

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
"Южный федеральный университет"  
Инженерно-технологическая академия**

**А.Г. ЗАХАРОВ, Н.А. КАКУРИНА,  
Ю.Б. КАКУРИН, А.С. ЧЕРЕПАНЦЕВ**

**ФИЗИКА. ВВЕДЕНИЕ В ТВЕРДОТЕЛЬНУЮ  
ЭЛЕКТРОНИКУ**

*Учебное пособие*

Ростов-на-Дону – Таганрог  
Издательство Южного федерального университета  
2017

УДК 539.2(075.8)+621.382(075.8)

Печатается по решению кафедры физики Института нанотехнологий, электроники и приборостроения Южного федерального университета

**Рецензенты:**

доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической, общей физики и технологии Таганрогского института имени А.П. Чехова (филиала) «Ростовского государственного экономического университета (РИНХ)» А.И Жорник

кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики института нанотехнологий, электроники и приборостроения ЮФУ А.Б. Колпачёв

**Захаров, А.Г.**

Физика. Введение в твердотельную электронику: учебное пособие / А.Г. Захаров; Южный федеральный университет. – Ростов-на-Дону; Таганрог: Издательство Южного федерального университета, 2017. – 125 с.

ISBN 978-5-9275-2621-5

В пособии рассмотрены элементы электронной теории металлов, классической и квантовой статистики. Даны общие сведения о полупроводниках, описаны механизмы кинетики носителей заряда и проводимость полупроводников. Рассмотрено явление сверхпроводимости. Достаточно подробно изложены контактные явления. Обсуждаются особенности гетеропереходов.

Табл. 4. Ил. 44. Библиогр.: 8 назв.

УДК 539.2(075.8)+621.382(075.8)

ISBN 978-5-9275-2621-5

© ЮФУ, 2017  
© Захаров А.Г.  
© Какурина Н.А.  
© Какурин Ю.Б.,  
© Черепанцев А.С. 2017

## СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	5
1. КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ИХ ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА.....	9
1.1. Классификация твердых тел.....	9
1.2. Межатомные взаимодействия в твердых телах.....	13
1.3. Идеальные кристаллы. Решетки Бравэ.....	18
1.4. Структура реальных кристаллов.....	22
1.5. Тепловые колебания в твердых телах.....	27
1.6. Фононы.....	30
1.7. Теплоемкость кристаллического твердого тела.....	33
1.8. Тепловое расширение твердых тел.....	36
Вопросы и задачи для самоконтроля.....	39
2. ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ.....	43
2.1. Обобществление электронов в кристалле. Свободные электроны.....	43
2.2. Плотность разрешенных состояний.....	47
2.3. Статистический способ описания состояния коллектива частиц. Невырожденные и вырожденные коллективы частиц.....	50
2.4. Классическая и квантовая статистики.....	51
2.5. Функция распределения для невырожденного коллектива.....	52
2.6. Функция распределения для вырожденного коллектива.....	53
2.7. Распределение электронов в металле при абсолютном нуле.....	53
2.8. Влияние температуры на распределение Ферми–Дирака.....	55
2.9. Снятие вырождения.....	57
Вопросы и задачи для самоконтроля.....	61
3. ПОЛУПРОВОДНИКИ .....	62
3.1. Понятия о полупроводниках.....	62
3.2. Эффективная масса.....	63
3.3. Понятие о дырках.....	67
3.4. Примесные уровни в полупроводниках.....	69
3.5. Проводимость и подвижность носителей тока.....	73
3.6. Механизмы рассеяния свободных носителей заряда.....	76
3.7. Примесная проводимость полупроводников.....	79
Вопросы и задачи для самоконтроля.....	82

## 4. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ. КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ.

ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНЫЙ ПЕРЕХОД.....	87
4.1. Явление сверхпроводимости.....	87
4.2. Влияние магнитного поля.....	92
4.3. Эффект Мейснера.....	94
4.4. Микроскопическая теория.....	97
4.5. Виды электрических контактов.....	98
4.6. Контакт двух металлов.....	99
4.7. Контакт полупроводника с металлом.....	101
4.8. Выпрямление напряжения на контакте полупроводника с металлом.....	106
4.9. Контакт двух полупроводников с различными типами проводимости. Электронно-дырочный переход.....	109
4.10. Электронно-дырочный переход в условиях равновесия.....	110
4.11. Гетероструктуры.....	114
Вопросы и задачи для самоконтроля.....	119
Заключение.....	123
Библиографический список.....	124

## Введение

Физика – это наука, изучающая наиболее общие закономерности явлений природы, свойства и строение материи, законы ее движения.

В настоящее время известны два вида неживой материи: вещество и поле. К первому виду материи – веществу – относятся атомы, молекулы и все тела состоящие из них. Второй вид материи образуют физические поля. Основным методом исследования в физике является эксперимент. Для объяснения физических явлений используются гипотезы. Доказанная гипотеза превращается в научную теорию или закон.

Физическая теория – это система основных идей, обобщающих опытные данные и отражающие объективные закономерности природы.

Физика является научным фундаментом развития новых отраслей техники. На основе ее открытий созданы электротехника и радиотехника, микро- и нанoeлектроника и вычислительная техника. На основе достижений физики разрабатываются принципиально новые и более совершенные технологические методы и аппаратура.

Известно, что достижения микро- и нанoeлектроники базируются на исследованиях и достижениях в области физики твердого тела и твердотельной технологии. С уменьшением линейных размеров элементов интегральных схем до величин (0,1 – 0,05) мкм возникает фундаментальный физический барьер, за которым свойства твердого тела существенно меняются. Начинают проявляться квантовые эффекты, в связи с чем физические принципы и явления, лежащие в основе нанoeлектроники, отличаются от используемых в микроэлектронике.

Предлагаемое учебное пособие позволит помочь студентам изучить разделы дисциплины «Физика»,

ориентированные на студентов, обучающихся по направлению подготовки 11.05.00 «Радиоэлектронные системы и комплексы». Кроме того, пособие может быть полезно аспирантам по направлению 11.06.01 «Электроника, радиотехника и системы связи». Материал пособия изложен компактно, без использования громоздких математических выкладок.

Дисциплина «Физика» выполняет не только общеобразовательную функцию, но формирует творческое инженерное мышление специалиста, дает ему основные знания, на которых строятся теоретические основы его специальности. Таким образом, важной задачей дисциплины является подготовка общетеоретической базы для общетехнических и специальных дисциплин. При изучении дисциплины «Физика» студент должен усвоить, что прикладные дисциплины – это, как правило, модифицированные развитием техники определенные разделы физики. Сюда, несомненно, относятся все разновидности радиоэлектроники.

#### 1. Цель и задачи учебного пособия.

Основной целью является изучение студентами физических эффектов и явлений, необходимых для последующего усвоения ими специальных и общепрофессиональных дисциплин – «Основы теории цепей», «Электроника», «Схемотехника радиоэлектронных устройств» и др.

Основные задачи:

- ознакомление с современным уровнем физических основ электронной теории металлов, полупроводников, сверхпроводимости и контактных явлений;
- изучение квантовой теории свободных электронов в металле;

- изучение статистики Ферми–Дирака, распределения электронов проводимости по энергетическим состояниям, а также влияния температуры на распределение электронов;

- изучение динамики электронов и дырок в кристаллической решетке твердого тела;

- изучение особенностей энергетического строения кристалла с дефектами, собственной и примесной проводимости полупроводников, а также зависимости их электропроводности от температуры;

- изучение основ теории сверхпроводимости металлов;

- изучение контактных явлений.

2. Требования к уровню освоения содержания учебного пособия.

Студент должен знать:

- физические основы квантовой теории свободных электронов в металлах;

- формулы, определяющие число разрешенных энергетических состояний в кристалле;

- понятия о вырожденных и невырожденных коллективах частиц, классической и квантовой статистиках;

- формулы распределения Ферми–Дирака;

- понятие о полупроводниках, особенности, отличающие их от других твердых тел;

- понятие об эффективной массе электрона;

- понятие о носителях заряда в полупроводниках;

- энергетические диаграммы донорных и акцепторных полупроводников;

- природу и формулу дрейфового тока в полупроводнике;

- зависимость электропроводности примесного полупроводника от температуры;

- формулы электропроводности примесного полупроводника;

- физические основы явления сверхпроводимости;
- зависимость сопротивления сверхпроводника от температуры;
- формулу зависимости критического магнитного поля от температуры, при которой сверхпроводник переходит в нормальное состояние;
- виды электрических контактов и их свойства;
- энергетические диаграммы контактов металл–полупроводник при различных соотношениях работ выхода электронов из металла и полупроводника;
- механизм выпрямления тока на контакте металл–полупроводник.



# 1. КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ТВЕРДЫЕ ТЕЛА И ИХ ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

## 1.1. Классификация твердых тел

Твердое тело является одним из четырех агрегатных состояний вещества. Отличительными признаками такого состояния являются устойчивость формы, а также характер теплового движения частиц твердого тела (атомов, молекул, ионов). В твердом теле они совершают малые колебания относительно некоторых устойчивых положений равновесия.

По внутреннему строению принято разделять твердые тела на кристаллические, аморфные и полимеры – рис.1.1.

Исследования внутреннего строения твердых тел с помощью рентгеноструктурного анализа позволили сделать вывод о существовании закономерности в расположении отдельных частиц, из которых они состоят. Закономерное чередование частиц, ограниченное расстояниями порядка расстояний между атомами, называется ближним порядком в структурной организации твердого тела. В случае если строгая закономерность расположения атомов повторяется на сколь угодно больших расстояниях, то такая организация называется дальним порядком. Данные типы структурной организации частиц твердого тела являются одним из основных классификационных признаков твердых тел. Так, аморфные твердые тела обладают только ближним порядком расположения атомов. К таким веществам относятся стекло, янтарь, воск. В аморфных телах отсутствует кристаллическая решетка и сохраняется закономерность связи только между соседними атомами. Особенностью в движении частиц в аморфных телах является то, что они совершают не только колебательные движения, но и скачки, что характерно для жидкой фазы состояния вещества. В аморфных телах отсутствуют симметрия расположения атомов и постоянная

температура плавления. Для них характерна изотропия свойств. В ряде моделей аморфное твердое тело представляется очень вязкой жидкостью. На больших временных масштабах в случае высоких температур и статических нагрузок их поведение аналогично вязкой жидкости, а при низких температурах их поведение соответствует поведению кристаллического твердого тела.



Рис. 1.1 Классификация твердых тел по строению

Полимеры представляют собой твердые тела, молекулы которых включают в себя большое число повторяющихся групп атомов (мономеров). Так, в молекуле полиэтилена число мономеров составляет величину  $\sim 35000$ . К полимерам относятся органические и биологические вещества: каучук, полипропилен, белки, нуклеиновые кислоты [1].

Основной интерес в настоящей работе представляют кристаллические твердые тела. Для них присутствует дальний порядок в расположении частиц. Свойством таких тел является симметрия кристаллической решетки (свойство отдельных узлов решетки совмещаться при трансляции перемещения).

Кристаллические тела делятся в свою очередь на монокристаллы, поликристаллы и жидкие кристаллы. Монокристаллическое тело представляет собой вещество с идеальным дальним порядком, определяемым наличием

трансляционной симметрии в расположении атомов. В монокристалле различные атомы вещества полностью упорядочены в пространстве. Элементарная ячейка кристалла каменной соли  $NaCl$  показана на рис. 1.2. Вдоль каждой из осей  $Ox, Oy, Oz$  атомы  $Na$  и  $Cl$  расположены последовательно друг за другом. Указанный порядок положения атомов в пространстве продолжается на сколь угодно большие расстояния. Для описания подобной закономерности оказывается достаточным задать элементарную или базисную группу атомов каждого вещества и определить вектора смещения, соединяющие соседние элементарные наборы атомов в каждом направлении. Такой вектор смещения, позволяющий совместить элементарную группу атомов саму с собой, называется вектором трансляции.

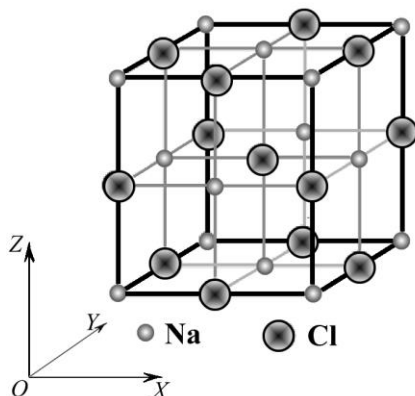


Рис. 1.2. Структура кристалла каменной соли

Так, для кристалла, представленного на рис. 1.2 достаточно задать исходные положения атомов  $Na=(0,0,0)$  и  $Cl=(1/2, 1/2, 1/2)$  и вектора трансляции  $\hat{a}_1=(1,0,0)$ ,  $\hat{a}_2=(0,1,0)$ ,  $\hat{a}_3=(0,0,1)$ .

