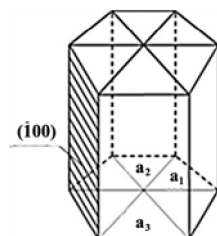


Рис. 1.20. Элементарная ячейка для гексагональных тригональных кристаллов

Таким образом, решетки гексагональных и тригональных кристаллов необходимо показывать четырьмя векторами, из которых первые два независимы, т.е. для их обозначения можно использовать четырехзначные индексы Миллера. В качестве примера приведем обозначения плоскостей типа $(10\bar{1}0)$ или (0001) , где четвертый индекс связан пересечением с осью c . Особенностью таких обозначений является равенство нулю суммы первых трех индексов Миллера, обусловленное соотношением между компланарными векторами a_1 , a_2 и a_3 . Пример связи индексов, обозначающих плоскости с направлением векторов a_1 , a_2 и a_3 , представлен на рис. 1.20.

В кристаллах низкой симметрии введение индексов Миллера требует некоторого предварительного изучения кристалла, т.е. необходимо измерить координаты точек пересечения плоскости с координатными осями и выразить их в длинах, соответствующих единичным векторам. Это позволяет существенно упростить рассмотрение кристаллов с низкой симметрией.

Положение элементарной ячейки определяется тремя числами u , v , w , каждое из которых описывает расстояние от данной точки до начала координат и выражается в единицах длины ребер элементарной ячейки. Так, например, если координаты точки в одном углу элементарной ячейки обозначить как (000) , то точка в противоположном углу обозначается (111) . Промежуточным точкам внутри или на поверхности элементарной ячейки будут соответствовать дробные числа, т.е. точка, обозначенная символами $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, находится в центре грани, а $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ – в центре ячейки. Подобным обозначением часто пользуются при рассмотрении реальных кристаллов.

Направления в кристалле обозначают тремя целыми числами в квадратных скобках. Данное обозначение похоже на индексы Миллера $[h, k, l]$, однако оно ортогонально им только в случае кубических кристаллов. Кристаллографическое направление $[h, k, l]$ определяется набором наименьших целых чисел, относящихся друг к другу как косинус углов между данными направлениями и осями элементарной ячейки. Из этого следует, что числа h, k, l пропорциональны длинам векторов, направленных вдоль осей элементарной ячейки, составляющих в сумме вектор, ориентированный в данном направлении.

1.7. Дефекты кристаллической решетки

Реальные кристаллы имеют конечные размеры, поэтому, по крайней мере в области поверхностного слоя, всегда имеют дефектную структуру. Например, при разрезании твердого тела на пластины в об-

ласти поверхности происходит разрыв элементарной ячейки и нарушение периодичности ее строения. В процессе изготовления конкретных изделий твердое тело подвергается механическому, электромагнитному, тепловому и другим воздействиям, в результате которых также происходит деформация кристаллической решетки твердого тела. Локальные нарушения периодичности называются дефектами структуры кристалла. Существующие дефекты образуют нарушение периодичности в области одного атома или совокупности атомов. В первом случае они образуют класс точечных дефектов, а в последнем – линейных или объемных, простирающихся на значительные расстояния в кристалле, образуя межкристаллитные границы, отделяющие их от совершенной области кристаллической решетки твердого тела. Наличие в области границ свободных энергетических уровней (связей) приводит к перемещению свободных электронов, ионов, примесных атомов в область дефекта, захвату их этими связями и возникновению электрического заряда или нейтрализации свободных связей. Каждый реальный кристалл обладает конечной концентрацией точечных дефектов и конечной плотностью линейных дефектов, называемых дислокациями.

1.7.1. Точечные дефекты

Точечные дефекты классифицируются в твердых телах тремя группами: атомы примеси (чужеродные атомы в узлах решетки кристалла); собственные точечные дефекты в виде пустых узлов (вакансий) и атомов, находящихся в междоузлии. Точечными дефектами также принято считать и более сложные образования, состоящие из нескольких сортов собственных и примесных атомов или из примесных атомов, связанных с вакансиями. Поэтому условились точечными дефектами называть нарушения периодичности структуры кристалла, максимальный размер которых не превышает нескольких атомных расстояний.

Простейшим случаем точечного дефекта является чужеродный (примесный) атом, располагающийся в узле или междоузлии кристаллической решетки. Присутствие примесных атомов оказывает значительное влияние на электрические, оптические, магнитные, тепловые и механические свойства полупроводников. Это обусловлено тем, что равновесная зона собственных дефектов может зависеть от концентрации примесных атомов, если их ковалентный радиус (размер) превышает межатомное расстояние. Например, внедрение атома алюминия в кристаллическую решетку кремния приводит к возникновению эффекта раздвигания решетки и выдавливанию соседнего матричного атома

в междоузлие, т.к. размеры атома алюминия превосходят размеры вакантного узла, т.е. вакансии. Точечным дефектом является также вакансия, под которой понимают отсутствие атома в узле кристаллической решетки или наличие дополнительного атома на поверхности кристалла или в междоузлии (рис.1.21, а, б). Общее число атомов в кристалле при этом не изменяется.

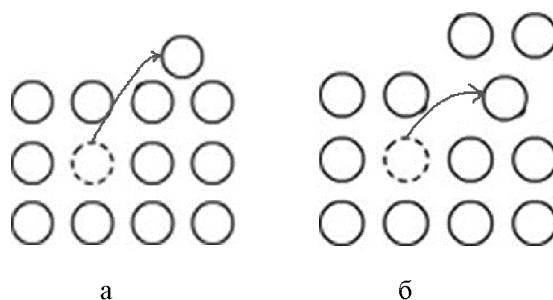


Рис. 1.21. Схема точечного дефекта типа вакансии: а – с переходом матричного атома на поверхность; б – при размещении матричного атома в междоузлии

Атомы в кристалле связаны друг с другом, поэтому для удаления атома из узла кристаллической решетки необходимо затратить некоторую энергию E_v . Для перемещения этого же атома на поверхность кристалла необходима уже энергия E_s . Таким образом, при использовании модели жесткой решетки энергия образования вакансии равна разности $E_v - E_s$, величина которой в большинстве случаев не превышает 10 эВ на вакансию. Поскольку реальная решетка не является идеально жесткой, то некоторая часть данной разности энергий компенсируется релаксацией решетки путем сдвига соседних с пустым узлом атомов на расстояние, равное доли межатомного расстояния. Образование вакансии в кристалле должно сопровождаться выполнением условия электронейтральности. В бинарных твердых телах с ионной связью, например во фтористом рубидии (RbF), электростатическая нейтральность в кристаллах сохраняется, если сохраняется стехиометрия. Число вакантных мест, соответствующих положительным ионам рубидия, в этом случае оказывается тем же, что и для отрицательных ионов фтора. В более сложном соединении диоксида меди (CuO_2) для пополнения стехиометрического баланса необходимо, чтобы число вакансий для ионов меди в два раза превышало число вакансий для атомов кислорода. В общем случае, если в структуре кристаллической решетки возникает пара вакансий противоположного знака, то говорят

о разупорядочении Шоттки и образовании *точечного дефекта Шоттки*. Обычно в чистом виде данный дефект реализуется только в бинарных соединениях, причем чаще всего в соотношении 1:1 между компонентами. Процесс образования дефекта Шоттки можно представить как переход одного из приповерхностных атомов на поверхность. Это приводит к перемещению за счет теплового движения атомов из объема кристаллической решетки в образовавшуюся вакансию, т.е. происходит перемещение приповерхностной вакансии в объем кристалла. Следует отметить, что два компонента дефекта Шоттки: вакансия и атом, обязательно должны находиться в непосредственной близости друг от друга.

Междоузельный атом как точечный дефект возникает за счет размещения атомов в некотором промежуточном положении кристаллической решетки. При этом в области междоузельного атома возникают механизмы сжатия и растяжения кристаллической решетки, изменяя ее свойства. Возникновение дефектов данного типа практически невозможно в плотноупакованных структурах, например, таких как медь или цинк. Наоборот, в менее плотных решетках типа алмаза существует много позиций, в которых мог бы разместиться внедрившийся атом (собственный или примесный), вызвав тем самым лишь несущественное смещение ближайших соседей. Одновременное внедрение положительных и отрицательных ионов в стехиометрических пропорциях практически невозможно, поэтому данному процессу не дано определение. Например, в решетке хлорида натрия ионы натрия могут найти свободное место в междоузлии решетки, тогда как ионы хлора слишком велики и не способны занять это место.

«*Центры окраски*» представляют собой точечные дефекты в кристаллах галогенидов и щелочных металлов, содержащие отдельные вакансии или близко расположенные группы вакансий (рис. 1.22).

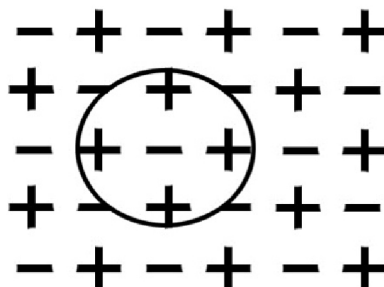


Рис.1.22. Схематическая модель F-центра в кристалле

Специфические электрические и оптические свойства таких дефектов определяются условиями электростатического равновесия. Опыт показывает, что при нагревании, радиационном или рентгеновском облучении кристаллов типа LiCl, NaCl, KCl в парах собственного щелочного металла они приобретают ярко выраженную окраску. Так, например, NaCl окрашивается в желтый цвет, а KCl в синий. Их окраска обусловлена возникновением в спектре поглощения света определенной полосы поглощения, которая отлична для различных кристаллов. Данные полосы поглощения получили название F-центров. Образование F-центров связано с избытком щелочного металла и недостатком атомов галоида, что приводит к возникновению вакансий в решетке анионов. Положительный заряд катионов, окружающих данную вакансию, оказывается в этом случае нескомпенсированным, т.е. в кристалле возникает положительно заряженный центр, захватывающий свободный избыточный электрон. Образование центра донорного типа позволяет легко его ионизировать, например, при поглощении кванта света с энергией больше или равной энергии ионизации электрона донорного центра. Появление в кристалле свободных электронов означает возникновение в кристалле фотопроводимости.

Дефекты типа Френкеля состоят из вакансии и междоузельного атома того же сорта, что и материал твердого тела, в котором они образуются, при соблюдении условия сохранения электростатической нейтральности и стехиометрии (рис.1.23). Разупорядочение типа Френкеля может произойти при воздействиях на кристалл тепловой, электромагнитной или радиационной энергий.

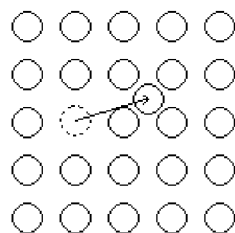


Рис.1.23. Схематическая модель дефектов типа Френкеля

Антиструктурное разупорядочение характеризуется расположением атомов в структуре молекул, при котором атомы одного сорта занимают места, предназначенные для атомов другого сорта. Точечные дефекты типа антиструктурное разупорядочение, например в кристаллах InSb, не нарушают стехиометрии, если число атомов индия, зани-

мающих позиции атомов сурьмы, равно числу атомов сурьмы, расположенных в позиции атомов индия. Антиструктурные дефекты возникают только при условии соизмеримости размеров атомов в структуре молекулы. Это приводит к причудливым образованиям комплексов с неправильным расположением атомов. Эти комплексы могут содержать от 50 до 100 атомов.

1.7.2. Линейные дефекты

Линейные или двумерные дефекты могут простирались в кристалле на миллионы межатомных расстояний в одном или двух направлениях, существенным образом изменяя свойства твердого тела. Они образуются при деформации сдвига, формирующего процесс скольжения атомных плоскостей относительно друг друга в локальной области кристаллической решетки, т.е. только на части атомной плоскости (рис.1.24, а,б). В окрестностях линии ВС, отделяющей зону сдвига, образуется характерное для данного типа дефектов нарушение периодичности расположения атомов решетки, называемой линейной или краевой дислокацией. Ее образование обусловлено возникновением в структуре кристалла одной полуплоскости (рис.1.24, б), направление которой всегда перпендикулярно направлению сдвига. Такие свойства дислокации приводят к ослаблению или даже разрыву электронных связей между атомами и образованию областей сжатия и растяжения в ее объеме.

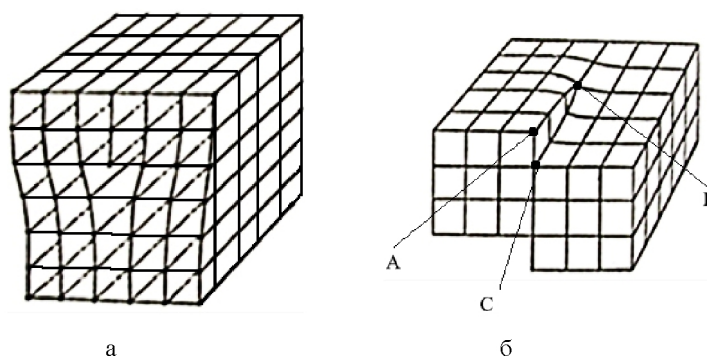


Рис. 1.24. Формирование линейной дислокации при сдвиге части кристаллической решетки: а – схема сдвига части кристалла; б – образование плоскости сдвига ABC и линейной области нарушения периодичности решетки кристалла BC

Поскольку всякое нарушение периодичности кристаллической решетки приводит к уменьшению энергии атомных связей на величину

энергии сдвига, то в данные области начинают перемещаться по диффузионным механизмам атомы примеси с малыми и большими, относительно межатомного расстояния, атомными радиусами. Это приводит к образованию скоплений примесных атомов в области дислокации, называемых облаками "Котрелла". Распределение примесных атомов по зонам сжатия и растяжения осуществляется согласно закономерности, описываемой выражением

$$\varepsilon = \frac{r_i - r_n}{r_n},$$

где r_n – ковалентный радиус примесного атома; r_i – ковалентный радиус матричного атома.

Величина ε характеризует величину и знак отклонения ковалентного радиуса. Если $\varepsilon > 0$, то атом помещается в области сжатия, если $\varepsilon < 0$, то в области растяжения. При выполнении равенства $\varepsilon = 0$ справедливо выражение $r_i = r_n$. Последний случай означает, что примесный атом не может быть захвачен дислокацией.

Энергетическое изменение электронных связей и образование облаков "Котрелла" существенным образом изменяют химические и электрические свойства полупроводниковой подложки. Так, например, атомы в области дислокации настолько слабо связаны с решеткой, что даже слабые травители способны вырвать их из кристалла и перевести в раствор. Это приводит к тому, что при травлении дислокационной структуры процесс травления осуществляется только в области дислокации и практически отсутствует вне ее. На поверхности подложки в данном случае возникают ямки травления правильной геометрической формы. Для алмазоподобных полупроводников (кремний, германий и т.д.) форма ямок травления определяется кристаллографической плоскостью и для плоскости (111) ямка травления имеет форму равностороннего треугольника (рис. 1.25, а,б).

На представленных фотографиях видны "розетки" ямок травления и малоугловые границы, в области которых ямки расположены вплотную друг к другу. Направления лучей «розеток» определяются степенью анизотропии свойств кристалла. При незначительном отклонении плоскости поверхности полупроводниковой пластины от кристаллографической плоскости форма дислокационных ямок травления искажается, принимая форму равнобедренного треугольника или даже трапеции, т.е. по форме ямок травления можно определить и кристаллографическую плоскость кристалла, и степень отклонения от нее.

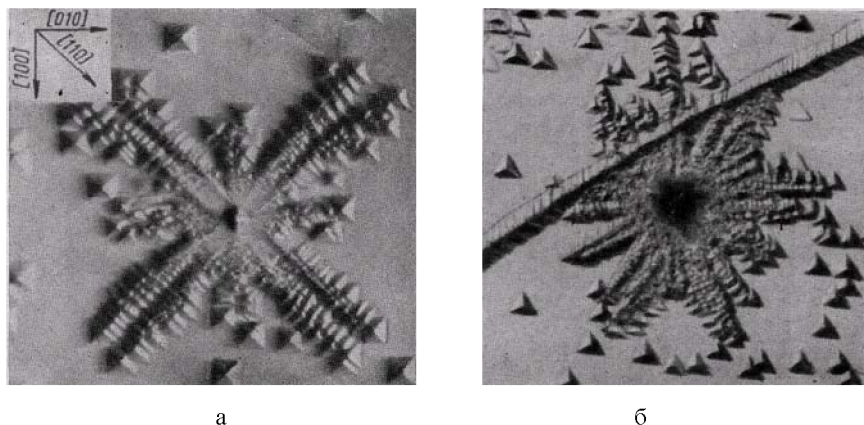


Рис. 1.25. Вид дислокаций, образованных методом травления: а – «розетка» ямок травления, образовавшаяся в результате выхода дислокаций на поверхности (100) кристалла NaCl при деформации сосредоточенной нагрузкой; б – «розетка» ямок травления на плоскости (111) кристалла LiF после отпечатка индентором и травления в 85%-ной муравьиной кислоте HCOOH

Области сжатия и растяжения приводят и к перераспределению оборванных, напряженных и ослабленных электронных связей (зарядовых состояний) таким образом, что становится электрически выгодно моделировать дислокации отрезком коаксиальной линии. В проводящую нить такого кабеля радиусом r_0 инжектируются дырки, которые становятся основными носителями заряда. Положительный заряд внутри трубки коаксиала примыкает к линии ненасыщенных связей, а свободные заряды движутся вдоль нее, т.к. свободные атомные связи в области дислокации не в состоянии осуществить их захват. Следовательно, механизм проводимости в области дислокации не зависит от подвижности носителей заряда в объеме полупроводника.

Энергию электронных связей дислокаций можно изменить воздействием электрического поля, например, расширить область пространственного заряда, располагая силовые линии поля перпендикулярно трубке. Это, в свою очередь, усиливает действие барьера для дырок, затягивая их в данную область и удерживая внутри границ дислокационной сети при больших скоростях дрейфа. Дислокации могут действовать и как ряды акцепторов, представляющие собой центры захвата для электронов с температурой ниже комнатной, и как рекомбинационные центры, в случае электронов с температурой выше комнатной. При 300K уровень энергии состояния в направлении от потолка валентной зоны равен $0,6 \pm 0,03$ эВ, населенность (степень заполнения) f

составляет около 0,05, а высота потенциального барьера для кремния 0,2 эВ (удельное сопротивление 200 Ом·см, ширина запрещенной зоны 1,2 эВ). Из этого следует два важных вывода: проводимость материала полупроводника вдоль нити ВС будет значительно выше, чем в направлении нормали к дислокационной трубке. Попадание дислокаций в центральную часть области объемного заряда р-п перехода способно значительно изменить его параметры.

1.7.3. Электрические свойства дислокаций

Геометрические размеры ямок травления соответствуют геометрическим размерам облаков «Котрелла», т.е. дислокации больших размеров будут иметь и большие размеры ямок травления. Причем если концентрация чужеродных атомов меньше или равна предельной концентрации, которую способна поглотить дислокация, то за счет образования облаков "Котрелла" произойдет очистка полупроводника в окрестностях дислокации от этих атомов и общее сопротивление исходной подложки увеличится (рис.1.26).

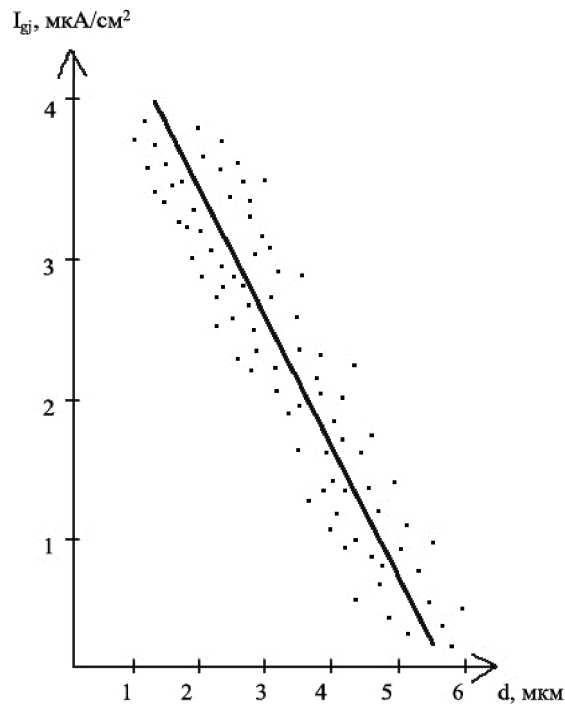


Рис.1.26. Зависимость обратного тока р-п перехода от размера дислокационных ямок травления

Примесные атомы, располагаясь в областях сжатия и растяжения дислокации, компенсируют ненасыщенные связи и приводят к значительному ухудшению ее рекомбинационных свойств. Анализ данных явлений показывает, что при формировании р-п перехода в полупроводниковой подложке следует учитывать место расположения дефекта. Например, если расположить дефект вне области объемного заряда р-п перехода, то очистка окрестностей дислокации от примесных атомов и их электрическая нейтрализация в области дефекта практически не изменят электрические характеристики р-п перехода, а если в области объемного заряда, то это приведет к уменьшению величины обратного тока. Следует отметить, что данное явление существует лишь при выполнении неравенства $N_t \leq N_{\text{кр}}$, где N_t – текущая концентрация дислокаций; $N_{\text{кр}}$ – критическая величина дислокаций, начиная с которой начинается рост обратного тока р-п перехода (рис. 1.27).

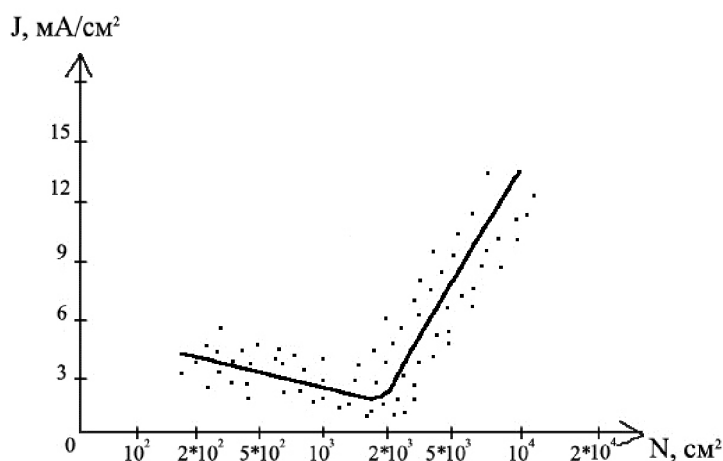


Рис. 1.27. Кривая зависимости обратного тока от плотности дислокационных ямок травления ($N_{\text{кр}} = 2 \cdot 10^4 \text{ см}^{-2}$)

При $N_t > N_{\text{кр}}$ расстояния между облаками "Котрелла" настолько уменьшаются, что возникает эффект туннелирования свободных носителей заряда между ними и начинается их взаимодействие друг с другом. В предельном случае облака "Котрелла" смыкаются, полностью изменяя проводимость полупроводника в данной области кристалла. Именно этим объясняется резкий рост обратного тока р-п перехода при увеличении концентрации дислокаций выше $N_{\text{кр}}$.

Для большинства практических расчетов проводимость определяется величиной времени жизни свободных носителей заряда, численное значение которой находят из эмпирических формул следующего вида:

$$\tau = 15 / N_t \text{ для кремния } p \text{ - и } n \text{ - типов проводимости;} \quad (1.21)$$

$$\tau_n = 2,4 / N_t \text{ для германия } n \text{ - типа проводимости;} \quad (1.22)$$

$$\tau_p = 1,5 / N_t \text{ для германия } p \text{ - типа проводимостей.} \quad (1.23)$$

Тогда, используя формулу

$$\sigma = \frac{en \cdot e \tau}{2m^*},$$

где m^* – эффективная масса электрона; τ – время жизни свободных носителей заряда, можно, например, для кремния написать выражение, определяющее зависимость проводимости кристалла от концентрации дислокаций:

$$\sigma = \frac{15 \cdot e^2 \cdot n}{2 \cdot m^* N_t}. \quad (1.24)$$

Таким образом, сравнивая значение общей проводимости подложки и значение проводимости, полученное с помощью (1.24), можно определить степень влияния дислокаций на электрические характеристики элементов, которые необходимо сформировать в данной подложке.

1.7.4. Плотность дефектов

Поглощение кристаллом некоторой энергии E приводит к увеличению амплитуды колебаний узловых атомов решетки и выбросу некоторых из них в междоузлие. В результате в кристаллической решетке возникают два дефекта: пустота атомного размера, называемая вакансией, и атом в междоузлии. Колеблющиеся атомы стремятся заполнить образовавшуюся пустоту, внедряя в нее соседний атом. В области соседнего атома возникает вакансия, т.е. вакансия переместилась на одно атомное расстояние. Кроме этого, в области дефектов в объеме кристалла и на его поверхности связь узловых атомов с решеткой ослаблена на величину внешнего воздействия. Поэтому избыток энергии, поглощенной кристаллической решеткой, легко перебрасывает их в междоузлие. Постоянная генерация и рекомбинация вакансий при установлении теплового равновесия создает условия энергетической нецелесообразности возникновения конечной концентрации вакансий в

кристалле. Однако при уменьшении энергии E или мгновенной фиксации концентрации вакансий можно создать условия существования их конечной концентрации. Тогда энтропия системы увеличивается и свободная энергия в структуре решетки может стать даже меньше, чем у идеального кристалла. Это утверждение справедливо, т.к. свободная энергия равна разности полной энергии кристалла и произведения энтропии на температуру. Пусть кристалл состоит из N атомов и n вакансий, случайно распределенных по узлам решетки, тогда приращение энтропии можно описать равенством

$$\Delta S = k_0 \ln \left[\frac{N!}{(N-n)!n!} \right]. \quad (1.25)$$

Используя приближенную формулу Стирлинга для факториала, получим

$$\Delta S = k_0 [N \ln(N) - (N-n) \ln(N-n) - n \ln(n)]. \quad (1.26)$$

Возникновение вакансии изменяет свободную энергию решетки кристалла на величину

$$\Delta F = nE - T\Delta S = nE - k_0 T [N \ln(N) - (N-n) \ln(N-n) - n \ln(n)]. \quad (1.27)$$

С точки зрения термодинамики, значение n становится реальным при условии выполнения равенства

$$\frac{\partial \Delta F}{\partial n} = 0$$

Согласно (1.27) данное условие справедливо только при использовании выражения

$$\frac{n}{N-n} = \exp \left(-\frac{E}{k_0 T} \right) \quad (1.28)$$

Таким образом, для любых конечных значений плотности собственных дефектов их концентрация является экспоненциальной функцией обратной температуре.

Аналогичные выражения можно получить и для равновесных концентраций других дефектов. В общем случае минимизация функционала свободной энергии $\Delta F = \Delta U - T\Delta S$ должна проводиться для сочетания дефектов различных типов с разными энергиями активации.

1.8. Стехиометрия

Термин стехиометрия определяет точное соответствие числа атомов в молекуле ее химической формуле. Поэтому, структура двойных соединений содержит в равном количестве два типа атомов. Нарушение стехиометрии приводит к нарушению равновесной структуры. Сохранение неравновесного состояния кристалла осуществляется путем генерации в его решетке вакансий, междоузельных атомов, либо тех и других одновременно. В твердых растворах, например окиси никеля (NiO), сернистого свинца (PbS), отклонение от стехиометрии можно легко создать путем их выдержки при высокой температуре, в вакууме, при высоком давлении паров наиболее летучего компонента, т.к., согласно закону действующих масс, изменение плотности дефектов пропорционально некоторой степенной функции парциального давления летучего компонента. Если кристалл, ставший после такой процедуры не стехиометрическим, быстро охладить, то в нем можно зафиксировать высокую плотность дефектов. Причем ее величина может значительно превышать равновесную плотность, соответствующую минимуму свободной энергии решетки при пониженной температуре. Колебания узловых атомов решетки при такой температуре настолько малы, что обратная диффузия избыточных дефектов за конечный промежуток времени практически не возникает. Такие избыточные дефекты могут скапливаться на границах зерен или в области дислокаций.

2. ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Теплоемкость и теплопроводность являются фундаментальными характеристиками, для описания которых необходимо использовать теорию фононов и статистику Ферми-Дирака. Это связано с тем, что для описания данных свойств необходимо использовать только термически возбужденные электроны с энергией порядка kT и располагающиеся в малом интервале вблизи уровня Ферми. Все электронные состояния вне этого интервала исключаются из рассмотрения в перечисленных явлениях принципом запрета Паули.

2.1. Статистика Ферми-Дирака

Пусть при некоторой установившейся фиксированной температуре ($T = \text{const}$) полупроводник находится в состоянии термодинамического равновесия, условием существования которого является равенство скоростей генерации $V_{\text{ген}}$ и рекомбинации $V_{\text{рек}}$ свободных носителей заряда.

Концентрации электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне обычно значительно меньше числа энергетических состояний, содержащихся в этих зонах. Поэтому средняя плотность заполнения энергетических состояний электронами и дырками f соответствует неравенству

$$f \ll 1. \quad (2.1)$$

Если выполняется условие $f \ll 1$, то полупроводник называется *невырожденным*, а если $f \gg 1$, то – *вырожденным*.

В собственном полупроводнике при температуре $T = 0 \text{ K}$ все энергетические уровни валентной зоны заполнены электронами, а уровни зоны проводимости – свободны. С повышением температуры некоторое количество электронов покидает валентную зону и переходит в зону проводимости. Распределение электронов и дырок по энергиям в соответствующих зонах полупроводника описывается *статистикой Ферми-Дирака*, согласно которой вероятность того, что состояние с энергией E при температуре T будет занято электроном (дыркой), определяется функцией распределения Ферми-Дирака:

$$f_n(E, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}, \quad (2.2)$$

где E – энергия, отсчитанная от произвольно выбранного уровня (обычно от уровня E_c); E_F – энергия уровня Ферми, отсчитанная относительно того же уровня; $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/град – постоянная Больцмана.

Вероятность выражается в долях единицы или в процентах. Рассмотрим некоторый энергетический уровень в валентной зоне. Если он занят электроном, то $f_n = 1$ и вероятность превращается в достоверность. Если же он не занят, то вероятность $f_n = 0$. Сумма вероятностей обоих событий «занят», «не занят» равна единице. Но вероятность того, что энергетический уровень в валентной зоне не занят электроном, есть вероятность нахождения на этом уровне дырки f_p . Таким образом, $f_p = 1$, если $f_n = 0$. Из этого следует, что сумма этих вероятностей $f_n + f_p = 1$. Подставляя в полученное равенство выражение (2.2) и решая его относительно f_p , получим соотношение

$$f_p(E, T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)}, \quad (2.3)$$

определяющее вероятность того, что рассматриваемый энергетический уровень E при температуре T занят дыркой. С формальной точки зрения *энергетический уровень Ферми* E_F , входящий в выражения (2.2) и (2.3), – это уровень энергии, вероятность заполнения которого электроном при любых значениях температуры равна 0,5 или 50 %.

Анализ выражений (2.2) и (2.3) показывает, что при $T = 0$ К и $E > E_F$ справедливы и выражения $f_n = 0$, $f_p = 1$. В случае же выполнения неравенства $E < E_F$ функции Ферми-Дирака описываются равенствами $f_n = 1$, а $f_p = 0$. При температурах $T \neq 0$ К из этих выражений также следует $f_n \neq 0$ и $f_p \neq 0$. Таким образом, функция Ферми-Дирака имеет вид, представленный на рис. 2.1.

Если разности $(E - E_F)$ в (2.2) и $(E_F - E)$ в (2.3) значительно превышают среднюю тепловую энергию системы, т.е. $E \gg E_F$, то в этих выражениях можно пренебречь единицей по сравнению с экспонентами и записать (2.2) и (2.3) в следующем виде:

$$f_n(E, T) = \exp\left(-\frac{E - E_F}{kT}\right); \quad (2.4)$$

$$f_p(E, T) = \exp\left(-\frac{E_F - E}{kT}\right). \quad (2.5)$$

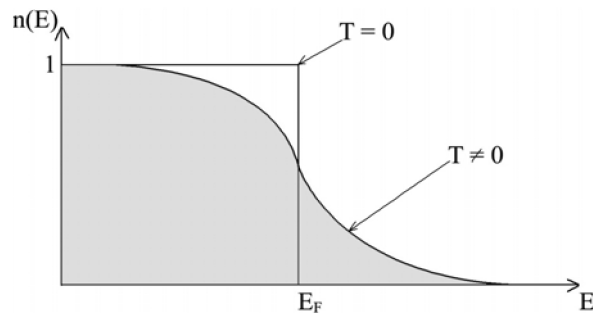


Рис. 2.1. Характер распределения электронов по энергиям, описываемый функцией Ферми-Дирака

Выражения (2.4), (2.5) описывают статистику Максвелла-Больцмана. Физической основой этой статистики является возможность использования функций f_n и f_p только для расчета параметров невырожденных полупроводников.

2.2. Электронная теплоемкость

Идеальный газ представляет собой систему частиц, например электронов, которые не взаимодействуют друг с другом или таковых взаимодействий настолько мало, что ими можно пренебречь. Электронная система атома металла подобна идеальному газу, поэтому среднюю величину энергии кинетического движения электрона в твердом теле при любой температуре можно описать статистикой Максвелла-Больцмана:

$$\frac{p^2}{2m_n} = \frac{3kT}{2}. \quad (2.6)$$

Поскольку (2.6) не противоречит теории о равномерном распределении энергии частиц в подобных системах, то его анализ показывает, что каждый подвижный электрон дает вклад в теплоемкость твердого тела, равный $3k/2$. Однако это условие выполняется только в диапазоне высоких температур, вне которого теплоемкость металла не поднимается выше предела Дюлонга и Пти, равного 5,96 кал/град. Это объясняется в основном механизмом взаимодействия движущегося электрона с фононами кристаллической решетки, позволяющем использовать классическую статистику Ферми-Дирака. Ее применение обусловлено малым значением длины волны де Бройля λ по сравнению с расстоянием между частицами $\bar{R}$ и необходимостью выполнения равенства

$$\bar{p} = (3mkT)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.7)$$

где $\bar{p}$ – средний импульс материальной частицы. Следовательно, можно записать выражение вида

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{\bar{p}} \ll \bar{R}. \quad (2.8)$$

Если принять валентность как число электронов, отдаваемое атомом при его взаимодействии с другими атомами, то используя (2.7) и (2.8), можно вывести неравенство

$$\frac{2\pi\hbar}{\sqrt{3mkT}} \ll \frac{V}{(ZN)^{\frac{1}{3}}}, \quad (2.9)$$

где N – число атомов; Z – валентность атома; V – объем кристалла; $\hbar$ – модифицированная постоянная Планка, равная $\hbar = h/2\pi$, k – постоянная Больцмана. Для типичного металла с расстоянием между атомами, равным $1\text{\AA}$ и длиной волны де Бройля, равной $\lambda = 50\text{\AA}$ при $T=300\text{K}$, неравенство (2.9) меняется на обратное. В этом случае необходимо использовать квантовую теорию, реализуемую статистикой Ферми-Дирака даже при комнатной температуре. В этом случае внутренняя энергия газа валентных электронов металлов при произвольной температуре T и выполнении условия неподвижности ионной решетки может быть описана выражением

$$U = 2 \sum_k f_k E_k = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int E_k f_k d\vec{k}, \quad (2.10)$$

где U – внутренняя энергия электрона; E_k – энергия электрона в состоянии с волновым вектором $\vec{k}_0$; f_k – вероятность заполнения состояния с импульсом $\vec{k}_0$. Множитель 2 в (2.10) учитывает спиновое вырождение электронов.

Для электронов со спином $1/2$ запишем (2.4) через химический потенциал μ :

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp[\beta(E - \mu)] + 1}, \quad (2.11)$$

где $\beta = 1/kT$ – квант тепловой энергии. Это позволяет выразить μ через плотность частиц соотношением

$$N = 2 \sum f(E, T) = \frac{2V}{8\pi^3} \int f(E, T) dE, \quad (2.12)$$

где величина отношения N/V представляет собой плотность электронов в электронном «газе» металла.

Электронную теплоемкость $C_{эл}$ при постоянном объеме можно выразить через внутреннюю энергию U :

$$C_{эл} = \left(\frac{dU}{dt} \right)_V. \quad (2.13)$$

Отсюда следует, что для расчета теплоемкости необходимо знать энергетический спектр электронов в рассматриваемом объеме. Для его нахождения воспользуемся равенством

$$E_k = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m}.$$

Определим число электронных состояний с энергиями, заключенными в интервале $E_k \dots (E_k + dE_k)$, обозначив эту величину в единице объема произведением $R(E_k)dE_k$, где $R(E_k)$ – плотность энергетических состояний. Тогда, с учетом спинового вырождения и полного числа электронных состояний, равного N , функция $R(E_k)$ должна удовлетворять равенству

$$\int f_k R(E_k) dE_k = \frac{N}{V}. \quad (2.14)$$

Внутреннюю энергию в этом случае необходимо представлять выражением:

$$\frac{U}{V} = \int f_k E_k R(E_k) dE_k. \quad (2.15)$$

Плотность электронных состояний в идеальном газе можно получить в явном виде на основании тождественности выражений (2.12), (2.14):

$$R(E_k) dE_k = \frac{2}{8\pi^3} 4\pi k_0^2 dk_0.$$

Отсюда следует:

$$R(E_k) dE_k = \left[\frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} \right] E_k^{\frac{1}{2}} = A E_k^{\frac{1}{2}}. \quad (2.16)$$

Таким образом, для плотности электронного газа можно записать выражение вида

$$\frac{U}{V} = A\beta^{\frac{5}{2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{\frac{3}{2}} dx}{\exp(x - \beta\mu) + 1}, \quad (2.17)$$

где интеграл в (2.17) является табличным. В общем случае, когда $R(E_k)$ имеет произвольный вид, значения для N и U могут быть получены из распределения Ферми-Дирака, описываемого зависимостью функции f_k от энергии:

$$f_k(E) = \frac{1}{1 + \exp[\beta(E - \mu)]}. \quad (2.18)$$

Анализ (2.18) показывает, что при низких температурах, для которых выполняется условие $\beta\mu \gg 1$, состояния с энергиями меньше чем химический потенциал, оказываются полностью заняты. Это следует из того, что в (2.18) $E < \mu$ знаменатель мал, так как выполняется неравенство:

$$\exp[\beta(E - \mu)] \ll 1.$$

Для состояний с $E > \mu$ экспонента становится больше единицы, следовательно, можно записать выражение $\exp[\beta(E - \mu)] \gg 1$, т.е. вероятность найти электрон с энергией больше μ мала (см. рис. 2.1). Следует отметить, что при выполнении неравенства $E > \mu$ функция Ферми-Дирака стремится как и в предыдущем случае к распределению Максвелла-Больцмана, записанного для идеального газа с химическим потенциалом μ на одну частицу

$$n(E) \approx \exp[-\beta(E - \mu)].$$

При $T = 0K$ функция $n(E)$ представляет собой ступеньку, в области которой при $E \leq \mu$ выполняется равенство $f(E) = 1$ и, наоборот, в случае $E \geq \mu$ эта функция становится равной нулю ($f(E) = 0$). В диапазоне температур $T \neq 0K$ выполняется условие $\beta\mu \gg 1$, из которого следует сильное вырождение электронного газа. Функции распределения Ферми-Дирака для собственного полупроводника для разных температур представлены на рис. 2.2. Заштрихованные площади пропорциональны концентрации носителей заряда в зонах.

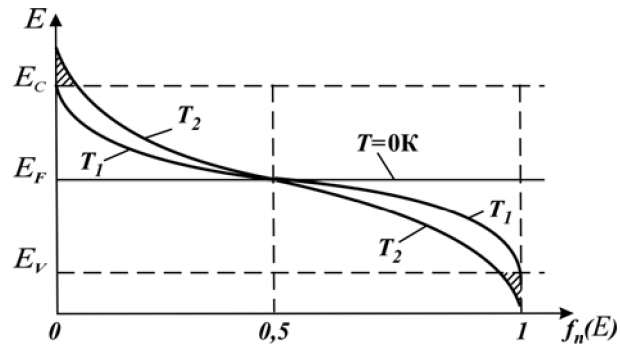


Рис. 2.2. Функции распределения Ферми-Дирака $f_n(E)$ и $f_p(E)$ при различных температурах ($T_2 > T_1$)

Эти свойства описываются функцией Ферми-Дирака и позволяют определить интервал распределения части электронов, необходимых для изучения тепловых свойств твердого тела при любой температуре:

$$\delta(E) = f_k(E) - f_0(E) . \quad (2.19)$$

В (2.19) функция $f_0(E)$ представляет собой функцию Ферми-Дирака при $T = 0K$. Из анализа зависимости dn/dE видно, что она представляет собой дельта-функцию, симметричную относительно равенства $E = \mu$ и имеющую ширину kT , поэтому в правой части выражения (2.15) математически удобнее использовать dn/dE вместо n (рис.2.3).