Свойством кристаллических тел является полиморфизм. Полиморфизм кристаллов - способность некоторых веществ с одним и тем же химическим составом находиться в состояниях с различной кристаллической структурой. Каждое из подобных состояний оказывается устойчивым в определенном диапазоне внешних параметров. Это, прежде всего, температура и давление. Полиморфизмом обладают как простые вещества, так и органические и неорганические соединения. Так карбонат кальция  $\text{CaCO}_3$  может находиться в двух модификациях кристаллической решетки – кальцита и аргонита.

Частным случаем полиморфизма можно считать аллотропию [1]. Она определяется как существование одного и того же химического элемента в виде двух и более простых веществ, различных по строению и свойствам. Так углерод имеет большое число состояний. Простейшая из них – алмаз. Он имеет кубическую кристаллическую решетку. Хорошо известна и другая модификация – графит, имеющий гексагональную структуру. Указанные кристаллические структуры организации атомов углерода определяют резкое различие физических свойств этих веществ.

Большинство кристаллических тел являются поликристаллическими телами. Такие тела, состоят из большого числа различно ориентированных небольших монокристаллов. Каждая из локальных областей поликристалла имеет четко выраженную структуру. Однако кристаллографическая ориентация каждой такой области или гранулы отличается от соседней.

В конце XIX века были открыты материалы, объединяющие в себе ряд свойств жидкостей и кристаллов – жидкие кристаллы. Подобно жидкостям, они обладают текучестью, подобно кристаллам, им свойственна анизотропия. Жидкие кристаллы состоят из определенным образом упорядоченных в пространстве молекул

протяженной формы, имеющих свойства вязкой жидкости. Важнейшей характеристикой таких кристаллов является их способность изменять ориентацию молекул в пространстве под воздействием даже сверхслабого внешнего электрического поля. Это свойство реализовано в буквенно-цифровых индикаторах, в телевизионных и компьютерных дисплеях и других электронных устройствах.

## 1.2. Межатомные взаимодействия в твердых телах

Твердые тела можно также классифицировать по особенностям связей между атомами и молекулами кристаллического тела.

Атомы в кристаллических твердых телах имеют пространственную периодичность. Установление такой устойчивой пространственной структуры предполагает, что между атомами одновременно действуют противоположные силы связи. Первая из них – сила притяжения, препятствующая разбеганию частиц друг от друга. Вторая – сила отталкивания, препятствующая слиянию частиц друг с другом.

Общий подход к оценке энергии связи атомов в твердом теле рассмотрим на простейшем примере двухатомной молекулы. При сближении атомов  $A$  и  $B$  энергия кулоновского притяжения  $U_K$  атомов уменьшается по сравнению с суммарной энергией изолированных атомов. При этом энергия отталкивания  $U_O$  быстро растет с уменьшением расстояния, поэтому дальнейшего сближения атомов не происходит. Следовательно, на некотором расстоянии  $r_0$  суммарная энергия  $U(r) = U_O - U_K$  достигает минимального значения  $U_{\min}$ , что соответствует равновесному положению атомов и нулевому значению равнодействующей силы:

$$F = -\left(\frac{dU(r)}{dr}\right)_{r=r_0} = 0.$$

На рис. 1.3 представлены зависимости этих потенциалов от расстояния между атомами и результирующая кривая, соответствующая полной потенциальной энергии системы.

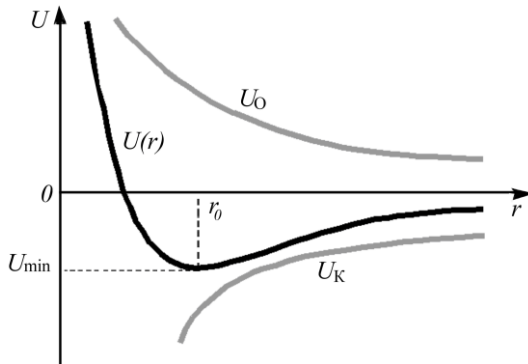


Рис.1.3. Энергия межатомного взаимодействия в молекуле

На расстоянии  $r_0$  силы притяжения уравновешиваются силами отталкивания и образуется молекула  $AB$  со стабильной конфигурацией. Минимальная энергия  $U_{\min}$  есть энергия связи атомов в молекуле. Рассмотрим основные виды связей между частицами твердого тела.

1. Связью, которая всегда присутствует между частицами твердого тела, является связь Ван-дер-Ваальса. Она обусловлена присутствием у каждого атома флуктуирующего электрического дипольного момента  $p_i$ , который определяется мгновенным положением электронов на орбитах атома. Флуктуирующий дипольный момент

создает электрическое поле  $E_i(r_i) = \frac{p_i}{r_i^3}$ . Под действием возникшего электрического поля происходит поляризация и близкорасположенных атомов. Индуцированные дипольные моменты соседних атомов имеют направления, параллельные друг другу и исходному дипольному моменту  $p_i$ . Энергия такого диполь-дипольного притяжения [2]:

$$U(r) \sim \frac{p_i p_j}{r^3} = \alpha \frac{p_i^2}{r^6}. \quad (1.1)$$

Силы Ван-дер-Ваальса (1.1) определяют формирование молекулярных кристаллов органических веществ. Энергия связи молекул в таких кристаллах имеет малую величину, составляющую  $\sim 10^{-1}$  эВ на атом. Молекулярные кристаллы обладают высоким удельным сопротивлением, малой диэлектрической проницаемостью и малым показателем преломления.

2. Ионная связь характерна для соединений, у которых элементы обладают разным сродством к электрону (количеством энергии, выделяющейся при присоединении электрона к атому). Рассмотрим взаимодействие между галоидами (*Cl, J, Br, F*), имеющими высокое сродство к дополнительному электрону и металлами, где такое сродство низкое. Связь осуществляется за счет перезарядки двух атомов. Электрон от атома металла переходит к атому галоида. Металл становится положительно заряженным, а галоид – отрицательно заряженным. Сила притяжения противоположно заряженных ионов описывается законом Кулона.

Энергия связи атомов [2]:

$$U(r) = -\left(\frac{B}{r^n} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right),$$

где: первое слагаемое – потенциал отталкивания, второе – притяжения,  $n > 1$  – показатель Борна.

Координаты точки минимума энергии связи  $U(r)$  [2]:

$$U(r_0) = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right).$$

Для  $N$  молекул кристаллической решетки энергия взаимодействия [2]:

$$U_{\text{реш}} = -NA \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right),$$

где  $A$  – постоянная Маделунга.

Средние значения энергии связи в ионных кристаллах составляют 100 эВ на атом. Так ионная связь определяет кубическую кристаллическую структуру соединения  $NaCl$ , представленную на рис.1.2. Свойством кристаллов с ионным типом связи является высокое значение удельного электрического сопротивления.

3. Ковалентная связь между атомами в кристаллической решетке осуществляется при обобществлении электронов двух соседних атомов. Эффект обобществления вытекает из следующих соображений. Если расстояние между двумя атомами водорода С и D  $r = 50 \text{ \AA}$  (Ангстрем =  $10^{-10}$  м), то вероятность, того, что электрон атома С окажется вблизи D ( $\sim 1 \text{ \AA}$ ) равна одному разу в 1012 лет. То есть атомы С и D



изолированы. Если же  $r \approx 2 \overset{\circ}{\text{Å}}$ , то наступает значительное перекрытие электронных оболочек с частотой  $10^{14}$  Гц. В случае продолжения сближения атомов частота обмена электронов настолько вырастает, что уже бессмысленно говорить о принадлежности электрона к атому С или атому D. Такое состояние атомов твердого тела соответствует обобществленным электронам [1]. При этом рост плотности электронных состояний между ядрами приводит к уменьшению энергии системы двух атомов и возникновению сил притяжения. То есть обобществленное электронное облако "стягивает" атомы друг к другу.

Кристаллами с ковалентной связью являются алмаз, сфалерит  $ZnS$ , а также материалы, широко используемые в твердотельной электронике – кремний, германий, арсенид галлия  $GaAs$ . Характерными физическими свойствами кристаллов с ковалентной связью является высокая твердость, высокое удельное сопротивление при низких температурах. Величина энергии ковалентной связи близка к значениям для кристаллов с ионной связью.

4. Особый тип связи атомов присущ металлам. Представление о металлической связи атомов в кристаллическом твердом теле дает квантово-механическая модель взаимодействия. Волновые функции, описывающие состояние электронов на внешних оболочках атомов, не так сильно сосредоточены в пространстве, как волновые функции внутренних оболочек. Электроны внешних оболочек слабее связаны с ядрами атомов, чем электроны внутренних, полностью занятых оболочек – рис. 1.4.

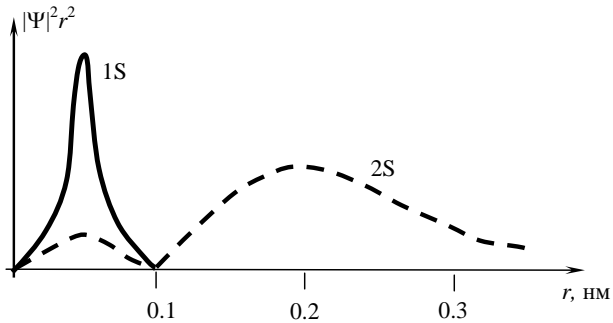


Рис. 1.4. Распределение электронной плотности  $1s$  и  $2s$  состояний в атоме лития

У лития расстояние между  $2s$ -электроном и ядром, в среднем, примерно в четыре раза больше, чем между ядром и  $1s$ -электронами, поэтому при сильном сближении атомов среднее расстояние  $2s$ -электронов до соседних ядер может оказаться меньшим, чем расстояние до своего ядра. Уменьшение расстояния между электронами внешних оболочек и соседними ядрами приводит к уменьшению потенциальной энергии системы и появлению сил притяжения между атомами. Дальнейшему сближению атомов препятствуют силы отталкивания внутренних оболочек.

При сближении атомов до состояния с минимальной энергией происходит образование периодического потенциального рельефа кристаллического поля. При этом электронные уровни внешних оболочек оказываются общими для всех атомов решетки и соответствующие электроны принадлежат всему кристаллу. В классическом представлении электроны в металле ведут себя подобно одноатомному идеальному газу, а состояние электронов в металле называют электронным газом. Энергия связи в металлах несколько ниже, чем в ионных и ковалентных кристаллах и не превышает  $5 \text{ эВ}$  на атом.

### 1.3. Идеальные кристаллы. Решетки Бравэ

Модель кристалла, описывающую расположение атомов (ионов, молекул) в пространстве представляют кристаллической решеткой. При рассмотрении модели идеального кристалла предполагается структура со строгой периодичностью расположения атомов. К моделям решеток относятся решетки Бравэ и решетки с базисом [3].

Решетки Бравэ задаются с помощью операции параллельного перемещения (трансляции) частиц (атомов, ионов). Такая операция определяется вектором трансляции [3]:

$$\bar{P} = p \cdot \bar{a} + q \cdot \bar{b} + s \cdot \bar{c},$$

где:  $p, q, s$  – целые числа.

Для описания положения атомов в кристалле удобно использовать трехмерную систему координат, которая в общем случае не является декартовой, а определяется симметрией кристалла и положением соседних атомов в нем. Ограниченность декартовой системы координат вытекает из требований ортогональности осей и равенства масштабов по осям. Используемая кристаллографическая система координат дает возможность учесть симметрию и анизотропию кристаллов. Как правило, кристаллографическая система координат имеет оси, сонаправленные с векторами, определяющими элементарную ячейку.

Элементарная ячейка кристаллической решетки задает минимальная область кристалла, полностью сохраняющая его структуру. Кристалл можно разбить на одинаковые элементарные ячейки. Все вершины элементарных ячеек являются узлами решетки. Они содержат атомы или группы атомов. Различие элементарных ячеек кристаллических тел определяет семь типов симметрий – сингоний Бравэ. В табл. 1.1. даны краткие характеристики каждой сингонии.

Наряду с сингонией кристалла, решетка может различаться заполнением элементарной ячейки отдельными атомами. Выделяется четыре возможные структуры элементарных ячеек.

В примитивной ячейке (ПР) частицы располагаются только в узлах. В этом случае в такой ячейке содержится только один атом.

Базоцентрированная (БЦ) ячейка, наряду с заполнением частицами вершин, включает в себя и частицы в центрах верхней и нижней граней.

Гранецентрированная (ГЦ) ячейка содержит частицы в вершинах и в центрах всех граней.

Таблица 1.1

Типы решеток Бравэ

Сингония	Параметры элементарной ячейки		Возможные структуры ячейки
	углы	ребра	
триклинная	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \pi/2$	$x \neq y \neq z$	ПР
моноклинная	$\alpha = \gamma = \pi/2, \beta \neq \pi/2$	$x \neq y \neq z$	ПР, БЦ
ромбическая	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	$x \neq y \neq z$	ПР, БЦ, ГЦ, ОЦ
тетрагональная	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	$x = y \neq z$	ПР, ОЦ
тригональная (ромбоэдрическая)	$\alpha = \beta = \gamma \neq \pi/2$	$x = y = z$	ПР
гексагональная	$\alpha = \beta = \pi/2, \gamma = 2\pi/3$	$x = y \neq z$	ПР
кубическая	$\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$	$x = y = z$	ПР, ГЦ, ОЦ

Объемноцентрированная (ОЦ) ячейка содержит частицы в вершинах и еще одну частицу в центре ячейки.

Как следует из представленных возможных комбинаций сингоний и возможных структур ячеек (таблица 1.1), можно построить только 14 различных решеток Браве.

Однако кристаллическая структура твердых тел может иметь более сложный характер и не описываться только одной из указанных выше решеток Браве. В этом случае решетки представляются двумя вставленными друг в друга решетками Бравэ. Дополнительным параметром, возникающим при описании такой решетки, является смещение решеток друг относительно друга. Оно определяется базисным вектором  $a$  [3].

Построение таких решеток с базисом осуществляется с помощью трансляций каждой элементарной ячейки, смещенной на базисный вектор. Так решетки кристаллов кремния и германия представляют собой две вставленными друг в друга ГЦК решетки, смещенные на четверть диагонали ячейки.

Кристаллографическая система координат позволяет определить параметры кристаллической решетки, включающие задание координат узлов, ребер, граней. Актуальность контроля направлений в кристалле определяется, прежде всего, свойством анизотропии. В соответствии со структурой кристалла любой сингонии, линейная плотность частиц зависит от выбранного направления. Для целей задания элементов структуры кристалла принято определять индексы Миллера для узлов, направлений и плоскостей.

Точечные координаты элемента решетки задаются с помощью индексов Миллера для узлов. Узел кристаллической решетки в системе с заданным началом координат определяется заданием трех чисел – координат  $x$ ,  $y$ ,  $z$  (рис. 1.5,  $a$ ) [3]:

$$x = p \cdot a, \quad y = q \cdot b, \quad z = s \cdot c, \quad (1.2)$$

где:  $a, b, c$  – масштабные параметры решётки;  $p, q, s$  - целые числа.

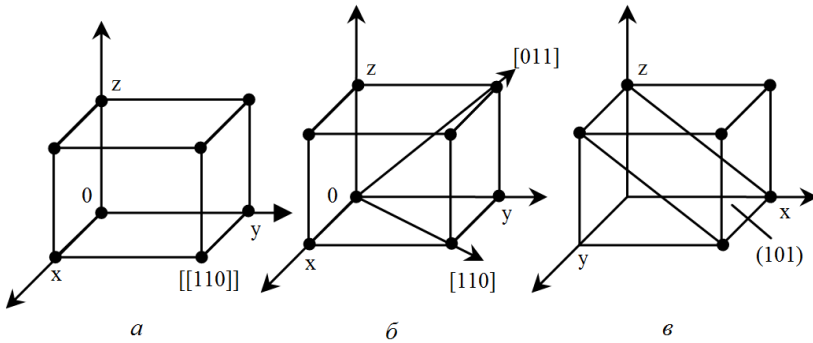


Рис. 1.5. Индексы Миллера:  $a$  – индексы узла;  $b$  – индексы направлений;  $c$  – индексы плоскости

При выборе в качестве единичной длины параметров решётки ( $a, b, c$ ) в (1.2), координатами узла будут  $p, q, s$ . Такие координаты определяют индексы Миллера для узла и записываются в двойных квадратных скобках –  $[[p\ q\ s]]$ .

Для описания направления используются индексы Миллера для направлений. Направление в кристалле задается вектором, начинающимся в начале координат и проходящим через узел, который лежит на векторе. Если индексы такого узла  $[[p\ q\ s]]$ , то индексы направления –  $[p\ q\ s]$ . Они записываются в одиночных квадратных скобках (рис. 1.5, б).

Для задания индексов Миллера для плоскостей определяются отрезки, отсекаемые ею на осях координат-  $P, Q, S$ . Обратные величины к отрезкам –  $1/P, 1/Q, 1/S$ . Следующий шаг – приведение дробей к общему знаменателю  $D$ :  $D=p \cdot P=q \cdot Q=s \cdot S$ . Полученные целые числа – индексы Миллера для плоскостей ( $m, n, q$ ). Они записываются в круглых скобках (рис. 1.5, в).

## 1.4. Структура реальных кристаллов

Реальные кристаллические тела не имеют идеальной периодической закономерности расположения частиц. Существуют различного рода отклонения от идеально правильной структуры. Такие отклонения называются дефектами структуры. Важность учета дефектов кристаллической структуры вытекает из того, что свойства реального твердого тела очень сильно отличаются от свойств идеальных кристаллов. Так, расчетные соотношения предела прочности и электропроводности идеального кристалла более чем в сто раз выше реально измеряемых значений.

Распространенной классификацией дефектов является классификация по мерности. Точечные (нульмерные) дефекты являются нарушениями положений атомов в отдельных точках решетки. Их можно разделить на следующие типы (рис. 1.6). Отсутствие узла кристаллической решетки (рис. 1.7, *a*) определяется как дефект по Шоттки. Основным источником возникновения структурных дефектов является тепловое движение частиц кристаллической решетки [4].

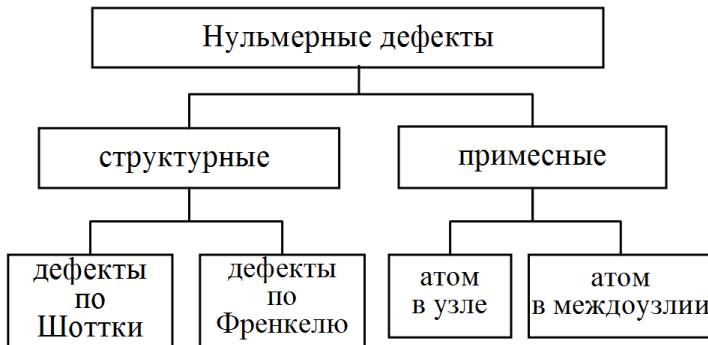


Рис. 1.6. Классификация точечных дефектов

Однако дефект может генерироваться и при росте кристалла, и при механическом воздействии. Для концентрации дефектов по Шоттки  $n_{ш}$  справедливо соотношение [4]:

$$n_{ш} = N_y \exp\left(-\frac{\Delta E_{ш}}{kT}\right), \quad (1.3)$$

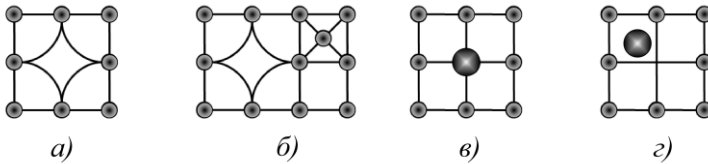


Рис. 1.7. Точечные дефекты в кристалле: *а* – дефект по Шоттки; *б* – дефект по Френкелю; *в* – примесный дефект – атом в узле; *г* – примесный дефект – атом в междуузлии.

Одновременная генерация вакансии в решетке и атома в междуузлии приводит к возникновению дефекта по Френкелю (рис.7, б). Соотношение для концентрации дефектов по Френкелю [4]:

$$n_{\phi} = \sqrt{N_y N_M} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\phi}}{2kT}\right), \quad (1.4)$$

где:  $N_y$  – концентрация узлов решетки,  $N_M$  – концентрация междуузлий,  $\Delta E_{\phi}$  – энергия дефектообразования.

Как следует из приведенных соотношений (1.3),(1.4) для концентраций, их число зависит от температуры. С ростом температуры растет генерация дефектов, а при ее понижении – преобладает рекомбинация дефектов. Динамика процессов образования таких дефектов характеризуется скоростью



генерации  $G$  и скоростью рекомбинации  $R$ . В равновесном состоянии при постоянной температуре эти скорости равны. В случае нарушения равновесия при скачке температуры образуется неравновесная концентрация дефектов  $\Delta n = \Delta G - \Delta R$ . Переход в равновесное состояние уже при новой температуре происходит путем релаксации, определяемой параметром  $\tau$  [4]:

$$\Delta n = \Delta n_0 \exp(-t/\tau),$$

где:  $\Delta n_0$  – начальная неравновесная концентрация,  $\tau$  – время релаксации.

Наряду со структурными дефектами, примесные дефекты представляют собой также точечные дефекты в кристаллах. Они могут быть источниками генерации свободных носителей заряда, центрами захвата носителей заряда, центрами рекомбинации носителей заряда. Электронная структура и расположение в кристаллической решетке примесных атомов определяет свойства, вносимые ими в кристаллическое тело. В случае если примесные атомы находятся в узлах решетки (рис.1.7,в), то такие кристаллические тела называются твердыми растворами замещения. Если же примесные атомы находятся в междоузлиях решетки (рис. 1.7, г), то такие кристаллические тела называются растворами внедрения. Важнейшим физическим свойством примесных дефектов является их влияние на процессы электропереноса в полупроводниках. Так введенные в кристалл полупроводника донорные или акцепторные примеси на несколько порядков изменяют концентрацию носителей заряда, а, следовательно, и электропроводность полупроводников.

Рассмотренные дефекты, будучи точечными, искажают характер связи элементов кристаллической решетки в некоторой конечной пространственной области. Она

составляет несколько межатомных расстояний. В этом смысле искажение правильной структуры кристалла уже нельзя считать точечным.

Распространенными дефектами в кристаллических телах являются одномерные дефекты. К ним относятся краевые и винтовые дислокации (рис.1.8, *а, б.*)

Дефект заключается в сдвиге атомных плоскостей относительно друг друга. Возникновение дислокаций может быть обусловлено деформацией кристалла при растяжении, сжатии или сдвиге. Проведенные исследования одномерных дефектов в кристаллических телах показывают, что сдвиг поверхностей происходит чаще всего по кристаллографическим плоскостям. Показанная на рис.1.8 *а.* линия *D* краевой дислокации перпендикулярна плоскости рисунка, а линия *D* винтовой дислокации (рис.1.8.*б*) перпендикулярна верхней плоскости.

В отличие от структурных точечных дефектов, которые всегда присутствуют в кристалле при конечной температуре, концентрация одномерных дефектов может быть существенно уменьшена. В промышленных условиях высокостабильных температурных режимов могут быть получены кристаллы с малой концентрацией дислокаций. Концентрация дефектов дислокаций в таких кристаллах может составлять величину менее  $10^2 \text{ см}^{-2}$ .

Двумерные поверхностные дефекты можно разделить на два типа – внутренние и внешние. Основной причиной внешних дефектов является поверхность кристалла.

Состояние атомов на границе поверхности отличается от состояния атомов во внутренней области. Присутствие оборванных связей поверхностных атомов приводит к возникновению втягивающего воздействия на них со стороны внутренней области кристалла. Еще одной причиной возникновения внешних дефектов является покрытие поверхности различными пленками. Они могут быть

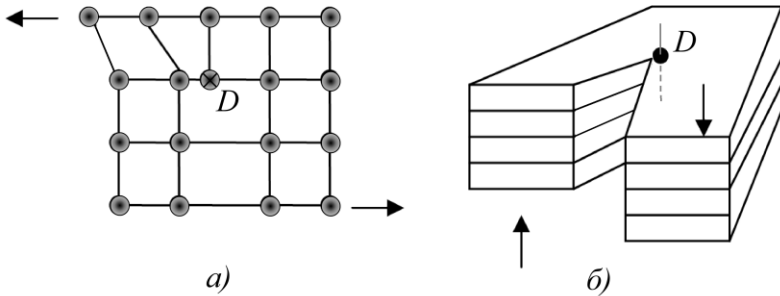


Рис.1.8. Одномерные дислокации: краевая (а), винтовая (б). Стрелки соответствуют месту и направлению приложенных механических напряжений

оксидными, боридными и т.д. Внутренние поверхностные дефекты расположены внутри кристалла. Они включают в себя поверхностные границы областей разных фаз, поверхностные границы различного рода включений, поверхностные границы областей с другой кристаллической ориентацией.

Трехмерные объемные дефекты кристалла включают в себя объемные области другой фазы, иной ориентации кристаллической решетки, инородные включения конечного размера.

Перечисленные выше дефекты могут существенно влиять на физические свойства твердого тела и на характер поведения тела при различных процессах. Это свойство определяет одну из важнейших задач твердотельной микроэлектроники – создание образцов материалов с заданной структурой.

## 1.5. Тепловые колебания в твердых телах

Атомы кристаллической решетки при конечной температуре совершают тепловые колебания около положений равновесия. Траектория таких колебаний является

достаточно сложной, и точное описание представляет значительные трудности. Поэтому рассматривают более простые приближенные модели с существенными упрощениями в постановке задачи. Так вместо описывания колебаний отдельных частиц, рассматривается их коллективное тепловое поведение в кристалле, являющемся пространственно упорядоченной системой. Коллективное тепловое колебание атомов называется нормальным колебанием решетки. Число таких нормальных колебаний решетки равно числу степеней свободы частиц кристалла. Если  $N$  – число частиц в кристалле, то число нормальных колебаний –  $3N$ .