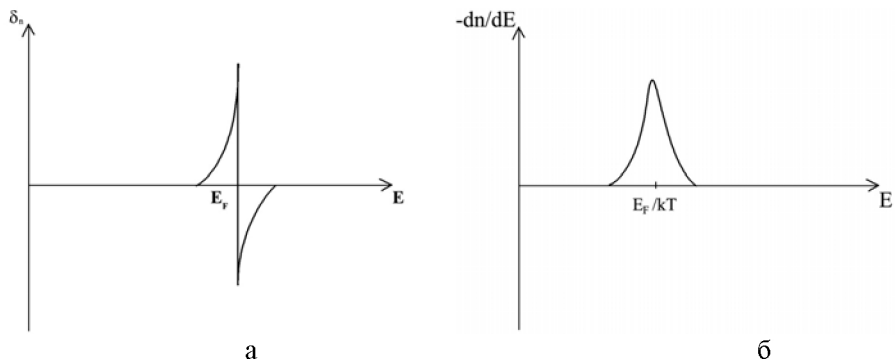


Рис. 2.3. Вид электронного распределения, связанного с термическим возбуждением, описываемым: а – δ -функцией; б – производной от распределения Ферми-Дирака (2.18)

Проинтегрируем (2.14) по частям, получим

$$\frac{N}{V} = \left[f(E) \int_0^E R(E) dE \right] \Big|_0^\infty - \int \frac{dU}{dE} \left[\int_0^E R(E) dE \right].$$

Первый член в правой части равенства исчезает на обоих пределах интегрирования. Тогда если ввести определение вида

$$\bar{R}(E) = \int_0^E R(E) dE, \quad (2.20)$$

можно получить простое выражение

$$\frac{N}{V} = - \int_0^\infty \frac{dU}{dE} \bar{R}(E) dE. \quad (2.21)$$

Аналогично записываются и соотношения:

$$\frac{U}{V} = - \int_0^\infty \frac{dU}{dE} \bar{U} dE, \quad \bar{U}(E) = \int_0^E E R(E) dE. \quad (2.22)$$

Поскольку функция $\frac{dn}{dE} = f(E)$ близка к дельта-функции с центром $E = \mu$, то оставшееся интегрирование можно выполнить, разложив $R(E)$ следующим образом:

$$\bar{R}(E) = \bar{R}(\mu) + (E - \mu) \bar{\beta}(\mu) + \frac{1}{2} (E - \mu)^2 R(\mu) \quad (2.23)$$

Выполнив такое же разложение для $U(E)$, получим

$$\frac{N}{V} = \sum_{n=0} C_n \bar{R}^{(n)}(\mu), \quad \frac{U}{\mu} = \sum_{n=0} C_n \bar{U}^{(n)}(\mu) \quad (2.24)$$

Функция C_r в правой части равенства (2.23) имеет вид

$$\begin{aligned} C_r &= \frac{1}{r!} \int_0^\infty (E - \mu)^r \left(-\frac{\partial n}{\partial E} \right) dE = \frac{1}{r! \beta^2} \int_0^\infty (\beta E - \beta \mu)^r \frac{\exp[\beta(E - \mu)]}{\{\exp[\beta(E - \mu)] + 1\}^2} d(\beta E - \mu \beta) = \\ &= \frac{1}{r! \beta^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{Z^2 dZ}{(e^Z + 1)(1 + e^{-Z})} = \begin{cases} (K_B T)^2 J_r & \text{— для целых четных значений } r \\ 0 & \text{— для целых нечетных значений } r \end{cases} \end{aligned}$$

Функция в решении интеграла J_r может быть легко получена численным расчетом или выражена через суммируемые ряды. Например, в последнем случае она может быть представлена равенствами вида:

$$J_0 = 1, \quad J_r = \frac{\pi^2}{6}. \quad (2.25)$$

Ограничившись вторым порядком разложения по температуре T , окончательно найдем отношения N/V и U/V :

$$\frac{N}{V} = \int_0^\mu R(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (K_B T)^2 \left(\frac{dR(E)}{dE} \right)_{E=\mu} + \dots \quad (2.26)$$

$$\frac{U}{V} = \int_0^\mu ER(E) dE + \frac{\pi^2}{6} (K_B T)^2 \left(\frac{dR(E)}{dE} \right)_{E=\mu} + \dots \quad (2.27)$$

Таким образом, дифференцируя правую часть (2.27) по температуре при условии, что объем постоянен и μ является функцией от T , получим выражение для электронной удельной теплоемкости в следующем виде:

$$\begin{aligned} C_{эл} &= \mu R(\mu) \frac{d\mu}{dT} + \frac{\pi^2}{3} K_B^2 T \left[R(E) + \mu \frac{dR(E)}{dE} \right] + 0(T^2) = \\ &= \frac{\pi^2}{3} K_B^2 T R(E_F) + \mu R(\mu) \left[\frac{d\mu}{dT} + \frac{\pi^2}{3} \frac{K_B^2 T}{R(E)} \frac{dR(E)}{dE} \right]_{E=\mu}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

где $R(E_F)$ – плотность состояний при выполнении тождества $\mu(T=0) \equiv E_F$. Анализ (2.28) показывает, что $C_{эл}$ имеет линейную зависимость от температуры. В этом случае полную теплоемкость металла, обусловленную электронами и фононами, можно записать в следующем виде:

$$C_V = \gamma T + \alpha T^3. \quad (2.29)$$

Электронную составляющую теплоемкости можно отделить от решеточной, построив экспериментальную зависимость $\frac{C_V}{T} = f(T^2)$ (рис. 2.4.):

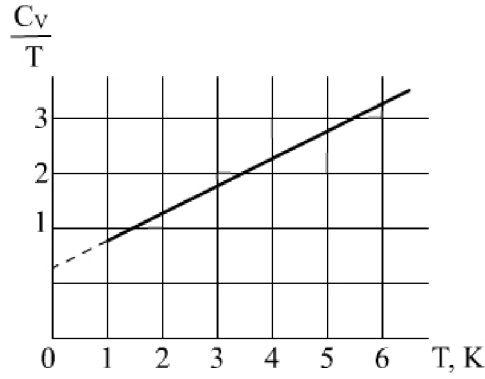


Рис. 2.4. Характер изменения функции $\frac{C_V}{T} = f(T^2)$ для олова при нормальных условиях (наклон прямой равен $0,265 \text{ мДж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-4}$)

Пересечение полученной линейной зависимости с осью C_V/T дает константу γ , а угол наклона этой линии – α . Постоянную γ определяют экспериментально. Численное значение γ используют для определения плотности состояний $R(E_F)$. Необходимо отметить, что для свободных электронов выражение (2.16) приводится при $E=E_F$ к простой формуле:

$$R(E_F) = \frac{3N}{2E_F}.$$

Тогда равенство (2.28) для свободных электронов можно представить выражением

$$C_{эл} = C_0 \left(\frac{\pi^2 kT}{3E_F} \right) \equiv \frac{\pi^2}{3} C_0 \left[\frac{T}{T_F} \right] \equiv \gamma T, \quad (2.30)$$

где $C_0 = \frac{3N_k}{2}$ – представляет собой классическую величину удельной теплоемкости; $T_F = \frac{E_F}{k}$ – температура фермиевского вырождения. Из этого следует, что классическое значение теплоемкости существенно уменьшается отношением $\frac{T}{T_F}$, величина которого для натрия при

комнатной температуре составляет порядка 0,01. Численное значение этого отношения приближенно равно числу электронов, которые могут быть термически возбуждены при некоторой температуре. Оставшиеся свободные электроны заморожены, подчиняясь принципу запрета Паули. Поэтому величина γ_0 в (2.30) всегда меньше наблюдаемого значения γ . Это отклонение связано с изменением массы свободного электрона в кристалле, происходящем за счет его взаимодействия с решеткой и другими движущимися электронами. Принято считать, что электрон обладает эффективной массой, определяемой отношением

$$\frac{\gamma_{\text{наблюдаемое в эксперименте}}}{\gamma_0} = \frac{m^*}{m}.$$

Это отношение можно получить, используя в (2.14) энергетический спектр электронов в виде следующего равенства:

$$E = \frac{\hbar k_0^2}{2m_n^*},$$

где m_n^* – эффективная масса электрона.

Таким образом, численное значение γ можно получить как экспериментально, так и расчетным путем, используя равенство (2.14).

2.3. Температурная зависимость удельного сопротивления

Рассмотрим идеальное сопротивление металлов, т.е. связанное только взаимодействием с фононами. Это дает право утверждать, что при наличии решеточных колебаний величина $S(q)$ является обычным структурным фактором, пропорциональным амплитуде смещения атомов для волновых векторов q , не равных обратной величине вектора решетки. Отсюда следует, что удельное сопротивление пропорционально среднему квадратичному смещению атомов $\langle U^2 \rangle$.

2.3.1. Модель Эйнштейна

Рассмотрим случай, когда все атомы в решетке кристалла колеблются с одинаковой частотой, равной

$$\omega = \frac{k\Theta_E}{\hbar},$$

где Θ_E – температура Эйнштейна. Это позволяет записать уравнение движения для каждого атома в следующем виде:

$$M \frac{d^2 U}{dt^2} + bU = 0 , \quad (2.31)$$

где bU – возрастающая сила, действующая на смещенный атом.

Из (2.31) нетрудно получить равенство

$$\frac{b}{M} = \omega^2 .$$

Таким образом, если величиной $\langle U^2 \rangle$ обозначить среднеквадратичное отклонение в данном направлении, то при высоких температурах ($T > \Theta_E$) она равна среднему потенциалу энергии:

$$\frac{1}{2} b \langle U^2 \rangle = \frac{1}{2} kT . \quad (2.32)$$

Тогда при $T < \Theta_E$ ее можно представить выражением

$$\frac{1}{2} b \langle U^2 \rangle = \frac{\frac{1}{2} \bar{h} \omega}{\exp\left(\frac{\bar{h} \omega}{kT}\right)} . \quad (2.33)$$

Следовательно, при высоких температурах ($T > \Theta_E$) выполняется равенство

$$\langle U^2 \rangle = \frac{kT}{b} = \frac{\bar{h} T}{M_k \Theta_E^2} .$$

Модель Эйнштейна позволяет определить зависимость удельного сопротивления от температуры, описываемую выражением

$$\rho \approx \frac{T}{M \Theta_E^2} . \quad (2.34)$$

Расчетные значения в этом случае хорошо согласуются с экспериментом.

При низких температурах ($T < \Theta_E$) соответствующая экспериментально полученная температурная зависимость $\rho = f(T)$ не совпадает с результатами, полученными из модели Эйнштейна, зато хорошо описывается в рамках модели Дебая.

2.3.2. Модель Дебая

При исследовании температурной зависимости удельного сопротивления ρ при $T < \Theta_E$ необходимо использовать общее правило, характеризующее эту зависимость в твердых телах и жидкостях при соответствующих изменениях структурного фактора $\langle |S(q)|^2 \rangle$:

$$\rho = \frac{3\pi}{\hbar e^2 v^2 F} \int_0^{2k_F} |v(q)|^2 \langle |S(q)|^2 \rangle \left(\frac{1}{2k_F} \right)^4 q^3 dq. \quad (2.35)$$

Анализ (2.35) показывает, что согласно модели Дебая, величина ρ будет пропорциональна модулю произведения $|qU_q|^2$. Тогда средняя кинетическая энергия частицы описывается равенством

$$\bar{E} = \sum_q M \omega_q^2 |U_q|^2 \quad (2.36)$$

и справедливо выражение

$$|U_q|^2 = \frac{\bar{E}}{M \omega_q^2}. \quad (2.37)$$

Если частота описывается равенством $\omega_q = V_s q$, где V_s – скорость звука, то структурный фактор можно представить выражением

$$|S(q)|^2 \approx \frac{kT}{MV_s^2} \left[\frac{\frac{\hbar \omega_q}{kT}}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_q}{kT}\right) - 1} \right]. \quad (2.38)$$

Удельное сопротивление в этом случае можно представить равенством

$$\rho \approx \left(\frac{3}{\hbar e^2 V_F^2} \right) \frac{kT}{MV_s^2} \int_0^{2K_F} |v(g)|^2 \left[\frac{\frac{\hbar \omega_g}{kT} q^3 dq}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_g}{kT}\right) - 1} \right]. \quad (2.39)$$

Если энергию фононов представить неравенством $(\hbar \omega_g) > kT$, то подынтегральное выражение резко спадает, рассеиваясь на тепловых

колебаниях атомов решетки. Причем, если это рассеяние происходит на сферической поверхности Ферми, то величины волнового вектора q и угла рассеивания $\Theta = 2 \arcsin(q/2k_F)$ находятся в таком соотношении, что выполняется неравенство

$$\frac{q}{2k_F} > \frac{q_0 T}{2k_F \Theta_D}.$$

Положив величину $V(q) = \text{const}$ и введя переменное интегрирования

$$x = \frac{\hbar \omega_q}{kT} = \left(\frac{q}{q_0} \right) \left(\frac{\Theta_D}{T} \right),$$

выражение (2.39) можно свести к виду

$$\rho \approx \frac{3|V(q)|^2}{\hbar e^2 V_F^2} \frac{\hbar^2}{Mk^2} q_D^2 \frac{T}{\Theta_D^2} \left(\frac{T}{\Theta_D} \right)^4 \int_0^{\frac{\Theta_D}{T}} \frac{4x^2 dx}{e^x - 1}. \quad (2.40)$$

При высоких температурах, когда Θ_D/T мало, интеграл стремится к отношению $(\Theta_D/T)^4$ и тогда (2.40) возвращается к равенству (2.34). При низких же температурах интеграл стремится к постоянной величине численно равной 124,4. Выражение (2.33) в этом случае переходит в равенство

$$\rho \approx T^5. \quad (2.41)$$

Выражение (2.41) представляет собой закон Блоха-Грюнайзена.

2.3.3. Оптические явления

Оптический отклик твердого тела характеризуется комплексным коэффициентом преломления $n = n_1 - in_2$, выражаемым через диэлектрическую проницаемость $n^2 = \varepsilon - \varepsilon_1 - i\varepsilon_2$ и коэффициент оптического поглощения

$$\alpha = \frac{\omega \varepsilon_2}{n_1 c}$$

или оптическую электропроводимость

$$\sigma = \frac{\omega \varepsilon_2}{4\pi} = \frac{\alpha n_1 c}{4\pi}.$$

Поскольку оптический отклик возникает в некоторой среде, то для описания ее свойств можно использовать уравнения Максвелла вида

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \vec{I}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}, \end{aligned} \quad (2.42)$$

где $\vec{E}$ и $\vec{H}$ – напряженность электрического и магнитного полей, $\vec{I}$ – плотность тока.

В уравнениях Максвелла оптические постоянные вводятся при помощи соотношений, связывающих напряженность электрического поля и электрическую индукцию:

$$\vec{D} = \vec{E} + 4\pi\vec{P} = (1 + 4\pi\chi)\vec{E} = \epsilon\vec{E}, \quad (2.43)$$

где $\vec{P}$ – дипольный момент единицы объема; χ – поляризуемость оптического отклика.

Плотность тока $\vec{I}$, создаваемая свободными носителями заряда связана с напряженностью электрического поля равенством

$$\vec{I} = \sigma\vec{E}. \quad (2.44)$$

Коэффициент оптического поглощения легко определяется экспериментальными методами, если луч света падает по нормали к плоскости поверхности пластины толщиной x . Проходя через пластину, он ослабляется по экспоненциальному закону: $I = I_0 \exp(-\alpha x)$. Следовательно, коэффициент α представляет собой отношение интенсивностей входящего в образец I_0 и выходящего I из образца токов, т.е. представляет собой равенство

$$\alpha = \frac{I_0}{I}.$$

Таким образом, по оптическому отклику свободных электронов на внешнее осциллирующее поле можно получить информацию об энергетической зонной структуре электронов.

2.3.4. Модель Друде

Согласно этой модели оптическую электропроводимость и диэлектрическую проницаемость можно получить, исследуя особенности движения свободных электронов. На длине свободного пробега это движение можно описать равенством

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -e\vec{E}.$$

Тогда если величины x и $\mathcal{E}$ имеют экспоненциальную зависимость от времени типа $\exp(-i\omega t)$, то справедливо выражение

$$-m\omega^2 x = -e\vec{\mathcal{E}}.$$

Решая это равенство относительно x , получим

$$x = \frac{e\vec{\mathcal{E}}}{m\omega^2}. \quad (2.45)$$

Предположим $x = vt$, где t – время релаксации при соударении электронов, v – средняя скорость электрона, тогда для определения тока можно записать выражение

$$i = NeV = \frac{Nex}{\tau} = \frac{Ne^2}{m\omega^2\tau}\vec{\mathcal{E}} = \sigma\vec{\mathcal{E}}.$$

Преобразуя его относительно оптической электропроводности, получим

$$\sigma = \frac{Ne^2}{m\omega^2\tau}. \quad (2.46)$$

Это соотношение известно как формула Друде для оптической электропроводности.

Вещественную часть диэлектрической постоянной можно определить, используя равенство для дипольного момента электронов:

$$P = -Nex = -\frac{Ne^2}{m\omega^2}\vec{\mathcal{E}} = 4\pi\chi\vec{\mathcal{E}}.$$

Из этого равенства следует

$$\varepsilon_1 = 1 + 4\pi\chi = 1 - \frac{4\pi Ne^2}{m\omega^2} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (2.47)$$

где $\omega_p = \left(\frac{4\pi Ne^2}{m}\right)^{\frac{1}{2}}$ является плазменной частотой электронов.

Выражения (2.46) и (2.47) позволяют определить мнимую и вещественную части комплексной диэлектрической проницаемости:

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega \left[\omega + \left(\frac{i}{\tau} \right) \right]}. \quad (2.48)$$

Если величину ε_2 представить равенством $\varepsilon_2 = \frac{4\pi\sigma}{\omega}$, то это выражение можно получить прямо из уравнения движения электрона, учитывая его столкновения:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{m}{\tau} \frac{dx}{dt} = -e \vec{\mathcal{E}}.$$

Данное выражение позволяет, как и (2.45), определить численное значение x :

$$x = \frac{e \vec{\mathcal{E}}}{m \omega \left[\omega + \left(\frac{1}{\tau} \right) \right]}.$$

Анализируя (2.48), можно сделать вывод о том, что мнимая часть этого равенства сводится к выражению (2.46) при выполнении неравенства $\omega \tau \gg 1$, т.е. при выполнении условия малости частоты столкновений $1/\tau$ по сравнению с частотой световой волны ω .

Вещественная часть диэлектрической проницаемости, оптическая электропроводность и величина $I_m(\varepsilon^{-1}) = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2}$ показаны на рис. 2.5.

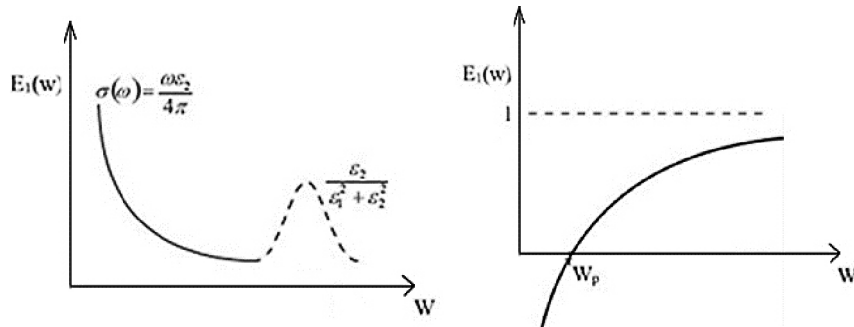


Рис. 2.5. Оптические постоянные в рамках модели Друде

Физический смысл оптических постоянных ε_1 и ε_2 (или σ) состоит в том, что электромагнитные волны, падающие на среду, могут распространяться через неё, только если действительная часть диэлектрической постоянной положительна. Если же ее величина отрицательна, то электромагнитная волна полностью отражается. Это поведение электромагнитной волны можно выразить через коэффициент отражения (R), выраженный через коэффициент преломления $n = \varepsilon^{1/2}$:

$$R = \left| \frac{1-n}{1+n} \right|^2.$$

Зависимость $R = f(\lambda/\lambda_p)$ показана на рис. 2.6.

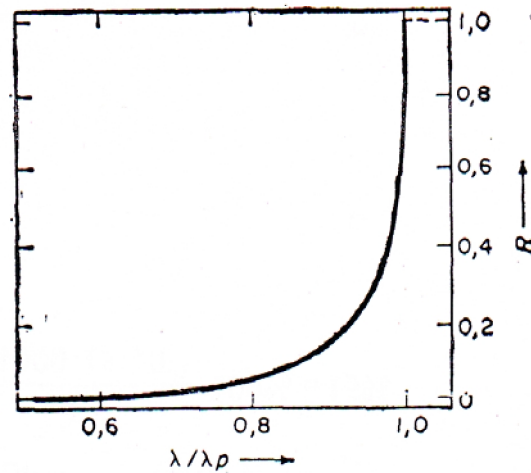


Рис. 2.6. Зависимость $R = f(\lambda/\lambda_p)$ для электронного газа

Плазменная частота λ_p является границей, отделяющей область пропускания электромагнитной волны через образец от области полного ее отражения. Однако на плазменной частоте, определяемой выражением

$$\lambda_p = \frac{2\pi c}{\omega_p},$$

образец прозрачен, о чем свидетельствует резонансный пик величины $I_m(\varepsilon^{-1})$.

В простых металлах со свободными электронами с концентрацией 10^{23} см^{-3} величины плазменной частоты ω_p и длины волны λ_p составляют 10^{16} рад/с и $0,1 \text{ мкм}$ соответственно. Поэтому металлы хорошо отражают видимый свет и прозрачны для электромагнитных волн ультрафиолетового диапазона.

3. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В состоянии термодинамического равновесия в кристалле полупроводника при заданной температуре существует определенное распределение электронов по различным квантовым состояниям. Это приводит к установлению определенной концентрации электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне. На характер распределения электронов и дырок в соответствующих зонах энергетической диаграммы могут оказать значительное влияние дефекты кристаллической решетки. Например, наличие в решетке отрицательно заряженных акцепторов приводит к связыванию в каждой единице объема некоторого количества свободных электронов. Аналогичное действие со свободными дырками осуществляют положительно заряженные доноры. Определение концентраций свободных и связанных носителей заряда в кристалле составляет основную задачу физики полупроводников.

3.1. Энергетические зонные диаграммы и носители заряда в полупроводниках

При сближении атомов энергетические уровни орбиталей атомов E_1 , E_2 и E_3 (рис.3.1, а) при $r=a$ начинают взаимодействовать друг с другом, образуя зоны энергетических уровней (рис.3.1, б).

В результате твердое тело можно представить в виде *зонной диаграммы*, в которой разрешенные для движения электронов энергетические зоны чередуются с запрещенными. Причем каждая разрешенная зона состоит, в свою очередь, из множества дискретных энергетических уровней, расстояния между которыми столь малы, что их расположение в зоне можно считать практически непрерывным.

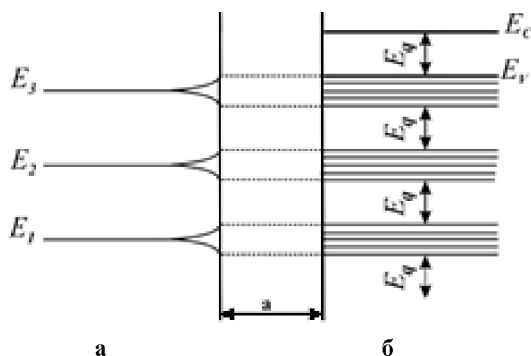


Рис. 3.1. Образование энергетических зон из дискретных энергетических уровней атомов (а) при их сближении на расстояние a (б)

Эти представления о структуре связи атомов в кристалле твердого тела полностью соответствуют физическим свойствам полупроводников и диэлектриков и могут быть описаны диаграммами (рис.3.2, а,б).

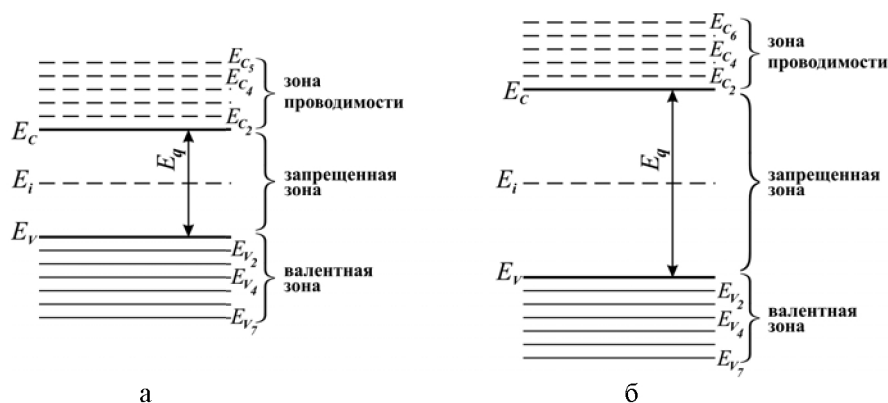


Рис. 3.2. Энергетические зонные диаграммы при температуре $T = 0 \text{ K}$:
а – полупроводника; б – диэлектрика

При температуре $T = 0 \text{ K}$ валентная зона всегда полностью заполнена электронами, поэтому в зоне проводимости электроны отсутствуют.

При $T \neq 0 \text{ K}$ атомы валентной зоны могут быть ионизованы, а свободные электроны, получившие энергию равную или больше ширины запрещенной зоны, перебрасываются в зону проводимости и становятся свободными. В случае воздействия на кристалл электрического поля свободные электроны, не прекращая теплового движения, начинают дрейфовать вдоль энергетического уровня зоны проводимости в направлении контактов внешней цепи. Следует отметить, что различие между полупроводниками и диэлектриками состоит лишь в большей ширине запрещенной зоны последних (см. рис. 3.2, а,б).

Металлы по характеру изменения проводимости настолько значительно отличаются от полупроводников и диэлектриков, что для описания этих особенностей потребовалось создание специальных диаграмм (рис. 3.3, а,б).

Отличительными особенностями энергетических диаграмм металлов является или частичное незаполнение энергетических уровней в валентной зоне (а), или перекрытие зон (б). Ширина запрещенной зоны в последнем случае близка к нулю. При подобных свойствах металла даже слабое электрическое поле способно привести электроны в движение вдоль этих уровней, образуя электрический ток в твердом теле.

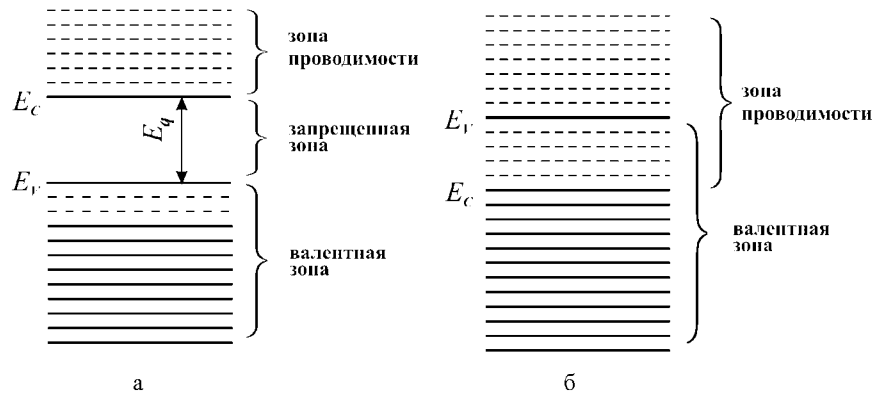


Рис. 3.3. Зонные диаграммы, характеризующие свойства металлов:
 а – пунктиром обозначены энергетические уровни, не заполненные электронами и при $T = 0\text{K}$; б – в зоне проводимости имеются энергетические уровни, заполненные электронами и при $T \neq 0\text{K}$

Большинство полупроводников являются твердыми телами с регулярной кристаллической структурой, т. е. монокристаллами. Их кристаллическая решетка состоит из множества повторяющихся и примыкающих друг к другу элементарных ячеек, имеющих определенные форму и размеры.

Атомы в кристаллической решетке алмазоподобных полупроводников (кремний, германий, арсенид галлия) связаны друг с другом за счет попарного объединения валентных электронов соседних атомов, при этом каждый из атомов остается электрически нейтральным, т.е. атомы объединены *ковалентной* связью. Повышение температуры вызывает колебательное движение атомов, располагающихся в узлах кристаллической решетки. В результате ковалентные связи между атомами в собственном полупроводнике могут разрываться, что приводит к образованию пары носителей заряда: свободного электрона и незаполненной связи атома, от которого оторвался электрон. Эта незаполненная связь по своим электрическим свойствам подобна свободному положительному заряду, который принято называть дыркой. Перемещение свободного положительного заряда осуществляется за счет того, что не заполненная электроном связь быстро заполняется одним из ионизованных валентных электронов соседнего атома, на месте которого образуется новая дырка. Бесконечное повторение этого процесса создает эффект движущегося положительного заряда, величина которого по абсолютному значению равна заряду электрона.

Процесс образования свободных носителей заряда (электронов, дырок) называется *генерацией* носителей заряда (рис. 3.4, переход 1). Если этот процесс происходит под воздействием теплоты, то его называют *термогенерацией*.

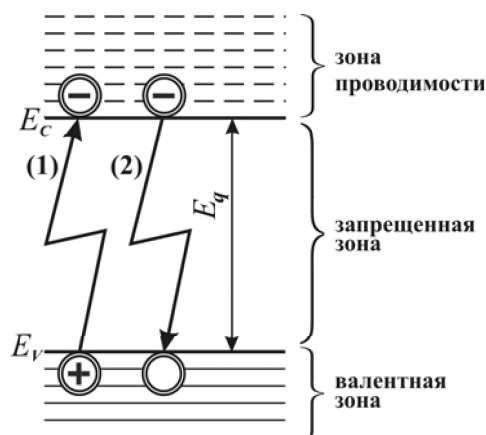


Рис. 3.4. Генерация (ионизация) (1) и рекомбинация (2) электронов в собственном полупроводнике

Электроны и дырки, образовавшиеся в результате генерации, совершают тепловое движение в полупроводниковом кристалле в течение некоторого времени, называемого *временем жизни*. Переход свободного электрона с энергетического уровня E_c на незаполненную связь уровня E_v приводит к исчезновению свободного электрона и дырки. Этот процесс называется *рекомбинацией* (рис. 3.4, переход 2).

Таким образом, при температуре $T \neq 0\text{K}$ в зоне проводимости постоянно находится некоторое количество свободных электронов, частично заполняющих ее. Перешедшие в зону проводимости электроны занимают преимущественно наиболее низкие энергетические уровни вблизи дна зоны проводимости E_c .

Свойства электрона в твердом теле и в свободном пространстве не совпадают, поэтому и масса электрона в кристалле m_n не совпадает с его массой в свободном пространстве m_o . Величину m_n называют *эффективной массой* электрона. С точки зрения физических представлений эффективная масса электрона является квантово-механическим параметром, используемым при расчетах взаимодействий свободных электронов с параметрами кристаллической решетки полупроводника, т.е. эффективная масса характеризует параметры механизма коллек-

тивного воздействия колеблющихся атомных частиц решетки на движущийся свободный электрон.

Аналогичным свойством обладает и дырка, однако в этом случае под эффективной массой понимают условный способ учета коллективного воздействия на дырку всех электронов, находящихся в валентной зоне. Эффективная масса электрона (m_n) всегда меньше эффективной массы дырки (m_p), но обе массы всегда меньше массы покоя электрона (m_0) в свободном пространстве.

3.2. Собственные полупроводники

Беспримесный, химически чистый полупроводник называется *собственным* (рис.3.5, а). При температуре $T = 0\text{K}$ в таком полупроводнике нет свободных носителей заряда и его электрическая проводимость $\sigma = 0$. Поглощение собственным полупроводником энергии, равной или больше энергии связи валентного электрона с атомом, приводит к разрушению их связи и образованию двух типов носителей заряда: свободный электрон в междоузлии и дырка в узле кристаллической решетки (рис. 3.5, б).

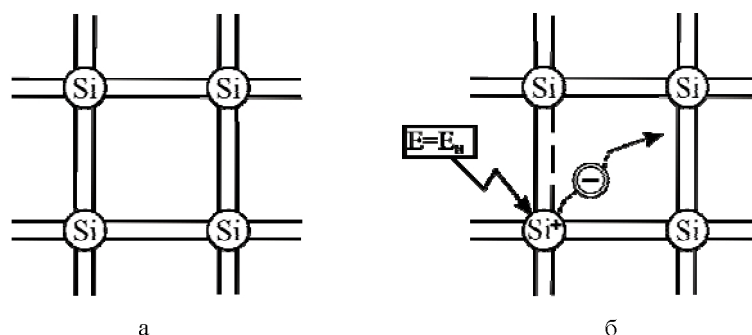


Рис. 3.5. Механизм образования в кристалле полупроводника положительного заряда – дырки: а) при $T=0\text{ K}$; б) при $T \neq 0\text{ K}$

Существует три механизма возникновения свободных электронов:

1. При отсутствии внешнего электрического поля и выполнении равенства $E=E_i$, где E_i – энергия ионизации валентных электронов, связь валентного электрона с атомом разрывается, однако у свободного электрона в этом случае отсутствует кинетическая энергия и он не покидает потенциального поля атома, которое притягивает его и в конечном итоге через некоторое время осуществляется рекомбинация.

Этот механизм генерирования свободных электронов не участвует в образовании долгоживущих электронно-дырочных пар, а следовательно, не участвует и в организации электрического тока.

2. При отсутствии внешнего электрического поля и выполнении неравенства $E > E_{\text{и}}$ свободный электрон получает некоторое количество кинетической энергии и покидает зону действия потенциального поля атома, включаясь в тепловое движение. Образование дополнительной концентрации свободных электронов и дырки приводит к увеличению проводимости полупроводника.

3. При наличии внешнего электрического поля и выполнении условия $E \geq E_{\text{и}}$ происходит разделение зарядов за счет дрейфа свободного электрона против поля, а дырки по полю. При этом оба свободных носителя заряда не прекращают теплового движения. Этот механизм приводит к формированию направленного потока электронно-дырочных пар, т.е. осуществляет формирование электрического тока в полупроводниках.

При $T=0\text{K}$ собственный полупроводник является идеальным диэлектриком, т.к. при этих условиях все свободные электроны перейдут из зоны проводимости в валентную зону и рекомбинируют с дырками. Отсутствие свободных носителей заряда делает собственный полупроводник при $T=0\text{K}$ идеальным диэлектриком.

При $T>0\text{K}$ некоторое количество матричных атомов ионизируется и в кристалле появляются свободные носители заряда. Перешедшие в зону проводимости электроны занимают уровни энергии вблизи дна зоны проводимости E_c , а дырки – вблизи потолка валентной зоны E_v .

3.3. Примесные полупроводники

Если в узлы кристаллической решетки собственного полупроводника внедрить некоторое количество чужеродных атомов, то это приведет к значительному изменению его электрических свойств, например, электропроводности. Такие полупроводники принято называть *примесными*.

Примесь оказывает существенное влияние на величину проводимости полупроводника, поэтому ее также называют *примесной* проводимостью.

Пусть в узел кристаллической решетки четырехвалентного полупроводника кремния (Si) или германия (Ge) будет внедрен атом большей валентности, например, пятивалентный мышьяк (As) (рис. 3.6, а). При его взаимодействии с соседними матричными атомами четыре из

пяти валентных электронов As вступают в ковалентную связь с четырьмя валентными электронами соседних атомов Si и образуют устойчивую электронную оболочку. Пятый электрон оказывается экранированным от потенциальных полей окружающих атомов, и его связь с валентными электронами значительно ослабляется (рис. 3.6, б).

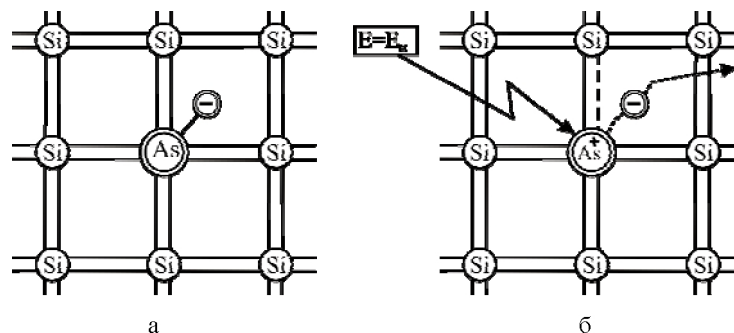


Рис. 3.6. Положение примесного атома (мышьяка) в узле кристаллической решетки Si при: а – $T=0$ К; б – $T \neq 0$ К

Поэтому уже при 77К он отрывается от атома As и переходит в свободное состояние, а атом As приобретает положительный заряд. Однако дырки при этом не образуются, т.к. энергетический уровень атома мышьяка E_d находится в запрещенной зоне (рис. 3.7).

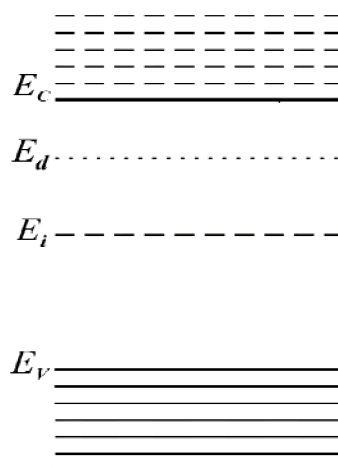


Рис. 3.7. Энергетическая диаграмма полупроводника, легированного атомами примеси донорного типа

Атомы примесей, способные отдать один из своих валентных электронов в зону проводимости, становясь при этом положительным ионом, называются *донорными*. Полупроводники, в узлы кристаллической решетки которых введены атомы донорной примеси, называются *электронными* или *n-типа* проводимости. Если количество свободных электронов в полупроводнике *n*-типа превышает концентрацию собственных носителей заряда n_i и p_i на порядок и более, то примесные электроны становятся *основными* носителями заряда полупроводника, а дырки – *неосновными*, т.к. они получены от ионизации матричных атомов. В соответствии с этим проводимость в полупроводнике *n*-типа называется *электронной*.

Если в узлы кристаллической решетки Si ввести трехвалентный бор (В), то три его валентных электрона вступят во взаимодействие с четырьмя валентными электронами соседних матричных атомов Si, образуя с ними устойчивую ковалентную связь. Для образования восьмиелектронной оболочки атомам кремния и бора не хватает одного электрона, т.е. возникает свободный энергетический уровень (рис. 3.8, а). Поскольку все связи валентных электронов задействованы, то свободный энергетический уровень атома бора также оказывается экранированным от потенциальных полей окружающих атомов и способен легко захватить из окружающего пространства свободный электрон, например, возникший в результате термогенерации матричных атомов Si (рис. 3.8, б). Атом бора становится при этом отрицательно заряженным ионом, энергетический уровень которого находится в запрещенной зоне. В идеальном случае этот механизм устраняет возможность появления в зоне проводимости свободного электрона. Матричный атом, делегировавший этот электрон атому бора, становится некомпенсированным положительным ионом, т.е. в валентной зоне возникает свободный положительный заряд – дырка (рис. 3.8, б; 3.9).

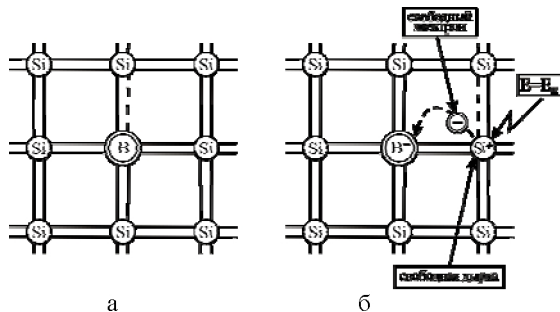


Рис. 3.8. Структура кристалла полупроводника с внедренным в его узел атомом бора

Атомы примеси, способные принимать свободные электроны, становясь при этом отрицательно заряженными ионами, условились называть *акцепторными*. Если в собственный полупроводник внедрить в узлы кристаллической решетки некоторое количество атомов примеси акцепторного типа, то такой полупроводник называют *акцепторным* или *p-типа* проводимости.

Пусть значительная часть электронов, возникших в результате ионизации собственных атомов, например Si, будет захвачена акцепторами. Тогда если количество дырок в валентной зоне на порядок и более превысит количество свободных собственных электронов n_i в зоне проводимости, то дырки в валентной зоне становятся *основными* носителями заряда. Проводимость в этом случае называется *дырочной* и практически осуществляется путем переходов дырки (положительного заряда) от одного омиического контакта к другому за счет ее взаимодействия со свободными электронами n_i , полученными, например, при действии в кристалле резонансных механизмов. В полупроводниках могут одновременно содержаться как донорные, так и акцепторные атомы примеси (рис. 3.9).

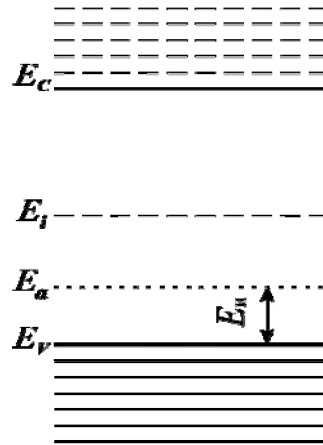


Рис. 3.9. Энергетическая диаграмма компенсированного полупроводника

Изменением концентраций этих примесей осуществляют регулировку величины проводимости в конкретном полупроводнике или при создании структур полупроводниковых приборов. Такие полупроводники называются *компенсированными*.

Если концентрация атомов примеси в полупроводнике меньше на $10^2 - 10^4$ по сравнению с числом матричных атомов (10^{23} см^{-3}), то такие полупроводники называются невырожденными. В этом случае потенциальные поля примесных атомов не взаимодействуют друг с другом, и следовательно не образуют дополнительного расщепления энергетических зон, т.е. не образуют дополнительных энергетических уровней. Если концентрация примесных атомов в полупроводнике превышает эту величину, то среднее расстояние между атомами примеси становится столь малым, что возникает эффективное взаимодействие их потенциальных полей, в результате которого появляется значительное число дополнительных энергетических уровней. При этом эти уровни превращаются в зоны, сливающиеся с зоной проводимости в электронных полупроводниках и с валентной зоной – в дырочных. Это создает для свободных электронов условия, когда они всегда могут найти в окружающем пространстве свободные энергетические уровни, соответствующие их энергии, и двигаться по ним, переходя от одного к другому, не теряя и не приобретая энергии. Такие полупроводники называют *вырожденными*. Вырождение полупроводника может также наступить в следующих случаях: при высокой температуре (значение kT велико), обычных рабочих температурах – у полупроводников с малой шириной запрещенной зоны E_g и высокой степенью легирования. *Степень или уровень легирования* определяется количеством примесных атомов в единице объема полупроводника. Величина проводимости вырожденных полупроводников близка к металлической, поэтому в рабочем интервале температур концентрация свободных носителей заряда не зависит от температуры.

3.4. Энергия ионизации атомов в полупроводниках

Отрыв электрона от атома-донора или добавление недостающего электрона к атому-акцептору требует затраты некоторого количества энергии, которую условились называть энергией *ионизации* атомов примеси. Ее величина определяется местом расположения энергетического уровня, соответствующего энергии ионизации примесных атомов, в запрещенной зоне энергетической диаграммы. С этой точки зрения различают мелкие энергетические уровни при их расположении вблизи E_c , E_v и глубокие, если вблизи E_i . Энергетические уровни примесных атомов, расположенные вблизи E_i , являются идеальными цен-

трами рекомбинации, т.к. именно через них чаще всего осуществляется переход электронов из зоны проводимости в валентную зону. Следует отметить, что энергетические уровни междоузельных примесных атомов также могут располагаться в запрещенной зоне вблизи E_i , но рекомбинационными центрами не являются, поэтому электрически пассивны.