Простейшей характерной моделью твердого тела является одномерная модель – линейная цепочка атомов, равноотстоящих на расстоянии  $a$  [4]. Атомы колеблются в направлении, перпендикулярном длине цепочки (рис.1.9, *a*)

Самой низкой частоте отвечает колебание цепочки с закрепленными концами. Колебание представляет собой стоячую волну с узлами на концах (рис. 1.9, *б*, кривая 1). Следующему колебанию (кривая 2) соответствует стоячая волна с узлами на концах и на середине цепочки. Третье колебание (кривая 3) определяется стоячей волной с двумя узлами. Аналогично можно продолжить определение конечного набора колебаний цепочки. Минимальная длина волны, возникающая в цепочке, соответствует удвоенному расстоянию между атомами цепочки (рис. 1.9, *в*):  $\lambda_{\min} = 2a$ . Ее частота  $\omega_{\max}$  [4]:

$$\omega_{\max} = \frac{2\pi\nu}{\lambda_{\min}} = \frac{\pi\nu}{a},$$

где:  $\nu$  – скорость распространения волн в цепочке.

При описании волновых процессов принято использовать волновой вектор  $\vec{k}$ , с направлением, совпадающим с направлением распространения волны и величиной равной  $k = 2\pi/\lambda$ . Зависимость частоты нормальных колебаний однородных атомов от величины волнового вектора  $\vec{k}$  называется дисперсионной кривой – рис. 1.10.

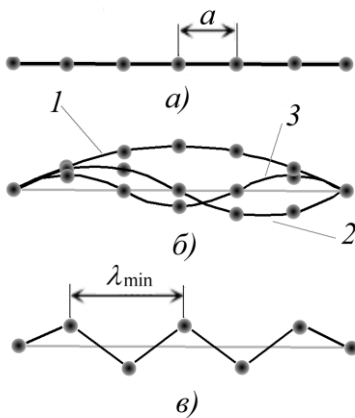


Рис. 1.9. Нормальные колебания в цепочке атомов

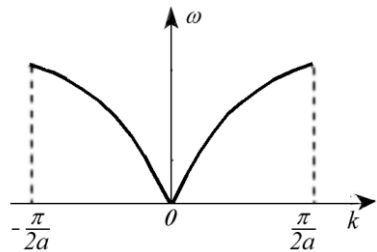


Рис.1.10. Дисперсионная кривая нормальных колебаний однородной цепочки атомов

Рассмотрим более сложную модель цепочки, состоящей из атомов двух сортов, правильно чередующихся между собой (рис. 1.11, а). Пусть масса тяжелых атомов  $M$ , легких –  $m$ . В такой цепочке атомов возможно появление двух типов колебаний (рис. 1.11, б). Первый тип колебаний аналогичен колебаниям однородной цепочки: соседние атомы колеблются практически в одной фазе и если  $k = 0$ , то  $\omega = 0$ . Такой тип

колебаний называется *акустическими*. Они включают весь спектр звуковых колебаний цепочки. Акустические тепловые колебания определяют такие важнейшие тепловые свойства кристаллов, как теплоемкость, тепловое расширение, теплопроводность.

При другом типе нормальных колебаний (рис. 1.11, в) атомы с разной массой колеблются в противоположных фазах. Такие колебания можно рассматривать как колебания друг относительно друга двух решеток из атомов одного типа, вставленных одна в другую. Данный тип колебаний называется оптическими тепловыми колебаниями. Он играет основную роль при взаимодействии квантов света с кристаллом. Дисперсионные кривые  $\omega(k)$  для акустических (1) и оптических (2) нормальных колебаний цепочки, состоящей из двух сортов атомов, представлены на рис.1.12.

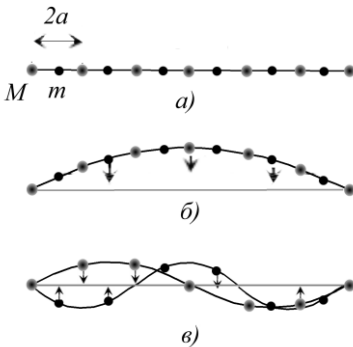


Рис. 1.11. Нормальные колебания в цепочке атомов двух видов

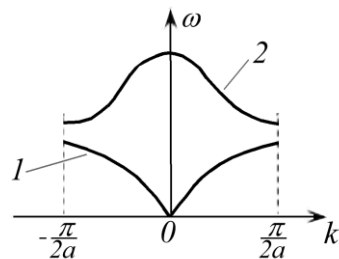


Рис.1.12. Дисперсионная кривая нормальных колебаний неоднородной цепочки атомов

В то время, как для акустических колебаний частота растет с ростом волнового числа  $k$  и достигает максимального значения при  $k_{\max} = 2\pi/a$ , для оптических колебаний  $\omega_{\max}$  имеет место при  $k=0$ , с ростом величины  $k$  частота этих колебаний уменьшается и становится минимальной при  $k_{\max}$ .

## 1.6. Фононы

Характеристикой каждого нормального колебания кристаллической решетки является энергия и импульс. Тепловые нормальные колебания решетки удобно представить набором колебаний свободных осцилляторов с массами, равными массе атомов твёрдого тела. Каждый осциллятор является одним из нормальных колебаний решетки. В каждой моде, соответствующей отдельному осциллятору, колеблются все атомы кристалла, двигаясь с частотой  $\omega$ . Исходя из данной модели, при возникновении полного набора нормальных колебаний ( $3N$  колебаний), полная тепловая энергия кристалла [4]:

$$E = \sum_{i=1}^{3N} E_i, \quad (1.5)$$

где:  $E_i$  – энергия  $i$ -го нормального колебания с частотой  $\omega_i$ .

Таким образом, смысл определения модели нормальных колебаний кристалла заключается в замене решения сложной задачи оценки тепловой энергии системы, состоящей из  $N$  атомов, на более простую задачу определения средней энергии нормальных осцилляторов.

Рассмотрение осциллятора на атомном уровне требует квантово-механического подхода. Энергия осциллятора определяется соотношением [4]:

$$E_n = (n+1/2)\hbar\omega,$$

где:  $\omega$  – циклическая частота колебаний осциллятора,  $n = 0, 1, 2$  – квантовое число.

Энергетический спектр линейного гармонического осциллятора показан на рис.1.13 пунктирными линиями. Он представляет собой совокупность дискретных уровней, расположенных на расстоянии друг от друга  $\hbar\omega$ .

Так как нормальные колебания решетки представляют собой также дискретный набор осцилляторов, то энергия тепловых колебаний (1.5) (как и электромагнитных) также должна квантоваться [4].

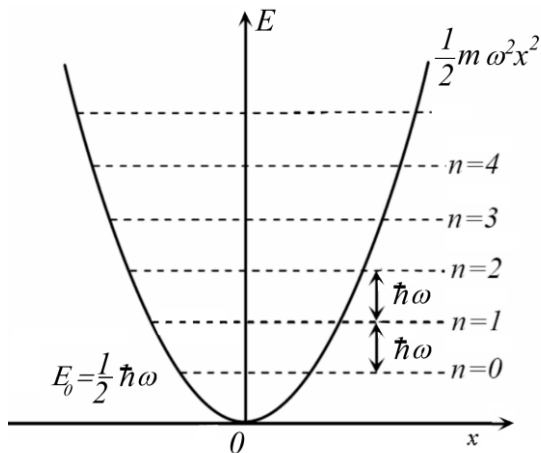


Рис.1. 13 Потенциальная энергия и энергетические уровни гармонического квантового осциллятора

$$\varepsilon_\phi = \hbar\omega. \quad (1.6)$$

Минимальная порция энергии, которая поглощается или испускается кристаллической решеткой, можно определить изменением энергии при переходе нормального колебания с



одного энергетического уровня на соседний уровень: Минимальная порция энергии тепловых колебаний кристаллической решетки (1.6) называется фононом. Упругие волны, возникающие при тепловых колебаниях кристаллической решетки, можно представить в виде газа, состоящего из квантов колебаний решётки - фононов. Нагретый кристалл можно представить замкнутым объемом, заполненным фононным газом. Основными свойствами фонона являются следующие свойства.

1. Фонон обладает импульсом:  $p_\phi = \hbar k = \varepsilon_\phi / v$ , где  $v$  – фазовая скорость фонона, равная скорости звука в твердом теле. Так в кремнии скорость звука  $v = 2200$  м/с.

2 Фонон является частицей, существующей только в веществе. Такие частицы называются квазичастицами. Фононы являются элементарными носителями движения в системе частиц твердого тела. Фононы распространяются в твердом теле, взаимодействуя друг с другом и неоднородностями кристаллической решетки в виде дефектов. Результатом такого взаимодействия является рассеивание фононов.

3. Свойством фононного газа является возможность одновременного существования практически неограниченного числа фононов с одинаковой энергией. Ограничение при этом определяется только число атомов в кристалле. Данное свойство учитывается видом статистической функции распределения фононов по энергии. Фононы описываются функцией распределения Бозе-Эйнштейна [3]:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\varepsilon_\phi/kT} - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \quad (1.7)$$

Как следует из соотношения (1.7), в кристалле, нагретом до температуры  $T$ , в решетке возбуждаются нормальные колебания в диапазоне энергий от нуля до  $\hbar\omega \approx kT$ .

### 1.7. Теплоемкость кристаллического твердого тела

Пусть кристаллическое тело состоит из  $N$  атомов. Тогда число степеней свободы колебаний такой системы атомов равно  $3N$ . Чтобы оценить теплоемкость твердого тела, оценим его внутреннюю энергию при температуре  $T$ . С учетом того, что внутренняя энергия одного атома составляет величину  $\varepsilon = 3kT$ , для одного моля вещества внутренняя энергия [1]:

$$U = 3kT \cdot N_A = 3RT.$$

где:  $k$  – постоянная Больцмана,  $N_A$  – число Авогадро,  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Теплоемкость моля вещества [1]:

$$C = \frac{dU}{dT} = 3R = 25 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К}). \quad (1.8)$$

Таким образом, теплоёмкость всех твёрдых тел не зависит от температуры и равна  $3R$ . Это соотношение называется законом Дюлонга и Пти – по имени авторов, экспериментально подтвердивших его справедливость.

Однако более поздние измерения показали, независимость от температуры для теплоемкости выполняется только при высоких температурах, выше некоторого параметра  $\Theta$ , называемой температурой Дебая. При этом при температурах твердого тела ниже  $\Theta$ , теплоемкость уменьшается с понижением температуры (рис.1.14). Проведенные исследования полученной

закономерности позволили установить, что  $\Theta$  является температурой, при достижении которой в твердом теле возбуждается полный спектр нормальных колебаний. Таким образом дальнейшее повышение температуры не вызывает генерации новых мод нормальных колебаний с большей энергией.

Для объяснения полученной закономерности поведения теплоемкости при низких температурах, Эйнштейном и Дебаем была разработана теория теплоёмкости кристаллических тел.

В соответствии с теорией Дебая тепловое движение атомов кристаллической решетки можно представить системой  $3N$  колебаний. Такие колебания приобретают устойчивый характер при отражении от поверхности кристалла и образуя стоячие волны. Длины и частота колебаний таких волн определяются размером кристалла и его упругими свойствами. Число возбуждаемых стоячих волн в кристалле равно  $3N$ .

В соответствии с теорией Дебая внутренняя энергия твердого тела  $U$  складывается из энергии нормальных колебаний решетки. Рассчитав спектр нормальных колебаний, можно получить значение молярной теплоемкости кристалла в виде интеграла [1]:

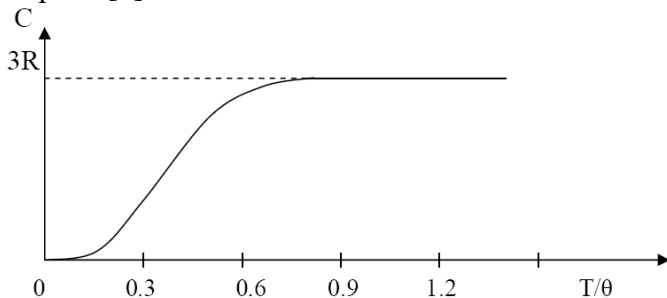


Рис.1.14. Изменение теплоемкости твердого тела с температурой

$$C_v = 3R \left[ 12 \left( \frac{T}{\Theta} \right)^3 \cdot \int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx - \frac{3(\Theta/T)}{e^{\Theta/T} - 1} \right] \quad (1.9)$$

Полученное соотношение (1.9) может быть записано в явном виде для разных температурных областей.

1. Низкие температуры:  $T \ll \Theta$ .

$$\int_0^{\Theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx \approx \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15}, \text{ следовательно:}$$

$$C_v = \frac{12\pi^4}{5} R \left( \frac{T}{\Theta} \right)^3 \sim T^3 - \text{Закон Дебая}$$

2. Высокие температуры:  $T \gg \Theta$ .

В этом случае  $x \leq \Theta/T \ll 1$ . Следовательно, в разложении  $e^x \approx 1 + x + \dots$  достаточно оставить первые два члена. Тогда:  $C_v = 3R$ . Полученное значение теплоемкости при высоких температурах совпадает с законом Дюлонга и Пти (1.8).

Предлагаемая в теории Дебая концепция изменения теплоемкости твердого тела с температурой может быть качественно описана исходя из следующих соображений.

При низких температурах увеличение внутренней энергии происходит по двум причинам. Первая из них – это повышение энергии колебаний уже возбужденных нормальных колебаний. Увеличение средней энергии пропорционален величине температуры  $T$ . Второй механизм роста внутренней энергии определяется возбуждением новых мод нормальных колебаний. Этот процесс сопровождается повышением внутренней энергии пропорционально  $T^3$ . Тогда общая внутренняя энергия твердого тела растет  $U \sim T^4$ , а  $C_v \sim T^3$ .

При достижении температуры Дебая, второй механизм перестает давать вклад в изменение внутренней энергии и остается только первый механизм. В этом случае  $U \sim T$  и теплоемкость  $C_V$  не зависит от температуры  $T$ .

### 1.8. Тепловое расширение твердых тел

Рассмотрим кривую зависимости потенциальной энергии взаимодействия двух частиц 1 и 2, находящихся в соседних узлах кристаллической решетки от расстояния между ними (рис.1.15) [1]. Расстояние  $r_0$  соответствует минимальной энергии взаимодействия  $U_0$ . Величина  $U_0$  соответствует энергии взаимодействия при нулевой температуре, когда частицы не совершают колебательных движений и удалены друг от друга на расстоянии  $r_0$ . Совокупность таких расстояний определяет линейный размер тела при нулевой температуре.

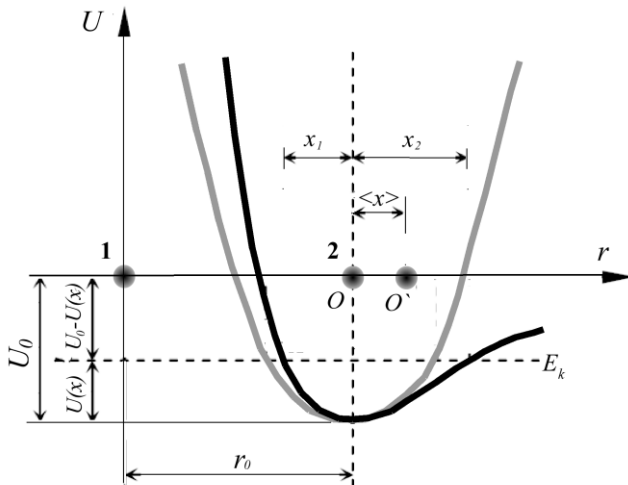


Рис. 1.15. Потенциальные энергии взаимодействующих частиц. Серая кривая – квадратичная зависимость, черная кривая – с учетом кубической зависимости

С ростом температуры возникают колебания частиц относительно положений равновесия  $O$ . Рассмотрим колебания частиц на примере частицы 2.

Максимальное значение кинетической энергии  $E_K$  колеблющейся частицы достигается в точке  $O$  положения исходного равновесия. При движении частицы 2 влево от положения равновесия  $O$  происходит рост сил отталкивания от частицы 1. При этом кинетическая энергия переходит в потенциальную энергию взаимодействия частиц.

Будем отсчитывать кинетическую энергию  $E_K$  от дна потенциальной ямы. Тогда при полном переходе кинетической энергии в потенциальную энергию взаимодействия и максимально близком сближении частиц, энергия взаимодействия частиц по сравнению с энергией  $U_0$  взаимодействия в положении равновесия увеличится на величину  $U(x) = E_K$ . Приращение энергии:  $\Delta U = -(U_0 - U(x))$ . При этом частица 2 сместится на предельное расстояние влево. Аналогичный процесс перехода кинетической энергии в потенциальную энергию происходит и при движении частицы 2 вправо.

Если предположить гармонический характер колебаний частицы 2 (серая кривая на рис.1.15), то в соответствии с законом Гука, сила, действующая на частицу при отклонении на расстояние  $x$  [2]:

$$f(x) = -\beta x.$$

Тогда значение потенциальной энергии  $U(x)$  частицы [2]:

$$U(x) = \beta x^2 / 2. \quad (1.10)$$

Парабола симметрична относительно прямой, параллельной оси  $U$ , отстоящей от нее на расстоянии  $r_0$ . В этом случае максимальные отклонения частицы влево и вправо одинаковы. Поэтому величина среднего положения частицы 2 остается в положении равновесия  $O$ . Таким образом, с нагреванием твердого тела не происходит изменений средних положений атомов, а лишь увеличивается амплитуда колебаний. В этом случае отсутствует линейное расширение твердого тела.

Чтобы описать наблюдаемое в реальных процессах тепловое расширение твердых тел необходимо учесть, что потенциальная кривая (черная кривая на рис.1.15) является несимметричной и соответственно колебания частиц в твердом теле не являются гармоническими. Рассмотрим асимметричную потенциальную кривую, добавив слагаемое к (1.10) с нечетной степенью  $x$  [2]:

$$U(x) = \frac{\beta x^2}{2} - \frac{gx^3}{3}, \quad (1.11)$$

$$f(x) = -\frac{\partial U}{\partial x} = -\beta x + gx^2.$$

При колебаниях частицы, асимметрия потенциальной кривой (1.11) определяет различие отклонений вправо и влево ( $x_2 > x_1$ ). Поэтому среднее положение частицы 2 (точка  $O'$ ) отлично от положения равновесия  $O$ . Смещение среднего положения частицы 2 вправо соответствует увеличению среднего расстояния между частицами на величину  $\langle x \rangle$ . В этом случае нагревание твердого тела сопровождается его объемным расширением. Величина такого расширения определяется величиной изменения средних расстояний между частицами, а не ростом амплитуды колебаний частиц.

Зная среднее расстояние между частицами можно оценить коэффициент линейного расширения твердого тела  $\alpha$  [2]:

$$\alpha = \frac{1}{r_0} \frac{\Delta r}{\Delta T} = \frac{1}{r_0} \frac{d\langle x \rangle}{dT} = \frac{g}{\beta^2 r_0} \frac{dU}{dT} = \chi C_V \quad (1.12)$$

Полученная зависимость (1.12) указывает, что коэффициент линейного расширения ведет себя по-разному при высоких и низких температурах нагревания твердого тела, отражая зависимость  $C_V(T)$ .

В области температур  $T > \Theta$  внутренняя энергия отдельной частицы, колеблющейся в одном направлении (линейно)  $U = kT$ . Тогда ее теплоёмкость равна  $C_V = k$ . С учетом этого коэффициент расширения линейной цепочки атомов [2]:

$$\alpha = \chi C_V = \frac{gk}{\beta^2 r_0} \quad (1.13)$$

Оценка  $\alpha$ , исходя из полученного соотношения (1.13), дает для различных твердых тел величину  $10^{-4} - 10^{-5}$ . Эксперименты по исследованию зависимости  $\alpha(T)$  при высоких температурах подтверждают, что коэффициент линейного расширения остается постоянной величиной.

Экспериментальные наблюдения также подтверждают, что при низких температурах коэффициент расширения уменьшается с уменьшением температуры.



## Вопросы и задачи для самоконтроля

1. Для каких твердых тел справедлив ближний порядок расположения атомов?
2. Приведите пример полиморфизма в кристаллах.
3. В каком случае полиморфизм сопровождается аллотропией?
4. Какой вид связи между атомами присутствует во всех кристаллах?
5. Чем отличается ковалентная связь атомов от металлической связи?
6. Какой тип связи определяет связь атомов в полупроводниках *Si* и *Ge*.
7. Что такое сингония Бравэ?
8. Что задается индексами Миллера?
9. Какие точечные дефекты кристалла являются структурными?
10. Для каких дефектов их концентрация зависит от температуры?
11. Что представляют собой нормальные колебания атомов в кристаллической решетке?
12. В каких кристаллических решетках возникают акустические и оптические колебания?
13. Что такое фонон?
14. Чем отличается закон Дебая и закон Дюлонга и Пти для теплоемкости твердого тела?
15. Каким свойством должна обладать кривая потенциальной энергии взаимодействия атомов для описания температурного расширения твердого тела?

1. Определить индексы плоскости, параллельной осям  $Y$  и  $Z$ .

Ответ:  $(1\ 0\ 0)$ .

2. Определить индексы грани в простой кубической решетке, параллельной оси Z.

Ответ: (1 1 0).

3. Найти индексы Миллера плоскости, проходящей через узловые точки кристаллической решетки и отсекающей на осях кристалла отрезки длиной  $22 \text{ \AA}$ ,  $28 \text{ \AA}$  и  $19 \text{ \AA}$ , если параметры решетки составляют:  $a=2,75 \text{ \AA}$ ,  $b=2,80 \text{ \AA}$ ,  $c=4,75 \text{ \AA}$ .

Ответ: (5 4 10).

4. Найти индексы Миллера плоскости, проходящей через узловые точки кристаллической решетки и отсекающей на осях кристалла отрезки длиной  $4,5 \text{ \AA}$ ,  $8,4 \text{ \AA}$  и  $4,9 \text{ \AA}$ , если параметры решетки составляют:  $a=1,5 \text{ \AA}$ ,  $b=2,1 \text{ \AA}$ ,  $c=0,7 \text{ \AA}$ .

Ответ: (28 21 12).

5. Энергия образования вакансий в Al примерно равна 0,75 эВ. Определить равновесную концентрацию дефектов Шоттки при комнатной температуре и при  $550^\circ\text{C}$ .

Ответ: При  $20^\circ\text{C}$  ~ 1 вакансия на  $10^{12}$  атомов, при  $550^\circ\text{C}$  ~ 1 атом на 1000 атомов.

6. Энергия образования дефектов внедрения в чистый Al составляет примерно 3 эВ. Оценить концентрацию равновесных дефектов Френеля. Рассчитать отношение концентрации атомов внедрения к концентрации вакансий для комнатной температуры и при  $550^\circ\text{C}$ . Использовать данные предыдущей задачи.

Ответ: При  $20^\circ\text{C}$  ~ 1 вакансия на  $6 \cdot 10^{25}$  атомов, при  $550^\circ\text{C}$  ~ 1 атом на  $1,4 \cdot 10^9$  атомов.

7. Найти отношение числа дефектов по Шоттки к числу дефектов по Френкелю при комнатной температуре, если энергия образования вакансии равна 0,75 эВ, а энергия образования дефекта внедрения 3 эВ.

Ответ:  $\frac{n_{Sh}}{n_{Fr}} \approx \exp\left[-\frac{2\omega_{Sh} - \omega_{Fr}}{2k_B T}\right] = 7.37 \cdot 10^7.$

**8.** Пусть энергия, необходимая для образования вакансии, равна 1 эВ. Вычислить вклад в теплоемкость одного моля металла при комнатной температуре, обусловленный присутствием этих дефектов.

Ответ:  $\Delta C = 1.4 \cdot 10^{-16}.$

**9.** Учитывая независимость амплитуды нулевых колебаний от частоты, оцените абсолютное значение этой амплитуды, рассматривая колебания решетки с максимально возможной частотой  $\omega_{\max}$  ( $\lambda_{\min} = 2a$ ). При этом энергию нулевых колебаний можно положить равной классической механической энергии колебаний одного атома решетки.

Ответ:  $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega_{\max}}}.$

**10.** Оцените величину вероятности возбуждения одного, двух и трех квантов с частотой  $\omega$  при температуре Дебая  $\Theta$ , которую можно положить равной комнатной  $\approx 300\text{K}$ , что справедливо для большинства металлов.

Ответ:  $p(n=1) = 0.232$ ;  $p(n=2) = 0.086$ ;  $p(n=3) = 0.32.$

**11.** Оценить температуру Дебая для железа, полагая скорости распространения продольных и поперечных волн одинаковыми и равными  $V_s = 5\text{км/с}$ . Плотность железа  $\rho = 7,8\text{ г/см}^3.$

Ответ:  $\Theta = \frac{\hbar}{k} V_s \left(6\pi^2 \frac{\rho N_A}{M}\right)^{1/3}.$

## 2. ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ МЕТАЛЛОВ

### 2.1. Обобществление электронов в кристалле.

#### Свободные электроны

В твердом теле расстояния между атомами настолько малы, что каждый из них оказывается в достаточно сильном электромагнитном поле соседних атомов. Для того чтобы проследить, какое влияние оказывает это поле на энергетические уровни атомов, рассмотрим следующий пример [1].

Расположим  $N$  атомов натрия в виде пространственной решетки, свойственной кристаллу натрия, но на столь больших расстояниях  $r$  друг от друга, чтобы взаимодействием между ними можно было пренебречь. В этом случае энергетическое состояние электронов в каждом из них можно считать таким же, как и в отдельно взятом изолированном атоме. В нижней части рис. 2.1, а показана энергетическая схема двух изолированных атомов натрия.