Некоторые примеси создают в запрещенной зоне полупроводника несколько энергетических уровней и этим делят ее на несколько зон (рис. 3.10, переходы I, II). Это значительно облегчает переход электронов из валентной зоны в зону проводимости. Например, атомы золота в запрещенной зоне кремния создают энергетические уровни $E_{Au1}=0,35$ эВ и $E_{Au2}=0,54$ эВ.

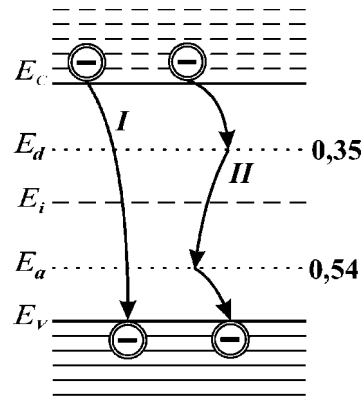


Рис. 3.10. Энергетическая диаграмма кремния: I – переход зона-зона;
II – переход по энергетическим уровням атомов Au

Особую роль в любом реальном полупроводнике играет его поверхность. Структурные нарушения кристаллической решетки и наличие адсорбированных атомов создают вблизи поверхности полупроводника дополнительные энергетические уровни, называемые *поверхностными* (рис. 3.11).

Эти уровни могут занимать различное положение на энергетической диаграмме, чаще всего они находятся в пределах запрещенной зоны в области ее середины.



Рис. 3.11. Положение энергетических уровней в области поверхности полупроводника

3.5. Определение концентрации свободных носителей заряда

Рассмотрим некоторый интервал значений энергии dE , лежащий в зоне проводимости (или валентной зоне). Обозначим число энергетических состояний, которые могут быть заняты электронами, через $N(E)$. Тогда число таких состояний в интервале dE будет равно произведению $N(E) \cdot dE$. Выразив концентрацию электронов dn , находящихся в интервале dE , через произведение $N(E) \cdot f_n(E, T) \cdot dE$ и интегрируя по всем значениям энергий в зоне проводимости (валентной зоне), получим число электронов в единице объема:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} N(E) f_n(E, T) dE. \quad (3.1)$$

Аналогичные рассуждения приводят к выражению для концентрации дырок в валентной зоне:

$$p = \int_0^{E_v} N(E) f_p(E, T) dE. \quad (3.2)$$

Для определения закона распределения плотности энергетических состояний $N(E)$ в интегралах (3.1) и (3.2) необходимо воспользоваться выражением для $N(E)$ в области энергий $E > E_c$, полученным в квантовой механике и справедливым в узкой полосе энергий вблизи дна зоны проводимости:

$$N(E) = \frac{4\pi(2m_n)^{3/2}}{h^3} (E - E_c)^{1/2}, \quad (3.3)$$

где m_n – эффективная масса электрона в зоне проводимости.

После интегрирования (3.1) получим выражение для определения концентрации свободных электронов в полупроводнике:

$$n = N_c \exp[-(E_c - E_F)/kT] \quad (3.4)$$

Проведя аналогичные аналитические преобразования для (3.2), получим выражение для определения концентрации дырок:

$$p = N_v \exp[-(E_F - E_v)/kT] \quad (3.5)$$

Коэффициенты N_c и N_v в приведенных выражениях называются *эквивалентными плотностями состояний* электронов и дырок соответственно. В предположении, что все свободные электроны располагаются только вблизи дна зоны проводимости, а дырки – потолка валентной зоны, численные значения этих коэффициентов можно рассчитать, используя равенства:

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2} \right)^{3/2} = 0,5 \cdot 10^{16} \left(\frac{m_n}{m} \right)^{3/2} T^{3/2}, \quad (3.6)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_p kT}{h^2} \right)^{3/2} = 0,5 \cdot 10^{16} \left(\frac{m_p}{m} \right)^{3/2} T^{3/2}, \quad (3.7)$$

где m_n , m_p – эффективные массы электрона и дырки в полупроводнике; m – масса свободного электрона; k – постоянная Больцмана; h – постоянная Планка.

На рис. 3.12, *а – в* графически представлены функции $N(E)$, $f_n(E)$ и их произведение, определяющее концентрацию электронов в зоне проводимости, которая пропорциональна заштрихованной площади. Основная часть свободных электронов в этом случае находится вблизи дна зоны проводимости.

В собственном полупроводнике энергетический уровень Ферми E_F располагается в середине запрещенной зоны:

$$E_F = \frac{E_g}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_v}{N_c} = \frac{E_g}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_p}{m_n}. \quad (3.8)$$

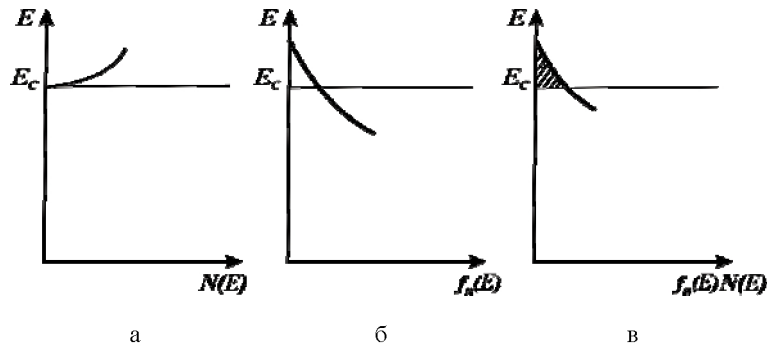


Рис. 3.12. Функции $N(E)$ (а), $f_n(E)$ (б) и их произведений $N(E)f_n(E)$ (в)

Поскольку $m_p > m_n$, то с ростом температуры уровень E_F поднимается. Однако в рабочих интервалах температур для собственных полупроводников, например, кремния, германия, этим смещением можно пренебречь. Тогда при практических расчетах можно использовать равенство $N_c = N_v$. Это позволяет определить уровень Ферми для собственных полупроводников:

$$E_F = E_g / 2 = E_i,$$

где через E_i обозначена середина запрещенной зоны.

Таким образом, граница, разделяющая занятые электронами и свободные энергетические уровни в собственном полупроводнике, располагается вблизи середины запрещенной зоны.

3.6. Закон действующих масс

Поскольку в основе закона действующих масс содержится произведение концентраций свободных носителей заряда, то найдем его в виде равенства

$$n_n n_p = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_c - E_v}{kT}\right) = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right). \quad (3.9)$$

Анализ (3.9) показывает, что величина этого произведения не зависит от типа и количества примесей, содержащихся в полупроводнике; всегда остается неизменным для заданной температуры; определяется только шириной запрещенной зоны. Поскольку ранее при выводе выражений для n_n и n_p не накладывалось никаких ограничений, то (3.9) можно использовать при выводе закона действующих масс для невырожденных полупроводников:

$$n_n p_n = n_p p_p = n_i^2 = p_i^2.$$

Это равенство позволило связать концентрации основных и неосновных носителей заряда в примесном полупроводнике с концентрацией свободных носителей заряда в собственном полупроводнике.

Представим концентрацию носителей заряда в собственном полупроводнике выражением

$$n_i = p = p = \sqrt{N_c N_v} \exp(-E_g / 2kT). \quad (3.10)$$

Тогда из (3.10) следует, что в собственном полупроводнике концентрация свободных носителей заряда определяется шириной запрещенной зоны E_g и величиной температуры. Влияние в последнем случае тем сильнее, чем больше ширина запрещенной зоны полупроводника.

3.7. Уровень Ферми в примесных полупроводниках

Важнейшим положением в физике полупроводников является утверждение о неизменяемости уровня Ферми в любой равновесной системе во всех ее частях, содержащей любое количество разнородных материалов, т.е. всегда выполняется равенство $E_F = \text{const}$.

Поскольку в (2.2), (2.3) в качестве основных членов входят эффективные массы электронов и дырок, характеризующие и примесные полупроводники, то эти равенства будут справедливы и для примесных полупроводников. Однако в примесных полупроводниках не выполняется равенство $n = p$, т.к. при переходе электронов в зону проводимости при ионизации доноров дырки в валентной зоне не возникают из-за расположения энергетических уровней примесных атомов в запрещенной зоне. Поэтому свободных электронов в полупроводнике n -типа проводимости значительно больше концентрации дырок в валентной зоне, образующихся при ионизации матричных атомов. Это вынуждает уровень Ферми смещаться от середины запрещенной зоны в направлении дна зоны проводимости. Причем чем выше концентрация примесных атомов в полупроводнике, тем больше это смещение. Этот закон справедлив и для полупроводников p -типа проводимости. В запрещенной зоне таких полупроводников уровень E_F располагается ниже середины запрещенной зоны (уровня E_i), поэтому при повышении концентрации атомов акцепторов N_A уровень Ферми будет перемещаться по оси энергий в направлении к потолку валентной зоны. Закономер-

ности перемещения уровня Ферми в запрещенной зоне представлены на рис. 2.1. Заштрихованные площади пропорциональны концентрациям носителей заряда в соответствующих зонах.

При увеличении температуры в соответствии с (3.8) происходит увеличение концентрации свободных носителей заряда в зоне проводимости и валентной зоне. Энергетический уровень Ферми в примесных полупроводниках устремляется к середине запрещенной зоны (рис. 3.13, *а, б*).

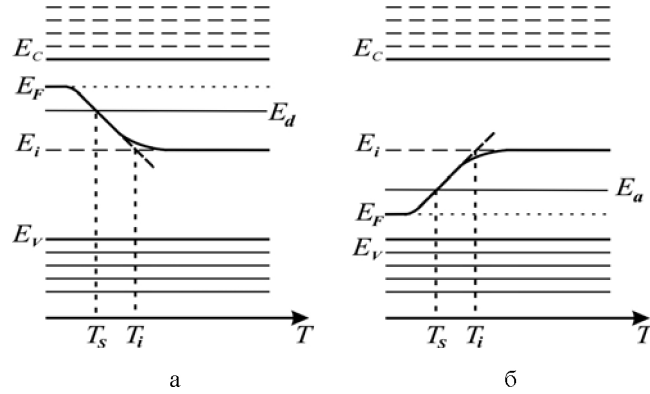


Рис. 3.13. Зависимость положения уровня Ферми E_F от температуры в примесных полупроводниках *n*-типа (*а*) и *p*-типа (*б*) проводимостей: T_s – температура истощения примесных атомов; T_i – температура ионизации матричных атомов

Согласно этим зависимостям в полупроводнике *n*-типа проводимости в области низких температур переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости можно пренебречь и считать, что все электроны в зоне проводимости появляются в результате ионизации доноров (рис. 3.13 *а*). Тогда (3.8) при низких температурах можно записать в виде

$$E_F = \frac{E_c - E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_d}{N_c}, \quad (3.11)$$

где E_d , N_d – энергетический уровень и концентрация доноров, соответственно.

Числитель в отношении первого члена равенства определяет энергию ионизации примесного атома.

3.8. Температурные свойства полупроводников

С ростом температуры происходит увеличение концентрации электронов в зоне проводимости за счет ионизации примесных атомов. В конечном итоге с течением времени происходит их истощение и выполнение равенства $n = N_d$. Энергетический уровень Ферми в этом случае совпадает с энергетическим уровнем доноров в запрещенной зоне энергетической диаграммы полупроводника. Тогда исходя из определения уровня Ферми, для концентрации электронов в зоне проводимости можно записать $n_n = N_d / 2$, позволяющее определить с помощью (3.11) температуру истощения примеси:

$$T_s = \frac{E_c - E_d}{k \ln(2N_c / N_d)}. \quad (3.12)$$

Величина этой температуры для германия при $N_d = 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $E_{\text{ион}} = 0,01 \text{ эВ}$ равна $T_s = 32 \text{ К}$.

При $T \neq 0$ в зоне проводимости появляются электроны как за счет ионизации донорных атомов, так и за счет ионизации собственных атомов полупроводника. С учетом этих механизмов образования свободных электронов в зоне проводимости можно записать равенство

$$n = n_{\text{пр}} + n_i, \quad (3.13)$$

где $n_{\text{пр}}$ – концентрация электронов, полученная путем ионизации атомов примеси; n_i – концентрация электронов, обусловленная генерацией собственных (матричных) атомов полупроводника.

При температурах $T \gg T_s$ для рассматриваемого проводника можно использовать равенство

$$n = N_d + \sqrt{N_c N_v} \exp(-E_g / 2kT)$$

Поскольку для примесного полупроводника справедливо условие

$$\exp\left(\frac{E_c - E_F}{kT}\right) = \frac{N_c}{n},$$

то положение уровня E_F при $T > T_s$ найдем из выражения

$$E_F = E_c - kT \ln(N_c / n).$$

Концентрация примесных атомов значительно меньше концентрации матричных атомов кристалла, т.е. атомов полупроводника, распо-

лагающихся в узлах кристаллической решетки. Поэтому при увеличении температуры собственная концентрация электронов может не только достичь величины примесной концентрации, но и значительно превысить ее. Последнее условие соответствует переходу к собственной электропроводности. Температуру, при которой выполняется равенство $n = n_{пр}$, называют *температурой ионизации* и обозначают T_i .

Экспериментально T_i можно определить, найдя точку пересечения касательной к кривой $E_F=f(T)$ с уровнем E_i (рис. 3.13).

Следует отметить, что при выполнении неравенства $T > T_i$ первым членом в (3.13) можно пренебречь. Температуру ионизации в этом случае можно найти из выражения

$$T_i = \frac{E_g}{k \ln(N_c N_v / N_d^2)}. \quad (3.14)$$

Для германия с концентрацией примеси $N_d = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ величина температуры ионизации равна $T_i = 450 \text{ К}$.

Зависимость концентрации электронов в зоне проводимости для полупроводника n -типа проводимости от температуры представлена на рис. 3.14. Кривая содержит три участка, в области которых формируются примесная электропроводность (ab), истощения примеси (bc) и собственная электропроводность.

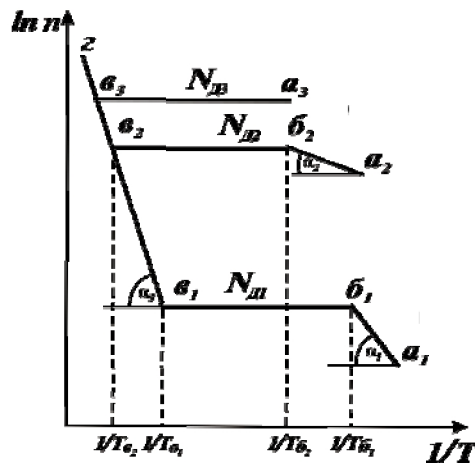


Рис. 3.14. Зависимость концентрации электронов от температуры в полупроводнике n -типа проводимости ($N_{D3} > N_{D2} > N_{D1}$)

В рабочем диапазоне температур при одноэлектронной ионизации всех примесных атомов выполняется неравенство $n_{\text{пр}} \gg n_i$. Это позволяет пренебречь собственной концентрацией n_i и записать равенство

$$n \approx N_{\text{д}} ; \quad (3.15)$$

$$p \approx N_{\text{а}} . \quad (3.16)$$

Аналогично определяется положение уровня Ферми и концентрация носителей заряда в полупроводниках p -типа проводимости.

Таким образом, диапазон рабочих температур примесных полупроводников ограничен температурами полной ионизации примесей и началом преобладающей ионизации матричных атомов, т.е. температурой, при которой преобладает собственная проводимость в полупроводнике.

4. КИНЕТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

К кинетическим явлениям относятся процессы, протекающие во времени при воздействии на их параметры внешних энергетических полей. К их числу относятся электропроводность, подвижность, время жизни свободных носителей заряда, термоэлектрические эффекты и т.д. Однако в настоящем разделе будут изложены только механизмы поведения свободных носителей заряда в области электрических и тепловых полей.

4.1 Электропроводность полупроводников

В отсутствие воздействия на кристалл внешних энергетических полей свободные носители заряда находятся в равновесном состоянии. При температуре $T \neq 0\text{K}$ они совершают тепловое движение со средней тепловой скоростью $\bar{v} \approx 10^5$ м/с при $T = 300\text{K}$. Величина тепловой скорости значительно превышает скорость свободных носителей заряда в объеме кристалла, обусловленную воздействием внешних энергетических полей.

Совершая движение в твердом теле, свободные электроны и дырки взаимодействуют с колеблющимися атомами (фононами), дефектами кристаллической решетки твердого тела, друг с другом. В результате происходит рассеяние их энергии, вследствие которого свободные носители заряда изменяют направления и скорость своего движения. При установлении равновесного состояния в кристалле средняя скорость движения свободных носителей заряда в любом его направлении определяется равенством $\bar{v} = 0$. Воздействием электрического поля на полупроводник изменяют ее величину ($\bar{v} \neq 0$) в направлении напряженности электрического поля E_0 . Эту скорость называют дрейфовой скоростью, а движение – дрейфом. Величину плотности электрического тока, формируемого дрейфом свободных носителей заряда, определяют, используя равенство

$$j_n = en\bar{v}_{nE_0}, \quad (4.1)$$

где e – заряд электрона; n – концентрация электронов; $\bar{v}_{nE_0}$ – средняя скорость дрейфа электронов в нормальном направлении к рассматриваемому сечению единичной площади.

В реальных кристаллах средняя скорость $\bar{v}_{nE_0}$ пропорциональна напряженности электрического поля E_0 , т. е. справедливо равенство

$$\bar{v}_{nE_0} = \mu_n E_0. \quad (4.2)$$

Коэффициент пропорциональности μ_n в (4.2) называется подвижностью электронов. Выражения (4.2) и (4.1) позволяют получить закон Ома в дифференциальной форме:

$$j_n = en\mu_n E_0 = \sigma_n E_0, \quad (4.3)$$

где $\sigma_n = en\mu_n$ – удельная электрическая проводимость полупроводника n – типа проводимости.

Аналогичные рассуждения можно привести и для дырочной составляющей плотности тока. Тогда полную удельную проводимость в любом полупроводнике можно описать равенством

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p = e(n\mu_n + p\mu_p), \quad (4.4)$$

где σ_n и σ_p – электронная и дырочная составляющие проводимости; μ_n, μ_p – подвижности свободных электронов и дырок; n и p – концентрации электронов и дырок в полупроводнике.

Выражение (4.4) справедливо только при выполнении условия $E_0 \leq E_{0кр}$. В этом диапазоне напряженностей электрического поля величина подвижности свободных носителей заряда остается постоянной, т.е. отсутствует зависимость $\mu = f(E_0)$.

При $E_0 > E_{0кр}$ свободные носители заряда на длине свободного пробега приобретают дрейфовую скорость, сравнимую со скоростью теплового движения $\bar{v}$. Это приводит к ее насыщению из-за роста числа столкновений в единицу времени. Характер изменения подвижности с ростом напряженности электрического поля можно выразить эмпирическим равенством:

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{E_{0кр}}{E_0} \right)^{1/2},$$

где μ_0 – подвижность, соответствующая критическому значению напряженности электрического поля.

Неравенство подвижностей свободных электронов и дырок ($\mu_n > \mu_p$) вытекает из неравенства их эффективных масс ($m_n > m_p$), что, в свою очередь, определяет согласно (4.2) и дрейфовую скорость носителей заряда, и быстродействие полупроводникового прибора.

Электроны при движении в полупроводнике на длине свободного пробега способны полностью потерять свою скорость уже при первом взаимодействии с окружающими атомами и атомными частицами, тогда среднюю дрейфовую скорость электрона удобно рассчитывать, пользуясь равенством вида

$$\bar{\lambda} = \bar{v} \bar{\tau},$$

где $\bar{v}$ – средняя скорость движения электрона; $\bar{\tau}$ – среднее время релаксации, равное среднему времени свободного пробега электрона.

Время релаксации характеризуется двумя параметрами: скоростью установления равновесного состояния в системе и временем, в течение которого разность неравновесной и равновесной концентраций электронов $(n - n_0)$ уменьшается в e раз ($e \approx 2,72$). В реальных кристаллах для того, чтобы скорость электрона в направлении первоначального движения стала равной нулю, необходимо в среднем $\bar{v}$ его взаимодействий с рассеивающими центрами. В этом случае для определения среднего пути справедливо равенство

$$\bar{L} = \bar{\lambda} \bar{v} = \bar{v} \bar{\tau}. \quad (4.5)$$

Равенство (4.5) позволяет определить численное значение среднего времени релаксации:

$$\bar{\tau} = \bar{\lambda} \bar{v} / \bar{v}. \quad (4.6)$$

Отношение $1/\bar{\lambda}$ в (4.6) называется *эффективностью столкновений* электрона с элементами кристалла. С учетом квантовой природы электрона и выражений (4.5), (4.6) величину подвижности в невырожденном полупроводнике можно записать равенством

$$\mu_n = \frac{e}{m_n} \frac{\bar{\lambda} \bar{v}}{\bar{v}}. \quad (4.7)$$

Таким образом из (4.7) следует, что установление зависимости подвижности от температуры T сводится к определению температурной зависимости параметров $\bar{\lambda}$ и $\bar{v}$.

Величина подвижности свободных носителей заряда определяется: температурой T , концентрацией примесных атомов N и напряженностью электрического поля при выполнении условия $E_0 > E_{0кр}$. Однако среди этих параметров важнейшим для подвижности является температура, т.к. в электронных приборах определяющими являются

механизмы рассеяния на тепловых колебаниях решетки и ионизированных примесях. Первый из них активно проявляется при высоких, а второй – при низких температурах.

4.2. Рассеяние свободных носителей заряда на тепловых колебаниях узловых атомов решетки (на фононах)

При $T \neq 0K$ в кристаллической решетке возникают колебания атомов. Поле упругих колебаний этих атомов удобно представить совокупностью квантов нормальных колебаний решетки – фононов. Квантование нормальных колебаний узловых атомов, охватывающих весь кристалл, представляет собой корпускулярное описание коллективных волновых движений, поэтому обладают не только энергией, но и импульсом. Это приводит к необходимости выполнения обратно пропорциональной зависимости $\bar{\lambda} \sim 1/n_\phi$, где n_ϕ – концентрации фононов.

При высоких температурах из зависимости $n_\phi \approx f(T)$ вытекает и справедливость пропорциональности:

$$\bar{\lambda} \sim 1/T. \quad (4.8)$$

Следует отметить, что в области высоких температур фононы обладают импульсом, соизмеримым с величиной импульса электронов проводимости. Это и означает прекращение движения электрона в данном направлении уже при единичном взаимодействии с фононом, т.е. в этом случае выполняется равенство $\bar{v} \approx 1$. Подставив (4.8) в (4.7) и учитывая зависимость $\bar{v} \sim f(T)$, получим

$$\mu_n \sim T^{-3/2}.$$

Повышение температуры увеличивает амплитуду тепловых колебаний узловых атомов решетки кристалла, поэтому растет вероятность столкновений свободных носителей заряда с этими колебаниями. Это рассеяние энергии свободных электронов при взаимодействии с фононами приводит к уменьшению их подвижности.

4.3. Рассеяние на ионизированных атомах примеси

Ионизированные примеси в кристалле создают кулоновское поле, действующее на несколько атомных расстояний и, следовательно, способны изменить траекторию электрона, даже движущегося на сравнительно далеком расстоянии от атома примеси.

При рассеянии электронов на примесных атомах величина $\bar{\lambda}$ должна быть обратно пропорциональна их концентрации (N) и не зависеть от температуры:

$$\bar{\lambda} \sim 1/N = \text{const} . \quad (4.9)$$

Определение эффективности столкновений свободных носителей заряда с ионизированными атомами примесей можно представить в виде равенства:

$$\bar{\nu} \sim \bar{\nu}^4 \left(\frac{\varepsilon}{Z_e} \right)^2 m_n, \quad (4.10)$$

где ε – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника, Z_e – заряд ионизированной примеси.

Анализ (4.10) показывает, что с увеличением скорости движения носителей заряда растут их эффективная масса и диэлектрическая проницаемость ε . Последнее означает уменьшение величины отклонения траектории свободных носителей заряда в области потенциального поля ионизированной примеси. Это приводит к росту числа столкновений электронов для прекращения их движения в первоначальном направлении. Однако с увеличением заряда иона атома примеси число взаимодействий электрона с кулоновским полем иона уменьшается. Из этого следует справедливость выражений для невырожденных полупроводников

$$\bar{\nu} \sim \sqrt{T} \text{ и } \bar{\nu} \sim T^2. \quad (4.11)$$

Подставляя (4.9) и (4.11) в (4.7), получим

$$\mu_n \sim T^{3/2}.$$

Следовательно, в невырожденных полупроводниках чем выше температура, тем быстрее движутся носители заряда и тем меньше они изменяют траекторию своего движения при взаимодействии с ионами примеси. Это свойство свободных носителей заряда в невырожденных полупроводниках оказывает значительное влияние и на зависимость $\mu = f(1/T)$ (рис. 4.1,а).

Более строгий анализ кривой показывает, что подвижность носителей заряда, определяемая рассеянием их на фононах, существенно зависит и от их эффективной массы $m_{эф}$, что следует из выражения

$$\mu \sim \frac{1}{m_{эф}^{5/2} T^{3/2}}.$$

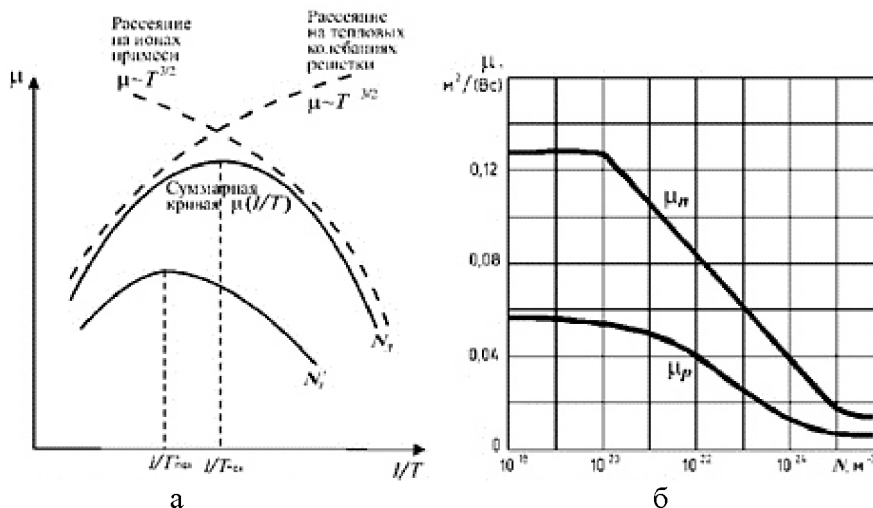


Рис. 4.1. Зависимость подвижности свободных носителей заряда в невырожденных полупроводниках: а – при различных концентрациях примеси ($N' > N$); б – от концентрации легирующей примеси в кремнии при $T=293$ К

Поскольку в невырожденных полупроводниках выполняется неравенство $m_n < m_p$, то справедливо и неравенство $\mu_n > \mu_p$. Из вышеизложенного следует, что зависимость подвижности от концентрации легирующей примеси N сложная и в целом аналитически не описывается. Однако это не мешает использовать в расчетах зависимости $\mu_n = f(N)$ и $\mu_p = f(N)$, полученные экспериментально для конкретных полупроводников (рис. 4.1,б). Анализ этих зависимостей показывает, что центрами рассеяния являются атомы примеси, увеличение концентрации которых приводит к уменьшению средней длины свободного пробега носителей (4.9), что снижает их подвижность.

4.4. Собственная электропроводность полупроводников

В собственном полупроводнике ввиду отсутствия примесных атомов ионизации подвергаются матричные атомы, поэтому они обладают собственной электрической проводимостью σ_i . Это означает, что концентрации свободных электронов и дырок в таких полупроводниках равны $n = p = n_i = p_i$. Это дает право записать равенство (4.4) в следующем виде:

$$\sigma_i = en_i(\mu_n + \mu_p) = ep_i(\mu_n + \mu_p).$$

С учетом выражений (3.6), (3.7) и (3.10), определяющих n_i , собственную электрическую проводимость можно представить выражением

$$\sigma_i = 2e \left(\frac{2\pi \sqrt{m_n m_p} kT}{h^2} \right)^{3/2} (\mu_n + \mu_p) \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right). \quad (4.12)$$

Из (4.12) следует, что при $T \rightarrow \infty$ и $\sigma_i \rightarrow \infty$. На рис. 4.2 зависимость $\sigma_i(1/T)$ представлена в логарифмических координатах, $\text{tg } \alpha = E_g / 2kT$.

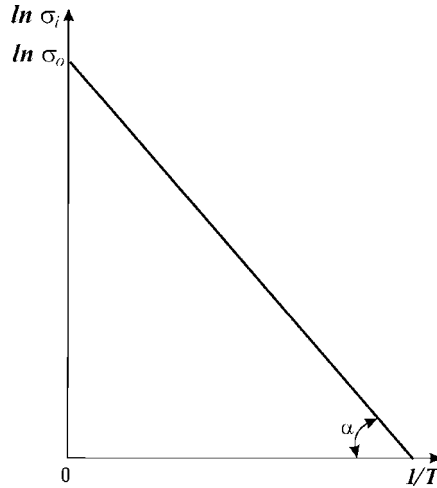


Рис.4.2. Зависимость собственной электрической проводимости полупроводника от температуры

Таким образом, при заданной температуре концентрация носителей заряда в собственном полупроводнике определяется только шириной его запрещенной зоны E_g .

4.5. Примесная электропроводность полупроводников

В рабочем диапазоне температур в равенстве (4.4) можно пренебречь составляющими, в которые входят параметры неосновных носителей заряда. В этом случае для большинства практических расчетов полупроводников n - и p -типов проводимостей можно использовать выражения

$$\sigma_n = e(n_n \mu_n + p_n \mu_p) \approx e n_n \mu_n; \quad (4.13)$$

$$\sigma_p = e(p_p \mu_p + n_p \mu_n) \approx e p_p \mu_p. \quad (4.14)$$

Если воспользоваться равенствами (3.15) и (3.16), то (4.13) и (4.14) можно переписать в более удобном для практических расчетов виде:

$$\sigma_n = eN_{\Delta}\mu_n; \quad (4.15)$$

$$\sigma_p = eN_{\Delta}\mu_p. \quad (4.16)$$

Характерные точки показаны на кривых температурной зависимости σ/σ_0 для кремния, содержащего различные количества примеси (рис. 4.3).

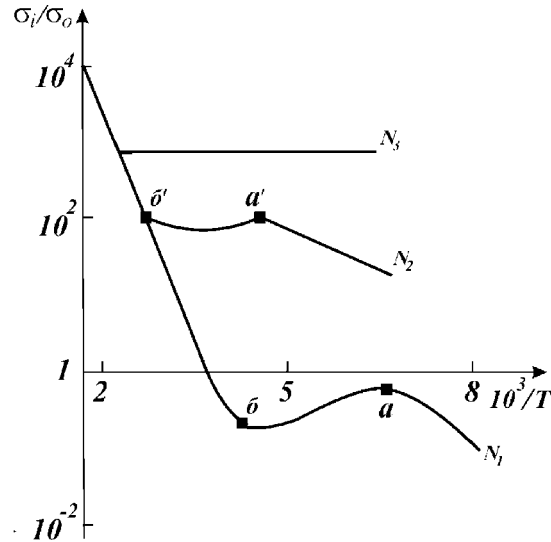


Рис. 4.3. Зависимость относительной удельной электрической проводимости примесного кремния от температуры при выполнении неравенства $N_3 > N_2 > N_1$; σ_0 – удельная электрическая проводимость при $T=293\text{K}$

Анализ зависимости $\sigma_i/\sigma_0 = f(10^3/T)$ показывает, что точка a соответствует температуре истощения примеси, а b – температуре ионизации, при которой примесный полупроводник превращается в собственный.

Удельное электрическое сопротивление ρ_0 является величиной, обратной удельной электрической проводимости.

4.6. Рекомбинация свободных носителей заряда

Процесс рекомбинации заключается в поглощении положительно заряженным ионом свободного электрона с образованием нейтрально заряженного атома. Механизм этого процесса формируется временами жизни свободных носителей заряда, дефектами кристаллической решетки и шириной запрещенной зоны полупроводника. При нарушении равновесного состояния эффективность процессов рекомбинации в кристалле усиливается за счет массового перехода свободных электронов на энергетические уровни в запрещенной и валентной зонах.

4.6.1. Неравновесные носители заряда и их основные характеристики

Поглощение твердым телом внешней энергии приводит к возникновению дополнительной концентрации свободных носителей заряда, т.е. приводит к нарушению равновесного состояния в кристалле. Атомные частицы, образующие дополнительную концентрацию свободных носителей заряда в твердом теле, называют неравновесными носителями заряда. Причем если на полупроводник воздействует внешний источник энергии постоянной интенсивности, то в нем устанавливается *равновесное состояние*, при котором выполняются равенства

$$\Delta n = n - n_0 \quad \text{и} \quad \Delta p = p - p_0,$$

где n и p – постоянные концентрации электронов и дырок при наличии внешнего источника энергии, а n_0 и p_0 – равновесные концентрации свободных электронов и дырок в полупроводнике при его отсутствии.

Из этого следует и равенство скоростей генерации и рекомбинации свободных носителей заряда. Если в полупроводнике отсутствуют объемные заряды, то выполнение этих равенств означает выполнение условия электрической нейтральности в каждой точке кристалла ($\Delta n = \Delta p$).

Если концентрация избыточных носителей заряда много меньше концентрации основных носителей заряда, но значительно превышает концентрацию неосновных носителей, то это означает низкий уровень возбуждения полупроводника.

При высоком уровне возбуждения полупроводника воздействием внешнего источника энергии концентрация избыточных носителей заряда значительно выше равновесной концентрации свободных носителей заряда.

После прекращения воздействия внешнего фактора избыточная концентрация свободных носителей заряда быстро уменьшается из-за действия механизма рекомбинации, достигая равновесного состояния. Численное значение скорости рекомбинации определяется временем жизни неравновесных носителей заряда τ , для определения которой выделим в полупроводнике плоскопараллельный слой толщиной dx , перпендикулярный направлению движения электрона (рис. 4.4).

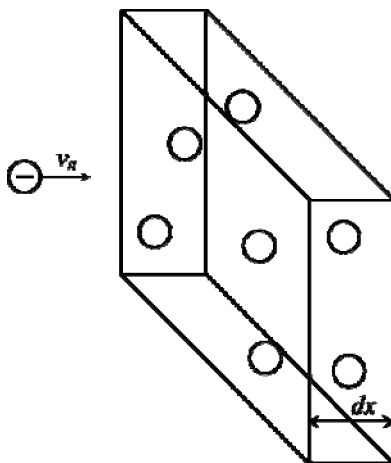


Рис. 4.4. Определение времени жизни свободных электронов

Пусть дырка, являясь положительным ионом, имеет сферическую симметрию распределения электрического поля, тогда ее можно моделировать центром захвата электрона радиусом r . При взаимодействии свободного электрона с таким центром происходит рекомбинация с образованием нейтрального атома, т.е. электрон, попадая в один из таких дисков, будет обязательно захвачен дыркой. В этом случае сечение захвата свободного электрона дыркой можно описать равенством $A_n = \pi r^2$. Обозначим площадь диска S , тогда объем в его области можно выразить произведением Sdx , а число дырок в нем $pSdx$, где p – концентрация дырок. Это позволяет определить суммарную площадь захвата электрона дырками при прохождении им слоя толщиной dx , используя равенство

$$S_{\text{захв}} = A_n p S dx .$$

Электрон при прохождении через слой dx взаимодействует с дыркой. Вероятность этого процесса можно определить, используя выражение

$$W_n = S_{\text{зах}} / S = A_n p dx. \quad (4.17)$$

Разделив левую и правую части (4.17) на dt и учитывая равенство $dx = v_n dt$, найдем вероятность столкновения электрона с дыркой в единицу времени:

$$P_n = A_n p v_n.$$

Таким образом, P_n представляет собой вероятность рекомбинации электрона в единицу времени. Величина, обратная этой вероятности, представляет собой среднее время жизни электрона в свободном состоянии τ_n :

$$\tau_n = \frac{1}{P_n} = \frac{1}{A_n v_n p}. \quad (4.18)$$

Аналогичное выражение можно записать и для среднего времени жизни дырок:

$$\tau_p = \frac{1}{P_p} = \frac{1}{A_p v_p p}, \quad (4.19)$$

где A_p – сечение захвата дырки электроном; v_p – скорость движения дырки относительно электронов; n – концентрация электронов.

В полупроводниках захватывать электроны могут не только дырки, но и различные локальные центры, создающие в запрещенной зоне дискретные энергетические уровни. Произведение сечения захвата на скорость движения носителя заряда, усредненное по всем носителям в зоне, называется *коэффициентом рекомбинации* γ . Для электронов и дырок его можно записать выражениями:

$$\gamma_n = \overline{A_n v_n}; \quad (4.20)$$

$$\gamma_p = \overline{A_p v_p}. \quad (4.21)$$

Подставляя (4.20) и (4.21) соответственно в (4.18) и (4.19), получим равенства для определения численных значений времен жизни электронов и дырок соответственно:

$$\tau_n = \frac{1}{\gamma_n P} \quad \text{и} \quad \tau_p = \frac{1}{\gamma_p P}.$$

Поскольку скорость рекомбинации измеряется числом носителей заряда, ежесекундно рекомбинирующих в единице объема полупроводника, то для неравновесных носителей заряда она равна произведению вероятности рекомбинации носителей заряда в единицу времени на их избыточную концентрацию. Таким образом, для скоростей рекомбинации электронов и дырок можно записать выражения:

$$R_n = -\frac{\partial n}{\partial t} = P_n \Delta n = \frac{\Delta n}{\tau_n} = \gamma_n P \Delta n;$$

$$R_p = -\frac{\partial p}{\partial t} = P_p \Delta p = \frac{\Delta p}{\tau_p} = \gamma_p P \Delta p.$$

Механизм движения свободных носителей заряда определяет три типа рекомбинаций: межзонную, через локальные уровни и поверхностную.

В первом случае происходит переход электрона из зоны проводимости непосредственно на свободный уровень валентной зоны. При этом освобождается энергия, равная ширине запрещенной зоны, выделяемая в виде кванта энергии электромагнитного излучения (фотона) или превращаемая в квант энергии тепловых колебаний решетки (фононов). По этим механизмам различают излучательную и фоновую межзонную рекомбинацию. Следует отметить, что вероятность межзонной рекомбинации очень мала, более вероятны переходы носителей заряда через локальные уровни, расположенные в запрещенной зоне.

4.6.2. Рекомбинация через локальные уровни энергии в запрещенной зоне

Механизмы рекомбинации через локальные уровни могут быть наглядно представлены на энергетических диаграммах путем расположения в запрещенной зоне глубоких E_d и мелких E'_d , E''_d локальных уровней энергии (рис. 4.5, а, б). Захват электрона глубоким уровнем отображается в этом случае переходом 1 (рис. 4.5, а). Однако после поглощения кванта энергии, равного энергии залегания в запрещенной зоне глубокого уровня, может осуществиться и обратный переход в зону проводимости (переход 3). Следует отметить, что этот процесс, формируемый, как правило, тепловой энергией, в рекомбинации не

участвует. Если же электрон перебрасывается с глубокого уровня в валентную зону (переход 2), то попадая в сечение захвата дырки, он рекомбинирует с нею, образуя нейтральный атом. Глубокие уровни энергии в запрещенной зоне полупроводника являются эффективными центрами рекомбинации.

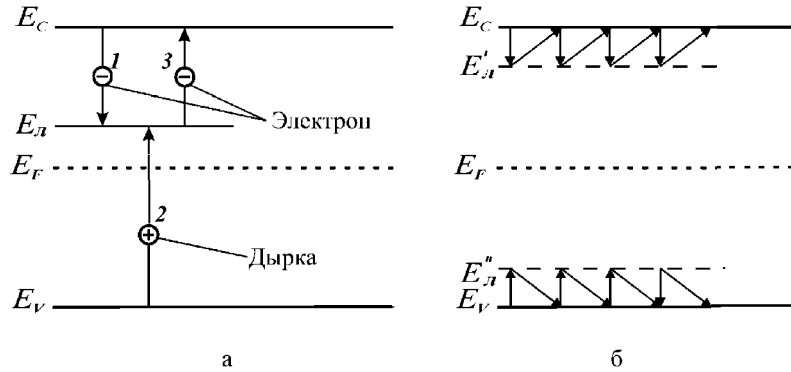


Рис. 4.5. Энергетическая диаграмма полупроводника, содержащего центры рекомбинации (а) и центры прилипания (б)

Для мелких локальных уровней процесс сводится к энергичному обмену электронами между уровнями E'_d , E''_d и соответствующим им энергетическим зонам (рис. 4.5, б). Такие локальные уровни получили название центры прилипания.

Таким образом, энергетические уровни, располагающиеся в запрещенной зоне вблизи ее середины E_i , называются глубокими уровнями энергии, а вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны – центрами прилипания.

Пусть имеем однократно ионизованный уровень энергии в кристалле. Причем при сохранении постоянных условий концентрация центров рекомбинации представляет собой малую величину по сравнению с концентрацией избыточных носителей заряда. Это позволяет использовать простейшую модель рекомбинации, содержащую выражения для скорости рассасывания избыточных носителей заряда и времени жизни τ неравновесных носителей заряда:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = - \frac{np - n_0 p_0}{(n + n_d)\tau_{p_0} + (p + p_d)\tau_{n_0}}; \quad (4.22)$$

$$\tau = P_p^{-1} \frac{n_0 + n_d}{(n_0 + p_0)} + P_n^{-1} \frac{p_0 + p_d}{(n_0 + p_0)}, \quad (4.23)$$

где n_0 , p_0 – равновесные концентрации свободных электронов и дырок в исходном состоянии; n_d , p_d – равновесные концентрации свободных электронов и дырок при условии совпадения энергетических уровней Ферми и ловушек, т.е. при условии выполнения равенства $E_F = E_d$; P_p – вероятность захвата дырок ловушками, когда все ловушки заняты электронами; P_n – вероятность захвата электронов ловушками в условиях, когда все ловушки свободны; τ_{p0} , τ_{n0} – времена жизни дырок и электронов в этих условиях.