Каждый атом изображен в виде веретенообразной потенциальной ямы, внутри которой проведены энергетические уровни:  $1s, 2s, 2p, 3s$  и т.д. Уровни  $1s, 2s$  и  $2p$  укомплектованы у натрия полностью, уровень  $3s$  – наполовину, уровни же, расположенные выше  $3s$ , свободны.

Из рис.2.1, а видно, что изолированные атомы отделены друг от друга потенциальными барьерами шириной  $r$ . Высота барьера для электронов, находящихся на разных уровнях различная. Она равна расстоянию от этих уровней до нулевого уровня  $00$ . Потенциальный барьер препятствует свободному переходу электронов от одного атома к другому.

В верхней части рис.2.1, а показана качественная картина распределения плотности вероятности обнаружения электронов на данном расстоянии от ядра. Максимумы этих

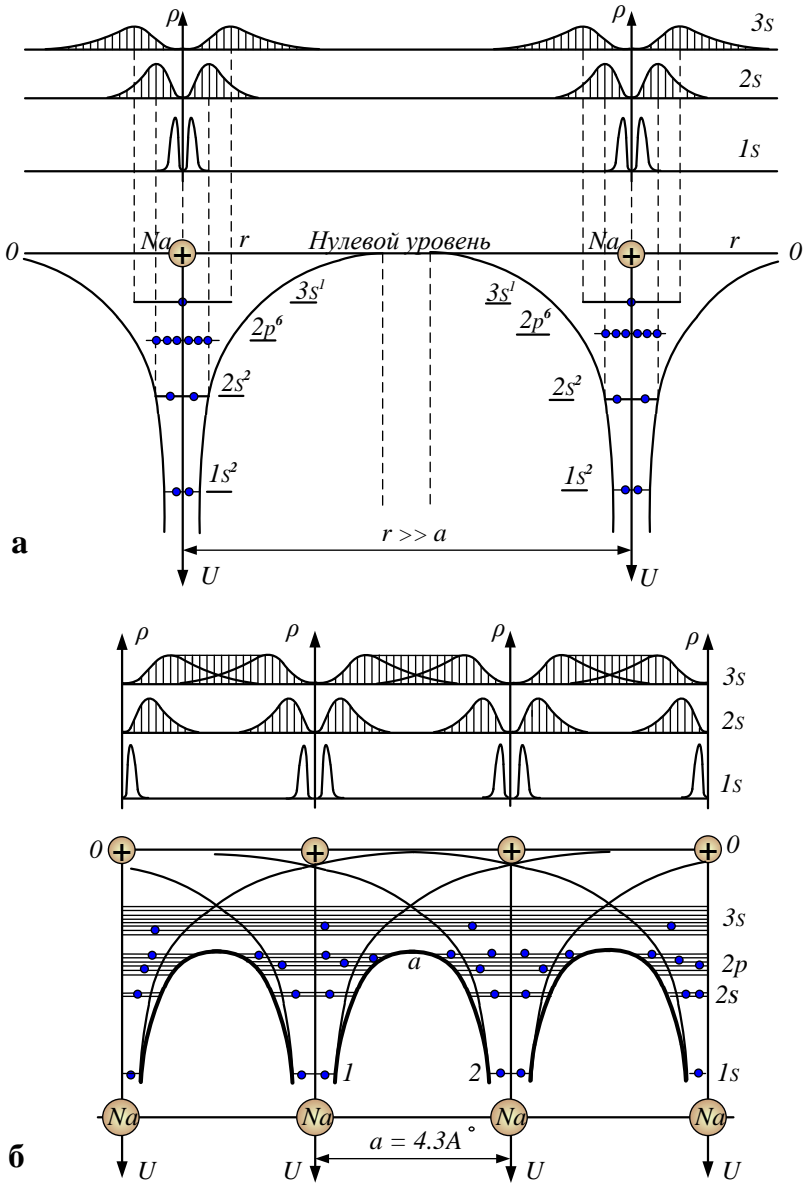


Рис. 2.1 Изменение состояния электронов при сближении атомов

кривых соответствуют примерно положению боровских орбит для этих электронов. Теперь подвергнем решетку медленному однородному сжатию, не нарушающему ее симметрии. По мере сближения атомов взаимодействие между ними растет и на расстояниях, равных параметру решетки, достигает нормальной величины. На рис.16,б показана картина, соответствующая такому сближению атомов. Из рис. 2.1, б видно, что потенциальные кривые, отделяющие соседние атомы, частично перекрываются и дают результирующую потенциальную кривую  $1a_2$ , проходящую ниже нулевого уровня  $00$ . Это означает, что сближение атомов вызывает уменьшение не только ширины барьера, но и его высоты. Примечательно, что эта высота оказывается даже несколько ниже первоначального положения уровня валентных электронов  $3s$ . Поэтому валентные электроны получают возможность практически беспрепятственно переходить от одного атома к другому. Об этом свидетельствует и характер волновых функций этих электронов: они перекрываются настолько сильно, что дают электронное облако практически равномерной плотности, чему соответствует состояние полного обобществления валентных электронов, при котором вероятность обнаружения их в любом месте решетки совершенно одинакова. В то же время электронные облака внутренних оболочек атома не перекрываются, вследствие чего состояние внутренних электронов в кристалле остается фактически таким же, как и в изолированных атомах [2, 3].

Коллективизированные электроны называют часто свободными. Следует помнить об относительности этого понятия: электрон освободился от конкретного атома, но остался в "плёну" у кристалла и, таким образом, не является полностью свободным. Не следует рассматривать такой электрон так же примитивно, считая, что он сначала "повертелся" около одного ядра, затем около другого и т.д.

Коллективизация является прямым следствием физической эквивалентности всех ионов решетки, и поэтому каждый электрон "принадлежит" одновременно всем ионам решетки и с равной вероятностью может быть обнаружен вблизи любого из них. Такие электроны образуют в кристалле электронный газ.

Электрические и магнитные свойства твердых тел в основном определяются поведением свободных электронов. Роль протонов обычно сводится лишь к нейтрализации отрицательного заряда.

Присутствие нейтронов иногда может оказаться важным (например, критическая температура сверхпроводимости зависит от общей массы атома), но, в конечном счете, именно структура энергетических уровней электронов – ключ к пониманию свойств твердого тела.

С математической точки зрения задача не отличается от тех, с которыми мы уже имели дело. Как найти энергетические уровни электронов в твердом теле? Надо ввести волновую функцию, зависящую от координат каждого из  $10^{25}$  электронов. Затем записать потенциал кулоновского взаимодействия всех электронных пар, а также пар электрон – протон и решить уравнение Шрёдингера. Как вы понимаете, мы не собираемся идти этим путем. Что же можно предложить взамен? Попробуем найти более простую математически разрешимую модель и будем надеяться, что результат будет иметь смысл.

Начнем наши поиски более простой модели. Рассмотрим кусок некоторого металла. Эксперименты показывают, что за границами металла электроны отсутствуют (по крайней мере, при комнатной температуре). Значит, что-то удерживает их внутри металла. Что именно? Конечно же, потенциальный барьер на поверхности металла. Ну, а что происходит внутри? Как изменяется потенциальная энергия электрона в присутствии огромного числа ядер и

других электронов? Будем считать, что эта энергия однородна в пространстве. Это может показаться совершенно неверным (конечно, так оно и есть), но таким образом мы придем к вполне разумным результатам. Эту модель предложил в 1928 г. Зоммерфельд. Она известна как модель свободных электронов. Электроны в металле (точнее, валентные электроны, занимающие внешние оболочки) движутся совершенно свободно, но не могут его покинуть.

Ясно, что эта модель – по сути уже хорошо знакомая нам потенциальная яма. Если представить себе куб со стороной  $L$ , внутри которого находится электрон, то энергию можно записать так [3]:

$$E = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad (2.1)$$

где  $h$  – постоянная Планка,  $m$  – масса электрона,  $n_x, n_y, n_z$  – целые числа.

Для одномерного случая выражение (2.1) принимает вид

$$E = \frac{\eta^2 k^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}. \quad (2.2)$$

## 2.2. Плотность разрешенных состояний

Разрешенные значения энергии, согласно формуле (2.1), кратны величине  $h^2/(8mL^2)$ . С ростом энергии расстояние между соседними энергетическими уровнями увеличивается, так как в (2.1) входят квадраты квантовых чисел. Несколько предвосхищая результат следующего раздела, примем  $E = 3$  эВ в качестве типичного значения максимальной энергии. Пусть  $n_x^2 = n_y^2 = n_z^2$ . Тогда



максимальному значению энергии будет соответствовать  $n_x \approx 1,64 \cdot 10^7$ . Для ближайшего энергетического уровня квантовые числа равны  $n_x - 1$ ,  $n_x$ ,  $n_x + 1$ . Следовательно, разность энергий

$$\Delta E \approx 1,22 \cdot 10^{-7} \text{ эВ.} \quad (2.3)$$

Таким образом, даже для максимально возможной энергии расстояние между соседними уровнями порядка  $10^{-7}$  эВ. Поэтому в макроскопически малый интервал  $dE$  попадает достаточно большое число дискретных энергетических уровней и можно ввести понятие плотности разрешенных состояний, т.е. считать энергетический спектр сплошным. Это существенно упрощает все расчеты.

Интересно узнать, сколько состояний попадает в интервал от  $E$  до  $E + dE$ . Для удобства введем новую целочисленную переменную  $n$  такую, что

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2. \quad (2.4)$$

Числа  $n_x$ ,  $n_y$ ,  $n_z$  можно рассматривать как проекции трехмерного вектора  $\vec{n}$ . Каждому конкретному набору целочисленных координат соответствует определенное энергетическое состояние. В единичном кубе содержится точно одно состояние. Следовательно, число состояний в любом заданном объеме равно численной величине этого объема. Так, в сфере радиусом  $n$  число состояний равно

$$N = \frac{4\pi}{3} n^3. \quad (2.5)$$

Поскольку  $n$  и  $E$  однозначно связаны друг с другом, общее число состояний с энергией меньше  $E$  составит

$$N = \frac{4\pi n^3}{3} = \frac{4\pi}{3} K^{3/2} E^{3/2}, \text{ где } K = \frac{8mL^2}{h^2}. \quad (2.6)$$

Аналогичным образом число состояний с энергией меньше  $E + dE$  будет равно

$$N = \frac{4\pi}{3} K^{3/2} (E + dE)^{3/2}. \quad (2.7)$$

Отсюда получаем число состояний в интервале от  $E$  до  $E + dE$ :

$$N(E)dE = \frac{4\pi}{3} K^{3/2} [(E + dE)^{3/2} - E^{3/2}] = 2\pi K^{3/2} E^{1/2} dE. \quad (2.8)$$

Это еще не окончательный ответ. Следует принять во внимание, что разрешены только положительные значения  $n_x, n_y, n_z$ . По этой причине результат надо разделить на 8. Кроме того, необходимо учесть два возможных значения спина, т. е. умножить на 2. В результате получим

$$N(E)dE = CE^{1/2}dE, \text{ где } C = 4\pi L^3 (2m)^{3/2} / h^3. \quad (2.9)$$

Выражение (2.9) дает число разрешенных состояний, но хотелось бы знать число занятых уровней, т. е. число состояний, в которых находятся электроны. Для этого надо знать вероятность того, что состояние с энергией  $E$  занято. Вероятность  $f(E)$  можно найти, проделав не слишком уж трудоемкое упражнение по статистической механике. Задача сводится к нахождению наиболее вероятного распределения частиц по энергии с учетом принципа Паули при условии, что общая энергия и число частиц заданы [4].

### 2.3. Статистический способ описания состояния коллектива частиц. Невырожденные и вырожденные коллективы частиц

Предположим, что  $N$  одинаковых частиц распределены по  $G$  различным энергетическим состояниям. Мерой «частоты встреч» микрочастиц может служить отношение  $N/G$ . Под «встречей» понимается попадание двух частиц в одно и то же состояние. Микрочастицы будут встречаться редко, если выполняется следующее условие:

$$N/G \ll 1.$$

В этом случае степень заполнения энергетических состояний много меньше единицы, т.е. в кристалле в распоряжении каждой микрочастицы имеется множество различных свободных состояний, и вопрос о заселении одного и того же состояния несколькими частицами практически не возникает [5].

Такие коллективы называются невырожденными, а условие  $N/G \ll 1$  называют условием невырожденности.

Если же число частиц  $N$  сравнимо с числом состояний, по которым они могут быть распределены, т.е. если выполняется условие

$$N/G \geq 1,$$

то вопрос о том, как заселять состояние – поодиночке или коллективно, становится весьма актуальным. Такие коллективы называются вырожденными. Их могут образовать только квантовые объекты.

По характеру поведения в коллективе все микрочастицы можно разделить на две группы: фермионы и бозоны. К фермионам относят электроны, протоны,

нейтроны и другие частицы с полуцелым спином:  $1/2\hbar$ ,  $3/2\hbar$  и т.д.