Используя выражения (4.18) и (4.19), равенство (4.23) можно переписать в виде, удобном для практических расчетов:

$$\tau = \tau_{p0} \frac{n_0 + n_d}{n_0 + p_0} + \tau_{n0} \frac{p_0 + p_d}{n_0 + p_0}. \quad (4.24)$$

На рис. 4.6, а,б показаны характерные особенности зависимостей $E_F = f(n/n_i)$ и $\tau = f(n/n_i)$.

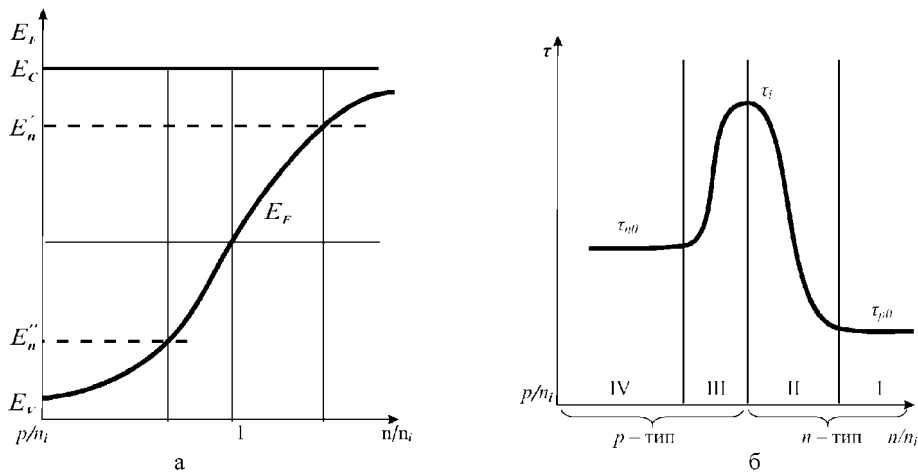


Рис. 4.6. Изменение положения уровня Ферми (а) и времени жизни неравновесных носителей τ (б) в зависимости от концентрации основных носителей заряда в полупроводнике

Изменения положения уровня Ферми E_F в зависимости от изменения концентрации основных носителей заряда (а) показывают, что непосредственно на энергетических уровнях E_n' и E_n'' существуют один

свободный и один занятый уровни, а в областях $E_c - E'_n$, $E''_n - E_v$ все уровни свободны и по ним могут передвигаться свободные носители заряда под действием внешних сил. Таким образом, исходя из физической сущности уровня Ферми, в диапазоне энергий $E'_n - E''_n$ все энергетические уровни заняты (рис.4.6, а). Следует отметить также, что характерные свойства кривой $\tau = f(n/n_i)$ определяются наличием четырех областей изменения τ , определяемых выражением (4.24), в области которых происходит изменение типа проводимости.

4.6.3. Поверхностная рекомбинация

Приповерхностный слой имеет особую зонную структуру, т.к. находится в области воздействия внешней силы, с помощью которой осуществляли обработку поверхности полупроводника. Это означает, что атомные связи в этом слое ослаблены на величину энергии, поглощенной кристаллом. Следовательно, поверхность имеет отличные от объемных количественные и качественные характеристики и параметры. Так, например, поверхность монокристаллического кремния может иметь проводимость близкую к металлу или диэлектрику, а структуру аморфную или поликристаллическую и т.д. Подобная неоднородность свойств поверхности и объема приводит к изменению величин времени жизни неравновесных носителей заряда τ в этих областях. Однако, поскольку они находятся в одном кристалле (имеют гальваническую связь), но существуют в разных областях, в которых величины времени жизни неравновесных носителей заряда практически не имеют связи друг с другом, то количественно τ можно описать суммой времен жизни в приповерхностном слое τ_s и в объеме τ_v , т.е. характер изменения τ в этом случае можно представить равенством

$$1/\tau = 1/\tau_v + 1/\tau_s .$$

Поверхность содержит следы механического или иного энергетического воздействия на кристаллическую решетку, поэтому, обладая значительной дефектностью, она содержит соизмеримую им концентрацию мелких ловушек, наличие которых приводит к выполнению неравенства $\tau_s < \tau_v$. Причем в большинстве практических случаев τ ближе к τ_s . Пусть имеем в запрещенной зоне полупроводника поверхностный рекомбинационный центр E_s при условии, что по всему объему генерируются неравновесные носители заряда. Обозначим их избыточные концентрации через Δn и Δp .

Структура E_s имеет свободные энергетические уровни, способные принимать свободные электроны. Образование градиента концентрации свободных носителей заряда приводит при наличии теплового движения к возникновению потоков носителей заряда в направлении поверхности:

$$\frac{j_n}{e} = S_n \Delta n;$$

$$\frac{j_p}{e} = S_p \Delta p,$$

где j_n, j_p – плотности тока электронов и дырок; e – заряд электрона; S_n, S_p – коэффициенты пропорциональности.

В условиях равновесия ток через поверхность равен нулю, поэтому эти плотности тока равны друг другу. Тогда выражение, определяющее число носителей заряда, ежесекундно рекомбинирующих в единице площади поверхности, будет иметь вид

$$q_s = \frac{j_p}{l} = \frac{j_n}{l} = S_n \Delta n = S_p \Delta p. \quad (4.25)$$

Таким образом, S_n и S_p в (4.25) выражают относительную долю избыточных носителей заряда, ежесекундно рекомбинирующих в единице площади поверхности полупроводника. Эти коэффициенты имеют размерность скорости, поэтому и называются *скоростями поверхностной рекомбинации* электронов и дырок. Связь между скоростью поверхностной рекомбинации и временем жизни τ в общем случае установить трудно, найдены решения этой задачи только для частных случаев.

4.7. Движение свободных носителей заряда в полупроводниках

Движение носителей заряда в полупроводнике в общем случае обусловлено двумя процессами: *диффузией*, обусловленной действием градиента концентрации свободных носителей заряда и теплового движения, и *дрейфом*, осуществляемым действием электрического поля. В первом случае движение свободных носителей заряда имеет не электрическую природу. Следовательно, полный ток состоит из суммы четырех независимых составляющих и для его плотности справедливо выражение

$$\mathbf{j} = j_{nE} + j_{nD} + j_{pE} + j_{pD} \mathbf{j} = j_{nE} + j_{nD} + j_{pE} + j_{pD},$$

где j_{nE}, j_{pE} – дрейфовые, а j_{nD}, j_{pD} – диффузионные составляющие плотности тока электронов и дырок соответственно.

Поведение неравновесных носителей заряда в полупроводниках описывается *уравнением непрерывности*. В этом случае в полупроводнике р-типа в направлении оси x существует градиент концентрации электронов ($dn/dx > 0$) и действует электрическое поле напряженностью E_{ox} .

Выделим в полупроводнике слой толщиной dx , расположенный перпендикулярно оси x , с площадью поперечного сечения 1 м^2 (рис. 4.4), объем которого равен dx . Величины концентраций свободных носителей заряда формируются координатой x и временем t . Обозначив концентрацию электронов в слое в момент времени t через $n(x, t)$, а в момент времени $(t + dt)$ – через $n(x, t + dt)$, можно записать выражение, характеризующее закономерность изменения числа электронов в слое за время dt :

$$[n(x, t + dt) - n(x, t)]dx = \frac{\partial n}{\partial t} dx dt.$$

Оно вызывается протекающими в слое процессами генерации, рекомбинации, диффузией и дрейфом носителей заряда.

В результате генерации за время dt в слое объемом dx за счет механизма ионизации возникает $g dx dt$ электронов, где g — скорость их генерации.

Процессы рекомбинации в единицу времени и в единице объема полупроводника приводят к исчезновению свободных электронов:

$$R = -\frac{n - n_0}{\tau_n}.$$

Тогда за время dt в объеме dx убыль электронов составит уже

$$R = -\frac{n - n_0}{\tau_n} dx dt.$$

Наличие градиента концентрации, теплового движения и внешнего поля в направлении оси x приводит к тому, что втекающий в слой dx поток электронов $J_n(x)$ будет не равен потоку $J_n(x + dx)$, вытекающему из этого слоя. Изменение числа электронов за время dt , вызванное различием этих потоков, описывается соотношением

$$[J_n(x_n) - J_n(x + dx)]dt = \frac{\partial J_n}{\partial x} dx dt.$$

Таким образом, полное изменение числа электронов в слое dx за время dt составит

$$\frac{\partial n}{\partial x} dx dt = \left(-\frac{\partial J_n}{\partial x} + g - \frac{n - n_0}{\tau_n} \right) dt dx.$$

Сократив обе части этого уравнения на $dt dx$, получим уравнение непрерывности для избыточных электронов:

$$\frac{\partial n}{\partial x} = -\frac{\partial J_n}{\partial x} + g - \frac{n - n_0}{\tau_n}. \quad (4.26)$$

Аналогичное уравнение можно получить для избыточных дырок:

$$\frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{\partial J_p}{\partial x} + g - \frac{p - p_0}{\tau_p}. \quad (4.27)$$

Поток электронов J_n удобно выразить через плотность тока $J_n = -j_n/e$, где e – заряд электрона. Это позволяет записать дрейфовую и диффузионную составляющие электрического тока в виде равенств

$$j_{nE_0} = en\mu_n E_{0x}, \quad j_{nD} = eD_n \frac{\partial n}{\partial x},$$

где коэффициент пропорциональности D_n называется *коэффициентом диффузии*. Тогда плотность тока, обусловленного дрейфом и диффузией электронов, выразим равенством

$$j_n = e \left(n\mu_n E_{0x} + D_n \frac{\partial n}{\partial x} \right).$$

Аналогичное выражение можно получить и для плотности тока дырок:

$$j_p = e \left(p\mu_p E_{0x} - D_p \frac{\partial p}{\partial x} \right).$$

Знак минус у диффузионной составляющей плотности тока дырок указывает на то, что направление диффузионного тока противоположно градиенту их концентрации. Заменив в (4.26), (4.27) потоки J_n и J_p плотностями тока, получим уравнения непрерывности в виде

$$\frac{\partial n}{\partial x} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + E_x \mu_n \frac{\partial n}{\partial x} + g - \frac{n - n_0}{\tau_n}; \quad (4.28)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = D_p \frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + E_x \mu_p \frac{\partial p}{\partial x} + g - \frac{p - p_0}{\tau_p}. \quad (4.29)$$

4.8. Соотношение Эйнштейна

В полупроводниках *n*-типа проводимости с неравномерным распределением атомов донорной примеси вдоль оси *x* (рис.4.7,а) возникают диффузионный J_{nD} и дрейфовый J_{nE} потоки электронов. В первом случае в области, откуда ушли электроны, возникает нескомпенсированный положительный заряд ионизированных атомов доноров. Это приводит к возникновению отрицательного заряда в том месте, куда электроны пришли, т.е в кристалле происходит образование внутреннего электрического поля напряженностью E_{ox} и дрейфового тока J_{nE} (рис. 4.7,б).

При достижении равновесного состояния выполняется равенство диффузионного и дрейфового токов:

$$e n \mu_n E_{ox} = e D_n \frac{\partial n}{\partial x}. \quad (4.30)$$

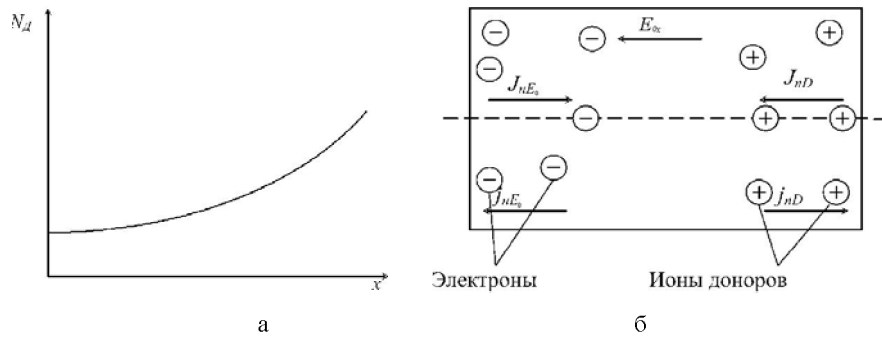


Рис. 4.7. Распределение концентрации легирующей примеси $N_D(x)$ при $\frac{dN_D(x)}{dx} > 0$ и схема возникновения электрического поля в полупроводнике

В электрическом поле напряженностью E_{ox} электроны имеют потенциальную энергию в точке *x* равную $-e\phi(x)$, где $\phi(x)$ – потенциал поля.

В условиях равновесия в соответствии с законом Больцмановского распределения концентрация электронов в области точки x , равна

$$n(x) = c \exp\left[\frac{e\varphi(x)}{kT}\right],$$

где c – коэффициент пропорциональности. Потенциал поля $\varphi(x)$ определяется равенством

$$E_{ox} = -\frac{d\varphi(x)}{dx}.$$

Тогда производная dn/dx будет иметь вид

$$\frac{dn}{dx} = c \exp\left[\frac{e\varphi(x)}{kT}\right] \frac{e}{kT} E_{ox}. \quad (4.31)$$

Подставив (4.31) в (4.30), получим

$$D_n = \frac{kT}{e} \mu_n = \varphi_T \mu_n. \quad (4.32)$$

Аналогичное выражение можно записать для коэффициента диффузии дырок:

$$D_p = \frac{kT}{e} \mu_p = \varphi_T \mu_p. \quad (4.33)$$

Выражения (4.32) и (4.33) связывают коэффициенты диффузии носителей заряда с их подвижностью и называются соотношениями Эйнштейна.

4.9. Диффузионная длина свободных носителей заряда

Пусть на одном конце полупроводника поддерживается постоянная избыточная концентрация электронов $\Delta n_0 = n - n_0$, тогда для определения закономерности распределения неравновесных носителей заряда вдоль полупроводника можно использовать уравнение непрерывности. При выполнении условий $dn/dt = 0$, $dp/dt = 0$ электрическое поле E_{ox} и генерация носителей заряда в объеме полупроводника настолько малы, что ими можно пренебречь, выражение (4.28) принимает вид

$$\frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = \frac{n - n_0}{D_n \tau_n}. \quad (4.34)$$

Граничными условиями (4.34) при $x = 0$ служит равенство $(n - n_0) = \Delta n_0$, а при $x \rightarrow \infty - (n - n_0) = 0$. Решением уравнения (4.34) в этом случае служит выражение

$$\Delta n = n - n_0 = \Delta n_0 \exp\left(-\frac{x}{\sqrt{D_n \tau_n}}\right). \quad (4.35)$$

Физически (4.35) описывает закон убывания концентрации избыточных носителей заряда вдоль полупроводника в стационарных условиях. Величина отрезка $L = \sqrt{D \tau}$ имеет размерность длины и называется диффузионной длиной. Для электронов и дырок ее определяют, используя равенства

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n}. \quad (4.36)$$

$$L_p = \sqrt{D_p \tau_p}. \quad (4.37)$$

Характерная особенность (4.36), (4.37) заключена в том, что в области L избыточная концентрация носителей заряда уменьшается в e раз.

4.10. Поверхностные явления в полупроводниках

Формирование поверхности осуществляется путем разрыва кристаллической решетки полупроводника, приводящего к появлению энергетических уровней или зон, характеризующих его свойства вблизи поверхности. Причем электроны, занимающие эти уровни, не могут проникать внутрь кристалла, т.к. локализируются у его поверхности. Такие уровни могут иметь свойства доноров, акцепторов или центров прилипания. Поглощение акцепторными уровнями свободных электронов означает их локализацию, а удаление электронов с донорных уровней – локализацию дырок. В соответствии с условием электрической нейтральности образование заряда на поверхности сопровождается возникновением в приповерхностном слое объемного заряда противоположного знака. Необходимость нейтрализации поверхностного заряда приводит к его обеднению носителями заряда одного знака с поверхностным зарядом и обогащению носителями заряда противоположного знака. Данное явление, формируемое под воздействием элект-

трического поля, наблюдается и в системе металл – диэлектрик – полупроводник и носит название *эффекта поля* (рис. 4.8). Если на металл подать положительный или отрицательный потенциал, то в приповерхностном слое сосредоточится заряд, равный по величине, но противоположный по знаку заряду на металлической пластине.

В металлах, имеющих высокую концентрацию носителей заряда порядка 10^{28} м^{-3} , нейтрализация поверхностного заряда происходит уже на расстоянии, равном нескольким атомным расстояниям решетки. Полупроводники имеют значительно меньшую концентрацию свободных носителей заряда, поэтому область объемного заряда простирается на значительную глубину ($\sim 10^{-6}$ м и более). В этом диапазоне глубины потенциал поля в веществе со свободными носителями заряда уменьшается в e раз. Обычно ее называют дебаевской длиной экранирования, обозначают L_D . Расчеты показывают, что для собственного полупроводника выполняется равенство

$$L_D = \left(\frac{\varepsilon \varepsilon_0 k T}{2 e^2 n_i} \right)^{1/2} = \left(\frac{\varepsilon \varepsilon_0 \varphi_T}{2 e n_i} \right)^{1/2},$$

где ε – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника; ε_0 – электрическая постоянная вакуума; $\varphi_T = kT/e$ – температурный потенциал.

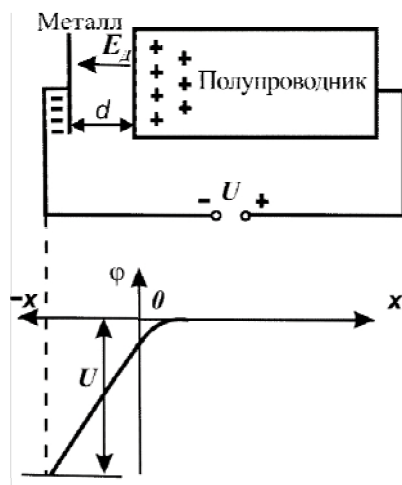


Рис. 4.8. Эффект поля в структуре металл-диэлектрик-полупроводник, $\varphi(x)$ – распределение потенциала

Для примесного полупроводника с концентрацией ионизированной примеси N выполняется равенство

$$L_D = \left(\frac{\varepsilon \varepsilon_0 \varphi_T}{eN} \right)^{1/2}.$$

При выполнении неравенства $N \gg n_i$ диффузионная длина в собственных полупроводниках значительно больше, чем в примесных, из-за отсутствия в кристаллической решетке дефектов, а следовательно, и рассеяния в них свободных носителей заряда. Это неравенство хорошо иллюстрируется в кристалле кремния при температуре 300К. Так, например, в собственном кремнии $L_D \approx 14$ мкм, а в примесном кремнии при $N_d = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ диффузионная длина уменьшается до $L_D \approx 0,04$ мкм. Образование заряда на поверхности полупроводника приводит к возникновению разности потенциалов между его поверхностью и объемом. В результате возникает искривление энергетических зон в области приповерхностного слоя. Если этот заряд имеет отрицательный знак, то электроны, перемещаясь из объема к поверхности, увеличивают свою энергию и энергетические зоны изгибаются вверх, образуя энергетический барьер. При заряджении поверхности положительным зарядом зоны изгибаются вниз, т.е. образуется потенциальная яма. Стеkanie в эту яму свободных носителей заряда приводит к обогащению ими приповерхностного слоя и увеличению проводимости. Величина изгиба зон, простирающихся вглубь полупроводника, приблизительно равна диффузионной длине. Концентрации электронов и дырок в приповерхностном слое полупроводника в этом случае описываются соотношениями

$$n = n_i \exp\left(\frac{E_F - E_i}{kT}\right); \quad (4.38)$$

$$p = n_i \exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right). \quad (4.39)$$

Выражения (4.38), (4.39) позволяют сделать следующие выводы: если в приповерхностной области полупроводника выполняется равенство $E_i = E_F$, то полупроводник обладает собственной проводимостью и $n = p = n_i$; при расположении уровня Ферми выше середины запрещенной зоны ($E_F > E_i$) и выполнении неравенства $n > n_i > p$ по-

полупроводник обладает электропроводностью n -типа; в области $E_i > E_F$ концентрация дырок находится в соотношении $p > n_i > n$, т.е. полупроводник обладает электропроводностью p -типа.

Таким образом, в приповерхностной области полупроводника могут наблюдаться три важных процесса: обеднение, инверсия и обогащение приповерхностной области носителями заряда.

Обедненная область в приповерхностном слое полупроводника возникает при совпадении знаков заряда на поверхности и основных носителей заряда (рис. 4.9, а). Однако по величине он еще не способен вызвать пересечение кривой, соответствующей середине запрещенной зоны E_i , с уровнем Ферми E_F . Изгиб зон в области поверхности приводит в этом случае к увеличению расстояния от уровня Ферми до дна зоны проводимости в полупроводнике n -типа и до потолка валентной зоны в полупроводнике p -типа. Это сопровождается обеднением приповерхностной области основными носителями заряда, концентрация которых, как и концентрация неосновных носителей заряда, оказывается много меньше концентрации примесных атомов. Заряд примесных атомов в приповерхностной области оказывается нескомпенсированным зарядом подвижных носителей, поэтому он и определяет тип электропроводности в приповерхностной области полупроводника.

Из рис. 4.9, б видно, что инверсная область в приповерхностном слое полупроводника возникает при высокой плотности поверхностного заряда, совпадающего по знаку с основными носителями заряда. Кривая, соответствующая середине запрещенной зоны E_i , в этом случае пересекает уровень Ферми и располагается выше его в полупроводнике n -типа и ниже – в полупроводнике p -типа. Расстояние от уровня Ферми до потолка валентной зоны в полупроводнике n -типа оказывается меньше расстояния до дна зоны проводимости. Поэтому концентрация неосновных носителей заряда для полупроводника n -типа (дырок) в приповерхностном слое оказывается выше концентрации основных носителей заряда (электронов). Это приводит к изменению типа электропроводности в кристалле. В полупроводнике p -типа проводимости расстояние между уровнями E_F и E_c оказывается меньше расстояния до потолка валентной зоны E_v , вследствие чего концентрация неосновных носителей заряда – электронов в приповерхностном слое оказывается выше концентрации основных носителей заряда – дырок, и тип электропроводности в нем также изменяется. Данное явление называется *инверсией*, а слои полупроводника, в которых оно возникает – инверсными.

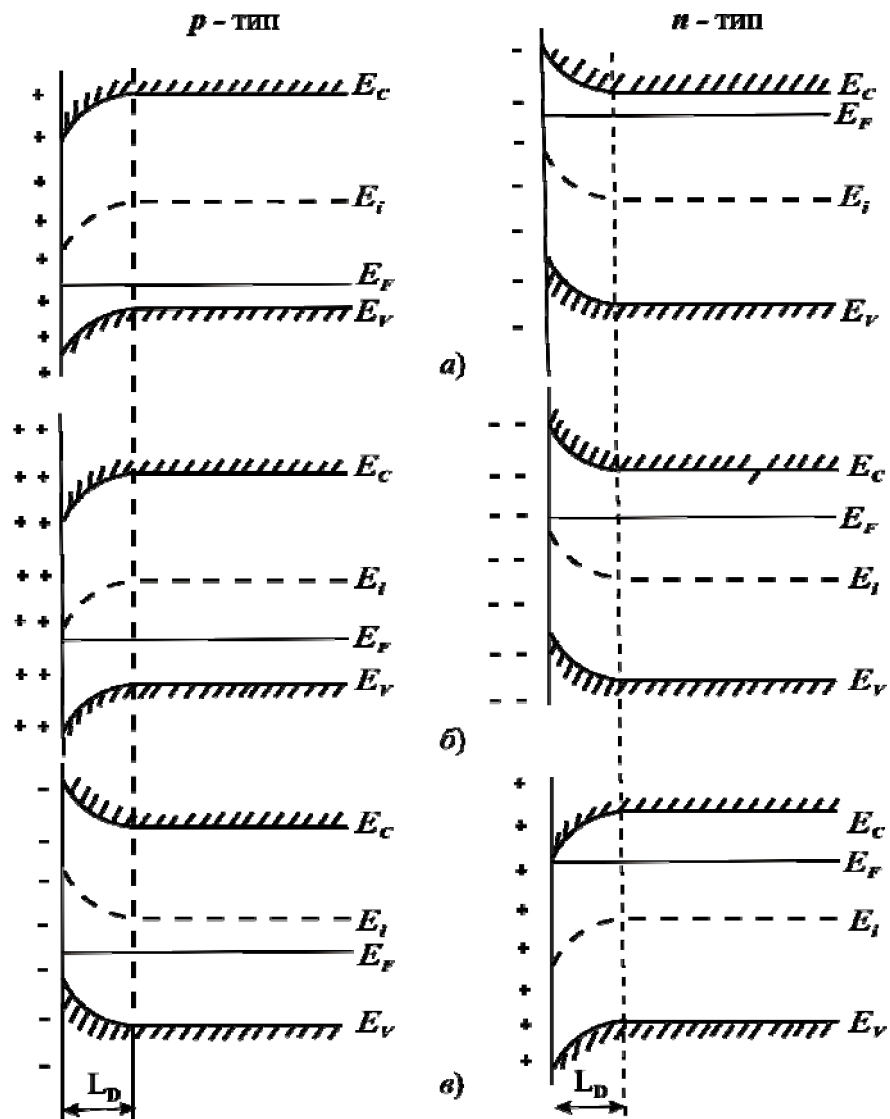


Рис. 4.9. Образование в приповерхностной области полупроводника под влиянием заряда на поверхности обедненного (а), инверсного (б) и обогащенного (в) слоев

В случае появления в приповерхностном слое заряда, противоположного по знаку основным носителям, происходит увеличение его проводимости, т.е. происходит обогащение приповерхностного слоя полупроводника свободными носителями заряда (рис. 4.9, в). Такие слои называют обогащенными и их электрические свойства близки к омическим. Поэтому это свойство обогащенных контактов используют при формировании контактов к полупроводниковым приборам.

5. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Градиенты температуры и токи в полупроводниках формируют механизмы переноса свободных носителей заряда, связанных с такими параметрами, как масса, электрический заряд, энергия, время жизни и т.д. При определенных условиях возникают направленные потоки этих величин, приводящих к появлению ряда термоэлектрических явлений в полупроводниках, важнейшими из которых в области приборостроения являются эффекты Пельтье, Томсона и Зеебека.

5.1. Эффект Пельтье

Данный эффект проявляет свои свойства в процессах выделения или поглощения теплоты (Q_{Π}) областью контакта двух разнородных полупроводников или полупроводника и металла. Численное значение Q_{Π} определяется величиной и длительностью электрического тока, протекающего через структуру контакта, поэтому для его вычисления используют выражение

$$Q_{\Pi} = \pm \Pi \cdot I \cdot t = \pm \Pi q, \quad (5.1)$$

где Π – коэффициент Пельтье.

При протекании тока через контактирующие материалы внешнее электрическое поле переносит электроны или дырки из одного материала в другой. Различие условий установления равновесного состояния электронов или дырок приводит к тому, что свободные заряды, имеющие избыток энергии, перейдя в другую область контакта, отдают ее решетке, в результате температура спая растет. Если же заряды обладают меньшей энергией, то решетка отдает им свою энергию и тогда ее температура падает.

Пусть в полупроводнике электронной проводимости выполняется неравенство $A_m > A_n$, где A_m – работа выхода электрона в металле; A_n – работа выхода электрона в полупроводнике, тогда электроны полупроводника будут переходить в металл, оставляя в области своего ухода uncompensated положительные ионы. Это означает, что в области контакта возникает потенциальный барьер (рис. 5.1).

Если на электроды такого контакта подать внешнее напряжение плюсом на металл, а минусом на полупроводник, то электроны, переходя в металл, опускаются до уровня Ферми F_m . В процессе своего движения они взаимодействуют с фононами, дефектами кристалла,

друг с другом. Избыток энергии поглощается решеткой в виде тепла, называемого теплотой Пельтье ΔQ_n . Ее численное значение определяют, используя равенство

$$\Delta Q_n = T_e - F_n. \quad (5.2)$$

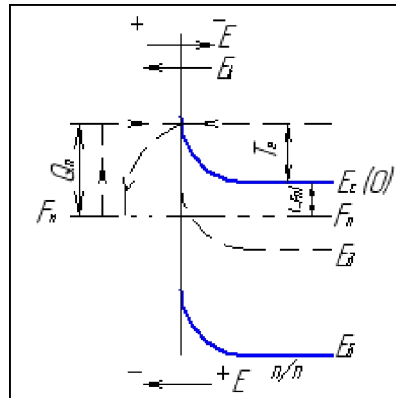


Рис. 5.1. Схема возникновения эффекта Пельтье в контакте электронного полупроводника с металлом

При смене полярности внешнего напряжения на электродах контактирующих материалов электроны, находящиеся в металле на энергетических уровнях, располагающихся выше дна зоны проводимости, переходят из металла в полупроводник, получая дополнительную энергию за счет атомов решетки, расположенных вблизи контакта. Поглощение теплоты Пельтье приводит к охлаждению контакта. Количество поглощенной теплоты определяют, используя равенство (5.2).

В невырожденных полупроводниках n-типа проводимости средняя кинетическая энергия электронов описывается равенством

$$T_e = (r + 2)kT. \quad (5.3)$$

Тогда, подставляя (5.3) в (5.2), получим выражение для вычисления коэффициента Пельтье:

$$\Pi = \frac{\Delta G_n}{e} = \frac{T_e - F_n}{e} = \frac{[(r + 2)kT - F_n]}{e}. \quad (5.4)$$

Подставляя значение уровня Ферми в электронном полупроводнике (F_n), определяемого выражением (5.20), в (5.4) и учитывая равенство (5.23), получим

$$\Pi = \alpha_1 T. \quad (5.5)$$

Это равенство выведено Томсоном из первого и второго начала термодинамики для свободно движущихся частиц. Поскольку в полупроводнике также имеются свободно движущиеся частицы, то аналогичные рассуждения справедливы и для контактов дырочного полупроводника с металлом при прохождении тока через него.

Эффект Пельтье возникает и в р-п-переходах полупроводниковых приборов, при прямом смещении которых электроны п-области и дырки р-области, двигаясь навстречу друг другу, взаимодействуют, причем электрон, попав в р-область р-п-перехода, занимает в валентной зоне место дырки. Энергия, высвобождаемая в результате рекомбинации, поглощается решеткой и контакт нагревается.

При обратном включении р-п-перехода электроны р-области переходят в п-область. Поскольку их энергия в этом случае должна быть больше, то дополнительную энергию электроны заимствуют у решетки, приводя к охлаждению контакта.

Таким образом, при прохождении электрического тока через р-п-переход из-за различия средней энергии электронов в областях п и р-типа проводимости осуществляется выделение или поглощение теплоты Пельтье (рис. 5.2).

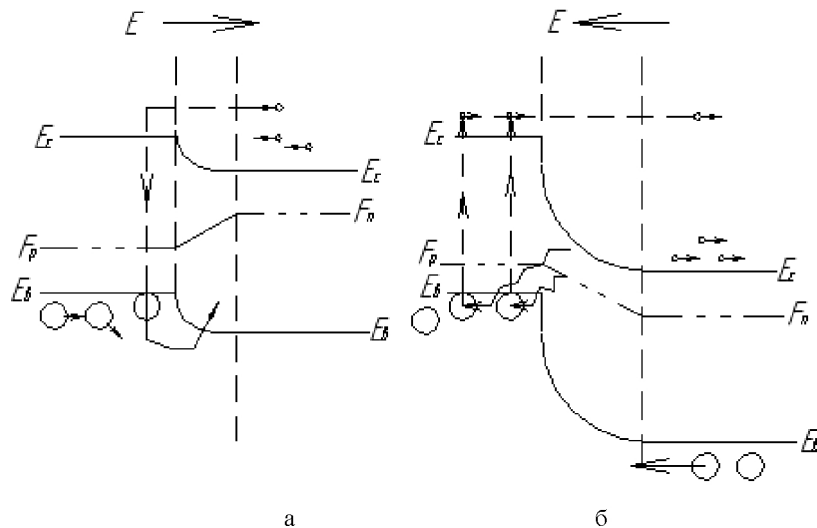


Рис. 5.2. Энергетическая диаграмма при нагреве (а) и охлаждении (б) области контакта двух полупроводников с различными типами проводимости

Эффект Пельтье получил практическое применение в различных охлаждающих устройствах: микрохолодильниках, термостатах, термо-электрических гигрометрах и др.

5.2. Эффект Томсона

При наличии продольного градиента температуры dT/dx и протекании электрического тока через однородный полупроводник происходит выделение теплоты, называемой теплотой Томсона. Согласно этим условиям выражение для расчета количества теплоты Томсона будет следующим:

$$G_{\tau} = \tau \cdot I \cdot t \frac{dT}{dx} = \tau \cdot e \frac{dT}{dx}, \quad (5.6)$$

где τ – коэффициент Томсона, зависящий от материала полупроводника.

Анализ (5.6) показывает, что эффект Томсона возникает при значительном увеличении тепловой скорости электронов, приобретаемой ими в области максимальной температуры. Для ее утилизации они вынуждены уходить в более холодную область полупроводника. В процессе уменьшения кинетической энергии скорость электронов становится меньше. Это сопровождается снижением амплитуды колебаний теплового движения электронов, позволяющим высокоэнергетичным электронам легко проникать в холодную область. Избыток энергии электронов в холодной области поглощается решеткой, т.е. происходит ее нагрев теплотой Томсона. При изменении направления тока происходит поглощение теплоты Томсона и кристалл охлаждается.

Поскольку основой эффекта Томсона служат особенности теплового движения электронов, то коэффициент Томсона имеет связь с коэффициентом термоЭДС, определяемую выражением вида

$$\tau = T \frac{d\alpha}{dT}, \quad (5.7)$$

где $d\alpha$ – изменение коэффициента термоЭДС при изменении температуры на dT , T – средняя температура полупроводника.

5.3. Эффект Зеебека

Возникновение этого эффекта определяется наличием градиента температур в контактах: металл-полупроводник; полупроводников с разным типом проводимости или с разной шириной запрещенной зоны

(гетеропереходы). Пусть в стержне невырожденного полупроводника контакты имеют разную температуру, причем $T_2 > T_1$ (рис. 5.3).

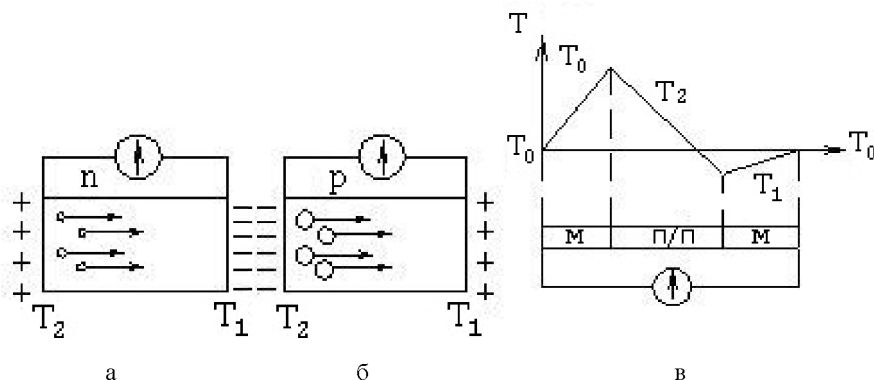


Рис. 5.3. Схема передвижения свободных носителей заряда в области градиента температур: а – полупроводник n-типа проводимости; б – акцепторный полупроводник; в – схема распределения температур в полупроводнике

В полупроводнике при наличии градиента температуры действуют два механизма движения свободных электронов:

1. В нагретой области происходят увеличение концентрации и энергии свободных электронов, поэтому для его ослабления они, не прекращая теплового движения, начнут перемещаться в холодную область полупроводника.

2. В области температур, значительно меньше комнатной, к этому механизму добавляется процесс увлечения свободных электронов фононами, амплитуда которых в направлении от горячего конца к холодному уменьшается, т.к. их концентрация в этом случае достаточно значительна, то пренебрегать влиянием фононов на характер движения электронов уже нельзя.

Диффузионное перемещение электронов приводит к образованию разности потенциалов, называемую термоэлектрической силой или термоЭДС. В условиях термодинамического равновесия термоЭДС формирует поток электронов равный, но противоположно направленный потоку диффузионных электронов. При одинаковой температуре металла и полупроводника их контактные разности потенциалов в области контакта будут равны по величине и направлены в противоположные стороны. Если же выполняется неравенство $T_2 > T_1$, то возникает контактная разность потенциалов $\Delta\phi_k$, дающая свой вклад в термоЭДС полупроводника.

Таким образом, возникновение термоЭДС ξ обусловлено двумя механизмами: объемной диффузией носителей заряда от горячего конца к холодному и контактной, возникающей из-за температурной зависимости контактной разности потенциалов:

$$\xi = \left(\frac{\partial \varphi_{\kappa}}{\partial T} + \frac{\partial \varphi_{об}}{\partial T} \right),$$

$$\Delta T = \xi_{\kappa} + \xi_{об}. \quad (5.8)$$

При объемной диффузии наличие градиента температуры, концентрации свободных носителей заряда и теплового движения вызывают одностороннюю диффузию потока электронов от горячего конца полупроводника к холодному. Тогда, если принять, что коэффициент диффузии D_n в процессе перемещения электронов имеет постоянную величину, то можно записать равенство вида:

$$P_n = D_n \frac{dn}{dx}. \quad (5.9)$$

Однако при постоянной концентрации свободных носителей и изменении температуры коэффициент диффузии уже не является постоянной величиной, поэтому для этого случая необходимо привести выражение

$$P_D = n \frac{dD_n}{dx}. \quad (5.10)$$

Коэффициент диффузии электронов D_n зависит также и от средней кинетической энергии T_e , являющейся функцией механизмов рассеяния носителей заряда и температуры:

$$D_n = C T_e^{r+\frac{1}{2}}, \quad T_e = (r+2)kT, \quad (5.11)$$

где r — коэффициент, определяемый типом рассеяния; k — постоянная Больцмана; C — коэффициент пропорциональности.

В случае динамического равновесия свободных носителей заряда, например электронов, и температурозависимости параметров D_n и n , в изолированном полупроводнике справедливо равенство

$$D_n \frac{dn}{dx} + n \frac{dD_n}{dx} = E \mu_n n, \quad (5.12)$$

где μ_n — подвижность электронов, E_0 — напряженность электрического поля, создаваемого термоЭДС

Пусть выполняются равенства $D_n = \text{const}$, $n = f(T)$, тогда (5.12) можно записать в следующем виде:

$$D_n \frac{dn}{dx} = D_n \frac{\delta n}{\delta T} \frac{\delta T}{\delta x} = E \mu_n n. \quad (5.13)$$

Величину подвижности свободных электронов в условиях равновесия можно определить из уравнения Эйнштейна:

$$\frac{D}{\mu} = \frac{kT}{e}. \quad (5.14)$$

Решая совместно (5.13) и (5.14), получим выражение для коэффициента термоЭДС:

$$\alpha_n = \frac{Edx}{dT} = \frac{k}{e} T \frac{\delta \ln n}{\delta T}. \quad (5.15)$$

При постоянной концентрации свободных электронов и температурозависимом коэффициенте диффузии уравнение (5.12) упрощается до вида

$$n \frac{dD_n}{dx} = n \frac{\delta D_n \delta T_e}{\delta T_e dx} = E \mu_n n. \quad (5.16)$$

Для определения численного значения коэффициента термоЭДС необходимо (5.11) подставить в (5.16), тогда получим выражение вида

$$\alpha_D = \frac{Edx}{dT} = \frac{k}{e} \left(r + \frac{1}{2} \right). \quad (5.17)$$

Коэффициенты α_n и α_D позволяют определить конкретные величины объемной термоЭДС (ξ_{06}).

Температурная зависимость работы выхода электрона в металле значительно меньше, чем в полупроводнике, поэтому изменение величины контактной термоЭДС (φ_k) полностью определяется работой выхода электрона в полупроводнике. Это позволяет записать равенство

$$\varphi_k = \frac{A_m - A_n}{e} = \frac{F_m - F_n}{e}. \quad (5.18)$$

Выражение для определения коэффициента контактной термоЭДС можно получить путем дифференцирования (5.18) по температуре:

$$\alpha_k = \frac{\delta \varphi_k}{\delta T} = -\frac{1}{e} \frac{\delta F_n}{\delta T}. \quad (5.19)$$

Для невырожденных полупроводников при $kT \gg \Delta E_d$, где ΔE_d – диапазон энергий примесных атомов донорного типа, уровень Ферми определяется выражением

$$F_n = kT \ln \frac{n}{N_c}, \quad (5.20)$$

где эффективная плотность квантовых состояний в невырожденных полупроводниках может быть найдена из выражения

$$N_c = 2 \frac{(2\pi m_n^*)^{\frac{3}{2}}}{h^2}. \quad (5.21)$$

Подставив (5.20) в (5.19), получим выражение для расчета контактной термоЭДС:

$$\alpha_k = -\frac{k}{e} \left(-\frac{3}{2} + \frac{F_n}{kT} + T \frac{\delta \ln n}{\delta T} \right). \quad (5.22)$$

В режиме $n \gg p$ и $kT \gg \Delta E_d$ суммарный коэффициент термоЭДС электронного полупроводника можно описать равенством

$$\alpha_1 = \alpha_n + \alpha_D + \alpha_k = \frac{k}{e \left(2 + r + \frac{\ln N_c}{n} \right)}. \quad (5.23)$$

Проводя аналогичные рассуждения для полупроводника дырочной проводимости (см. рис. 5.3, б) при условии $p \gg n$, $kT \gg \Delta E_a$ и учете только диффузионного механизма, получим выражение для коэффициента термоЭДС:

$$\alpha_2 = \alpha_p + \alpha_D + \alpha_k = \frac{k}{e \left(2 + r + \frac{\ln N_v}{p} \right)}. \quad (5.24)$$

Анализ (5.23) и (5.24) показывает, что в примесных полупроводниках коэффициент термоЭДС α слабо зависит от температуры, т.к. он пропорционален $\ln(T)^{3/2}$ и обратно пропорционален логарифму концентрации носителей.