К бозонам относят фононы, фотоны и другие частицы, обладающие целочисленным спином:  $0$ ,  $\hbar$ ,  $2\hbar$ .

В коллективе фермионы проявляют ярко выраженное «стремление к уединению». Если данное квантовое состояние уже занято фермионом, то никакой другой фермион данного типа не может попасть на это состояние. В этом заключается известный принцип запрета Паули, которому подчиняются фермионы.

Бозоны, напротив, проявляют «стремление к объединению».

## 2.4. Классическая и квантовая статистики

Физическая статистика, изучающая свойства невырожденных коллективов, называется классической статистикой. Ее связывают с именами Максвелла и Больцмана и называют статистикой Максвелла – Больцмана.

Физическая статистика, изучающая свойства вырожденных коллективов, называется квантовой статистикой.

Квантовую статистику связывают с именами Ферми и Дирака и называют статистикой Ферми – Дирака.

Из сказанного выше следует, что в квантовых статистиках фигурируют только квантовые объекты, тогда как в классической статистике могут фигурировать и классические, и квантовомеханические объекты. Если уменьшать число частиц в коллективе или увеличивать число возможных состояний, по которым распределяются микрочастицы, то вырожденный коллектив превращается, в конце концов, в невырожденный. В этом случае коллектив будет описываться статистикой Максвелла – Больцмана [6].

Рассмотрим функцию распределения микрочастиц по энергиям  $f(E)$ .

Вид этой функции зависит, прежде всего, от того, является ли коллектив микрочастиц вырожденным или невырожденным.

## 2.5. Функция распределения для невырожденного коллектива

Функция распределения  $f(E)$  для невырожденного коллектива микрочастиц имеет следующий вид:

$$f_{M-B}(E) = e^{\mu/kT} e^{-E/kT}, \quad (2.10)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана;  $\mu = dE/dn$  – химический потенциал;  $n$  – число микрочастиц.

Химический потенциал – это величина, выражающая изменение свободной энергии системы при изменении числа частиц в системе на одну при постоянной температуре и постоянном объеме системы. График функции (2.10) имеет вид, показанный на рис. 2.2

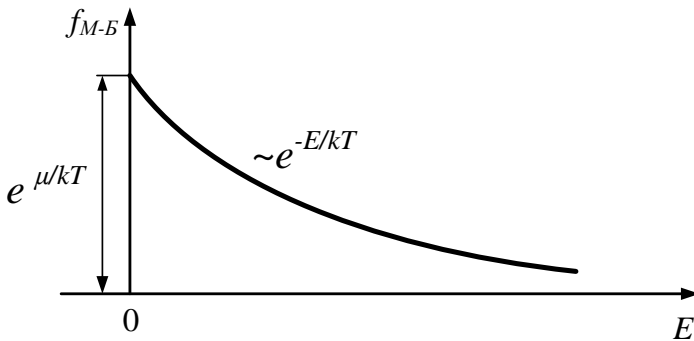


Рис. 2.2. Функция распределения для невырожденного коллектива микрочастиц

Данная функция имеет максимальное значение при  $E=0$  и асимптотически снижается с увеличением  $E$ . Это означает, что наибольшую вероятность заполнения имеют состояния с низкими энергиями; по мере повышения энергии состояний вероятность их заполнения резко падает.

## **2.6. Функция распределения для вырожденного коллектива**

Как уже отмечалось, функция распределения для вырожденного газа микрочастиц была впервые получена Ферми и Дираком и имеет следующий вид:

$$f_{\Phi-D}(E) = \frac{1}{1 + \exp[(E - \mu)/kT]}. \quad (2.11)$$

Здесь, как и ранее, через  $\mu$  обозначен химический потенциал, который применительно к электронному газу называют обычно энергией Ферми. Из формулы (2.11) видно, что при  $E = \mu$  функция распределения  $f_{\Phi-D} = 1/2$  при любой температуре  $T$  отличной от 0 [6].

## **2.7. Распределение электронов в металле при абсолютном нуле**

Металл для свободных электронов является потенциальной ямой, выход из которой требует совершения работы по преодолению сил связи, удерживающих электрон в металле.

Схема такой ямы показана на рис. 2.3. Горизонтальными линиями показаны энергетические уровни, которые могут занимать электроны. В соответствии с принципом Паули на каждом таком уровне могут разместиться два электрона. Если электронный газ содержит  $N$  электронов, то последним будет

занят уровень с номером  $N/2$ . Этот уровень называется уровнем Ферми для вырожденного электронного газа. Он соответствует максимальной кинетической энергии, которой может обладать электрон в металле при абсолютном нуле.

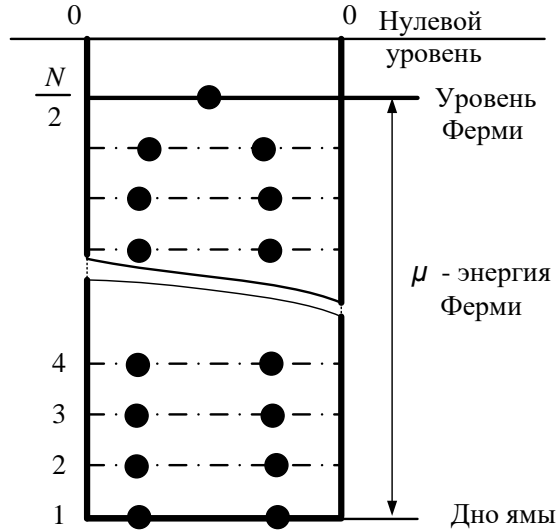


Рис. 2.3. Заполнение квантовых состояний электронами в металле

Таким образом, при абсолютном нуле все состояния с энергией  $E < \mu$  заняты электронами, а состояния с энергией  $E > \mu$  свободны. Иначе говоря, при  $T = 0$  К вероятность заполнения электронами состояний с энергией  $E < \mu$  равна единице, вероятность заполнения состояний с энергией  $E > \mu$  равна нулю [б]:

$$f_{\Phi-D}(E) = \begin{cases} 1 & \text{для } E < \mu; \\ 0 & \text{для } E > \mu. \end{cases}$$

График функции распределения Ферми – Дирака при абсолютном нуле имеет вид ступеньки, обрывающейся при  $E = \mu$  (рис. 2.4).

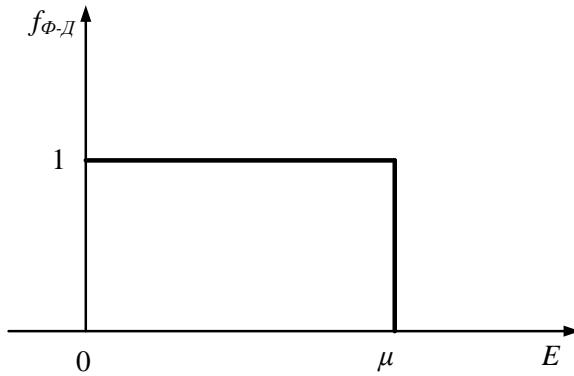


Рис. 2.4. График функции распределения для вырожденного газа при абсолютной температуре  $T = 0 \text{ K}$

## 2.8. Влияние температуры на распределение Ферми-Дирака

С повышением температуры электроны подвергаются тепловому возбуждению и переходят на более высокие энергетические уровни. Однако такому возбуждению могут подвергаться электроны лишь узкой полосы ( $\approx kT$ ), непосредственно примыкающей к уровню Ферми (рис. 2.5).

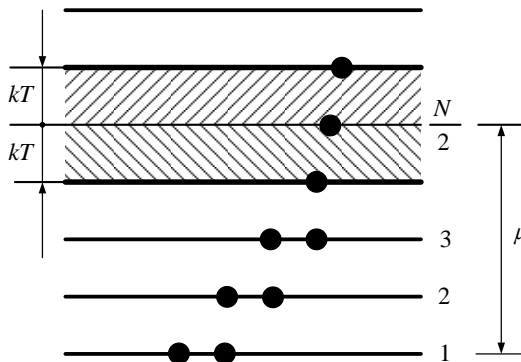


Рис. 2.5. Тепловое возбуждение электронов



Электроны более глубоких уровней остаются практически не затронутыми.

На рис. 2.6 показано распределение электронов по состояниям при  $T > 0$  К, из которого видно, что повышение температуры вызывает размытие ступеньки распределения Ферми на глубине порядка  $kT$ .

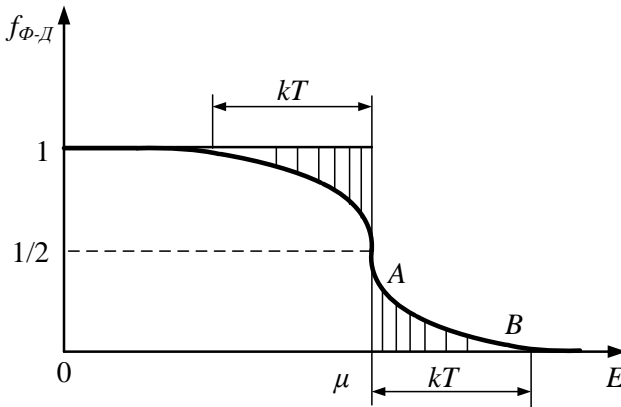


Рис. 2.6. График функции распределения Ферми – Дирака при  $T > 0$  К

Кроме того, повышение температуры вызывает также появление «хвоста» распределения  $AB$ , представляющего собой не что иное, как максвелловскую функцию распределения.

Чем выше температура, тем сильнее размытие распределения Ферми и длиннее «хвост» максвелловского распределения.

Тем не менее во всем диапазоне температур, при которых металлы могут существовать в твердом состоянии, электронный газ в них является вырожденным и его распределение мало отличается от распределения при абсолютном нуле.

Незначительный процент электронов, подвергающихся термическому возбуждению, приводит к тому, что электронный газ почти не поглощает тепла при нагревании, вследствие чего теплоемкость металла в обычных условиях практически полностью определяется теплоемкостью его кристаллической решетки.

## 2.9. Снятие вырождения

При выполнении критерия невырожденности  $N/G \ll 1$  любой газ, в том числе и электронный, должен стать невырожденным. Рассмотрим это более подробно.

Согласно данному условию газ является невырожденным, если средняя плотность заполнения состояний частицами значительно меньше единицы. Так как функция распределения  $f(E)$  как раз и выражает среднюю плотность заполнения состояний электронами, то условие невырожденности можно записать так:  $f(E) \ll 1$ .

Функция Ферми–Дирака (11) будет существенно меньше 1, если величина  $\exp[(E - \mu)/kT]$ , стоящая в знаменателе этой функции, окажется значительно больше единицы:

$$\exp[(E - \mu)/kT] \gg 1.$$

Это неравенство должно выполняться для всех состояний, в том числе и для состояний с  $E = 0$ :  $\exp(-\mu/kT) \gg 1$ .

Это возможно в том случае, если химический потенциал электронного газа  $\mu$  является величиной отрицательной и по абсолютному значению превышает  $kT$ :  $|\mu| \gg kT$ .

При этом единицей в знаменателе функции распределения Ферми–Дирака можно пренебречь.

Тогда получим следующее выражение для  $f(E)$ :

$$f(E) = \exp(\mu/kT)\exp(-E/kT).$$

Оно совпадает с функцией Максвелла – Больцмана. Это свидетельствует о том, что при выполнении условия  $N/G \ll 1$  или  $f(E) \ll 1$  вырождение у электронного газа снимается и он становится невырожденным.

С таким электронным газом приходится иметь дело, например, в невырожденных полупроводниках.

В заключение обсудим основные свойства распределения Ферми – Дирака.

1. Пусть температура равна нулю. Тогда

$$\begin{aligned} f(E) &= 1 & \text{для } E < E_F, \\ f(E) &= 0 & \text{для } E > E_F, \end{aligned} \quad (2.12)$$

где  $E_F$  – энергия Ферми.

Это означает, что при температуре абсолютного нуля все разрешенные состояния ниже уровня Ферми заняты, а выше него свободны. Поскольку  $N(E)dE$  – число состояний в интервале энергий от  $E$  до  $E + dE$ , общее число состояний с энергией меньше  $E_F$ , равное

$$\int_0^{E_F} N(E)dE, \quad (2.13)$$

должно в точности равняться общему числу электронов  $nL^3$  ( $n$  – концентрация электронов). Подставляя (2.9) в (2.13), получаем

$$\frac{4\pi L^3 (2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{E_F} E^{1/2} dE = nL^3. \quad (2.14)$$

Интегрируя, находим, что

$$E_F = \frac{h^2}{2m} \left( \frac{3N}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (2.15)$$

В табл. 2.1 приведены значения энергии  $E_F$ , вычисленные на основании известных значений концентрации свободных электронов.

Таблица 2.1  
Значения энергии уровня Ферми (в эВ),  
рассчитанные по формуле (2.15)

Li	4,72
Na	3,12
K	2,14
Rb	1,82
Cs	1,53
Cu	7,04
Ag	5,51
Al	11,70

Таким образом, даже при температуре абсолютного нуля энергия электронов изменяется в широких пределах.