В области полной ионизации атомов примеси, наблюдаемой при высоких температурах, выражения для α_1 и α_2 можно записать в следующем виде:

$$\alpha_1 = \frac{k}{e \left(2 + r + \frac{\ln N_c}{N_d} \right)}. \quad (5.25)$$

$$\alpha_2 = \frac{k}{e \left(2 + r + \frac{\ln N_v}{N_a} \right)}. \quad (5.26)$$

Таким образом, из равенств (5.25) и (5.26) следует, что в примесных полупроводниках с увеличением температуры при условии неполной ионизации атомов примеси происходит рост величин α_1 , α_2 и их уменьшение с увеличением концентрации примеси донорного или акцепторного типов. Для нахождения численного значения коэффициента α в режиме перехода от истощения примеси к собственной проводимости необходимо учитывать носители обоих знаков. В этом случае выражения (5.23) и (5.24), записанные для примесных полупроводников, можно обобщить на случай собственной проводимости, используя выражение

$$\alpha = \frac{\alpha_2 \mu_p p - \alpha_1 \mu_n n}{\mu_p p + \mu_n n}. \quad (5.27)$$

В собственных полупроводниках электрический ток формируется электронами и дырками, поэтому их термоЭДС значительно ниже, чем в примесных полупроводниках, что следует из (5.27). Это означает, что в процессе истощения примеси и перехода к собственной проводимости численная величина α уменьшается.

Уровень Ферми в собственных полупроводниках располагается в области середины запрещенной зоны. При изменении температуры это приводит к равному изменению концентраций электронов и дырок ($n = p$). Поэтому уровень Ферми также не изменяет своего положения

в запрещенной зоне, если выполняется равенство $m_n^* = m_p^*$. Из этих условий следует, что в объеме собственного полупроводника контактную термоЭДС α_k можно принять равной нулю.

Характер изменения термоЭДС определяется изменением температуры, т.е. при уменьшении температуры полупроводника она растет, а при увеличении уменьшается, стремясь к нулю. В первом случае рост термоЭДС обусловлен механизмом увлечения свободных электронов фононами, а во втором – исчезновением эффекта увлечения электронов фононами из-за рассеяния фононов на фононах.

Из (5.24) следует, что в полупроводниках р-типа проводимости при температурах меньше температуры истощения примесных атомов (T_1) выполняется неравенство $p \gg n$. Возникновение термоЭДС в этом случае обусловлено только концентрацией дырок. Повышение температуры от T_1 до T_2 приводит к медленному увеличению термоЭДС вследствие увеличения концентрации собственных носителей заряда в полупроводнике. При дальнейшем увеличении температуры до T_3 происходит изменение типа проводимости и согласно (5.27) термоЭДС изменяет знак. Увеличение температуры до T_4 не приводит к изменению отрицательного знака, т.к. преобладает электронная составляющая проводимости полупроводника. С ростом температуры от T_4 до T_5 термоЭДС вновь уменьшается.

В большинстве практических случаев для определения термоЭДС можно использовать следующие свойства полупроводника:

1) в небольшом диапазоне температур величину термоЭДС ξ можно считать пропорциональной разности температур ΔT и описывать равенством

$$\xi = \Delta T ; \quad (5.28)$$

2) если термоэлектрическая цепь составлена из последовательно соединенных полупроводников п- и р-типа проводимостей, то термоЭДС отдельных элементов складываются:

$$\xi_{12} = (\alpha_1 + \alpha_2) \Delta T = \alpha_{12} \Delta T , \quad (5.29)$$

где α_{12} – коэффициент дифференциальной термоЭДС, характеризующий пару полупроводников.

Таким образом, коэффициент α_{12} зависит от материала ветвей термопары и от интервала температур, в котором используется термопара.

Структура кристаллической решетки металлов состоит из ионизованных матричных атомов, т.е. концентрация электронов не изменяется при изменении температуры. Из этого следует и слабая зависимость от температуры контактной разности потенциалов и термоЭДС. Поэтому термоЭДС металлов практически не превышает нескольких микровольт на градус.

В кристаллической решетке полупроводников атомы не полностью ионизованы и при наличии запрещенной зоны наблюдается значительная зависимость от температуры: кинетической энергии, концентрации свободных носителей заряда, контактного потенциала и связанного с ним уровня Ферми.

Это приводит к увеличению термоЭДС до сотен микровольта на градус. В случае контакта металл-полупроводник электрическое поле проникает в полупроводник на значительную глубину, поэтому термоЭДС возникает исключительно в его объеме. Поскольку проникновением поля в металл можно пренебречь, то по знаку термоЭДС определяют тип проводимости кристалла. Например, полупроводник обладает n-типа проводимостью, если на холодном конце термопары имеется отрицательный заряд и, наоборот, p-типа проводимостью при наличии на этом электроде положительного заряда. При слабых токах все три термоэлектрических явления считаются обратимыми, т.е. при стационарном тепловом режиме изменяют знак с изменением разности температур и направления тока. Тогда, используя закон сохранения энергии и разность температур между контактами dT , можно записать равенство, связывающее коэффициенты α , Π , τ в замкнутой цепи из двух материалов:

$$\frac{\delta \Pi_{12}}{\delta T} dT dI + (\tau_1 - \tau_2) dT dI = \alpha_{12} dT dI . \quad (5.30)$$

Если использовать контакт двух полупроводников, то выражение (5.30) можно переписать в следующем виде:

$$\frac{\delta \Pi_{12}}{\delta T} + (\tau_1 - \tau_2) = \alpha_{12} .$$

Таким образом, это равенство аналитически объединяет в общую группу термоэлектрические эффекты.

6. МЕТОДЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ЭФФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

При протекании электрического тока через полупроводниковый прибор происходит неоднородный нагрев подложки, т.е. в кристалле возникает градиент температуры. Оба явления порождают в приборе термоэлектрические эффекты, способные изменить его электрические параметры. В полупроводниковой электронике наиболее широко распространены экспериментально установленные термоэлектрические эффекты Зеебека, Пельтье и Томсона.

6.1. Определение эффекта Зеебека

В простейшем случае эффект Зеебека возникает в контактной паре металл – полупроводник, формируя в его объеме термоЭДС. Металл, в этом случае используют в качестве термозонда, заостренный конец которого взаимодействует с поверхностью полупроводника, образуя точечный контакт (рис. 6.1).

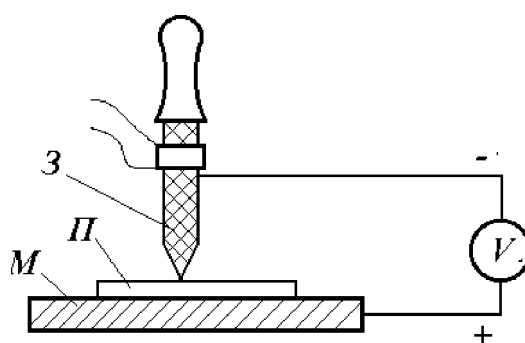


Рис. 6.1. Схема установки для определения термоЭДС полупроводника:
М – основание; V – гальванометр; П – подложка; З – термозонд

Термозонд нагревает точечную поверхность полупроводника до температуры 353-373 К. Исследуемая подложка П располагается на подставке М и между ними образуется электрический контакт. В электрическую цепь термозонда и основания включен гальванометр (микровольтметр) с чувствительностью не ниже $2 \cdot 10^{-6}$ В/дел. В большинстве практических случаев термозонд соединяют с плюсом микровольтметра, а основание – с его минусом. При взаимодействии

горячего термозонда с поверхностью полупроводника n-типа проводимости электроны, являясь основными носителями заряда, приобретают избыточную энергию, которая преобразуется в избыточную скорость. Это вынуждает электроны покидать нагретую зону и уходить в холодную область образца, которой они и отдают избыток энергии. В нагретой зоне остаются некомпенсированные положительные ионы примесных атомов донорного типа, образуя положительный заряд. В холодной области полупроводника, куда пришли «горячие» электроны, образуется их избыток, т.е. отрицательный заряд. Таким образом, в цепи термозонд – подложка возникает термоЭДС.

При использовании подложек дырочной проводимости избыточная энергия электронов не позволяет им оставаться в валентной зоне и они устремляются в запрещенную зону на энергетические уровни атомов акцепторного типа, взаимодействуют с ними, образуя отрицательно заряженные ионы, т.е. термозонд приобретает отрицательный заряд. Уход электронов горячей области в запрещенную зону и их захват акцепторными атомами образует по отношению к электронам холодной области градиент электронов. Стремясь устранить возникший градиент, электроны холодной области полупроводника устремляются в горячую зону, образуя отрицательный заряд в горячей области.

Следует отметить, что кроме зависимости знака термоЭДС от концентрации электронов в горячей области полупроводника существует и его зависимость от величин давления термозонда на исследуемую поверхность и температуры. Например, при малых значениях этих величин в области контакта возникает инверсный слой, т.е. в полупроводнике n-типа проводимости возникает слой проводимости p-типа. Для устранения возможности возникновения инверсного слоя необходимо с достаточно большим усилием прижимать горячий зонд к поверхности исследуемого образца и зонд должен иметь температуру более 373 К. Эффект Зеебека способен регистрировать размеры n- и p-областей p-n перехода. Для этого в полупроводниковой пластине формируют косой шлиф под углом 7° (рис. 6.2).

Это позволяет значительно увеличить площадь исследуемой поверхности и использовать для определения размеров n- и p-областей зондовые методы. Для этого, перемещая микровинтом 4 измерительный зонд 3 по n- и p-областям, определяем с точностью до нескольких десятков микрон размеры n- и p-областей p-n перехода 2.

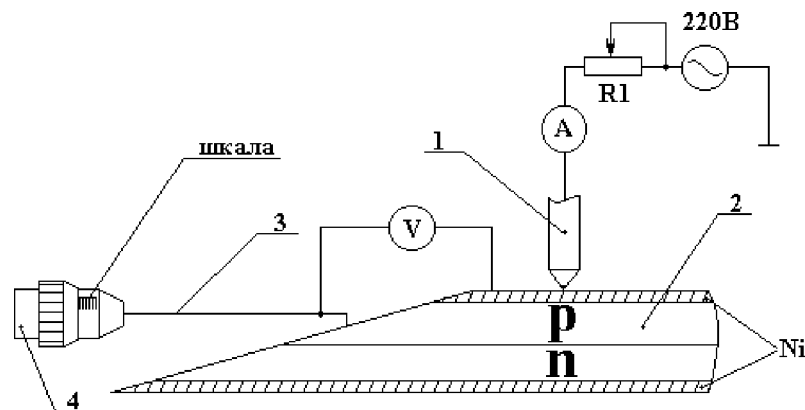


Рис. 6.2. Схема измерения размеров p- и n-областей p-n перехода:
V – микровольтметр; A – амперметр; R1 – резистор,
регулирующий температуру термозонда

При условии незначительного изменения диапазона температур коэффициент термоЭДС термопары можно достаточно точно определить, используя равенство

$$\alpha_{12} = \frac{\xi_{12}}{\Delta E}, \quad (6.1)$$

где ξ_{12} – термоЭДС, ΔT – разность температур между горячим спаем термопары и ее холодными концами.

Экспериментальное определение разности температур между спаем и холодными концами ветвей термопары ΔT основано на использовании контрольной термопары, а термоЭДС – потенциометра (рис. 6.3).

Конструкция установки для экспериментального определения величин ΔT и ξ_{12} содержит полупроводниковые образцы 1 и 2 p- и n-типа проводимостей соответственно. Образцы образуют с медными пластинами 3-й и 4-й спаи. Другими концами полупроводниковые образцы образуют тепловой контакт с горячей областью измерительного термоэлемента (ИДТЭ) и нагревателя 5.

Медные пластины для охлаждения погружаются в сосуд с водой 8. Холодный спай измерительного термоэлемента посредством медных пластин находится в тепловом контакте с холодными концами исследуемой термопары.

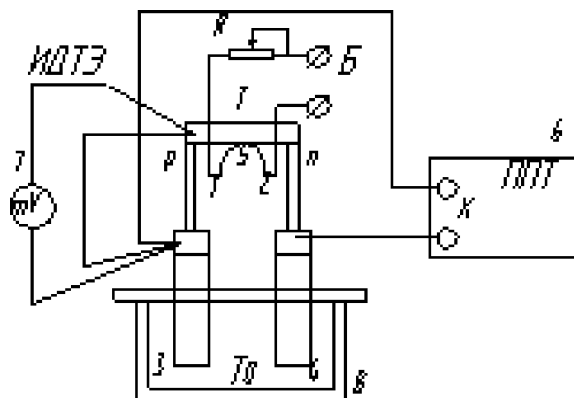


Рис. 6.3. Схема установки для измерения коэффициента термоЭДС термопары: 1,2 – ветви термопары из полупроводниковых пластин p- и n-типов проводимости, соответственно; 3,4 – медные пластины; 5 – нагреватель на графитовом стержне (создает температуру T спаев 1,2); Б – источник тока (5-10 В); R – переменный резистор (30 Ом); 6 – потенциометр; 7 – милливольтметр ИДТЭ; 8 – сосуд с водой при постоянной температуре T_0

Разность температур ΔT между спаем и холодными концами ветвей термопары 1, 2 создают включением нагревателя 5. После установления равновесного состояния в системе измеряют ее ИДТЭ, а возникающую при этом термоЭДС исследуемой термопары определяют потенциометром. Изменением величины тока через нагреватель создают различные значения ΔT и соответствующие им термоЭДС. При этом каждое вычисленное значение α_{12} будет соответствовать среднему значению температуры горячего и холодного концов исследуемой термопары. Таким образом, если к измеренной разности температур ΔT прибавить температуру воды в сосуде T_0 , то можно определить и температуру нагреваемого спаев.

6.2. Определение количества теплоты Пельтье

В опытах по исследованию теплоты Пельтье сила тока подбирается такой, чтобы теплота Джоуля была сравнима или больше теплоты Пельтье. Разделение эффектов производится путем измерения количества теплоты, выделяющейся в спаях, при двух противоположных направлениях тока, т.к. теплота Джоуля пропорциональна квадрату силы тока, а теплота Пельтье пропорциональна силе тока. В этом случае, если теплообменом с окружающей средой пренебречь ($Q_0=0$), то при пропускании тока I через спай в прямом направлении (теплота Пельтье

выделяется) общее количество теплоты, выделенное за единицу времени, можно описать равенством

$$\frac{Q_1}{t} = \frac{1}{2} Q_{\text{Дж}} + Q_{\text{П}}. \quad (6.2)$$

При пропускании через спай той же величины тока в обратном направлении (теплота Пельтье поглощается) общее количество теплоты, выделяемое в спае за единицу времени, определяется уже выражением

$$\frac{Q_2}{t} = \frac{1}{2} Q_{\text{Дж}} - Q_{\text{П}}. \quad (6.3)$$

Решая совместно (6.2) и (6.3), можно найти теплоту Пельтье:

$$Q_{\text{П}} = \frac{Q_1 - Q_2}{2t}. \quad (6.4)$$

Выполняя аналогичную операцию с выражениями (5.2) и (6.4), получим равенство, с помощью которого можно определить численное значение коэффициента Пельтье:

$$\Pi_{12} = \frac{Q_1 - Q_2}{2It} = \frac{1}{2I} \left(\frac{Q_1}{t} - \frac{Q_2}{t} \right). \quad (6.5)$$

Таким образом, коэффициент Π_{12} определяют путем вычисления количества теплоты, выделяемой в спае за единицу времени при фиксированном значении тока, протекающего через термопару в прямом (Q_1/t) и в обратном (Q_2/t) направлениях.

При экспериментальном определении величины Π_{12} используется та же термопара, что и при определении коэффициента термоЭДС (рис. 6.4).

Медные пластины 3 и 4 тепловым и электрическим контактами соединяются с ветвями исследуемой термопары 1 и 2. Через электрический контакт спая пропускается ток, величина и направление которого регулируются переменным резистором R и переключателем П соответственно.

При прохождении через термопару электрического тока в области теплового контакта выделяется тепло Джоуля-Ленца. При установлении равновесного состояния в спае устанавливается температура T и возникает градиент температуры, формирующий поток теплоты от нагретого спая к медным пластинам 3 и 4, находящимся при температуре T_0 .

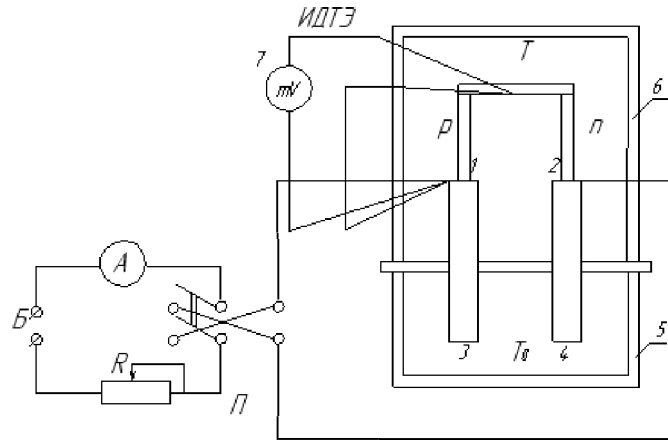


Рис. 6.4. Схема установки для измерения коэффициентов Пельтье термопары: Б – источник постоянного тока, регулируемого в диапазоне 6-12 В; А – амперметр; R – переменный резистор (30 Ом); П – переключатель направления тока; mV – милливольтметр; ИДТЭ – измерительный дифференциальный термоэлемент (медь-константан или хромель-копель); 1-2 – исследуемая термопара; 3-4 – медные пластинки; 5 – сосуд с водой; 6 – сосуд для закрытия термопары (термоизоляция)

В условиях равновесного состояния и действия только механизма теплопроводности через ветви термопары передается постоянный тепловой поток в единицу времени при сохранении направления протекания электрического тока. Однако если направление тока изменяется, то в спае выделяется уже неодинаковое количество теплоты, что хорошо видно из выражений:

при пропускании тока в прямом направлении

$$\frac{Q_1}{t} = \left(\chi_1 \frac{S_1}{l_1} + \chi_2 \frac{S_2}{l_2} \right) \cdot \Delta T_1, \quad (6.6)$$

при пропускании тока в обратном направлении

$$\frac{Q_2}{t} = \left(\chi_1 \frac{S_1}{l_1} + \chi_2 \frac{S_2}{l_2} \right) \cdot \Delta T_2. \quad (6.7)$$

Постоянное значение теплового потока фиксируют по моменту установления постоянного значения разности температур ΔT между спаем холодными концами, что фиксируется по милливольтметру 7. Вы-

ражения (6.6), (6.7) и (6.5) позволяют определить коэффициент Пельтье:

$$P_{12} = \frac{\left(\chi_1 \frac{S_1}{l_1} + \chi_2 \frac{S_2}{l_2} \right) \cdot (\Delta T_1 - \Delta T_2)}{2I} . \quad (6.8)$$

Из (6.8) следует, что величина коэффициента P_{12} формируется постоянным током и установившейся разностью температур ΔT_1 при прохождении тока в прямом направлении и ΔT_2 – в обратном. Величины χ , S , l для исследуемой термопары приведены в справочниках или в техническом описании устройства.

6.3. Определение эффекта Томсона

Для проверки соотношения Томсона находят коэффициент Пельтье, используя первое и второе начала термодинамики:

$$P = \alpha_1 T . \quad (6.9)$$

Подставляя в (5.25) значения α_1 , найденные в (5.3), получим равенство

$$P = \frac{kT}{e \left(2 + r + \frac{\ln N_c}{n} \right)} . \quad (6.10)$$

После этого, используя результаты, полученные в (6.2) определяют для одной и той же температуры спая T значения α_{12} и P . При сравнении полученных коэффициентов Пельтье должны получиться одинаковые значения, что свидетельствует о достоверности равенства (6.9).

6.4. Определение температурной зависимости термоЭДС

Исследование температурной зависимости коэффициента термоЭДС полупроводника осуществляется с помощью установки, схема которой представлена на рис. 6.5.

Для создания вдоль образца перепада температур в 10–20 К в сквозное отверстие верхнего металлического диска 1 помещается нагреватель 3 . Измерение температуры холодного и горячего торцов образца 2 осуществляют термопары 4 и 5 . Температура холодных концов термопар термостатируется путем помещения в сосуд с маслом 7 с контролируемой температурой.

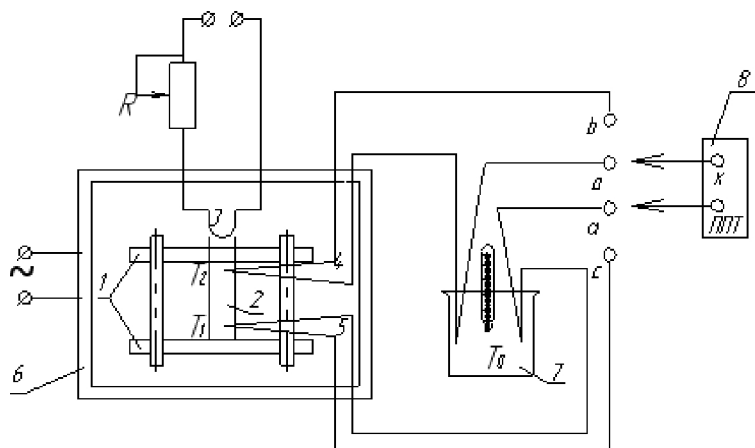


Рис.6.5. Схема установки для изучения зависимости термоЭДС от температуры:
 1 – металлические диски; 2 – полупроводниковый образец; 3 – нагреватель;
 4-5 – измерительные термопары; 6 – термостат; 7 – сосуд с маслом;
 8 – потенциометр

Для измерения термоЭДС используют выводы b и c измерительных термопар. Установка помещается в термостат 6, что исключает влияние на измерение термоЭДС внешней среды. Выводы термопар (a,b), (c,d), (b,c) с учетом полярности термоЭДС поочередно подключаются к зажимам потенциометра 8. Измерение зависимости $\alpha = f(T)$ проводят путем измерения α при комнатной температуре и только после этого включают нагреватель. Нагрев образца осуществляют до установления равновесного состояния и, убедившись в выполнении равенства $T = \text{const}$, измеряют э. д. с. нижней термопары 5 (выводы c, d), э. д. с. верхней термопары 4 (выводы a, b) и термоЭДС образца 2 (выводы b, c). Температуру спаев T_1 и T_2 находят с учетом поправки на температуру холодного спая термопары T_0 . Определив $\Delta T = T_2 - T_1$ и коэффициент термоЭДС можно, используя (6.1), рассчитать численное значение α , соответствующее среднему значению температуры горячего и холодного концов образца в интервале температур ΔT . Изменяя температуру в термостате 6 при фиксированном режиме нагревателя 3, находят значение α при температурах 313, 333, 353, 373K.

7. КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

В квантовой электронике носителями информации являются свободный пробег электрона в твердом теле, его параметры в структурах различного типа и вероятность заполнения или ионизации валентных электронов атомов кристалла.

7.1. Эффект кулоновской блокады в наноразмерных телах

Теория одноэлектронного туннелирования впервые открыта русским ученым К.К. Лихаревым, рассмотревшего этот эффект на примере туннелирования одного электрона между двумя металлическими контактами. Обозначим емкость такой системы, являющуюся по сути конденсатором, через C . Тогда ее энергию можно описать равенством

$$E = \frac{Q^2}{2C}, \quad (7.1)$$

где Q – заряд на обкладках конденсатора.

Заряд электрона является дискретной величиной, минимальное изменение энергии которого составляет

$$\Delta E = \frac{e^2}{2C}, \quad (7.2)$$

где e – элементарный заряд электрона.

Для рассмотрения эффекта блокады электрона необходимо, чтобы минимальное изменение энергии ΔE было больше температурных флуктуаций, то есть должно выполняться неравенство

$$\Delta E \gg kT, \quad (7.3)$$

где k – постоянная Больцмана; T – температура.

Кроме того, необходимо, чтобы данные изменения превышали и квантовые флуктуации, т.е. необходимо выполнение неравенства

$$\Delta E \gg \frac{hG}{C}, \quad (7.4)$$

где $G = \max(G_s, G_i)$, G_i – проводимость перехода, G_s – проводимость, шунтирующая туннельный переход. Исходя из (7.4), определим G в виде неравенства

$$G \gg R_Q^{-1}, \quad (7.5)$$

где $R_Q = \frac{h}{4e^2} \approx 6,45 \text{ кОм}$ – квантовое сопротивление.

Важнейшим условием одноэлектронного туннелирования является отличие от нуля начального заряда на туннельном переходе Q_o , который может принимать значения не кратные целому числу электронов. Это объясняется тем, что начальный заряд может создаваться поляризацией близлежащих электродов, заряженных примесей и т.д. и, следовательно, может иметь любое значение. Тогда в уравнении (7.1) величина заряда на обкладках конденсатора равна $Q = Q_o - 1$. Таким образом, если Q лежит в пределах от $-e/2$ до $+e/2$, то согласно (7.1) добавление или вычитание целого числа электронов будет увеличивать энергию, что энергетически невозможно.

Данный вывод иллюстрируется рис.7.1, из которого видно, что если заряд хотя бы немного меньше значения $e/2$, то добавление или вычитание одного электрона (штрихпунктирные стрелки) приводит к увеличению общей энергии. Если заряд превышает значение $e/2$, то выгодным становится туннелирование электрона через диэлектрик. Так как напряжение на конденсаторе $V = Q/C$, то при напряжениях от $-e/2$ до $+e/2$ ток через туннельный переход протекать не должен.

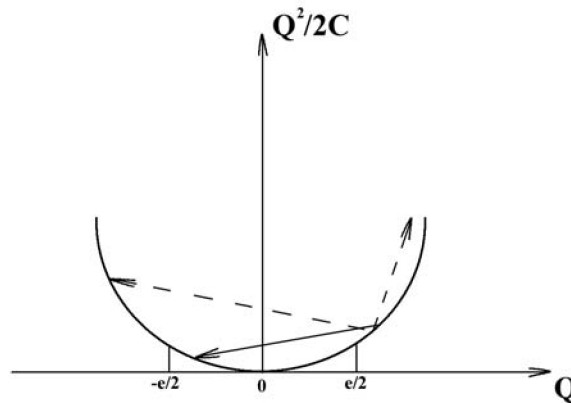


Рис.7.1. Зависимость зарядовой энергии перехода от заряда (стрелками показано добавление или вычитание) одного электрона

Другими словами, для того чтобы обеспечить туннелирование через переход, необходимо преодолеть силу кулоновского отталкивания электронов. Данный эффект отсутствия тока при приложении напряжения в указанных пределах назван эффектом кулоновской блокады.

Таким образом, кулоновская блокада – явление отсутствия тока при приложении напряжения к туннельному переходу из-за невозможности туннелирования электронов вследствие их кулоновского отталкивания.

Напряжение, которое необходимо приложить к переходу для преодоления кулоновской блокады:

$$V_{кб} = \frac{e}{2C}. \quad (7.6)$$

Это напряжение называют напряжением отсечки, при котором электрон уже не может преодолеть кулоновскую блокаду.

7.1.1. Протекание тока через туннельный переход

Электрический ток является непрерывной величиной, поэтому заряд на одной стороне перехода накапливается постепенно. При достижении его величины до $e/2$ происходит туннелирование одного электрона через переход и процесс повторяется. Это аналогично падению капели жидкости из неплотно закрытого крана: по достижению некоторой критической массы капля отрывается от крана и начинается образование новой. Заряд одного электрона e накапливается при токе I за время t , то есть $e = I \cdot t$, затем электрон туннелирует через переход. Нетрудно видеть, что процесс повторяется с частотой

$$f = \frac{I}{e}, \quad (7.7)$$

где I – ток через туннельный переход.

Таким образом, кулоновская блокада может существовать только при выполнении условий (7.3) и (7.5).

7.1.2. Эквивалентные схемы практической реализации эффекта кулоновской блокады

Рассмотрим эквивалентную схему с одним туннельным переходом (рис. 7.2).

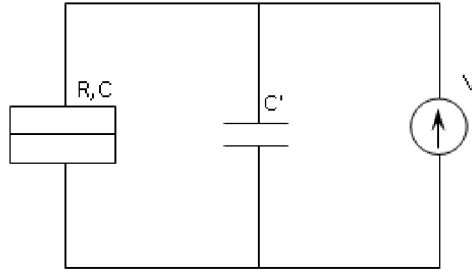


Рис.7.2. Эквивалентная схема эффекта кулоновской блокады с одним туннельным переходом

Переход характеризуется сопротивлением R и емкостями C , C' и напряжением V , где C' – емкость проводящих контактов. Используя (7.2) и (7.3), определим емкость, необходимую для наблюдения кулоновской блокады при данной температуре:

$$C \ll \frac{e^2}{2kT} . \quad (7.8)$$

Анализ эквивалентной схемы показывает, что если выполняется неравенство $C' > C$, то емкость системы будет определяться C' . Для определения их соотношения подставим в (7.7) численные значения e и k . Тогда при $T=4,2\text{K}$ одноэлектронное туннелирование возникает при емкости менее $2 \cdot 10^{-16} \text{ Ф}$, а при $T=77\text{K}$ и $T=300\text{K}$ соответственно много меньше 10^{-17} и 10^{-8} .

Таким образом, для работы приборов при высоких температурах (выше 77K) необходима емкость $10^{-18} - 10^{-19} \text{ Ф}$. В реальных системах не удастся получить емкость менее 10^{-15} Ф , что на два порядка больше требуемой величины даже для наблюдения одноэлектронного туннелирования при 4K .

Таким образом, наблюдение одноэлектронного туннелирования в системе с одним переходом является существенной проблемой. Для ее решения необходима схема из двух включенных последовательно туннельных переходов (рис.7.3).

Емкость контактов в этом случае уже не шунтирует емкость каждого перехода. Выражение для общей электростатической энергии такой системы можно представить в виде равенства

$$E = \frac{Q_1^2}{2C_1} + \frac{Q_2^2}{2C_2}, \quad (7.9)$$

где индексы соответствуют номерам туннельных переходов. Физически это означает конструкцию, представляющую собой малую проводящую частицу, отделенную туннельными переходами от контактов, поэтому справедливо равенство

$$Q_1 = Q_2 = Q,$$

где Q – заряд, находящийся на частице.

Тогда (7.9) необходимо переписать в следующем виде:

$$E = \frac{Q^2}{2C_\Sigma}, \quad (7.10)$$

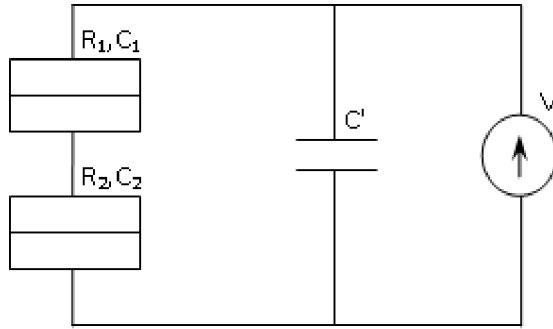


Рис.7.3. Эквивалентная схема с двумя туннельными переходами

Выражение (7.10) аналогично (7.1) за исключением того, что вместо емкости C в равенстве (7.10) присутствует суммарная емкость двух переходов C_Σ , так как C_1 и C_2 включены параллельно, если смотреть с частицы. Таким образом, справедливыми остаются и формулы (7.2), 7.4) и (7.8) при замене в них C на C_Σ . В равенствах (7.3) и (7.4) необходимо G заменить на $\max(Q_1, Q_2)$. Характерная вольт-амперная характеристика двухпереходной системы с симметричными переходами представлена на рис 7.4.

Пунктирные линии на рис.7.4 соответствуют теоретическим расчетам для симметричного перехода с такими же емкостью и сопротивлением.

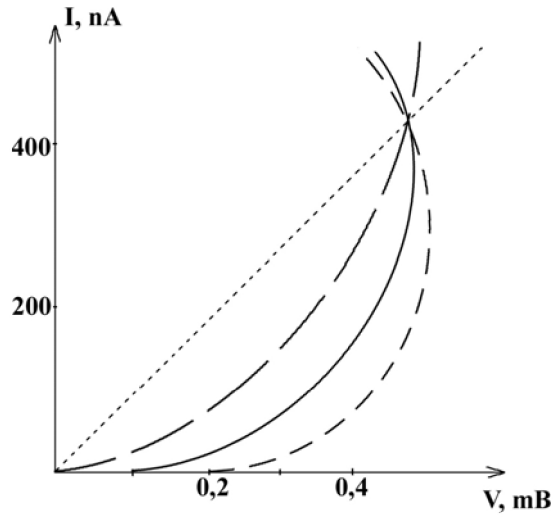


Рис. 7.4. ВАХ двойного перехода при токе 20 мкА и затворном напряжении, равном нулю (сплошная линия) и $e/2C$ (штриховая)

7.2. Кулоновская лестница

Рассмотрим двухпереходную систему с несимметричными туннельными переходами, в которой темп туннелирования через переход описывается равенством

$$\Gamma_1 = \frac{\delta E_1}{e^2 R_1}, \quad (7.11)$$

где $\delta E_1 = eV_1 - (e^2/2C_1)$ – есть изменение энергии на первом переходе при падении на нем напряжения $V_1 > V_{кб}$. Подставив δE_1 в (7.11), получим

$$\Gamma_1 = \frac{V_1}{eR_1} - \frac{1}{2R_1C_1}. \quad (7.12)$$

Аналогичное выражение можно записать и для Γ_2 . Из (7.12) видно, что при различии R и C переходов будут различаться и их темпы туннелирования. Если R и C перехода равны, то при увеличении напряжения на контактах будет плавно расти ток, так как количество

пришедших на кулоновский остров электронов будет равно количеству ушедших. При несимметричности переходов на островке будет существовать заряд из n электронов. При увеличении напряжения до значения, достаточного для забрасывания на островок $n+1$ -го электрона, вначале будет резко расти ток, что обусловлено переходом с высоким темпом туннелирования. Дальнейшее увеличение тока, обусловленное переходом с низким темпом туннелирования, будет медленным до тех пор, пока на островок не сможет попасть $n+2$ -й электрон.

Таким образом, хотя ток протекает через систему непрерывно, в каждый момент времени на островке будет существовать определенное количество электронов, зависящее от приложенного напряжения. В результате ВАХ двухполупериодной системы имеет ступенчатый вид, называемый кулоновской лестницей. Ступеньки кулоновской лестницы будут выражены тем ярче, чем будет больше несимметричность переходов. При симметричном расположении переходов, то есть при равенстве постоянных R и C , ступеньки исчезают. Семейство кулоновских лестниц для различных значений Q_0 представлено на рис. 7.5.

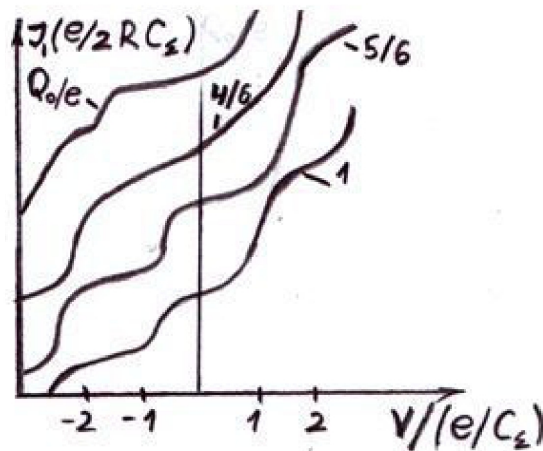


Рис. 7.5. Расчетная ВАХ схемы для различных значений $(Q_1 \ll Q_2)$ и $(C_1 = 2C_2)$

В равенстве (7.1) заряд на обкладках конденсатора можно представить равенством

$$Q = Q_0 - ne, \quad (7.13)$$

где n – целое число электронов на кулоновском острове.

Величина Q_o имеет поляризационную природу, поэтому, расположив рядом с кулоновским островом третий электрод, служащий затвором, можно управлять этим зарядом путем приложения затворного напряжения. Следует отметить, что этот заряд можно изменять непрерывно, пропорционально затворному напряжению. Таким образом, при непрерывном изменении Q_o наблюдается периодическое выполнение условий кулоновской блокады, показанной на рис. 7.1. Из этого следует, что при изменении затворного напряжения будет периодически возникать и кулоновская блокада, приводящая к осцилляционному характеру прохождения тока через квантовую точку (или напряжения на ней при постоянном токе).

7.3. C_o -туннелирование

В системах с несколькими переходами, кроме последовательных событий туннелирования, возможно также туннелирование более высокого порядка, называемое C_o – туннелированием, при котором сохраняется энергия лишь между начальным и конечным состояниями всего массива туннельных переходов. Другими словами, массив туннельных переходов является «черным ящиком», на входе и выходе которого энергия проходящего через него электрона сохраняется, однако поведение электрона на каждом отдельном переходе неопределенно. Кроме того, возможно также неупругое туннелирование, обусловленное генерацией и рекомбинацией электронно-дырочных пар.

7.4. Квантовые размерные эффекты

Рассмотренная выше теория является полуклассической, так как наряду с классическими кулоновскими эффектами присутствует и квантовое туннелирование. В одноэлектронных системах, связанных с пространственными ограничениями объектов, возможны и чисто квантовые эффекты. Например, при использовании двух- и более туннельных переходов между двумя электродами находятся малые объекты, которые при определенных геометрических размерах и температуре имеют энергетический спектр в виде набора дискретных уровней, формируемых квантовыми точками, то есть нуль-мерными объектами. Для зерна Al с характерными размерами 4,3 нм наблюдение квантово-размерных эффектов возможно только при температурах меньше 1,5 К, в то время как для полупроводниковых квантовых точек необходимая температура будет выше из-за более низкой плотности состояний. При наличии в зерне отдельных энергетических уровней электрон может

туннелировать только через них и на вольт-амперной характеристике, т.е. на кулоновской лестнице будет появляться структура энергетических уровней (рис. 7.6.). На рисунке отчетливо видна одна ступенька кулоновской лестницы при наличии квантовых размерных эффектов.

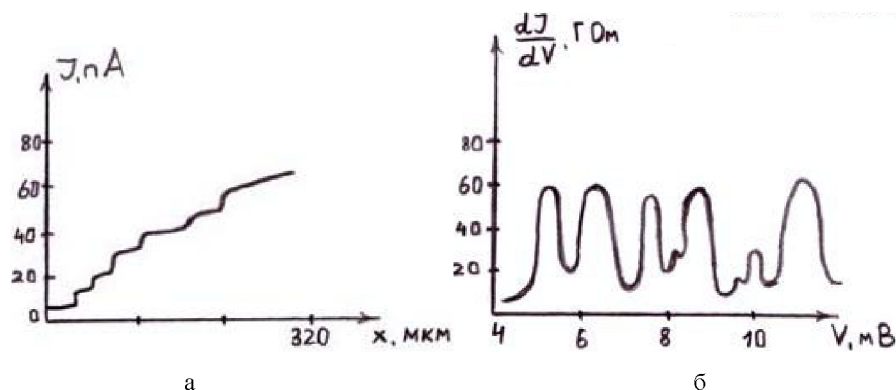


Рис. 7.6. ВАХ, снятая при 320 мкм (а), соответствующая началу кулоновской лестницы, характер изменения производной dI/dV (б)

7.5. Влияние внешних переменных полей на квантовые кулоновские точки

Воздействие внешних переменных полей на квантовую точку оказывает влияние на механизм одноэлектронного транспорта путем модуляции высоты ее потенциального барьера. Область кулоновской блокады в этом случае сдвигается из-за наличия межзонного возбуждения и появляется в результате резонансная структура кулоновских пиков. Электрон в этом случае туннелирует через барьер до того, как достигнет наименьшего значения. Фаза модулирующего сигнала, возникающего при туннелировании, определяется амплитудой сигнала, высотой и толщиной барьера, через который туннелирует электрон. Следует отметить, что модулирование потенциала цепочки металлических островков может происходить и при помощи поверхностной акустической волны, распространяющейся по пьезоэлектрической подложке. Теоретически через такую цепочку должен протекать постоянный ток $I = \pm ef$, где f – частота волны, а знак зависит как от величины постоянного смещения островков, так и от направления распространения волны.

Пусть имеется цепочка из восьми островков с емкостями $0,1\text{пФ}$ и сопротивлениями 170 кОм , модулируемая поверхностной акустической волной с частотой $f = 48\text{ МГц}$. При протекании постоянного тока через данную цепочку его величина значительно уменьшилась, что объясняется наличием в наблюдаемой цепочке неконтролируемых случайных фоновых зарядов.

7.6. Эффекты, связанные с кулоновской блокадой

Помимо собственно эффекта кулоновской блокады возникают побочные эффекты, способные изменить параметры самой блокады. Например, при использовании в качестве туннельных диэлектриков органических материалов кулоновский островок может изменять свое положение относительно электродов, т.е. кулоновский островок будет периодически менять положение относительно электродов, курсируя между ними наподобие челнока при передаче электронов. Это приводит к тому, что даже при равенстве толщин туннельных барьеров возникает кулоновская лестница. При образовании ограничивающего потенциала (областями обеднения и др.) всегда в режиме кулоновской блокады наблюдается изменение формы кулоновского островка. Это изменение должно оказывать влияние на величину емкости островка, однако в реальных системах никаких качественных изменений при этом не происходит. Теоретические исследования возможности одноэлектронного туннелирования в туннельных диодах показали, что свойства одноэлектронного туннельного диода будут существенно отличаться от свойств обычных туннельных диодов. Существенные отличия заключены в ступенчатом изменении тока насыщения с периодом $e/2C$.

7.7. Эффекты туннелирования через двухбарьерную структуру с квантовой ямой

При движении электрона в тонкопленочной структуре с толщиной отдельных слоев порядка десятков и единиц нанометров происходит проявление квантово-механических, т.е. волновых, свойств электрона. Причем эти свойства начинают проявляться уже при уменьшении толщины слоя до величины, сравнимой с длиной волны де Бройля электрона. Начиная с этого момента, в характеристике электрона, включая и его характеристики, при взаимодействии с внешней средой

главными становятся его волновые свойства. Для ясного представления рассматриваемого эффекта проведем оценку длины волны электрона для металла и полупроводника. При исследовании эффекта дифракции электронов в процессе прохождения их через твердое тело было обнаружено, что длина волны электрона λ обратно пропорциональна его скорости:

$$\lambda = \frac{h}{mv} . \quad (7.14)$$

Экспериментально определено, что коэффициент пропорциональности равен отношению h/m . Используя эту зависимость, можно записать равенство для квазиимпульса в виде

$$p = mv = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi h}{\lambda} , \quad (7.15)$$

где $2\pi/\lambda$ называется волновым числом или волновым вектором, которое, как и в классической механике, определяет направление движения электрона, описываемого равенством

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} \cong \frac{h}{mv} = \sqrt{\frac{15,4}{\frac{m_*}{m_o} E_{кин}}} \text{ (нм)}, \quad (7.16)$$

где m_* – эффективная масса электрона в твердом теле; m_o – масса электрона в вакууме; $E_{кин}$ – кинетическая энергия электрона, выраженная в электрон-вольтах.

Для полупроводников равенства $(m_*/m_o) = 10^{-1}$ и $E_{кин} = 0,025$ эВ при комнатной температуре могут быть использованы для большинства практических расчетов. Подставляя эти значения в (7.16), получим

$$\lambda_{270^{\circ}C} = 25 \text{ нм} = 250 \text{ \AA} = 25 \cdot 10^{-3} \text{ мкм}.$$

Для металлов кинетическая энергия определяется энергией Ферми $E_F = (1 \dots 10)$ эВ. Волна де Бройля электрона в металлах на порядок и более меньше, чем в полупроводниках. Поэтому в тонких пленках или

структурах, содержащих слои с данной толщиной, возможно проявление волновых свойств электрона. Практическая реализация этого условия легко осуществима в полупроводниках, т.к. в этом случае технологически легче изготовить пленки с монокристаллической структурой и размерами, позволяющими обнаружить квантово-размерные эффекты. Следует отметить, что и в полупроводниковых пленках наибольший интерес представляют не одиночные барьеры, а структуры, имеющие двойной потенциальный барьер, разделенный квантовой ямой (рис. 7.7).

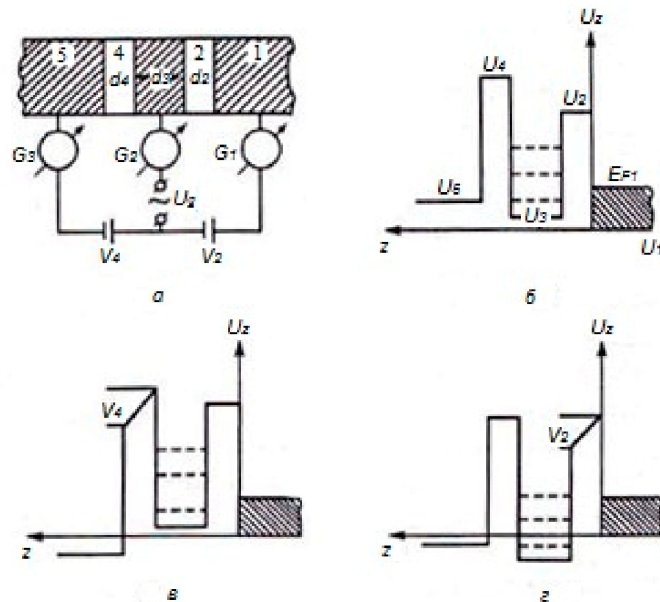


Рис. 7.7. Тонкопленочный резонансный триод: а – структурная схема; б, в, г – изменение потенциальной энергии электрона в зависимости от приложенного напряжения; 1, 5 – металлические эмиттер и коллектор; 2, 4 – диэлектрические барьеры; 3 – тонкий проводящий резонатор, расположенный между эмиттером и коллектором

Эмиттер 1 инжектирует электроны, туннелирующие в коллектор 5 через барьер и потенциальную яму. Если энергия электрона совпадает с энергетическим уровнем в потенциальной яме, это означает, что их поток принимает максимальное значение. В этом случае происходит резонансное туннелирование, содержащее два механизма:

1) резонансное когерентное, возникающее при согласовании электронной волны с квантовыми уровнями в потенциальной яме и сохранении волновой функцией когерентности по всей двухбарьерной системе, что приводит по аналогии с оптикой к росту амплитуды волны в яме и возникновению резонансного туннелирования через всю структуру;

2) резонансное последовательное туннелирование возникает при приложении потенциала к двухбарьерной структуре и совпадении энергии электрона с квантовым уровнем в яме, что вынуждает электрон эмиттера дважды туннелировать сначала на этот уровень, а затем еще раз в коллектор через второй барьер. Этот механизм называют еще некогерентным резонансным туннелированием. Следует отметить, что различия между этими двумя механизмами размыты, поэтому их практическое определение представляет собой технически трудную задачу.

Для осуществления когерентного туннелирования необходимо точно знать параметры электрона и двухбарьерной системы, определяемых выполнением следующих условий:

1) необходима соизмеримость величин длины волны электрона и толщины резонатора (шириной квантовой ямы);

2) для многократного прохождения электрона поперек резонатора длина свободного пробега электрона должна быть достаточно велика, т.е. он должен испытывать на границах ямы только зеркальное рассеяние или с небольшой добавкой диффузионного перемещения;

3) равенство энергий электрона одного из локальных квантовых уровней в квантовой яме.

Когерентное туннелирование проявляется через модуляцию тока вольт-амперной характеристики при увеличении напряжения смещения. Подобную модуляцию можно объяснить присутствием интерференционных явлений в двухбарьерной структуре In Ga As – Al In As даже при комнатной температуре (рис. 7.8).

Однако более четкое проявление когерентного туннелирования наблюдается при модуляции независимости дифференциальной проводимости от напряжения для того же объекта (рис. 7.9).

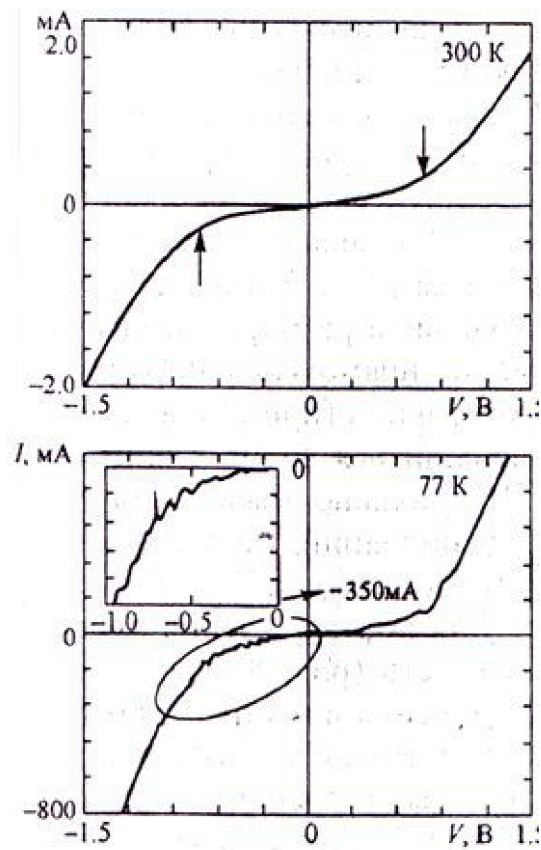


Рис. 7.8. ВАХ двухбарьерной структуры In Ga As – Al In As при двух значениях температуры

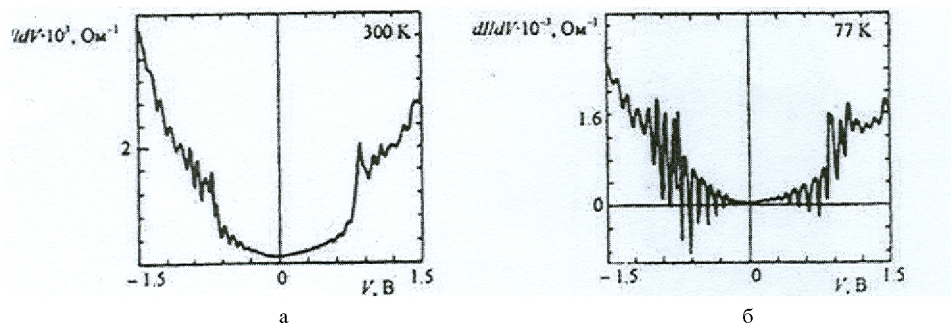


Рис. 7.9. Дифференциальная проводимость dI/dV двухбарьерной структуры In Ga As – Al In As при 300 К (а) и 77 К (б)

В этом случае возникают два вида «отражения» в исследуемой системе:

1. При выполнении условия кратности длины волны электрона ширине потенциальной ямы возникают эффекты интерференции и отражения электронной волны от границ квантовой ямы.

2. Равенство энергий туннелирующего электрона и энергетического заряда между квантовыми уровнями в яме. В обоих случаях возникает резонансное туннелирование, выражаемое ростом коэффициента прозрачности для туннелирующего электрона при заданных условиях, т.е. ростом вероятности для их перехода через потенциальный барьер. Особенностью характеристик, представленных на рис. 7.9,б, является количество наблюдаемых осцилляций – 22. Теоретические расчеты показывают, что в кулоновской яме располагаются не более 14 уровней размерного квантования. Их число уменьшается до 10 при увеличении напряжения от нуля до некоторого рабочего значения, что связано с изменением формы потенциальной ямы от прямоугольной до треугольной соответственно.

Таким образом, туннелирование через энергетические уровни в кулоновской яме должно сопровождаться максимум 10 осцилляциями. Остальные 12 осцилляций, возможно, характеризуют свободные энергетические уровни, располагающиеся над потенциальной (кулоновской) ямой.

Расчет зависимости вероятности прохождения туннелирующего электрона через потенциальный барьер от приложенного напряжения показывает справедливость сделанных ранее выводов (рис.7.10). На данном рисунке видно, что по мере увеличения напряжения наблюдается рост осцилляций вероятности перехода, достигая насыщения для энергий электрона, существенно превышающих высоту входного барьера. Подобное поведение вероятности перехода находится в соответствии с особенностями движения частицы над потенциальной ямой. Некоторое отличие обусловлено конечной шириной правого барьера, показанного на рис 7.10 (вставка).

Следует отметить, что в настоящий момент не получены экспериментальные результаты, подтверждающие наличие точных критериев определения различий между механизмами когерентного и последовательного туннелирований. Однако в теоретических исследованиях приводятся достаточно строгие условия определения этих механизмов, позволяющие прогнозировать и их практическую реализацию.

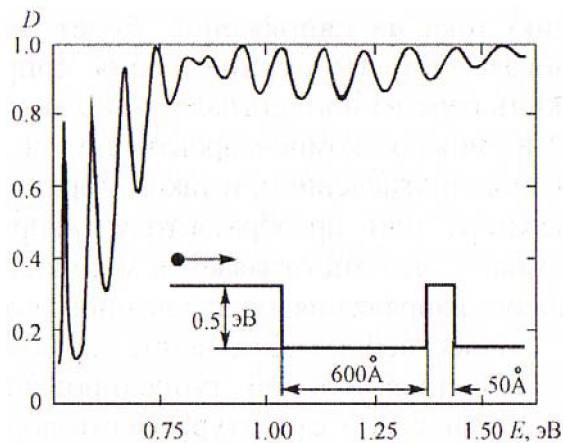


Рис. 7.10. Дифференциальная проводимость двухбарьерной структуры In Ga

Выбор типа механизма туннелирования чаще всего осуществляют, используя отношение ширины волнового пакета электронов, например, в k – пространстве к ширине резонансного уровня энергии в квантовой яме структуры, через которую туннелирует электрон. Если широкий волновой пакет проходит структуру через промежуточное состояние в квантовой яме, то это соответствует последовательному туннелированию электрона и, наоборот, при узком распределении по импульсам происходит возникновение резонансного когерентного туннелирования. Следует отметить, что отсутствие рассеяния в яме резонансного и последовательного туннелирования в равной степени приводит к возникновению одинакового по величине тока через структуру. Именно эффект рассеяния туннелирующего электрона в квантовой яме приводит к значительным трудностям в определении механизмов туннелирования экспериментальными методами. Поэтому в большинстве работ, посвященных исследованию туннелирования электрона через двухбарьерную структуру, чаще всего используется понятие последовательного туннелирования.

7.8. Эффект отрицательного дифференциального сопротивления в наноразмерных структурах

Отрицательное дифференциальное сопротивление возникает при протекании тока через двух- и многобарьерные структуры, поэтому изучение его механизма можно осуществлять в процессе исследования осцилляций туннельного тока (рис 7.11).

Периодическое изменение напряжения создает условия для возникновения отрицательного дифференциального сопротивления. Уменьшение тока с ростом напряжения эквивалентно сдвигу фазы между током и напряжением на 180° , т.е. их переменные составляющие как бы направлены навстречу друг другу. В этом случае мощность переменного сигнала будет иметь отрицательный знак.

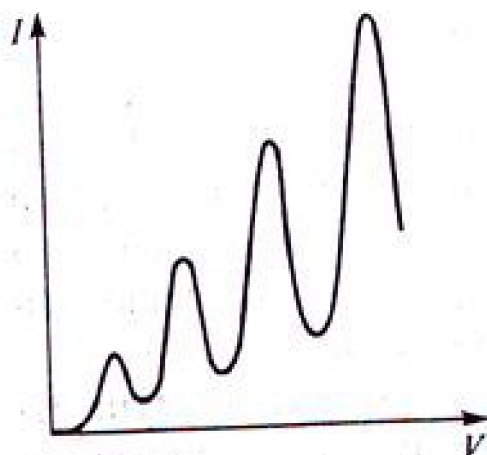


Рис. 7.11. Осцилляция туннельного тока через двухбарьерную структуру с изменением напряжения

Следовательно, отрицательное сопротивление не потребляет мощность переменного сигнала, а отдает ее во внешнюю цепь. Это позволяет компенсировать потери, вносимые в схему положительным сопротивлением, и создавать схемы усилителя, генератора и преобразователя напряжения.

Объяснение механизма туннелирования через барьер основано на энергетической структуре квантовой ямы, содержащей в своей основе систему локальных уровней размерного квантования. Характер изменения зависимости представленной на рис 7.8, показывает, что увеличение тока после включения напряжения связано с заполнением нижнего энергетического уровня в яме, лежащего ниже уровня Ферми эмиттера (справа). При последующем движении электрона по этому уровню он достигает области второго потенциального барьера и туннелируя через него попадает в коллектор. При дальнейшем повышении напряжения уровни в квантовой яме опускаются вниз по шкале энергии. Это движение приводит к тому, что туннелирование через первый уровень становится невозможным, как только он расположится ниже дна зоны проводимости эмиттера. Уменьшение тока

туннелирования в процессе опускания системы энергетических уровней определяет и уменьшение тока протекающего через барьер. Однако он не уменьшается до нуля, т.к. незаселенный второй энергетический уровень в квантовой яме начинает активно вступать во взаимодействие с уровнем Ферми. Электроны, использующие второй уровень для временного пребывания в яме, начинают по резонансному механизму туннелировать из эмиттера в коллектор, что и приводит к резкому росту туннелированного тока. При увеличении напряжения в процесс формирования туннельного тока включаются последовательно второй и третий уровни, затем третий и четвертый и так далее, осуществляя генерацию осцилляций туннельного тока с изменением напряжения. Причем расстояние между пиками осцилляций находится в пропорциональной зависимости от расстояния между энергетическими уровнями в квантовой яме, т.е. устанавливается зависимость энергии электрона от величины квазиимпульса. Таким образом, экспериментально полученная зависимость осцилляций туннельного тока от приложенного к барьеру напряжения позволяет установить закон дисперсии электронов.

7.9. Эффект сверхрешетки в структуре твердого тела

Эффект сверхрешетки заключается в создании в кристаллической решетке твердого тела дополнительного периодического потенциала. Практически это проявляется при образовании в решетке деформации, возникающей в процессе прохождения через тело ультразвуковой волны. Русский ученый Л.В. Келдыш впервые обнаружил, что подобные деформации в кристалле вызывают качественные изменения в зонной структуре. Пространственно-периодическое поле деформации жестко связано с пространственно-периодической модуляцией энергии электронов, однако ее период значительно больше постоянной решетки кристалла. Ширина диапазона между энергетическими уровнями в квантовой яме (ширина запрещенной зоны) определяется равенством

$$E_0 = \frac{1}{\lambda^2},$$

где λ – длина волны звука. Поскольку выполняется неравенство $\lambda \gg a_0$, где a_0 – постоянная решетки, то для электрона, движущегося в направлении распространения звуковой волны, спектр разрешенных энергий распадается на ряд относительно узких разрешенных и запрещенных зон (рис 7.12).

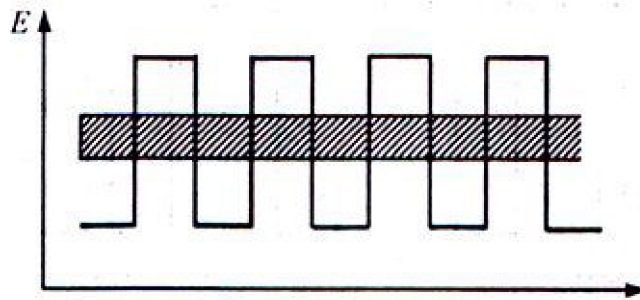


Рис. 7.12. Пример построения зонной диаграммы сверхрешетки с образованием мини-зоны

Экспериментальная перестройка энергетического спектра электронов в квантовой яме позволяет формировать в кристалле ряд новых эффектов, не наблюдавшихся ранее, например осцилляций Блоха. Энергетическая диаграмма сверхрешетки приведена на рис 7.13.

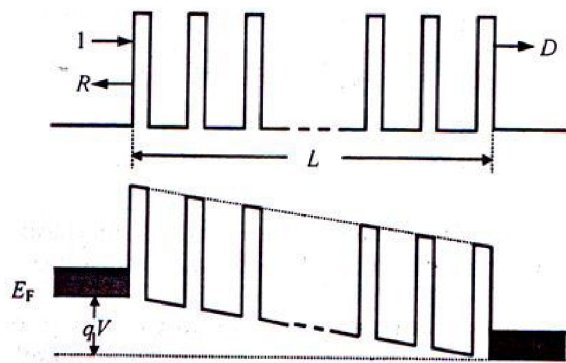


Рис. 7.13. Энергетическая диаграмма сверхрешетки в равновесии (а) и в случае приложенного напряжения (б): 1 – падающий поток электронов; R – коэффициент отражения; D – коэффициент прохождения

Увеличение энергии туннелирующих электронов и количества потенциальных барьеров приводит к росту числа осцилляций, что подтверждается зависимостями, представленными на рис 7.14.

Расчетные характеристики $\ln I = f(U)$ для двух- и трехбарьерной структур при условии $T=0$ показывают, что особенностью рассматриваемых структур является соотношение расположения пиков по шкалам напряжений и энергий (рис 7.15).

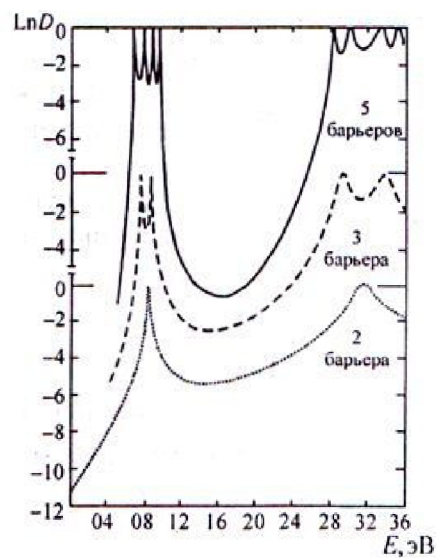


Рис. 7.14. Расчетные зависимости логарифма коэффициента пропускания $\ln D_0$ от энергии электрона для случаев двух-, трех- и пятибарьерных структур при ширине барьеров квантовых ям $20\text{\AA}$ и $50\text{\AA}$

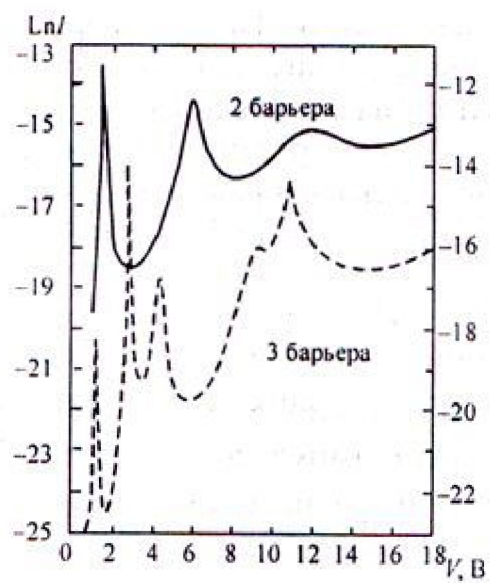


Рис. 7.15. Зависимости плотности тока для двух- и трехбарьерной структур от приложенного напряжения

Выражение для плотности тока в этом случае можно представить равенством

$$I = \frac{em^*}{2\pi^2\hbar^2} \int_0^{E_F} (E_F - E_n) D_{ec} dE_n \quad (7.17)$$

Первый пик двухбарьерной структуры лежит при 0,082 эВ, что соответствует положению первого квантово-размерного уровня в квантовой яме. Причем максимального значения ток достигает в момент приближения резонансного уровня в кулоновской яме ко дну зоны проводимости эмиттера. Достижение этого явления становится возможным, если к двухбарьерной структуре приложить напряжение, численно равное энергии резонансного уровня, выражаемого в электрон-вольтах. Возникновение пика в этом случае начинается уже при приложении напряжения $U \approx 0,16$ В. Это связано со сдвигом системы энергетических уровней в симметричных структурах, включая и дно квантовой ямы, в соответствии с распределением падения напряжения в этой системе. Причем величина этого сдвига численно равна половине приложенного напряжения. Из этого следует возможность экспериментального определения положения особенностей на вольт-амперной характеристике, ориентируясь на расчетные значения параметров энергетических уровней квантовой ямы.

Таким образом, полученные результаты позволяют начать построение ряда сверхвысокочастотных приборов, конструкция и материал которых создают условия существования этих эффектов.

8. ПРИМЕРЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ

8.1 Физика полупроводников

1. Основываясь на характеристиках кристаллической структуры типа алмаза, рассчитайте следующие параметры кремния:

а) число атомов, содержащихся в элементарной ячейке (единичном кубе);

б) атомный радиус структуры, полагая, что длина ребра элементарной ячейки кристалла кремния $a \approx 0,356$ нм;

в) число атомов в 1 см^3 ;

г) число атомов, приходящихся на единицу площади в кристаллических плоскостях (111), (100) и (110). Приведенные значения индексов Миллера характеризуют положение плоскостей в кристалле;

д) удельную плотность, положив, что атомная масса кремния равна 28.

Решение

а) Структура типа алмаза подобна кубической гранецентрированной структуре, каждой вершине которой принадлежит $1/8$ атома, центру каждой грани – $1/2$ атома. Однако здесь атом в центре тетраэдра чередуется с атомом, принадлежащим вершине (т. е. на каждую элементарную ячейку приходится дополнительно $(1/2) \cdot 8$ тетраэдров). Следовательно, число атомов в элементарной ячейке структуры типа алмаза составляет

$$8 \cdot (1/8) + 6(1/2) + 4 = 8.$$

б) Атомный радиус представляет собой длину отрезка, соединяющего два ближайших узла. Решетку типа алмаза можно получить из двух кубических гранецентрированных решеток, если одну из них сместить по диагонали куба в соответствии с вектором трансляции $(a/4, a/4, a/4)$. Тогда атомный радиус в решетке типа алмаза составит

$$\sqrt{3} \frac{a}{4} = \sqrt{3} \cdot 0,356 / 4 = 0,23 \text{ нм}, \text{ а число атомов в } 1 \text{ см}^3 \quad N = 8/a^3 =$$
$$= (8 \cdot 10^{21} / (0,356)^3) \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}.$$

в) Удельное число атомов в плоскости (111) можно определить, обратившись к рис. 8.1. Сторона треугольника в плоскости (111)

$b = a \sqrt{2}$. Его площадь $A = 1/2 \cdot a^2 \sqrt{3}$. Число атомов, относящихся к данному треугольнику, $3 \cdot (1/6) + 3(1/2) = 2$. Тогда число атомов на единицу площади $2/A = 4/(a^2 \sqrt{3}) = 7,9 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$.

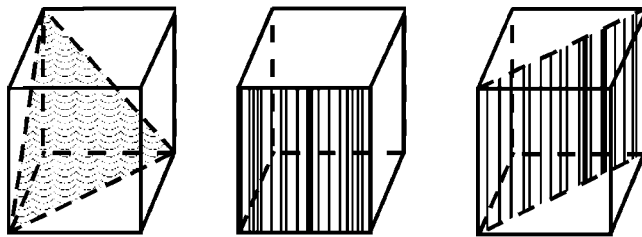


Рис. 8.1. Плоскости (111), (100) и (110)

Аналогично для плоскости (100), если число атомов, приходящихся на квадрат со стороной a , составляет $4 \cdot (1/4) + 1 = 2$, то число атомов, приходящихся на единицу площади, составит $2/A = 2/a^2 = 6,8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Наконец, в плоскости (110) имеется $4 \cdot (1/4) + 2(1/2) = 2$ атома, относящихся к выделенному прямоугольнику площадью $A = a^2 \sqrt{2}$. Из этого следует, что поверхностная плотность размещения атомов составляет $2/A = 2/(a^2 \sqrt{2}) = 4,8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$.

г) Плотность кремния равна массе атомов, содержащихся в элементарной ячейке, деленной на объем этой ячейки. Масса его атома равна молярной массе самого элемента P_a (г/моль), деленной на число Авогадро $N_0 = 6,02 \cdot 10^{23}$. Поэтому плотность кремния

$$\rho = \frac{8(P_a / N_0)}{a^3} = \frac{8 \cdot 28 / (6,02 \cdot 10^{23})}{(0,357 \cdot 10^{-9})^3} = 2330 \text{ кг/м}^3.$$

2. Пусть a_1 , a_2 и a_3 являются векторами примитивных трансляций некоторой кристаллической решетки, а b_1 , b_2 и b_3 – примитивными векторами трансляций обратной решетки. Покажите, что смешанное произведение описывается равенством

$$[b_1 \ b_2 \ b_3] = (2\pi)^3 / [a_1 \ a_2 \ a_3].$$

Решение

Первый способ

$$[b_1 b_2 b_3] = [b_1 (b_2 \times b_3)];$$

$$\begin{aligned} b_2 b_3 &= \frac{(2\pi)^2 \cdot (a_3 \times a_1)(a_1 \times a_2)}{[a_1 a_2 a_3]} = \\ &= \frac{(2\pi)^2 [a_1 (a_3 \times a_1) a_2 - a_2 (a_3 \times a_1) a_1]}{[a_1 a_2 a_3]} = \frac{(2\pi)^2 a_1}{[a_1 a_2 a_3]}, \end{aligned}$$

поскольку $(a_3 \times a_1)a_1 = 0$, то выполняется равенство

$$[b_1 b_2 b_3] = \frac{2\pi \cdot (a_2 \times a_3)}{[a_1 a_2 a_3]} \cdot \frac{(2\pi)^2 \cdot a_1}{[a_1 a_2 a_3]} = \frac{(2\pi)^3 (a_2 \times a_3) a_1}{[a_1 a_2 a_3]^2} = \frac{(2\pi)^3}{[a_1 a_2 a_3]}.$$

Второй способ

$$\begin{aligned} [b_1 b_2 b_3] &= \frac{(2\pi)^3 (a_2 \times a_3) \cdot [(a_3 \times a_1) \times (a_1 \times a_2)]}{[a_1 (a_2 \times a_3)]^3} = \\ &= \frac{8\pi^3}{V_0^3} (a_2 \times a_3) \cdot \{[(a_1 \times a_2) a_3] a_1 - [(a_1 \times a_2) a_1] a_3\} = \\ &= \frac{8\pi^3}{V_0^3} [(a_2 \times a_3) a_1] \cdot [(a_1 \times a_2) a_3] = \frac{8\pi^3}{V_0^3} \cdot V_0 = \frac{8\pi^3}{[a_1 a_2 a_3]}. \end{aligned}$$

3. Некоторая трехмерная решетка, имеющая форму куба со стороной L , содержит N атомов, каждый из которых имеет Z валентных электронов. Пусть электроны свободно перемещаются под действием приложенного электрического поля (приближение свободных электронов). Выведите выражение для оценки радиуса сферы Ферми в обратном пространстве.

Решение

Уравнение Шрёдингера относительно волновой функции свободного валентного электрона, находящегося внутри кубического объема с длиной ребра L , имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \nabla^2 \psi(r) = E_k \psi_k(r),$$

где $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Поскольку волновая функция имеет период L , то решением этого уравнения является равенство

$$\psi_k(r) = \exp(jkr),$$

где $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ т.е.

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L} = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}; \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L} = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L};$$

$$k_z = \frac{2\pi n_z}{L} = 0; \pm \frac{2\pi}{L}; \pm \frac{4\pi}{L}.$$

Данному решению отвечает некоторое значение энергии, принадлежащее множеству $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$.

В основном состоянии системы, состоящей из свободных электронов, уровни энергии в k -пространстве полностью заполняют так называемую сферу Ферми, имеющую радиус k_F . Энергию, отвечающую этому значению радиуса, называют энергией Ферми $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2$.

Каждому набору k_x, k_y, k_z отвечает некоторое квантовое состояние, следовательно, элемент объемом $(2\pi/L)^3$ находится в k -пространстве. Поскольку спин может принимать одно из двух возможных состояний, каждую элементарную ячейку могут занимать два электрона с антипараллельными спинами. Таким образом, общее число квантовых уров-

ней внутри сферы объемом $\frac{4}{3}\pi k_F^3$ для системы из NZ электронов составит

$$\frac{(2\pi/L)^3}{2} = \frac{(4/3)\pi k_F^3}{NZ} \Rightarrow k_F = \left(\frac{3\pi^2 \cdot NZ}{L^3}\right)^{\frac{1}{3}}.$$

Вводя параметр $n = N/L^3$ – плотность атомов в физическом пространстве, получаем $k_F = (3nZ\pi^2)^{\frac{1}{3}}$.

4. Пусть электрон, имеющий полную энергию E , движется в области пространства с нулевым потенциалом. В точке $x = 0$ электрон попадает в область с постоянным потенциалом $V_0 < E$.

а) Изобразите одномерный график распределения энергии вдоль пути электрона.

б) Получите выражения для волновой функции ψ при $x < 0$ и при $x > 0$, выразив ее через амплитуды A_i , A_r и A_t падающей, отраженной и прошедшей волн соответственно.

в) Пусть энергия электрона равна 10 эВ, а высота потенциального барьера составляет 1 эВ. Найдите отношения амплитуд A_r/A_i и A_t/A_i . Вычислите отношения интенсивностей $A_r A_r^*/A_i A_i^*$ и $A_t A_t^*/A_i A_i^*$.

Решение

а) Электрон движется по некоторому уровню энергии и внезапно получает импульс энергии, равный eV_0 , т.е. скачкообразно переходит на другой уровень энергии (рис. 8.2).

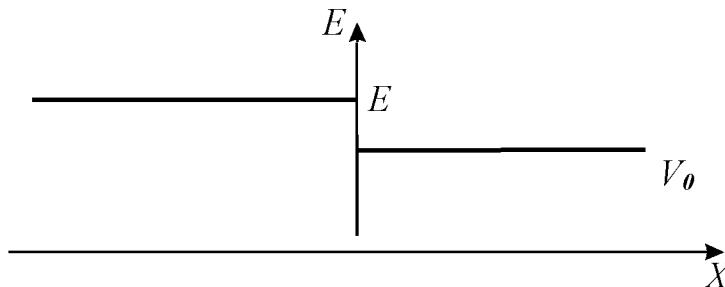


Рис. 8.2. Уровень полной энергии и распределение потенциала V_0

б) Уравнение Шрёдингера в области $x < 0$ имеет вид

$$\frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + k_1^2 \psi_1 = 0,$$

где $k_1^2 = \frac{8\pi^2 m E}{h^2}$.

Решение этого уравнения представляет две волны, одна из которых, падающая, распространяется в сторону $x > 0$ и имеет амплитуду A_i , а другая, отраженная, распространяется в сторону $x < 0$, имея амплитуду A_r .

При $x > 0$ поведение электрона описывается уже волновым уравнением

$$\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + k_2^2 \psi_2 = 0, k_2^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - V_0),$$

имеющим решение

$$\psi_2 = A_t \cdot \exp(jk_2 x),$$

где A_t – амплитуда прошедшей волны.

в) В соответствии с граничными условиями волновые функции и их производные должны быть непрерывными в точке $x=0$:

$$\psi_1 = \psi_2, \quad \frac{d\psi_1}{dx} = \frac{d\psi_2}{dx} \text{ при } x = 0.$$

Отсюда следуют равенства

$$A_i + A_r = A_t, \quad k_1(A_i - A_r) = k_2 A_t,$$

$$A_r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \cdot A_i,$$

$$A_t = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \cdot A_i.$$

Заметим далее, что

$$k_1 = KE^{1/2} = \sqrt{10}K, \text{ а } k_2 = K(E - V_0)^{1/2} = 3K,$$

где K – постоянное число.

Таким образом, отношения амплитуд:

$$\frac{A_r}{A_i} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} = \frac{\sqrt{10} - 3}{\sqrt{10} + 3} = 0,0263,$$

$$\frac{A_t}{A_i} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} = \frac{2\sqrt{10}}{\sqrt{10} + 3} = 1,0263.$$

Соответствующие отношения интенсивностей

$$\frac{A_r \cdot A_r^*}{A_i \cdot A_i^*} = 6,917 \cdot 10^{-4} \quad \frac{A_t \cdot A_t^*}{A_i \cdot A_i^*} = 1,0534.$$

В квантовой механике показано, что вероятность прохождения электрона через потенциальный барьер численно равна так называемому коэффициенту прохождения $T = \frac{A_t^2}{A_i^2} \cdot \frac{k_2}{k_1}$. В рассматриваемом случае $T = 0,99934$, т.е. такое событие является весьма вероятным.

5. Известно, что поверхность кремния (Si) в качестве легирующей примеси содержит 10^{-4} атомных процентов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $3 \cdot 10^{16}$ ат/см³ и после этого равномерно легируется бором (B) до 10^{18} ат/см³. Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активизирует все примеси.

- Какой тип проводимости будет иметь образец кремния?
- Чему будет равна концентрация основных носителей заряда?

Решение

Мышьяк является элементом V группы таблицы Менделеева, поэтому он является донорной примесью. Структура кремния содержит $5 \cdot 10^{22}$ см⁻³ атомов матрицы и 10^{-4} атомных процента атомов примеси (As). Это означает, что концентрация атомов As в Si равна $5 \cdot 10^{22} \cdot 10^{-6} = 5 \cdot 10^{16}$ см⁻³. Дополнительное легирование Si фосфором ($3 \cdot 10^{16}$ см⁻³) увеличивает содержание доноров в Si до $8 \cdot 10^{16}$ см⁻³, а легирование Si бором превращает Si n-типа в полупроводник p-типа проводимости, т.к. концентрация акцепторов теперь будет превосходить концентрацию доноров. Результирующая концентрация акцепторов будет меньше, чем атомов бора.

Таким образом:

а) Кремний имеет р-тип проводимости;

$$\text{б) } p = Na(B) - [Nd(As) + Nd(P)] = 10^{18} - (5 \cdot 10^{16} + 3 \cdot 10^{16}) = 9,2 \cdot 10^{17}.$$

6. Найти положение уровня Ферми и температурную зависимость концентрации электронов в собственном полупроводнике. Как изменится концентрация электронов при изменении температуры от 200К до 300К, если $E_g = (0,785 - \xi T)$ эВ.

Решение

Из условия электронейтральности $n = p$ в невырожденном полупроводнике имеем:

$$2 \left(\frac{m_n k T}{2 \pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_F - E_c}{kT}} = 2 \left(\frac{m_p k T}{2 \pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_v - E_F}{kT}}.$$

После переноса скобок налево, а экспоненты – направо и выполнения необходимых сокращений получим

$$\exp \left(\frac{2E_F - E_c + E_v}{kT} \right) = \left(\frac{m_p}{m_n} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

После логарифмирования получим

$$E_F = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{3}{4} kT \ln \frac{m_p}{m_n}.$$

Концентрация электронов равна

$$n_i = \sqrt{n_p p} = 2 \left[\frac{(m_n m_p)^{\frac{1}{2}} k T}{2 \pi \hbar^2} \right] e^{\frac{E_v - E_c}{2kT}}.$$

Отношение концентраций при 300К и 200К равно

$$\frac{n_{300}}{n_{200}} = \left(\frac{300}{200} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{\Delta}{2k} \left(\frac{1}{300} - \frac{1}{200} \right) \right] = 3,6 \cdot 10^3.$$

7. В исследуемом полупроводнике концентрация электронов при $T = 400\text{K}$ составляла $1,3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а при $350\text{K} - 6,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Найти ширину запрещенной зоны материала, считая, что ее температурная зависимость изменяется по линейному закону.

Решение.

Отношение концентраций при температурах T_1 и T_2 равно

$$\frac{n_1}{n_2} = \left(\frac{T_1}{T_2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[- \frac{\Delta}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) \right].$$

Решая полученное равенство относительно Δ , получим

$$\Delta = 2k \frac{T_1 T_2}{T_1 - T_2} \ln \frac{n_1 T_2^{\frac{3}{2}}}{n_2 T_1^{\frac{3}{2}}}.$$

Для заданных условий $\Delta = 0,26 \text{ эВ}$.

Ширина запрещенной зоны определяется из равенства при условии $\xi = 2 \cdot 10^{-4}$:

$$E_g = (\Delta - \xi T).$$

8. Как изменится концентрация собственных электронов при изменении температуры от 200K до 300K , если $E_g = (0,785 - \xi T) \text{ эВ}$.

Решение

Полагая $E_c - E_v = \Delta - \xi T$, находим, что отношение концентраций при 300K и 200K равно

$$\frac{n_{300}}{n_{200}} = \left(\frac{300}{200} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[- \frac{\Delta}{2k} \left(\frac{1}{300} - \frac{1}{200} \right) \right] = 3,6 \cdot 10^3.$$

9. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при $T = 400\text{K}$ оказалась равной $1,38 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-3}$. Найти значение произведения эффективных масс электрона и дырки, если известно, что ширина запрещенной зоны изменяется по закону $E_g = (0,785 - 4 \cdot 10^{-4} T) \text{ эВ}$.

Решение

С учетом температурного изменения E_g концентрация электронов в собственном полупроводнике равна

$$n_i = 2 \left(\frac{\sqrt{m_n m_p} kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\xi}{2k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta}{2kT}\right),$$

где $\Delta = E_g + \xi T$.

Отсюда:

$$2 \left(\frac{\sqrt{m_n m_p} kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{\xi}{2k}\right) = n T^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\Delta}{2kT}\right)$$

и, следовательно,

$$\frac{m_n m_p}{m_0^2} = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{kT} \right) \left(\frac{n}{2} \right)^{\frac{4}{3}} \frac{1}{m_0^2} \exp\left(\frac{2\Delta}{3kT} - \frac{2\xi}{3K}\right) = 0.21.$$

10. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при $T = 400\text{K}$ оказалась равной $1,38 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Определить величину произведения эффективных масс электрона и дырки, если известно, что ширина запрещенной зоны меняется по закону $E_g = (0,785 - 4 \cdot 10^{-4}T) \text{ эВ}$.

Решение

С учетом температурного изменения ширины запрещенной зоны концентрация в собственном полупроводнике описывается равенством

$$n_i = \sqrt{np} = 2 \left(\frac{\sqrt{m_n m_p} kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\xi}{2k}\right) \exp\left(-\frac{\Delta}{2kT}\right),$$

где $\Delta = E_g + \xi T$.

Отсюда получаем

$$2 \left(\frac{\sqrt{m_n m_p} kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{\xi}{2k}\right) = n T^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\Delta}{2kT}\right)$$

следовательно:

$$\frac{m_n m_p}{m_0^2} = \left(\frac{(2\pi\hbar^2)^2}{(kT)^2 2^{\frac{4}{3}}} \right) \frac{1}{m_0^2} n_i^{\frac{4}{3}} \exp\left(\frac{2\Delta}{3kT} - \frac{2\xi}{3K}\right) = 0.21.$$

11. Вычислить собственную концентрацию носителей заряда в кремнии при $T=300\text{K}$, если ширина его запрещенной зоны $E_g = 1,12 \text{ эВ}$, а эффективные массы состояний равны $m_c = 1,05m_0$, $m_v = 0,56 m_0$.

Решение

В собственном полупроводнике вследствие выполнения равенства $p=n$ достаточно определить концентрацию собственных электронов, характер изменения которых описывается выражением

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(\frac{E_g}{2kT}\right),$$

где эффективную плотность квантовых состояний, которые способны занять электроны (N_c) и дырки (N_v), можно определить, используя выражения:

$$\begin{aligned} N_c &= 2 \left(\frac{2\pi k T m_c}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} = \frac{2(2 \cdot 3,14 \cdot 1,05 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{23} T)^{\frac{3}{2}}}{(6,62 \cdot 10^{-34})^3} = \\ &= 2,69 \cdot 10^{25} \left(\frac{T}{300} \right)^{\frac{3}{2}}, \end{aligned}$$

$$N_v = \frac{2(2 \cdot 3,14 \cdot 0,56 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,38 \cdot 10^{23} \cdot T)^{\frac{3}{2}}}{(6,62 \cdot 10^{-34})^3} = 1,05 \cdot 10^{25} \left(\frac{T}{100} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Используя для решения задачи эти значения, получим

$$n_i = 10^{25} \sqrt{2,69 \cdot 1,05} \exp\left(\frac{1,12}{2 \cdot 8,625 \cdot 10^{-5} \cdot 300}\right) \approx 7 \cdot 10^{15} \text{ м}^{-3}.$$

12. Показать, что при $E < E_F$ и $T = 0$ функция Ферми-Дирака $f(E) = 1$, а при $E > E_F$ и $T = 0$ $f(E) = 0$. В каком случае здесь рассматривается р-полупроводник, а в каком – п-полупроводник ?

Решение

Функция Ферми-Дирака описывается равенством

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)},$$

следовательно, при $E < E_F$ числитель при экспоненте будет отрицателен. Это дает право записать функцию Ферми-Дирака в следующем виде:

$$f(E) = \frac{1}{1 + \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}}.$$

При $T = 0$ выражение в знаменателе

$$\frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} = 0,$$

а из этого следует и выполнение равенства $f(E) = 1$.

Аналогично выполняется и доказательство равенства $f(E) = 0$ при $E > E_F$.

13. Вычислить положение уровня Ферми при $T = 300\text{K}$ в кристалле германия, содержащем $2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ атомов мышьяка и 10^{22} м^{-3} атомов галлия.

Решение

Выполнение неравенства $N_d > N_a$ означает, что полупроводник проявляет электропроводность n-типа. При этом избыточная концентрация доноров $N'_d = N_d - N_a$. При $T = 300\text{K}$ все доноры ионизированы, поэтому можно принять $n \approx N'_d$.

Из выражения

$$n = N_E \exp\left(\frac{E_c - E_v}{kT}\right)$$

находим:

$$(E_c - E_F) = kT \ln \frac{N_C}{N_D} = 8,625 \cdot 10^{-5} \cdot 300 \ln \frac{1,02 \cdot 10^{25}}{10^{22}} = 0,179 \text{ В}.$$

14. Определить положение середины запрещенной зоны в собственном полупроводнике (E_i) и её зависимость от температуры.

Решение

Условием существования собственного полупроводника является выполнение равенства $n=p$. Концентрации электронов и дырок в невырожденном полупроводнике описываются выражениями:

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right), \quad p = N_v \exp\left(-\frac{E_F - E_v}{kT}\right).$$

Подставив эти выражения в равенство и решая его относительно уровня Ферми, получим

$$E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_v) - kT \ln \frac{N_C}{N_V}.$$

Согласно теории энергетических диаграмм положение энергетического уровня середины запрещенной зоны определяется равенством

$$E_i = \frac{1}{2}(E_c + E_v),$$

следовательно

$$E_i = E_F + kT \ln \frac{N_c}{N_v}.$$

15. Определить положение уровня Ферми в собственном полупроводнике, если

$$n = 2 \left(\frac{m_n kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[\frac{(E_F - E_c)}{kT} \right]; \quad p = 2 \left(\frac{m_p kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[\frac{(E_v - E_F)}{kT} \right].$$

Решение

Условием существования собственного полупроводника является выполнение равенства $p=n$. Подставляя в него функциональные значения n и p , получим уравнение вида

$$\exp \left[\frac{(2E_F - E_c + E_v)}{kT} \right] = \left(\frac{m_p}{m_n} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

Логарифмируя обе части равенства и решая его относительно уровня Ферми, получим

$$E_F = \frac{1}{2}(E_c + E_v) + \frac{3}{4}kT \ln \left(\frac{m_p}{m_n} \right).$$

16. Определить дрейфовую скорость электрона ($\mathcal{G}_D$) при следующих параметрах: удельное сопротивление образца $\rho = 0,01$ Ом·см, длина образца $l = 5$ см, напряжение, прикладываемое к образцу, равно $U = 80$ В, концентрация электронов $n = 6,2 \cdot 10^{15}$ см⁻³ при $T = 300$ К.

Решение

Если воспользоваться равенствами $\mathcal{G}_D = \mu E$; $E = \frac{U}{l}$; $j = \sigma E = \frac{E}{\rho}$;

$\frac{1}{\rho} = en\mu$; $\mu = \frac{\sigma}{en}$, то выполнив необходимые математические преобразования, можно получить выражение

$$\mathcal{G}_D = \frac{\sigma}{en} E = \frac{E}{\rho en}.$$

17. Определить удельную проводимость примесного полупроводника (σ), если $m_p = 0,37m_0$, $n = 1,37 \cdot 10^{16}$ см⁻³ при $T = 400$ К; $n_i = 1,38 \cdot 10^{15}$ см⁻³ при $T = 400$ К; $\tau_m = 0,25 \cdot 10^{-12}$ с, $e = 1,6 \cdot 10^{-12}$ к, $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг, $m_n = 0,56 m_0$.

Решение

Полная проводимость примесного полупроводника определяется из выражения $\sigma = e(n\mu_n + p\mu_p)$. Из закона действующих масс $np = n_i^2$ находим отношение $p = \frac{n_i^2}{n}$. Характер изменения подвижностей электронов и дырок определяется из выражений

$$\mu_n = \frac{e}{m_n} \tau_M; \quad \mu_p = \frac{e}{m_p} \tau_M.$$

Подставляя полученные равенства в исходное уравнение, получаем

$$\sigma = e^2 \tau_M \left(\frac{n}{m_n} + \frac{n_i^2}{m_p n} \right).$$

18. Образец кремния n-типа, находящийся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 300К, характеризуется следующими параметрами: удельное сопротивление 5 Ом·см; подвижность электронов $1600 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; подвижность дырок $600 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; собственная концентрация носителей $1,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ и эффективная плотность уровней в зоне проводимости 10^{19} см^{-3} . Определите: а) концентрацию электронов и дырок; б) положение уровня Ферми; в) вероятность событий, состоящих в том, что донорный уровень занят и свободен. Известно, что $E_c - E_d = 50 \text{ мэВ}$.

Решение

а) Запишем уравнения, определяющие удельную объемную проводимость, а также уравнение полупроводника (закон действующих масс):

$$\sigma = q(\mu_n n + \mu_p p); \quad np = n_i^2.$$

Объединяя эти две формулы, получаем $\sigma = q \left(\mu_n n + \mu_p \cdot \frac{n_i^2}{n} \right)$, т.е.

$$0,2 = 1,6 \cdot 10^{-19} \left(1600 n + \frac{600 (1,4 \cdot 10^{10})^2}{n} \right),$$

откуда $n = 0,8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Следует иметь в виду, что параметр n_i – постоянная величина, зависящая для каждого полупроводникового материала только от температуры.

Воспользовавшись уравнением полупроводника, получаем $p = 2,45 \cdot 10^5 \text{ см}^{-3}$.

б) Известно, что

$$n = N_c \cdot \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right).$$

Подставляя соответствующие значения, находим

$$0,8 \cdot 10^{15} = 10^{19} \cdot \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right),$$

откуда $E_C - E_F = 0,244 \text{ эВ}$.

в) Вероятность того, что донорный уровень заполнен,

$$f(E_d) = \left[1 + \exp\left(\frac{E_d - E_F}{kT}\right)\right]^{-1}.$$

Так как $E_C - E_F = 0,244 \text{ эВ}$, $E_C - E_d = 0,05 \text{ эВ}$, то $E_d - E_F = 0,194 \text{ эВ}$, откуда

$$f(E_d) = \left[1 + \exp\left(\frac{0,194}{0,026}\right)\right]^{-1} = 5,7 \cdot 10^{-4}.$$

Итак, вероятность того, что донорный уровень занят, т. е. относительная доля ионизированных атомов с занятым донорным уровнем, составляет 0,057%. В то же время относительная доля ионизированных атомов с незанятым донорным уровнем равна 99,943%.

Интересно отметить, что с ростом концентрации донорных атомов N_d уровень Ферми приближается к границе зоны проводимости. При этом возрастает вероятность того, что он будет занят, и уменьшается относительная доля ионизированных донорных атомов. Аналогичные рассуждения применимы и в случае акцепторной примеси. Если уровень E_F приближается к границе валентной зоны, то число дырок возрастает, а концентрация электронов уменьшается.

19. Найдите положение уровней Ферми в германии, находящемся в состоянии термодинамического равновесия. Материал легирован ак-

цепторными атомами с концентрацией 10^{15} см^{-3} . Значения температуры $T=0, 100, 300$ и 400 К. Считайте, что при $T=100\text{K}$ ионизированными оказываются 50%, а при более высоких температурах ионизировано 100% примесных атомов. При комнатной температуре T_k имеет место равенство

$$n_i^2 = 3,1 \cdot 10^{32} T_k^3 \exp\left(\frac{-9100}{T_k}\right).$$

Решение

При $T=0$ К электропроводность отсутствует и

$$E_F = E_i = (E_c - E_v) / 2.$$

При $T=100\text{K}$

$$n_i^2 = 3,1 \cdot 10^{32} (100)^3 \exp\left(-\frac{9100}{100}\right) \approx 0,093 \text{ см}^{-6},$$

$$n \approx 0,31 \text{ см}^{-3},$$

$$p = \frac{N_a}{2} + \left[\frac{N_a^2}{4} + 300n_i^2 - 100n_i^2 \right]^{1/2} \approx 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3},$$

$$n = \frac{n_i^2}{p} \approx 1,9 \cdot 10^{-16} \text{ см}^{-3}.$$

Таким образом, здесь превалирует режим примесной электропроводности:

$$E_F = E_i - kT \ln \frac{5 \cdot 10^{14}}{0,31} = E_i - 0,0086 \ln \frac{5 \cdot 10^{14}}{0,31} = E_i - 0,302 \text{ эВ}.$$

При $T=300\text{K}$

$$n_i^2 = 3,1 \cdot 10^{32} (300)^3 \exp\left(-\frac{9100}{300}\right) \approx 5,8 \cdot 10^{26} \text{ см}^{-6} \rightarrow n_i \approx 2,4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3},$$

$$p = 10^{15} \text{ см}^{-3} \rightarrow n \approx 5,6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3},$$

$$E_F = E_i - 0,026 \ln \frac{10^{15}}{2,4 \cdot 10^{13}} = E_i - 0,097 \text{ эВ}.$$

При $T=400\text{K}$

$$n_i^2 = 2,63 \cdot 10^{30} \text{ см}^{-6} \rightarrow n_i \approx 1,62 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3},$$

$$p = \frac{N_a}{2} + \left[\frac{N_a^2}{4} + 400n_i^2 - 300n_i^2 \right]^{1/2} \approx \frac{10^{15}}{2} + 1,6 \cdot 10^{15} \approx 2,1 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3},$$

$$n = 2,63 \cdot 10^{30} / (2,1 \cdot 10^{15}) \approx 1,25 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}.$$

Следовательно, имеет место режим собственной электропроводности:

$$E_F = E_i + 0,034 \ln \frac{2,1 \cdot 10^{15}}{1,6 \cdot 10^{15}} = E_i + 0,009 \text{ эВ}.$$

20. В эксперименте по изучению эффекта Холла, проведенном с образцом кремния, получены следующие данные: $l=1,0\text{ см}$; $d=0,1\text{ см}$; $a=0,2\text{ см}$; $I=5\text{ мА}$; $B=1\text{ Тл}$; $U=0,245\text{ В}$ (в направлении тока I); $U_H=2,0\text{ мВ}$. Считая, что коэффициент Холла $r_H=1,18$, определите: а) тип полупроводника, из которого выполнен образец; б) концентрацию основных носителей; в) холловскую подвижность носителей; г) подвижность, связанную с протеканием основного тока; д) коэффициент диффузии.

Решение

а) Поскольку напряжение U_H положительно, образец выполнен из полупроводника р-типа.

б) $J = I/(ad)$; $\xi_H = U_H/a$; $\xi = U/l$;

$$R_H = \frac{r_H}{qp} = \frac{\xi_H}{JB} = \frac{U_H d}{IB} = \frac{U_H}{aJB};$$

$$p = \frac{r_H IB}{q U_H d} = 1,84 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3};$$

в) $\mu_p = \frac{r_H \sigma}{qp} = \sigma |R_H| = \frac{U_H l}{aUB} = 408 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1};$

г) $\frac{\mu_p (\text{эффект Холла})}{\mu_s (\text{электропроводность})} = r_H;$

$$\mu_H (\text{электропроводность}) = 408 / 1,18 = 346 \text{ см}^2 \text{В}^{-1} \text{с}^{-1};$$

$$\text{д) } D_p = \frac{kT}{q} \mu_p = 9 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}.$$

21. Процесс инжекции носителей приводит к разделению квазиуровней Ферми, относящихся к электронам и дыркам. Покажите, что при нарушении термодинамического равновесия произведение концентраций носителей остается тем же, что и в равновесном состоянии, если вместо ширины запрещенной зоны E использовать параметр $E_q = (E_{Fn} - E_{Fp})$.

Решение

В состоянии термодинамического равновесия

$$np = N_c N_v \exp[-E_g/(kT)],$$

где $E'_q = E_q - (E_{Fn} - E_{Fp})$ в соответствии с приведенными условиями. Если термодинамическое равновесие нарушается, то

$$n = n_i \exp\left(-\frac{E_{Fn} - E_i}{kT}\right) = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fn}}{kT}\right),$$

$$p = n_i \exp\left(-\frac{E_i - E_{Fp}}{kT}\right) = N_v \exp\left(-\frac{E_{Fp} - E_i}{kT}\right)$$

и поэтому

$$np = N_c N_v \exp\left(-\frac{E_q - (E_{Fn} - E_{Fp})}{kT}\right),$$

где $E_q = E_c - E_v$.

Итак, доказано, что произведение концентраций носителей оказывается одинаковым независимо от того, выполняются ли условия термодинамического равновесия, если считать, что ширина запрещенной зоны $E'_q = E_q - (E_{Fn} - E_{Fp})$.

22. Имеется образец полупроводника, размеры которого достаточно велики для того, чтобы можно было пренебречь влиянием поверхности. При $x=0$ существует однородный источник, создающий избыточную концентрацию неосновных носителей заряда, которая

изменяется лишь вдоль оси x . Внешнее электрическое поле отсутствует и система находится в стационарном состоянии. Полупроводник n -типа невырожден, равномерно легирован атомами примеси с концентрацией N_d , выполняются условия низкого уровня инжекции и квазинейтральности ($J_{dp}=J_{ap}$).

Принимая во внимание уравнение непрерывности вида

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} + \mu_n \cdot \frac{d}{dx}(n_p \cdot \varepsilon) + D_n \cdot \frac{d^2 n_p}{dx^2}, \quad (8.1)$$

найдите: а) концентрацию неосновных носителей заряда как функцию переменной x ; б) плотности токов диффузии неосновных и основных носителей заряда, считая, что $D_n=2D_p$; в) плотность дрейфового тока основных носителей; г) напряженность внутреннего электрического поля.

Решение

а) При заданном уровне инжекции и нейтральности полная скорость рекомбинации

$$V = p'_n / \tau_p, \quad p'_n = p_n - p_0.$$

Кроме того, поскольку система стационарна и одномерна, уравнение непрерывности (8.1) сводится к уравнению диффузии:

$$\frac{d^2 p'_n}{dx^2} = \frac{p'_n}{L_p^2}, \quad L_p = (D_p \tau_p)^{1/2}.$$

Приняв во внимание заданные граничные условия $p'_n(0)=0$ и $p'_n(\infty)=0$, запишем решение дифференциального уравнения диффузии в виде

$$p'_n = A \cdot \exp(-x/L_p).$$

При $x=0$ $\exp(0)=1$, поэтому $p_n(x) - p_{n0} = p'_n(0) = A$.

Таким образом, $p_n(x) = p_{n0} + p'_n(x) = p'_n(0) \exp(-x/L_p)$.

б) Плотность диффузионного тока неосновных носителей

$$J_{dp} = q D_p \cdot \frac{dp_n}{dx} = q \frac{D_p}{L_p} p'_n(0) \exp(-x/L_p).$$

Так как в соответствии с условием квазинейтральности $n_n - n_{n0} = n'_n \approx p'_n$, то плотность тока диффузии основных носителей

$$J_{dn} = qD_n \cdot \frac{dn_n}{dx} = qD_n \frac{dp_n}{dx} \approx 2qD_p \frac{dp_n}{dx} = -2J_{dp}.$$

$$\text{в)} \quad J = J_{an} + J_{dn} + J_{ap} + J_{dp} \approx J_{an} + J_{dn} + J_{dp};$$

$$J \approx J_{an} - J_{dp} = J_{an} - q \frac{D_p}{L_p} p'_n(0) \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right);$$

$$J_{an} = J + q \frac{D_p}{L_p} p'_n(0) \exp\left(-\frac{x}{L_p}\right);$$

г) Используя уравнение непрерывности, а также принимая во внимание то, что рассматриваемый режим является невырожденным, низок уровень инжекции и ярко выражен примесный характер электропроводности ($n'_n \approx p'_n \ll n_{n0} \approx N_d$), получаем

$$\xi_i = \frac{J_{an}}{q\mu_n n} \approx \frac{1}{q\mu_n N_d} \left[J + q \frac{D_p}{L_p} p'_n(0) \cdot e^{-x/L_p} \right].$$

8.2. Упражнения для самопроверки

Задача 1. В германиевом кубике длиной 11 мм, находящемся под напряжением 15 мВ, протекает ток силой 7 мА. Напряжение приложено к граням кубика. Задавшись подвижностью электронов, равной $0,4 \text{ м}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$, найти значение концентрации носителей. Чему равно время релаксации, если эффективная масса электрона в германии равна $0,12m_0$ (m_0 – масса свободного электрона)?

Задача 2. Показать, что наиболее вероятная энергия, которую электрон имеет в зоне проводимости, на $0,5kT$ выше дна зоны проводимости. Считая, что уровень Ферми расположен на несколько единиц kT ниже дна зоны проводимости, найти среднюю энергию электрона.

Задача 3. Учитывая, что в данном полупроводнике $N_n N_p = N_i^2$, найти отношение N_p/N_n , которое обеспечивает минимум проводимости. Пусть времена релаксации для электронов и дырок равны и $m_n^*/m_p^* = 0,5$.

Задача 4. Для получения кремниевого образца р-типа с удельным сопротивлением 11 Ом·м его необходимо легировать алюминием. Пусть все атомы алюминия ионизированы и, принимая подвижность

дырок в кремнии равной $0,05 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, найти необходимую концентрацию алюминия.

Задача 5. Образец кремния легирован индием, акцепторный уровень для которого расположен на $0,17 \text{ эВ}$ выше границы валентной зоны. Найти, при какой концентрации примеси уровень Ферми совпал бы с примесным уровнем при 300К ? Определить долю заполненных в данном случае акцепторных уровней и концентрации основных и неосновных носителей, если $E_g=1,1 \text{ эВ}$, $m_n^*=0,26m_0$, $m_p^*=0,39m_0$, $\mu_n=0,15 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, $\mu_p=0,05 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$.

Задача 6. При абсолютной температуре T_1 полупроводник n-типа имеет проводимость σ . Оказалось, что при этой температуре вклад рассеяния на примесях и рассеяния на колебаниях решетки в процессе релаксации одинаков. Считая, что в диапазоне температур от T_1 до $2T_1$ плотность электронов возрастает с температурой квадратично, определить отношение $\sigma(2T_1)/\sigma(T_1)$.

Задача 7. В примесном полупроводнике скорость рекомбинации носителей равна скорости их генерации и задается выражением $r_{\text{прим}} = aN_p N_p$, где a – коэффициент пропорциональности. Показать, что в случае если концентрация неосновных носителей в полупроводнике n-типа превысит при $t = 0$ равновесное значение на $(\delta N_p)_0$, то избыточная концентрация будет стремиться с течением времени к нулю по закону

$$\delta N_p = (\delta N_p)_0 \exp(-t/\tau_p),$$

где $\tau_p = aN_p$.

При решении необходимо учесть, что скорость рекомбинации пропорциональна реальной концентрации носителей, в то время как скорость генерации остается постоянной.

Задача 8. В чем состоит качественное различие спектров поглощения полупроводников с прямыми и непрямыми переходами электронов?

Задача 9. Для образца собственного кремния с параметрами: $E_g=1,1 \text{ эВ}$, $m_n^*=0,26m_0$, $m_p^*=0,39m_0$, $\mu_n=0,155 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, $\mu_p=0,0052 \text{ м}^2/\text{В}\cdot\text{с}$, рассчитать сопротивление образца при комнатной температуре, при 350°С . Найти температурный коэффициент сопротивления, определяемый как $(1/R)(dR/dT)$. Как его использовать для измерения температуры?

Задача 10. Концентрация собственных носителей в некотором полупроводнике равна N_i . При легировании его донорной примесью с концентрацией N_0 изменяется концентрация как электронов, так и ды-

рок. Изобразить график зависимости относительных концентраций электронов N_n/N_i и дырок N_p/N_i от N_0/N_i в диапазоне $0 \leq N_0/N_i \leq 10$. Считать, что все донорные атомы ионизированы.

Задача 11. Вывести уравнение непрерывности для неосновных носителей в полупроводнике n-типа. При выводе учесть рекомбинацию избыточных носителей, введя время их жизни τ_p .

Задача 12. Определить удельную проводимость примесного полупроводника (σ), если: $m_p = 0,23 m_0$, $n = 2,7 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при $T = 390 \text{ K}$; $n_i = 1,8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при $T = 390 \text{ K}$; $\tau_m = 0,24 \cdot 10^{-12} \text{ с}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ к}$, $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, $m_n = 0,53 m_0$

Задача 13. Образец кремния n-типа, находящийся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 300 K, характеризуется следующими параметрами: удельное сопротивление 12 Ом·см; подвижность электронов $1450 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; подвижность дырок $670 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; собственная концентрация носителей $1,2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ и эффективная плотность уровней в зоне проводимости 10^{19} см^{-3} . Определите: а) концентрацию электронов и дырок; б) положение уровня Ферми; в) вероятность событий, состоящих в том, что донорный уровень занят или свободен. Известно, что $E_c - E_d = 50 \text{ мэВ}$.

Задача 14. Пусть в полупроводнике, легированном акцепторной примесью с концентрацией N_a , акцепторный уровень примеси располагается при $E_a = E_g/5$. При рабочей температуре $E_g = 20 \text{ кТ}$, $E_F = 5 \text{ кТ}$. Эффективные массы электронов и дырок $m_e^* = 0,12 m_0$, $m_p^* = m_0$. Найти для концентрации $N_a = 10^{23} \text{ м}^{-3}$: концентрацию ионизированных акцепторных атомов; концентрацию дырок и электронов и их отношение N_n/N_p ; рабочую температуру; ширину запрещенной области.

Задача 15. Образец арсенида галлия был легирован избыточным количеством мышьяка так, чтобы его удельное сопротивление составило 0,049 Ом·м. Однако на самом деле из-за присутствия неизвестной акцепторной примеси удельное сопротивление оказалось равным 0,061 Ом·м, хотя образец остался полупроводником n-типа. Найти значения концентраций атомов донорной и акцепторной примесей в образце. Пусть $\mu_n = 0,86 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ и все атомы примеси ионизированы.

Задача 16. Зависимость удельного сопротивления собственного германия от температуры приведена ниже:

T, K	385	455	556	714
ρ , Ом·м	0,028	0,0061	0,0013	0,000274

Считая, что приближенно подвижности дырок и электронов меняются при изменении температуры пропорционально $T^{-3/2}$, а ширина

запрещенной зоны не зависит от температуры, найти величину ширины запрещенной зоны E_g . При какой длине волны будет наблюдаться начало роста оптического поглощения?

Задача 17. Вывести выражение для энергии Ферми в собственном полупроводнике. Насколько близок уровень Ферми к середине запрещенной зоны в GaAs при комнатной температуре? Ширина запрещенной зоны равна 1,4 эВ, а эффективные массы электронов и дырок составляют соответственно 0,067 и 0,065 m_0 .

Задача 18. В структуре с германиевым p-n-переходом удельная проводимость p-области $\sigma_p=10^{14}$ Ом/м, а n-области $\sigma_n=10^2$ Ом/м. Подвижность электронов $\mu_n=0,39$ м²/В·с, $\mu_p=0,19$ м²/В·с. Вычислить:

- а) плотность обратного тока насыщения;
- б) отношение дырочной составляющей обратного тока насыщения к электронной, если $L_n=L_p=10^{-3}$ м;
- в) напряжение, при котором плотность прямого тока $j=10^5$ а/м².

Задача 19. В образец чистого кремния введены донорные атомы фосфора с концентрацией 10^{16} см⁻³. Предположим, что атомы фосфора распределены в кремнии равномерно. Атомная масса фосфора равна 31.

- а) Чему равно удельное сопротивление образца при 300 К?
- б) Какую долю по массе составляют донорные примеси?
- в) Если в добавление к фосфору введены 10^{17} см⁻³ атомов бора, распределенных равномерно, то каковы результирующее удельное сопротивление и тип проводимости (будет ли материал иметь проводимость p- или n-типа)?
- г) Изобразить диаграмму энергетических зон для случая в) и указать положение уровня Ферми.

Задача 20*. Найти равновесные концентрации электронов и дырок и положение уровня Ферми в кремнии при 27°C, если кремний содержит следующие концентрации легирующих примесей, создающих мелкие уровни:

- а) $1 \cdot 10^{16}$ см⁻³ атомов бора,
- б) $3 \cdot 10^{16}$ см⁻³ атомов мышьяка и $2,9 \cdot 10^{16}$ см⁻³ атомов бора.

Задача 21. Образец кремния n-типа имеет равномерную концентрацию $N_d=10^{16}$ см⁻³ атомов мышьяка, а образец кремния p-типа имеет $N_a=10^{15}$ см⁻³ атомов бора. Для каждого полупроводникового материала определить:

- а) температуру, при которой ионизирована половина примесных атомов. Предполагается, что все подвижные электроны и дырки поступают от легирующих примесей;

б) температуру, при которой собственная концентрация n_i превосходит концентрацию примесей в 10 раз. Зависимости $n_i(T)$ приведены в табл. 1.4;

в) равновесную концентрацию неосновных носителей при 300 К. Предполагается, что примеси полностью ионизированы;

г) положение уровня Ферми относительно края валентной зоны E_v в каждом материале при 300 К. Положение уровня Ферми, если оба типа примесей имеются в одном образце.

Задача 22. Образец кремния n-типа проводимости имеет при 27°C удельное сопротивление 5 Ом·см. Найти для теплового равновесия концентрацию дырок при 27, 100 и 500 °C (необходимые данные взять из таблиц и рисунков).

Задача 23. а) Покажите, что эффективная плотность энергетических уровней в пределах зоны шириной $1,2kT$ вблизи края зоны проводимости составляет

$$N_c = \frac{11,14}{h^3} (2mkT)^{3/2}.$$

б) Поясните физический смысл данного результата.

в) Постройте график распределения Ферми-Дирака $f(E)$ для значений аргумента, близких уровню Ферми $E_F = 1$ эВ.

г) Дайте физическую интерпретацию данной кривой.

Задача 24. Вычислите вероятность нахождения электронов на уровнях $E_F + 0,1$ эВ и $E_F - 0,1$ эВ при температурах 0, 150, 300 и 1000 К. Представьте результаты в табличной форме.

Задача 25. Вместо распределения Ферми-Дирака $f(E)$, определяемого формулой

$$f(E) = [1 + \exp((E - E_F)/(kT))]^{-1} \quad (3.10),$$

используют распределение Максвелла-Больцмана $f_{мб}$ [см. формулу $f_{мб}(E) = C \cdot e^{-E/(kT)}$]; уровень E находится вблизи уровня E_F . Какова относительная ошибка такой замены при $E - E_F = kT$ и при $E - E_F = 4kT$?

Задача 26. Покажите, что вероятность того, что состояние с энергией, превышающей уровень Ферми E_F на величину ΔE , занято, в точности совпадает с вероятностью иметь свободное состояние, энергия которого меньше значения E_F на ту же величину ΔE .

Задача 27. а) Вычислите эффективную плотность уровней N_c и N_v для кремния при комнатной температуре. Считайте, что эффективные массы носителей выражаются через массу электрона m следующим

образом: $m_n = 1,1 m$; $m_p = 0,56m$. б) Определите собственную концентрацию носителей.

Задача 28. а) Получите выражение, связывающее положение собственного уровня Ферми E_i с положением центра запрещенной зоны.

б) Подсчитайте смещение уровня E_i , относительно центра запрещенной зоны для германия при комнатной температуре. Считайте, что эффективные массы носителей выражаются через массу электрона m следующим образом: $m_n = 1,1 m$; $m_p = 0,56m$.

Задача 29. Имеется полупроводник р-типа. Каким будет положение уровня Ферми относительно энергии акцепторного уровня при $T=0$ и при некоторой температуре $T=T_{max}$?

а) Используя выражения

$$N_{dn} = \frac{N_d}{1 + 1/2 \exp[(E_d - E_F)/(kT)]},$$

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right),$$

покажите, что относительная доля ионизированных примесей зависит от температуры следующим образом:

$$\frac{n}{N_d} = \frac{-\frac{N_c}{N_d} + \left[\left(\frac{N_c}{N_d} \right)^2 + 8 \left(\frac{N_c}{N_d} \right) \exp\left(\frac{E_c - E_d}{kT} \right) \right]^{1/2}}{4 \exp\left(\frac{E_c - E_d}{kT} \right)}.$$

б) Имеется образец кремния, легированный атомами фосфора, причем $E_c - E_d = 0,044$ эВ. Какова относительная доля ионизированной примеси при $T=50$ и 300K ? При какой температуре ионизированными станут 95% примесных атомов?

Задача 30. Образец кремния находится в состоянии термодинамического равновесия и содержит донорные примеси с концентрацией $N_d = 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Найдите температуру, при которой $p=0,1n$. Положите, что эта температура превышает 50K .

Задача 31. Имеется равновесный образец германия при температуре 400 K . Вычислите: а) концентрацию дырок и электронов, если образец легирован атомами сурьмы (элемент V группы) с концентрацией

$2,4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$; б) концентрацию носителей, которая установится после того, как проведено легирование атомами индия (элемент III группы) с концентрацией $4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

Задача 32. Полупроводник, в котором концентрации примесей N_d и N_a одинаковы, называют компенсированным. В таком материале концентрация дырок p и n электронов совпадает с собственной концентрацией n_i . Будет ли компенсированный материал иметь то же удельное сопротивление, что и нелегированный собственный полупроводник? Поясните ответ.

Задача 33. а) Покажите, что в слаболегированном полупроводнике p -типа удельное сопротивление максимально, если $\mu_n/\mu_p > 1$.

б) Вычислите концентрацию акцепторных атомов акцепторной примеси N_a , которая потребуется для достижения максимального удельного сопротивления. Примите для кремния $\mu_n/\mu_p = 2,18$; $n_i = 1,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

Задача 34. В образце кремния электрон массой m имеет тепловую энергию порядка kT , которая связана со средней скоростью теплового движения соотношением $E = 3kT/2$. Если известно, что $\mu_n = 1350 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, покажите, что (при комнатной температуре) скорость дрейфа электронов мала по сравнению со скоростью теплового движения, если напряженность внешнего поля 10 В/см . Убедитесь, что при напряженности поля 1000 В/см выполняется обратное неравенство.

Задача 35. Пластина из германия n -типа имеет удельное сопротивление $\rho = 0,1 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ и ширину $d = 10^{-2} \text{ см}$. К пластине приложена разность потенциалов $U = 1 \text{ В}$. Вычислите: а) плотность тока; б) время, которое потребуется для того, чтобы носитель заряда пересек пластину; в) отношение плотностей токов дырок и электронов. Положите, что $\mu_n = 3900 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_p = 1900 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; $n_i = 2,4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

Задача 36. Имеется образец германия с поперечным сечением $0,1 \times 0,2 \text{ см}$ и концентрацией легирующих примесей 10^{17} см^{-3} . Вдоль образца протекает ток $0,6 \text{ А}$. Перпендикулярно направлению тока действует магнитное поле с индукцией $0,5 \text{ Тл}$. Вычислите напряжение Холла между контактами к узким сторонам боковой поверхности образца.

Задача 37. В приборе для исследования эффекта Холла в образце германия при $l = 2,5 \text{ мм}$; $d = 50 \text{ мкм}$; $a = 0,25 \text{ мм}$; $I = 2 \text{ мА}$; $B = 5 \cdot 10^{-1} \text{ Тл}$ получено $U = 85 \text{ мВ}$ (в направлении тока I); $U_H = -1,25 \text{ мВ}$. Определите: а) тип основных носителей; б) их концентрацию; в) коэффициент Холла; г) подвижность основных носителей.

Задача 38. В образце кремния p -типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x

описывается функцией $N_a(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5$ мкм. Считая, что $p(x) = N_a(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля, а также плотность токов дрейфа и диффузии для дырок в зависимости от величины N_a . Исходные данные: $D_p = 10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 40 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 39. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию 10^{18} электронно-дырочных пар в секунду.

а) Подсчитайте избыточную концентрацию носителей, а также относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n = \tau_p = 2 \text{ мс}$.

б) Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t = t_0$. Как изменяется во времени избыточная концентрация дырок при $t > t_0$? За какое время избыточная концентрация снизится до 5% начального значения?

Задача 40. Образец арсенида галлия, легированный донорной примесью с концентрацией $2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, подвергается действию некоторого внешнего возбуждения, в результате которого каждую секунду в 1 см^3 генерируется 10^{20} электронно-дырочных пар. Считается, что имеет место низкий уровень инжекции. Вычислите: а) коэффициент рекомбинации, если $\tau_n = \tau_p = 50 \text{ нс}$; б) избыточную концентрацию в стационарном режиме [см. формулу $G = r(n_0 + n') \cdot (p_0 + p') - r \cdot n_0 p_0$].

Задача 41. Определите положение квазиуровней Ферми в полупроводнике, легированном акцепторной примесью с концентрацией 10^{16} см^{-3} при комнатной температуре. Известно, что $G = 10^{18} \text{ см}^3/\text{с}$; $\tau_n = 10 \text{ мкс}$; $n_i = 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

9. ВАРИАНТЫ ДОМАШНИХ ЗАДАНИЙ

Домашнее задание для заочной формы обучения содержит изучение теоретического курса «Основы физики твердого тела», ответы на вопросы и подробные описания решений задач. Вопросы по теоретической части домашнего задания прилагаются к каждому конкретному варианту, а решения задач строго индивидуальны. Таким образом, домашнее задание считается выполненным, если в нем приведены ответы на теоретические вопросы и решения задач по выбранному варианту.

9.1. Вопросы к теоретической части домашнего задания

1. Объясните процесс образования энергетических зон в твердом теле.
2. Что такое энергетическая, разрешенная, валентная, свободная зоны и зона проводимости?
3. От чего зависит ширина запрещенной зоны и число энергетических уровней в ней?
4. Каков физический смысл понятия уровня Ферми?
5. Какова зонная структура изолятора, проводника и полупроводника?
6. Чем вызвана необходимость введения понятия эффективной массы носителей заряда в кристалле и каков физический смысл понятия эффективной массы электрона?
7. Что такое дырка с точки зрения зонной теории?
8. Объясните возникновение локальных энергетических уровней в кристалле и образование примесных зон.
9. Объясните механизм примесной и собственной проводимости полупроводников.
10. Объясните влияние примесей на электропроводность металлов и полупроводников.
11. Поясните возможность управления величиной и знаком электропроводности полупроводников путем введения примесей.
12. Почему измерения удельного сопротивления полупроводников производят в темноте?
13. Назовите причины температурной зависимости ширины запрещенной зоны полупроводника.
14. Объясните зависимость положения уровня Ферми и концентрации свободных носителей заряда в полупроводниках от температуры.
15. Сформулируйте закон действующих масс.

16. Что такое вырожденный и невырожденный полупроводники и где расположен уровень Ферми в них?

17. Объясните температурную зависимость подвижности носителей заряда в полупроводниках.

18. Чем объясняется различный ход температурной зависимости сопротивления у металлов и полупроводников?

19. Объясните физический смысл энергии активации и параметров температурной зависимости сопротивления у металлов и полупроводников: τ – постоянная времени, α – температурный коэффициент сопротивления.

9.2. Варианты задач домашнего задания

ВАРИАНТ №1

Задача 1. Образец кремния легирован индием, акцепторный уровень для которого расположен на 0,17 эВ выше границы валентной зоны. Найти, при какой концентрации примеси уровень Ферми совпадет с примесным уровнем при 300К? Определить долю заполненных в данном случае акцепторных уровней и концентрации основных и неосновных носителей, если $E_g = 1,1$ эВ, $m_n^* = 0,26 m_0$, $m_p^* = 0,39 m_0$, $\mu_n = 0,15$ м²/В·с, $\mu_p = 0,05$ м²/В·с.

Задача 2. Для образца собственного кремния с параметрами: $E_g = 1,1$ эВ, $m_n^* = 0,26 m_0$, $m_p^* = 0,39 m_0$, $\mu_n = 0,155$ м²/В·с, $\mu_p = 0,0052$ м²/В·с рассчитать сопротивление образца при комнатной температуре, при 350⁰С. Найти температурный коэффициент сопротивления, определяемый как $(1/R)(dR/dT)$. Как его использовать для измерения температуры?

Задача 3. Образец кремния n-типа, находящийся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 300 К, характеризуется следующими параметрами: удельное сопротивление 12 Ом·см; подвижность электронов 1450 см²·В⁻¹·с⁻¹; подвижность дырок 670 см²·В⁻¹·с⁻¹; собственная концентрация носителей $1,2 \cdot 10^{10}$ см⁻³ и эффективная плотность уровней в зоне проводимости 10^{19} см⁻³. Определите: а) концентрацию электронов и дырок; б) положение уровня Ферми; в) вероятность событий, состоящих в том, что донорный уровень занят или свободен. Известно, что $E_c - E_d = 50$ мэВ.

Задача 4. Образец кремния n-типа имеет равномерную концентрацию $N_d = 10^{16}$ см⁻³ атомов мышьяка, а образец кремния p-типа имеет $N_a = 10^{15}$ см⁻³ атомов бора. Предполагается, что все подвижные электроны и дырки поступают от легирующих примесей. Для каждого полу-

проводникового материала определить температуру, при которой ионизирована половина примесных атомов.

Задача 5. Вычислите эффективную плотность уровней N_c и N_v для кремния при комнатной температуре. Считайте, что эффективные массы носителей выражаются через массу электрона следующим образом: $m_n = 1,1m$; $m_p = 0,56m$.

Задача 6. В образце кремния р-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_a(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5 \text{ мкм}$. Считая, что $p(x) = N_a(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля для дырок в зависимости от величины N_a . Исходные данные: $D_p = 10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 40 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию 10^{18} электронно-дырочных пар в секунду.

Подсчитайте избыточную концентрацию носителей, если $\tau_n = \tau_p = 2 \text{ мс}$.

ВАРИАНТ №2

Задача 1. Поверхность кремния (Si) в качестве легирующей примеси содержит 10^4 атомов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $3 \cdot 10^{16} \text{ ат/см}^3$ и после этого равномерно легируется бором (B) до 10^{18} ат/см^3 . Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активирует все примеси. Определить концентрацию основных носителей заряда.

Задача 2. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при $T = 300 \text{ К}$ оказалась равной $0,5 \cdot 10^{-5} \text{ см}^{-3}$. Найти значение произведения эффективных масс электрона и дырки, если известно, что ширина запрещенной зоны меняется по закону $E_g = (0,785 - 4 \cdot 10^{-3} T) \text{ эВ}$.

Задача 3. Определить зависимость положения середины запрещенной зоны от температуры в собственном полупроводнике (E_i).

Задача 4. Образец кремния n-типа имеет равномерную концентрацию $N_d = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов мышьяка, а образец кремния р-типа имеет $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ атомов бора. Предполагается, что все подвижные электроны и дырки поступают от легирующих примесей. Для каждого полупроводникового материала определить температуру, при которой собственная концентрация n_i превосходит концентрацию примесей в 10 раз.

Задача 5. Определите собственную концентрацию носителей для кремния при комнатной температуре. Считайте, что эффективные массы носителей выражаются через массу электрона следующим образом: $m_n = 1,1m$; $m_p = 0,56m$.

Задача 6. В образце кремния р-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_a(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5 \text{ мкм}$. Считая, что $p(x) = N_a(x)$, вычислите плотность тока дрейфа для дырок в зависимости от величины N_a . Исходные данные: $D_p = 10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 40 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию 10^{18} электронно-дырочных пар в секунду.

Подсчитайте относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n = \tau_p = 2 \text{ нс}$.

ВАРИАНТ №3

Задача 1. Известно, что поверхность германия (Ge) в качестве легирующей примеси содержит 10^{-3} атомных процентов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $3,45 \cdot 10^{14} \text{ ат/см}^3$ и после этого равномерно легируется бором (B) до $9,7 \cdot 10^{19} \text{ ат/см}^3$. Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активирует все примеси. Какой тип проводимости будет иметь образец германия?

Задача 2. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при $T = 500 \text{ К}$ оказалась равной $2 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$. Найти значение произведения эффективных масс электрона и дырки, если известно, что ширина запрещенной зоны меняется по закону $E_g = (0,785 - 4 \cdot 10^{-4} T) \text{ эВ}$.

Задача 3. Образец арсенида галлия был легирован избыточным количеством мышьяка так, чтобы его удельное сопротивление составило $0,049 \text{ Ом} \cdot \text{м}$. Однако на самом деле из-за присутствия неизвестной акцепторной примеси удельное сопротивление оказалось равным $0,061 \text{ Ом} \cdot \text{м}$, хотя образец остался полупроводником n-типа. Найти значения концентраций атомов донорной и акцепторной примесей в образце. Пусть $\mu_n = 0,86 \text{ м}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ и все атомы примеси ионизированы.

Задача 4. Образец кремния n-типа имеет равномерную концентрацию $N_d = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов мышьяка, а образец кремния p-типа имеет $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ атомов бора. Предполагается, что все подвижные электроны и дырки поступают от легирующих примесей. Для каждого полу-

проводникового материала определить равновесную концентрацию неосновных носителей при 300 К.

Задача 5. Рассчитать величину смещения уровня E_i относительно центра запрещенной зоны для германия при комнатной температуре. Считайте, что эффективные массы носителей выражаются через массу электрона следующим образом: $m_n = 1,1m$; $m_p = 0,56m$.

Задача 6. В образце кремния р-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_a(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5 \text{ мкм}$. Считая, что $p(x) = N_a(x)$, вычислите плотность тока диффузии для дырок в зависимости от величины N_a . Исходные данные: $D_p = 10^{-3} \cdot \text{м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 40 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию 10^{18} электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n = \tau_p = 2 \text{ нс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t = t_0$. Как изменяется во времени избыточная концентрация дырок при $t > t_0$?

ВАРИАНТ №4

Задача 1. Известно, что поверхность германия (Ge) в качестве легирующей примеси содержит 10^{-3} атомных процентов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $3 \cdot 10^{14} \text{ ат/см}^3$ и после этого равномерно легируется бором (B) до 10^{19} ат/см^3 . Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активирует все примеси. Чему будет равна концентрация основных носителей?

Задача 2. В образец чистого кремния введены донорные атомы фосфора с концентрацией 10^{16} см^{-3} . Предположим, что атомы фосфора распределены в кремнии равномерно. Атомная масса фосфора равна 31. Чему равно удельное сопротивление образца при 300 К?

Задача 3. Определить дрейфовую скорость электрона, если удельное сопротивление образца $0,1 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, длина образца 20 см, а напряжение, прикладываемое к образцу, равно 20 В, $n = 6,2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ при $T = 100 \text{ К}$.

Задача 4. Образец кремния n-типа имеет равномерную концентрацию $N_d = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов мышьяка, а образец кремния р-типа имеет $N_a = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ атомов бора. Предполагается, что все подвижные электроны и дырки поступают от легирующих примесей. Для каждого полупроводникового материала определить: положение уровня Ферми от-

носителем края валентной зоны E_v в каждом материале при 300 К; положение уровня Ферми, если оба типа примесей имеются в одном образце.

Задача 5. Получите выражение, связывающее положение собственного уровня Ферми E_i с положением центра запрещенной зоны. Считайте, что эффективные массы носителей выражаются через массу электрона следующим образом: $m_n = 1,1m$; $m_p = 0,56m$.

Задача 6. В образце кремния р-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_a(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,19$ мкм. Считая, что $p(x) = N_a(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля для дырок в зависимости от величины N_a . Исходные данные: $D_p = 10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 40 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию 10^{18} электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n = \tau_p = 2 \text{ мс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t = t_0$. За какое время избыточная концентрация снизится до 5% начального значения?

ВАРИАНТ №5

Задача 1. Известно, что поверхность кремния (Si) в качестве легирующей примеси содержит 10^{-6} атомных процентов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $3 \cdot 10^{16} \text{ ат/см}^3$ и после этого равномерно легируется бором (B) до 10^{18} ат/см^3 . Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активирует все примеси. Какой тип проводимости будет иметь образец кремния?

Задача 2. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при $T = 100 \text{ К}$ оказалась равной $1,2 \cdot 10^3 \text{ см}^{-3}$. Найти значение произведения эффективных масс электрона и дырки, если известно, что ширина запрещенной зоны меняется по закону $E_g = (0,785 - 4 \cdot 10^{-4} T) \text{ эВ}$.

Задача 3. Определить дрейфовую скорость электрона, если удельное сопротивление образца $0,007 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, длина образца 2 см , а напряжение, прилагаемое к образцу равно 80 В , $n = 6,2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при $T = 300 \text{ К}$.

Задача 4*. Образец кремния n-типа имеет при 27°С удельное сопротивление $5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$. Найти для теплового равновесия концентрацию дырок при 27°С (необходимые данные взять из таблиц и рисунков).

Задача 5. Имеется полупроводник р-типа. Каким будет положение уровня Ферми относительно энергии акцепторного уровня при $T=0$ и при некоторой температуре $T=T_{max}$?

Задача 6. В образце кремния р-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_a(x)=N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0=0,15$ мкм. Считая, что $p(x)=N_a(x)$, вычислите плотность тока дрейфа для дырок в зависимости от величины N_a . Исходные данные: $D_p=10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n=40 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d=10^{18} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $5 \cdot 10^{19}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте избыточную концентрацию носителей, если $\tau_n=\tau_p=2 \text{ нс}$.

ВАРИАНТ №6

Задача 1. Известно, что поверхность кремния (Si) в качестве легирующей примеси содержит 10^6 атомных процентов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $5 \cdot 10^{16} \text{ ат/см}^3$ и после этого равномерно легируется бором (B) до $7 \cdot 10^{18} \text{ ат/см}^3$. Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активирует все примеси. Какой тип проводимости будет иметь образец кремния? Чему будет равна концентрация основных носителей?

Задача 2. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при $T=400 \text{ К}$ оказалась равной $1,38 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Определить величину произведения эффективных масс электрона и дырки, если известно, что ширина запрещенной зоны меняется по закону $E_g=(0,785-4 \cdot 10^{-4}T) \text{ эВ}$.

Задача 3. Определить дрейфовую скорость электрона, если удельное сопротивление образца $0,05 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, длина образца 25 см , а напряжение, прикладываемое к образцу, равно 180 В , $n=6,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при $T=350 \text{ К}$.

Задача 4. Образец кремния n-типа имеет при 27°С удельное сопротивление $5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$. Найти для теплового равновесия концентрацию дырок при 100°С (необходимые данные взять из таблиц и рисунков).

Задача 5. Имеется полупроводник n-типа. Каким будет положение уровня Ферми относительно энергии донорного уровня при $T=0$ и при некоторой температуре $T=T_{max}$?

Задача 6. В образце кремния р-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_a(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,8$ мкм. Считая, что $p(x) = N_a(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля для дырок в зависимости от величины N_a . Исходные данные: $D_p = 10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 40 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 2,2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $2,5 \cdot 10^{19}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n = \tau_p = 2 \text{ мс}$.

ВАРИАНТ №7

Задача 1. Известно, что поверхность кремния (Si) в качестве легирующей примеси содержит $5 \cdot 10^3$ атомных процентов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $3,54 \cdot 10^{16} \text{ ат/см}^3$ и после этого равномерно легируется бором (B) до $5,34 \cdot 10^{18} \text{ ат/см}^3$. Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активирует все примеси. Какой тип проводимости будет иметь образец кремния? Чему будет равна концентрация основных носителей?

Задача 2. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при $T = 400 \text{ К}$ оказалась равной $0,5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Определить величину произведения эффективных масс электрона и дырки, если известно, что ширина запрещенной зоны меняется по закону $E_g = (0,785 - 4 \cdot 10^{-5} T) \text{ эВ}$.

Задача 3. Определить удельную проводимость примесного полупроводника (σ), если: $m_p = 0,37 m_0$, $n = 1,37 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при $T = 400 \text{ К}$; $n_i = 1,38 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при $T = 400 \text{ К}$; $\tau_m = 0,25 \cdot 10^{-12} \text{ с}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ к}$, $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, $m_n = 0,56 m_0$.

Задача 4. Зависимость удельного сопротивления собственного германия от температуры приведена ниже:

$T, \text{ К}$	385	455	556	714
$\rho, \text{ Ом} \cdot \text{м}$	0,028	0,0061	0,0013	0,000274

Считая, что приближенно подвижности дырок и электронов меняются при изменении температуры пропорционально $T^{-3/2}$, а ширина запрещенной зоны не зависит от температуры, найти величину шири-

ны запрещенной зоны E_g . При какой длине волны будет наблюдаться начало роста оптического поглощения?

Задача 5. Используя выражения

$$N_{dn} = \frac{N_d}{1 + 1/2 \exp[(E_d - E_F)/(kT)]}; \quad n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right),$$

покажите, что относительная доля ионизированных примесей зависит от температуры следующим образом:

$$\frac{n}{N_d} = \frac{-\frac{N_c}{N_d} + \left[\left(\frac{N_c}{N_d} \right)^2 + 8 \left(\frac{N_c}{N_d} \right) \exp\left(\frac{E_c - E_d}{kT} \right) \right]^{1/2}}{4 \exp\left(\frac{E_c - E_d}{kT} \right)}$$

Задача 6. В образце кремния р-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_a(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5$ мкм. Считая, что $p(x) = N_a(x)$, вычислите плотность тока диффузии для дырок в зависимости от величины N_a . Исходные данные: $D_p = 10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 40 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $4,5 \cdot 10^{19}$ электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n = \tau_p = 2 \text{ нс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t = t_0$. Как изменяется во времени избыточная концентрация дырок при $t > t_0$?

ВАРИАНТ №8

Задача 1. Известно, что поверхность кремния (Si) в качестве легирующей примеси содержит $3,3 \cdot 10^{-5}$ атомных процентов мышьяка (As). Затем он легируется фосфором (P) до $3,3 \cdot 10^{15} \text{ ат/см}^3$ и после этого равномерно легируется бором (B) до $3,9 \cdot 10^{18} \text{ ат/см}^3$. Полученная структура проходит термический отжиг, который полностью активирует все примеси. Какой тип проводимости будет иметь образец кремния? Чему будет равна концентрация основных носителей?

Задача 2. Концентрация электронов в собственном полупроводнике при $T = 400 \text{ К}$ оказалась равной $3,2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Определить величину

произведения эффективных масс электрона и дырки, если известно, что ширина запрещенной зоны меняется по закону $E_g = (0.785 - 4 \cdot 10^{-3} T)$ эВ.

Задача 3. Определить удельную проводимость примесного полупроводника (σ), если: $m_p = 0,37m_0$, $n = 1,37 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ при $T = 100\text{K}$; $n_i = 0,8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ при $T = 100\text{K}$; $\tau_m = 0,25 \cdot 10^{-12} \text{ с}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ К}$, $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, $m_n = 0,56 m_0$.

Задача 4. Покажите, что эффективная плотность энергетических уровней в пределах зоны шириной $1,2kT$ вблизи края зоны проводимости составляет

$$N_c = \frac{11,14}{h^3} (2mkT)^{3/2}.$$

Задача 5. Имеется образец кремния, легированный атомами фосфора, причем $E_c - E_d = 0,044 \text{ эВ}$. Какова относительная доля ионизированной примеси при $T = 50$ и 300 K ?

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации доноров вдоль оси x описывается функцией $N_d(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,3 \text{ мкм}$. Считая, что $n(x) = N_d(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n = 10^{-6} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 80 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец германия, находящийся при комнатной температуре, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $5 \cdot 10^{19}$ электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n = \tau_p = 2 \text{ мс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t = t_0$. За какое время избыточная концентрация снизится до 5% начального значения?

ВАРИАНТ №9

Задача 1. В исследуемом полупроводнике концентрация электронов при $T = 400\text{K}$ составляла $1,3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а при 350K – $6,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Найти ширину запрещенной зоны материала, считая, что она меняется с температурой по линейному закону $E_g = (0,785 - \xi T) \text{ эВ}$, где $\xi = 4 \cdot 10^{-4}$.

Задача 2. Вычислить собственную концентрацию носителей заряда в кремнии при $T = 300\text{K}$, если ширина его запрещенной зоны $E_g = 1,12 \text{ эВ}$, а эффективные массы состояний $m_c = 1,05m_0$, $m_v = 0,56 m_0$.

Задача 3. Определить удельную проводимость примесного полупроводника (σ), если: $m_p = 0,37m_0$, $n = 1,37 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ при $T = 300\text{K}$;

$n_i = 1,38 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ при $T = 300 \text{ К}$; $\tau_m = 0,25 \cdot 10^{-12} \text{ с}$, $e = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ к}$, $m_0 = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, $m_n = 0,56 m_0$.

Задача 4. Эффективная плотность энергетических уровней в пределах зоны шириной $1,2 \text{ кТ}$ вблизи края зоны проводимости составляет

$$N_c = \frac{11,14}{h^3} (2mkT)^{3/2}.$$

Поясните физический смысл данного результата.

Задача 5. Имеется образец кремния, легированный атомами фосфора, причем $E_c - E_d = 0,044 \text{ эВ}$. При какой температуре ионизированными станут 95% примесных атомов?

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации доноров вдоль оси x описывается функцией $N_n(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,33 \text{ мкм}$. Считая, что $n(x) = N_d(x)$, вычислите плотность токов дрейфа для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n = 2 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 82 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 350 К , подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,5 \cdot 10^{19}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n = \tau_p = 2 \text{ нс}$.

ВАРИАНТ №10

Задача 1. В исследуемом полупроводнике концентрация электронов при $T = 500 \text{ К}$ составляла $1,3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$, а при 350 К – $6,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Найти ширину запрещенной зоны материала, считая, что она меняется с температурой по линейному закону $E_g = (0,785 - \xi T) \text{ эВ}$, где $\xi = 4 \cdot 10^{-3}$.

Задача 2. Вычислить собственную концентрацию носителей заряда в германии при $T = 300 \text{ К}$, если ширина его запрещенной зоны $E_g = 0,7 \text{ эВ}$, а эффективные массы состояний $m_c = 1,05 m_0$, $m_v = 0,56 m_0$.

Задача 3. Образец кремния n-типа, находящийся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 300 К , характеризуется следующими параметрами: удельное сопротивление $4,95 \text{ Ом} \cdot \text{см}$; подвижность электронов $1600 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; подвижность дырок $633 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; собственная концентрация носителей $1,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ и эффективная плотность уровней в зоне проводимости 10^{19} см^{-3} . Определить положение уровня Ферми, если известно, что $E_c - E_d = 50 \text{ мэВ}$.

Задача 4. Постройте график распределения Ферми-Дирака $f(E)$ для значений аргумента, близких к уровню Ферми $E_F = 1$ эВ.

Задача 5. Образец кремния находится в состоянии термодинамического равновесия и содержит донорные примеси с концентрацией $N_d = 4 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Найдите температуру, при которой $p = 0,1n$. Покажите, что эта температура превышает 50К.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации доноров вдоль оси x описывается функцией $N_n(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,44 \text{ мкм}$. Считая, что $n(x) = N_d(x)$, вычислите плотность тока дрейфа для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n = 3,22 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$; $\mu_n = 80,99 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 350К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 7,7 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,5 \cdot 10^{19}$ электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n = \tau_p = 5,44 \text{ нс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t = t_0$. Как изменяется во времени избыточная концентрация дырок при $t > t_0$?

ВАРИАНТ №11

Задача 1. В исследуемом полупроводнике концентрация электронов при $T = 360 \text{ К}$ составляла $1,31 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, а при 300 К – $6,21 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Найдите ширину запрещенной зоны материала, считая, что она меняется с температурой по линейному закону $E_g = (0,785 - \xi T) \text{ эВ}$, где $\xi = 4 \cdot 10^{-5}$.

Задача 2. Вычислить собственную концентрацию носителей заряда в кремнии при $T = 200 \text{ К}$, если ширина его запрещенной зоны $E_g = 1,12 \text{ эВ}$, а эффективные массы состояний $m_c = 1,05 m_0$, $m_v = 0,56 m_0$.

Задача 3. Образец кремния n-типа, находящийся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 300 К, характеризуется следующими параметрами: удельное сопротивление $5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$; подвижность электронов $1600 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; подвижность дырок $655 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; собственная концентрация носителей $1,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ и эффективная плотность уровней в зоне проводимости $2,33 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Определить вероятность событий, состоящих в том, что донорный уровень занят и свободен, если известно, что $E_c - E_d = 60 \text{ мэВ}$.

Задача 4. Дайте физическую интерпретацию данной кривой распределения Ферми—Дирака $f(E)$ для значений аргумента, близких уровню Ферми $E_F = 1$ эВ.

Задача 5. Образец кремния находится в состоянии термодинамического равновесия и содержит донорные примеси с концентрацией $N_d = 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Найдите температуру, при которой $p = 0,2n$.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_a(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5 \text{ мкм}$. Считая, что $n(x) = N_d(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля, а также плотность токов дрейфа и диффузии для дырок в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_p = 10^{-6} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$; $\mu_n = 84,11 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 350К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 3,12 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,5 \cdot 10^{19}$ электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n = \tau_p = 5 \text{ нс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t = t_0$. За какое время избыточная концентрация снизится до 3% начального значения?

ВАРИАНТ №12

Задача 1. В исследуемом полупроводнике концентрация электронов при $T = 450 \text{ К}$ составляла $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а при 300 К – $1,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Найти ширину запрещенной зоны материала, считая, что она меняется с температурой по линейному закону.

Задача 2. Вычислить собственную концентрацию носителей заряда в германии при $T = 200 \text{ К}$, если ширина его запрещенной зоны $E_g = 0,7 \text{ эВ}$, а эффективные массы состояний $m_c = 1,05 m_0$, $m_v = 0,56 m_0$.

Задача 3. Образец кремния p-типа, находящийся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 300 К, характеризуется следующими параметрами: удельное сопротивление $5 \text{ Ом} \cdot \text{см}$; подвижность электронов $800 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; подвижность дырок $300 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$; собственная концентрация носителей $1,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$ и эффективная плотность уровней в зоне проводимости 10^{19} см^{-3} . Определить концентрацию электронов и дырок, если известно, что $E_c - E_d = 30 \text{ мэВ}$.

Задача 4. Вычислите вероятность нахождения электронов на уровнях $E_F + 0,1 \text{ эВ}$ и $E_F - 0,1 \text{ эВ}$ при температурах 0 и 150 К. Представьте результаты в табличной форме.

Задача 5. Образец кремния находится в состоянии термодинамического равновесия и содержит донорные примеси с концентрацией $N_d = 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Найдите температуру, при которой $p = 0,05n$.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации доноров вдоль оси x описывается функцией $N_n(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5 \text{ мкм}$. Считая, что $p(x) = N_d(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n = 10^{-7} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 180 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 350К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{17} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,5 \cdot 10^{19}$ электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n = \tau_p = 7 \text{ нс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t = t_0$. За какое время избыточная концентрация снизится до 3% начального значения?

ВАРИАНТ №13

Задача 1. Найти положение уровня Ферми и температурную зависимость концентрации электронов в собственном полупроводнике. Как изменится концентрация электронов при изменении температуры от 200К до 300К, если $E_d = (0,785 - \xi T) \text{ эВ}$, где $\xi = 4 \cdot 10^{-4}$.

Задача 2. Вычислить положение уровня Ферми при $T = 300 \text{ К}$ в кристаллах германия, содержащих $5 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ атомов галлия.

Задача 3. Найдите положение уровней Ферми в германии, находящемся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 400К. Материал легирован акцепторными атомами с концентрацией 10^{18} см^{-3} , которые ионизированы на 100%. При комнатной температуре T_k имеет место равенство

$$n_i^2 = 3,1 \cdot 10^{32} T_k^3 \exp\left(\frac{-9100}{T_k}\right).$$

Задача 4. Вычислите вероятность нахождения электронов на уровнях $E_F + 0,1 \text{ эВ}$ и $E_F - 0,1 \text{ эВ}$ при температурах 300 и 1000К. Представьте результаты в табличной форме.

Задача 5. Имеется равновесный образец германия при температуре 400 К. Вычислить концентрацию дырок и электронов, если образец легирован атомами сурьмы (элемент V группы) с концентрацией $2,4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, после чего проведено легирование атомами индия (элемент III группы) с концентрацией $4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации доноров вдоль оси x опи-

сывается функцией $N_n(x)=N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0=0,5\text{мкм}$. Считая, что $p(x)=N_d(x)$, вычислите плотность тока дрейфа для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n=10^{-6}\text{м}^2\text{с}^{-1}$; $\mu_n=80\text{см}^2\text{В}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 380К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d=10^{15}\text{см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,7 \cdot 10^{16}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте избыточную концентрацию носителей, если $\tau_n=\tau_p=12\text{мс}$.

ВАРИАНТ №14

Задача 1. Найти положение уровня Ферми и температурную зависимость концентрации электронов в собственном полупроводнике. Как изменится концентрация электронов при изменении температуры от 300К до 400К, если $E_g=(0,785-\xi T)\text{эВ}$, где $\xi=4 \cdot 10^{-4}$.

Задача 2. При $E < E_F$ и $T=0$ функция Ферми-Дирака $f(E)=1$, а при $E > E_F$ и $T=0$ $f(E)=0$. Определить функцию Ферми-Дирака при $E=E_F$. Какую проводимость в этом случае имеет полупроводник?

Задача 3. Найдите положение уровней Ферми в германии, находящемся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 300К. Материал легирован акцепторными атомами с концентрацией 10^{16}см^{-3} , которые ионизированы на 100%. При комнатной температуре T_k имеет место равенство

$$n_i^2 = 3,1 \cdot 10^{32} T_k^3 \exp\left(\frac{-9100}{T_k}\right).$$

Задача 4. Вместо распределения Ферми-Дирака $f(E)$, определяемого формулой $f(E)=[1+\exp((E-E_F)/(kT))]^{-1}$ (3.10), используют распределение Максвелла-Больцмана $f_{\text{мб}}$ [см. формулу $f_{\text{мб}}(E)=C \cdot e^{-E/(kT)}$ (3.8)]; уровень E находится вблизи уровня E_F . Какова относительная ошибка такой замены при $E-E_F=kT$ и при $E-E_F=4kT$?

Задача 5. Имеется равновесный образец германия, легированный атомами сурьмы (элемент V группы) с концентрацией $2,4 \cdot 10^{13}\text{см}^{-3}$ при температуре 400 К. Вычислить концентрацию носителей заряда, которая установится после того, как проведено легирование атомами индия (элемент III группы) с концентрацией $4,8 \cdot 10^{13}\text{см}^{-3}$.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_d(x)=N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0=0,5\text{мкм}$. Считая, что

$n(x)=N_d(x)$, вычислите плотность тока диффузии для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n=10^{-6} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n=80 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 380К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d=10^{15} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,7 \cdot 10^{16}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n=\tau_p=12 \text{ мс}$.

ВАРИАНТ №15

Задача 1. Найти положение уровня Ферми и температурную зависимость концентрации электронов в собственном полупроводнике. Как изменится концентрация электронов при изменении температуры от 400К до 500К, если $E_g=(0,785-\xi T) \text{ эВ}$, где $\xi=4 \cdot 10^{-2}$.

Задача 2. Показать, что при $E < E_F$ и $T=0$ функция Ферми-Дирака $f(E)=1$, а при $E > E_F$ и $T=0$ $f(E)=0$. В каком случае здесь рассматривается n-полупроводник?

Задача 3. Найдите положение уровней Ферми в германии, находящемся в состоянии термодинамического равновесия при температуре 100К. Материал легирован акцепторными атомами с концентрацией 10^{15} см^{-3} , которые ионизированы на 50%. При комнатной температуре T_k имеет равенство

$$n_i^2 = 3,1 \cdot 10^{32} T_k^3 \exp\left(\frac{-9100}{T_k}\right).$$

Задача 4. Вместо распределения Ферми-Дирака $f(E)$, определяемого формулой $f(E)=[1+\exp((E-E_F)/(kT))]^{-1}$, используют распределение Максвелла-Больцмана $f_{\text{мб}}$ [см. формулу $f_{\text{мб}}(E)=C \cdot e^{-E/(kT)}$]; уровень E находится вблизи уровня E_F . Какова относительная ошибка такой замены при $E-E_F=kT$ и при $E-E_F=3kT$?

Задача 5. Имеется равновесный образец кремния, легированный атомами сурьмы (элемент V группы) с концентрацией $2,4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ при температуре 400К. Вычислить концентрацию носителей, которая установится после того, как проведено легирование атомами индия (элемент III группы) с концентрацией $4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_d(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5 \text{ мкм}$. Считая, что $p(x) = N_d(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n = 10^{-6} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n = 1100 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 380К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{15} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,7 \cdot 10^{16}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n = \tau_p = 12 \text{ нс}$.

ВАРИАНТ №16

Задача 1. Как изменится концентрация собственных электронов при изменении температуры от 200К до 300К, если $E_g = (0,785 - \xi T) \text{ эВ}$, где $\xi = 4 \cdot 10^{-4}$.

Задача 2. Показать, что при $E < E_F$ и $T = 0$ функция Ферми-Дирака $f(E) = 1$, а при $E > E_F$ и $T = 0$ $f(E) = 0$. В каком случае здесь рассматривается p-полупроводник?

Задача 3. В образец чистого кремния введены донорные атомы фосфора с концентрацией 10^{16} см^{-3} . Предположим, что атомы фосфора распределены в кремнии равномерно. Атомная масса фосфора равна 31. Какую долю по массе составляют донорные примеси?

Задача 4. Вместо распределения Ферми-Дирака $f(E) = [1 + \exp((E - E_F)/(kT))]^{-1}$, используют распределение Максвелла-Больцмана $f_{MB}(E) = C \cdot e^{-E/(kT)}$, уровень E находится вблизи уровня E_F . Какова относительная ошибка такой замены при $E - E_F = 2kT$ и при $E - E_F = 4kT$?

Задача 5. Имеется равновесный образец кремния при температуре 400 К. Вычислить концентрацию дырок и электронов, если образец легирован атомами сурьмы (элемент V группы) с концентрацией $2,4 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$, а затем проведено легирование атомами индия (элемент III группы) с концентрацией $4,8 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_d(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,5 \text{ мкм}$. Считая, что $p(x) = N_d(x)$, вычислите плотность тока дрейфа для электронов

в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n=10^{-6}\text{ м}^2\text{ с}^{-1}$; $\mu_n=1100\text{ см}^2\cdot\text{В}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 380К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d=10^{15}\text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,7\cdot 10^{16}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n=\tau_p=12\text{ мс}$.

ВАРИАНТ №17

Задача 1. Как изменится концентрация собственных электронов при изменении температуры от 250К до 400К, если $E_d=(0,785-\xi T)\text{ эВ}$, где $\xi=4\cdot 10^{-3}$.

Задача 2. Вычислить положение уровня Ферми при $T=300\text{ К}$ в кристаллах германия, содержащих $2\cdot 10^{22}\text{ м}^{-3}$ атомов мышьяка.

Задача 3. В образец чистого кремния введены донорные атомы фосфора с концентрацией 10^{16} см^{-3} . Предположим, что атомы фосфора распределены в кремнии равномерно. Атомная масса фосфора равна 31. Если в добавление к фосфору введены 10^{17} см^{-3} атомов бора, распределенных равномерно, то каковы результирующее удельное сопротивление и тип проводимости (будет ли материал иметь проводимость p- или n-типа)?

Задача 4. Вместо распределения Ферми-Дирака $f(E)=[1+\exp((E-E_F)/(kT))]^{-1}$ используют распределение Максвелла-Больцмана $f_{MB}(E)=C\cdot e^{-E/(kT)}$; уровень E находится вблизи уровня E_F . Какова относительная ошибка такой замены при $E-E_F=kT$ и при $E-E_F=4kT$?

Задача 5. Полупроводник, в котором концентрации примесей N_d и N_a одинаковы, называют компенсированным. В таком материале концентрация дырок p и n электронов совпадают с собственной концентрацией n_i . Будет ли компенсированный материал иметь то же удельное сопротивление, что и нелегированный собственный полупроводник? Поясните ответ.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_d(x)=N\cdot\exp(-x/x_0)$, где $x_0=0,5\text{ мкм}$. Считая, что $p(x)=N_d(x)$, вычислите плотность тока диффузии для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n=10^{-6}\text{ м}^2\text{ с}^{-1}$; $\mu_n=1100\text{ см}^2\cdot\text{В}^{-1}\cdot\text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 380К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d=10^{15} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,7 \cdot 10^{16}$ электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n=\tau_p=12\text{мс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t=t_0$. Как изменяется во времени избыточная концентрация дырок при $t>t_0$?

ВАРИАНТ №18

Задача 1. Как изменится концентрация собственных электронов при изменении температуры от 150К до 300К, если $E_g=(0,785-\xi T) \text{ эВ}$, где $\xi=4 \cdot 10^{-4}$.

Задача 2. Вычислить положение уровня Ферми при $T=300\text{К}$ в кристаллах кремния, содержащих $5 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$ атомов мышьяка и 10^{22} м^{-3} атомов галлия.

Задача 3. В образец чистого кремния введены донорные атомы фосфора с концентрацией 10^{16} см^{-3} . Предположим, что атомы фосфора распределены в кремнии равномерно. Атомная масса фосфора равна 31. Определить положение уровня Ферми и изобразить диаграмму энергетических зон.

Задача 4. Вместо распределения Ферми-Дирака $f(E)=[1+\exp((E-E_F)/(kT))]^{-1}$ используют распределение Максвелла-Больцмана $f_{\text{МБ}}(E)=C \cdot e^{-E/(kT)}$, уровень E находится вблизи уровня E_F . Какова относительная ошибка такой замены при $E-E_F=2kT$ и при $E-E_F=3kT$?

Задача 5. Покажите, что в слаболегированном полупроводнике р-типа, удельное сопротивление максимально, если $\mu_n/\mu_p>1$.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_d(x)=N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0=0,8 \text{ мкм}$. Считая, что $n(x)=N_d(x)$, вычислите напряженность внутреннего электрического поля для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n=10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n=900 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 380К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d=10^{15} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,7 \cdot 10^{16}$ электронно-дырочных пар в секунду ($\tau_n=\tau_p=12\text{мс}$). Пусть действие потока фотонов прекращается в момент времени $t=t_0$. За какое время избыточная концентрация снизится до 15% начального значения?

ВАРИАНТ №19

Задача 1. Как изменится концентрация собственных электронов при изменении температуры от 100К до 200К, если $E_g = (0,785 - \xi T)$ эВ, где $\xi = 4 \cdot 10^{-2}$.

Задача 2. Вычислить положение уровня Ферми при $T = 300$ К в кристаллах кремния, содержащих $2 \cdot 10^{22} \text{ м}^{-3}$ атомов мышьяка и 10^{22} м^{-3} атомов галлия.

Задача 3. Найти равновесные концентрации электронов и дырок в кремнии при 27°C , если кремний содержит следующие концентрации легирующих примесей, создающих мелкие уровни: а) $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов бора, б) $3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов мышьяка и $2,9 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов бора.

Задача 4. Покажите, что вероятность того, что состояние с энергией, превышающей уровень Ферми E_F на величину ΔE , занято, в точности совпадает с вероятностью иметь свободное состояние, энергия которого меньше значения E_F на ту же величину ΔE .

Задача 5. Вычислите концентрацию акцепторных атомов акцепторной примеси N_a , которая потребуется для достижения максимального удельного сопротивления. Примите для кремния $\mu_n/\mu_p = 2,18$; $n_i = 1,4 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_d(x) = N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0 = 0,8$ мкм. Считая, что $p(x) = N_d(x)$, вычислите плотность тока дрейфа для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n = 10^{-3} \text{ м}^2 \text{ с}^{-1}$; $\mu_n = 900 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 180К, подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,1 \cdot 10^{15}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n = \tau_p = 7 \text{ нс}$.

ВАРИАНТ №20

Задача 1. Как изменится концентрация собственных электронов при изменении температуры от 210К до 280К, если $E_g = (0,785 - \xi T)$ эВ, где $\xi = 4 \cdot 10^{-4}$.

Задача 2. Вычислить положение уровня Ферми при $T=200\text{K}$ в кристаллах германия, содержащих $2 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$ атомов мышьяка и 10^{22} м^{-3} атомов галлия.

Задача 3. Найти положение уровня Ферми в кремнии при 27°C , если кремний содержит следующие концентрации легирующих примесей, создающих мелкие уровни: а) $1 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов бора, б) $3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов мышьяка и $2,9 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ атомов бора.

Задача 4. Покажите, что вероятность того, что состояние с энергией, превышающей уровень Ферми E_F на величину ΔE , занято, в точности совпадает с вероятностью иметь свободное состояние, энергия которого меньше значения E_F на ту же величину ΔE .

Задача 5. В образце кремния электрон массой m имеет тепловую энергию порядка kT , которая связана со средней скоростью теплового движения соотношением $E=3kT/2$. Если известно, что $\mu_n=1350 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, покажите, что (при комнатной температуре) скорость дрейфа электронов мала по сравнению со скоростью теплового движения, если напряженность внешнего поля 10 В/см . Убедитесь, что при напряженности поля 1000 В/см выполняется обратное неравенство.

Задача 6. В образце кремния n-типа, находящемся при комнатной температуре, распределение концентрации акцепторов вдоль оси x описывается функцией $N_d(x)=N \cdot \exp(-x/x_0)$, где $x_0=0,8 \text{ мкм}$. Считая, что $n(x)=N_d(x)$, вычислите плотность тока диффузии для электронов в зависимости от величины N_d . Исходные данные: $D_n=10^{-3} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$; $\mu_n=900 \text{ см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

Задача 7. Образец кремния, находящийся при температуре 280K , подвергается непрерывному воздействию фотонов. Такое внешнее возбуждение ионизирует атомы примеси, создавая концентрацию примесей $N_d=10^{15} \text{ см}^{-3}$ и обуславливая постоянную генерацию $0,7 \cdot 10^{12}$ электронно-дырочных пар в секунду. Подсчитайте относительное изменение концентрации носителей вследствие действия фотонов, если $\tau_n=\tau_p=4\text{мс}$.

10. ИНТЕРНЕТ-ЭКЗАМЕН

10.1. Интернет-экзамен в сфере профессионального образования

Специальность: **210201.00 – Проектирование и технология радиоэлектронных средств**

Дисциплина: **Основы физики твердого тела**

Время выполнения: **90 минут**

Количество заданий: **27**

ТЕМАТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА АПИМ

№ ДЕ	НАИМЕНОВАНИЕ ДИДАКТИЧЕСКОЙ ЕДИНИЦЫ ГОС	№ задания	ТЕМА ЗАДАНИЯ
1	1. Введение. Физические явления и процессы в полупроводниках и их классификация. Строение атома, квантовые состояния электронов в структуре атома	1	Модель атома Резерфорда. Энергетическая диаграмма атома
		2	Квантовые состояния электронной структуры атома
2	Иерархия структур материи: типы межатомных связей в твердых телах; основы теории энергетических диаграмм; собственные и примесные полупроводники	3	Модельные представления сил Ван-дер-Ваальса
		4	Типы атомных связей в кристалле твердого тела
		5	Элементы структуры кристалла. Типы дефектов кристаллической решетки

3	Классическая и квантовая статистики свободных носителей заряда в полупроводниках	6	Распределение квантовых состояний по энергии в структуре твердого тела
		7	Функции Ферми-Дирака и Максвелла-Больцмана. Электронная теплоемкость твердого тела. Температурная зависимость удельного сопротивления кристалла. Модель Эйнштейна
4	Кинетические процессы в полупроводниках и полупроводниковых структурах	8	Электропроводность в полупроводниках. Подвижность свободных носителей заряда в полупроводниках. Плотность тока. Соотношение Эйнштейна
		9	Акустические и оптические колебания
5	Физические эффекты в полупроводниках	10	Световые эффекты в полупроводниках. Фотоэффект. Эффект фотоизлучения
		11	Тепловые эффекты в полупроводниках. ТермоЭДС, эффект Пельтье
		12	Электромагнитные эффекты в полупроводниках. Эффекты Холла, магнитосопротивления

10.2. Домашние задания к интернет-экзамену

ЗАДАНИЕ №1 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Ионная связь атомов в кристалле осуществляется между атомами

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Металлов и полупроводников.	3. Металлов и металлоидов*
2. Полупроводников и диэлектриков	4. Металлов с разной проводимостью

ЗАДАНИЕ №2 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Металлическая связь атомов в кристалле осуществляется между атомами

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Металлов*	3. Диэлектриков
2. Полупроводников	4. Металлов с разной проводимостью

ЗАДАНИЕ №3 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Ковалентная связь атомов в кристалле осуществляется между атомами

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Металлов и полупроводников	3. Металлов и металлоидов
2. Полупроводников и диэлектриков*	4. Металлов и диэлектриков

ЗАДАНИЕ №4 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Физико-химические свойства атомов определяются свойствами

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Ядра	3. Средними электронными оболочками
2. Ближайшей к ядру электронной оболочкой	4. Последней, внешней электронной оболочкой атома*

ЗАДАНИЕ №5 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Главное квантовое число n характеризует

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Совокупность электронов в электронной оболочке*	3. Возможные пространственные направления вектора момента количества движения электрона
2. Величину момента количества движения электрона	4. Определенный механический момент количества движения электрона

ЗАДАНИЕ №6 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Орбитальное квантовое число l характеризует

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Совокупность электронов в электронной оболочке	3. Возможные пространственные направления вектора момента количества движения электрона
2. Величину момента количества движения электрона*	4. Определенный механический момент количества движения электрона

ЗАДАНИЕ №7 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Главное квантовое число m характеризует

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Совокупность электронов в электронной оболочке	3. Возможные пространственные направления вектора момента количества движения электрона*
2. Величину момента количества движения электрона	4. Определенный механический момент количества движения электрона

ЗАДАНИЕ №8 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Квантовое число s характеризует

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Совокупность электронов в электронной оболочке	3. Возможные пространственные направления вектора момента количества движения электрона
2. Величину момента количества движения электрона	4. Определенный механический момент количества движения электрона*

ЗАДАНИЕ №9 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Вместимость электронной оболочки при постоянном орбитальном квантовом числе ($l = \text{const}$) описывается равенством

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. $2 \cdot (2l + 1)^*$	3. $3 \cdot (2l + 1)$
2. $1 \cdot (2l + 1)$	4. $5 \cdot (2l + 1)$

ЗАДАНИЕ №10 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Сильная пространственная направленность характерна для атомной связи

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Металлической	3. Ионной
2. Ковалентной*	4. Ориентационной

ЗАДАНИЕ №11 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Базис – это группа атомов или молекул

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Связанных между собой по определенному алгоритму*	3. Имеющих структуру аморфного полупроводника
2. Имеющих максимальное количество энергии	4. Связанных обобществлением валентных электронов

ЗАДАНИЕ №12 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Объемные дефекты в кристаллах

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Вакансии Шоттки	3. Дислокации*
2. Атомы примеси	4. Вакансии Френкеля

ЗАДАНИЕ №13 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Максимальное количество атомов в секущей плоскости элементарной ячейки кристалла

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. (001)	3. (111)*
2. (101)	4. (100)

ЗАДАНИЕ №14 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Энергетический уровень на энергетической диаграмме E_c – это

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Дно зоны проводимости*	3. Потолок валентной зоны
2. Запрещенная зона	4. Середина запрещенной зоны

ЗАДАНИЕ №15 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Энергетический уровень на энергетической диаграмме E_v – это

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Дно зоны проводимости	3. Потолок валентной зоны*
2. Запрещенная зона	4. Энергетический уровень Ферми

ЗАДАНИЕ №16 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Энергетический уровень на энергетической диаграмме E_g – это

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Дно зоны проводимости	3. Потолок валентной зоны
2. Запрещенная зона*	4. Середина запрещенной зоны

ЗАДАНИЕ №17 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Запрещенная зона на энергетической диаграмме равна

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Энергии связи валентного электрона с атомом*	3. Валентной зоне
2. Зоне проводимости	4. Энергии дрейфа свободного электрона в кристалле

ЗАДАНИЕ №18 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Для получения примесного полупроводника n-типа проводимости в узел кристалла помещают

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Атомы большей валентности*	3. Атомы благородных газов
2. Атомы меньшей валентности	4. Атомы металлоидов

ЗАДАНИЕ №19 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Для получения примесного полупроводника p-типа проводимости в узел кристалла помещают

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Атомы большей валентности	3. Атомы благородных газов
2. Атомы меньшей валентности*	4. Атомы металлоидов

ЗАДАНИЕ №20 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Собственные полупроводники

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Не имеющие чужеродных атомов в структуре кристалла*	3. Имеющие энергетические уровни атомов в запрещенной зоне кристалла
2. Имеющие чужеродные атомы в структуре кристалла	4. Имеющие униполярную проводимость

ЗАДАНИЕ №21 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Примесные полупроводники

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Не имеющие чужеродных атомов в структуре кристалла	3. Имеющие энергетические уровни атомов в запрещенной зоне кристалла
2. Имеющие чужеродные атомы в структуре кристалла*	4. Имеющие униполярную проводимость

ЗАДАНИЕ №22 ([] – выберите один из вариантов ответа)

В выражении плотности квантовых состояний для полупроводника n-типа проводимости

$$N(E) = \frac{4\pi}{A^3} (2A_n)^{\frac{3}{2}} (A - A_c)^{\frac{1}{2}}, \quad N(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_n)^{\frac{3}{2}} (E - E_c)^{\frac{1}{2}}$$

вместо символа A расставить правильно символы

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Постоянную Планка	3. Текущую энергию
2. Эффективную массу электрона	4. Энергетический уровень дна зоны проводимости

ЗАДАНИЕ №23 ([] – выберите один из вариантов ответа)

В уравнении Ферми- Дирака

$$f(E,T) = \frac{A}{A + \exp\left(\frac{A - A_f}{kA}\right)}, \quad f(E,T) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)}$$

вместо символа А расставить правильно символы

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Единицы	3. Энергию уровня Ферми
2. Текущую энергию	4. Температуры

ЗАДАНИЕ №24 ([] – выберите один из вариантов ответа)

В уравнении Максвелла- Больцмана

$$f(E,T) \approx \exp\left(-\frac{A - A_f}{AT}\right) = C \exp\left(-\frac{E}{kT}\right), \quad (f(E,T) \approx \exp\left(-\frac{E - E_f}{kT}\right) = C \exp\left(-\frac{E}{kT}\right))$$

вместо символа А расставить правильно символы

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Текущую энергию	3. Энергию уровня Ферми
2. Постоянную Планка	4. Коэффициент Больцмана

ЗАДАНИЕ №25 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Это равенство описывает $E_x = \frac{1}{2}(E_c + E_v) - \frac{3}{4}KT \ln \frac{m_n}{m_p}$

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Уровень Ферми*	3. Зону проводимости
2. Уровень середины запрещенной зоны	4. Валентную зону

ЗАДАНИЕ №26 ([] – выберите один из вариантов ответа)

Это равенство описывает $E_x = \frac{1}{2}(E_c + E_v) - \frac{3}{4}KT \ln \frac{m_n}{m_p}$

ВАРИАНТЫ ОТВЕТОВ:

1. Примесный полупроводник	3. Полупроводник с дефектами
2. Собственный полупроводник*	4. Монокристалл

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Епифанов, Г.И. Физика твердого тела [Текст]: учеб. пособие / Г.И. Епифанов. – СПб.; М.; Краснодар: Лань, 2010. – 288с.
2. Гуревич, А.Г. Физика твердого тела [Текст]: учеб. пособие для вузов / А.Г. Гуревич. – Ростов-на-Дону: Феникс, 2004. – 572с.
3. Зиненко, В.И. Основы физики твердого тела [Текст]: учеб. пособие для вузов / В.И. Зиненко, Б.И. Сорокин, Р.И. Турчин. – М.: Издательство физико-математической литературы, 2001. – 336с.
4. Жданов, Г.С. Лекции по физике твердого тела [Текст] / Г.С. Жданов. – М.: Издательство МГУ, 1988. – 288 с.

Работа выполнена при поддержке грантов Президента Российской Федерации для поддержки молодых российских ученых – докторов наук МД-1041.2011.2 и Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 12-07-33018 мол_а_вед).

Учебное электронное издание

*Колтаков Всеволод Анатольевич
Колтаков Анатолий Иванович
Кричевский Сергей Васильевич*

ОСНОВЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Учебное пособие

Редактор Т. К. К р е т и н и н а
Верстка Т. Е. П о л о в н е в а

Электронный ресурс
Арт. – 23/2013

Самарский государственный
аэрокосмический университет.
443086 Самара, Московское шоссе, 34.

Изд-во Самарского государственного
аэрокосмического университета.
443086 Самара, Московское шоссе, 34.