Это существенным образом отличается от классического результата, согласно которому при  $T = 0$  все электроны имеют нулевую энергию.

2. Если энергия электрона больше энергии Ферми настолько, что

$$E - E_F \gg kT,$$

то распределение Ферми–Дирака переходит в распределение Максвелла – Больцмана.

3. Если энергия электрона ниже уровня Ферми, так что  $E_F - E \gg kT$ , то (10) можно представить в виде

$$f(E) \approx 1 - \exp [(E - E_F)/(kT)].$$

Следовательно, в области энергий, существенно меньших энергии Ферми, разрешенные состояния заняты с вероятностью, очень близкой к единице.

Иногда удобнее говорить о вероятности того, что состояние свободно, т.е. использовать функцию  $1 - f(E)$ . В таком случае легко видеть, что вероятность найти состояние незанятым изменяется по экспоненте.

4. В области  $E \approx E_F$  функция  $f(E)$  изменяется очень быстро, принимая значения от близких к единице до близких к нулю. Скорость изменения зависит от  $kT$  и для температуры абсолютного нуля равна бесконечности. С увеличением  $T$  функция  $f(E)$  изменяется все более и более плавно (см. рис. 2.6.). Если границы переходной области обозначить (достаточно произвольно) значениями  $f(E) = 0,9$  и  $f(E) = 0,1$ , то ее ширина составит приблизительно  $4,4 kT$ .

Итак, можно выделить три области значений энергии: от  $E = 0$  до  $E_F - 2,2 kT$ , где функция распределения близка к единице, а вероятность найти состояние незанятым изменяется по экспоненте; от  $E = E_F - 2,2 kT$  до  $E_F + 2,2 kT$ , где вероятность быстро изменяется приблизительно от 1 до 0; наконец, область от  $E_F + 2,2 kT$  до  $E = \infty$ , где вероятность изменяется экспоненциально.

## Вопросы для самоконтроля

1. Какие электроны образуют в кристалле электронный газ?
2. Какие микрочастицы относят к фермионам, а какие – к бозонам?
3. Функция распределения для невырожденного коллектива микрочастиц.
4. Функция распределения для вырожденного коллектива микрочастиц.
5. Какой энергетический уровень называют уровнем Ферми?
6. Влияние температуры на функцию распределения Ферми-Дирака.
7. Понятие о плотности разрешённых энергетических состояний.
8. Возможно ли взаимное превращение бозонов в фермионы и обратно?
9. Функция вероятности уровня Ферми равна  $1/2$ . Означает ли это, что на уровне Ферми находится лишь один электрон?
10. Каков физический смысл функции распределения?
11. Что такое уровень Ферми?
12. Каково заполнение электронами энергетических уровней меньших, чем уровень Ферми, больших уровня Ферми и самого уровня Ферми?
13. Что такое вырождение электронного газа?
14. Чем отличается энергетический спектр электронов в кристалле от спектра в изолированном атоме?

### 3. ПОЛУПРОВОДНИКИ

#### 3.1. Понятия о полупроводниках

У полупроводников зоны валентных электронов (валентные зоны) заполнены целиком и отделены от близлежащей свободной зоны достаточно широким энергетическим интервалом. Внешнее поле, приложенное к такому кристаллу, не в состоянии изменить характер движения электронов в валентной зоне, так как оно не способно поднять электроны в лежащую выше свободную зону. Внутри же самой зоны, не содержащей ни одного свободного уровня, оно может вызывать перестановку электронов местами, что не нарушает симметрии распределения их по скоростям. Поэтому в таких телах электрическое поле не может вызвать появления направленного движения электронов, т.е. появления электрического тока [6].

Естественно, что такие тела при абсолютном нуле должны обладать нулевой электропроводностью, т.е. быть изоляторами. Однако с повышением температуры вследствие термического возбуждения электронов валентной зоны часть из них может приобрести энергию, достаточную для преодоления запрещенной зоны и перехода в зону проводимости. Последняя превращается тогда в частично занятую, а в ранее целиком заполненной валентной зоне появляются вакансии, по которым может происходить движение электронов. Чем меньше ширина запрещенной зоны и выше температура кристалла, тем больше электронов переходит в свободную зону и тем больше вакансий образуется в валентной зоне. Для тел, у которых ширина запрещенной зоны не превышает 1 эВ, уже при комнатной температуре в зоне проводимости оказывается достаточное число электронов, а в валентной зоне – вакансий, чтобы осуществить относительно высокую электропроводность.

Такие тела обычно называют полупроводниками. Полупроводники имеют  $\sigma = 10^{-7} \div 10^4$  (Ом·см)<sup>-1</sup>.

### 3.2. Эффективная масса

Давно известно, что электрон имеет вполне определенную массу и, ускоряясь под действием электрического поля, подчиняется законам механики Ньютона. Что же случится, если ускоряющийся электрон окажется внутри кристалла? Как он будет взаимодействовать с электрическим полем?

Ответы на эти вопросы получим, используя квазиклассический подход, который, как говорит само название, наполовину классический, а наполовину квантовомеханический. Квантовомеханической оказывается формула, согласно которой скорость электрона в одномерной решетке равна его групповой скорости [6]

$$v_g = \frac{1}{\eta} \frac{\partial E}{\partial k}, \quad (3.1)$$

зависящей от выбранной функции энергии  $E(k)$  и модуля волнового вектора  $k$ . Классическим является определение  $dE$  как работы, произведенной над классической частицей, прошедшей расстояние  $v_g dt$  под действием силы  $q\xi$ , т. е. [6]

$$dE = q\xi v_g dt = q\xi \frac{1}{h} \frac{\partial E}{\partial k} dt. \quad (3.2)$$

Мы можем найти ускорение, продифференцировав выражение (3.1) следующим образом:



$$\frac{d\nu_g}{dt} = \frac{1}{\eta} \frac{d}{dt} \frac{\partial E}{\partial k} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{dk}{dt}. \quad (3.3)$$

Выразив теперь  $dk/dt$  из уравнения (3.2) и подставив его в (3.3), получим

$$\frac{d\nu_g}{dt} = \frac{1}{\eta^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} q\xi. \quad (3.4)$$

Сравнив это равенство с формулой для свободной классической частицы

$$m \frac{d\nu}{dt} = q\xi, \quad (3.5)$$

мы можем определить эффективную массу электрона

$$m^* = \eta^2 \left( \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right)^{-1}. \quad (3.6)$$

Оказывается, что в общем случае масса электрона, находящегося в кристалле, отлична от массы свободного электрона и обычно называется эффективной массой [1, 6].

Следовательно, ответ на первоначальный вопрос таков: электрон в кристаллической решетке действительно взаимодействует с электрическим полем, но его масса отличается от массы свободного электрона и определяется выражением (3.6).

Теперь проверим, нет ли здесь противоречия с той зависимостью  $E(k)$ , которая получена нами для свободного электрона:

$$E = \frac{\eta^2 k^2}{2m}.$$

Отсюда имеем равенство

$$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \frac{\eta^2}{m},$$

которое, будучи подставлено в (3.6), дает  $m^* = m$ .

На рис. 3.1. изображены кривые зависимостей энергии, групповой скорости и эффективной массы для данного случая от величины  $k$ , изменяющейся в пределах от  $-\pi/a$  до  $\pi/a$ .

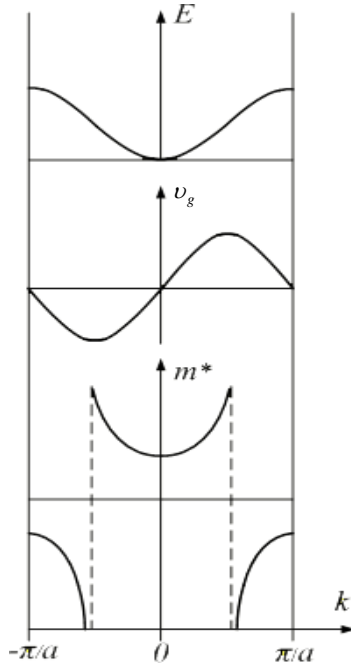


Рис. 3.1. Кривые зависимостей энергии, групповой скорости и эффективной массы как функции величины  $k$

Поразительно, что величина  $m^*$  может стремиться к бесконечности, а также принимать отрицательные значения.

Если электрон, первоначально находившийся в покое при  $k = 0$ , начнет ускоряться электрическим полем, то при его движении величина  $k$  увеличивается, а масса его возрастает до тех пор пока не станет бесконечной при  $k = \pi/(2a)$ . При дальнейшем увеличении  $k$  эффективная масса становится отрицательной, что может трактоваться как появление новой частицы – дырки, с которой мы еще будем встречаться в оставшейся части нашего курса. Эффективная масса электрона, определяемая выражением (3.6), соответствует одномерной модели кристалла, однако принцип ее вычисления можно легко обобщить и на трехмерный случай.

Если вы любите математику, то эффективную массу (а лучше ее обратную величину) можете считать тензором, а если вам тензоры не нравятся, то рассматривайте электрон в кристалле как весьма экстравагантную частицу, которая под действием электрического поля, направленного, например, по оси  $x$ , перемещается в другом направлении.

Масса  $m^*$ , определяемая выражением (3.6), называется эффективной массой электрона. Приписывая электрону, находящемуся в периодическом поле кристалла, массу  $m^*$  мы можем считать этот электрон свободным и описывать его движение во внешнем поле так, как описывается движение обычного свободного электрона.

Необходимо подчеркнуть, что введение понятия эффективной массы является лишь удобным способом описания поведения электрона в периодическом поле кристалла. Сама же эффективная масса не является массой в обычном смысле слова. Она не определяет ни гравитационных, ни, строго говоря, инерционных свойств электрона. По величине она может быть как больше, так и

меньше массы покоящегося электрона, по знаку – как положительной, так и отрицательной.

### 3.3. Понятие о дырках

Электроны валентной зоны, в которой имеются свободные состояния, под действием внешнего электрического поля могут переходить на эти состояния и создавать в кристалле электрический ток. Определим мгновенную величину этого тока. Мгновенный ток, создаваемый одним электроном, движущимся со скоростью  $v$ , равен  $i_э = -q v$ .

Допустим, что таким электроном является электрон, состояние которого характеризуется волновым числом  $k$  (рис. 3.2).

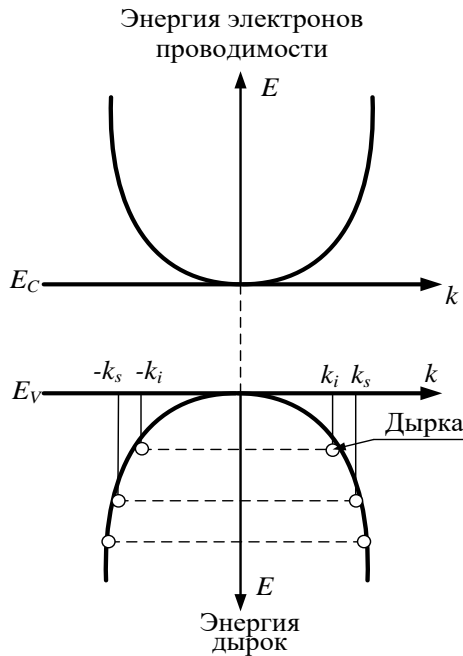


Рис. 3.2. Иллюстрация понятия дырки в валентной зоне

Результирующий мгновенный ток для всей совокупности электронов в зоне равен:

$$i = -q \sum_s v_s,$$

где суммирование ведется по всем состояниям, занятым электронами. Для зоны, полностью укомплектованной электронами,  $i = 0$ , так как для любого электрона с волновым числом  $k_s$  и скоростью движения  $v_s$  найдется электрон с волновым числом  $-k_s$  и скоростью  $-v_s$ .

Предположим теперь, что в зоне заняты все состояния, кроме одного, характеризующегося волновым числом  $k_i$  и скоростью движения  $v_i$  (рис. 3.2). Суммарный ток в такой зоне будет равен

$$i = -q \sum_{s=1} v_s = -q \sum_s v_s + qv_i.$$

Так как первое слагаемое правой части равно нулю, то  $i = +qv_i$ .

Видно, что суммарный ток всех электронов в зоне, имеющей одно вакантное состояние, эквивалентен току, образованному одной частицей с положительным зарядом  $+q$ , помещенной в это состояние. Такие фиктивные частицы называются дырками. Фиктивными они являются потому, что в действительности не существуют. Введение их оправдывается тем, что они позволяют весьма сложную задачу о движении огромного числа электронов валентной зоны по вакантным уровням заменить значительно более простой задачей о движении относительно небольшого числа дырок, располагающихся на этих уровнях.

Дырки, как и электроны, обладают эффективной массой. По абсолютной величине эффективная масса дырок равна эффективной массе электрона, ранее занимавшего данное вакантное состояние. Так как знак заряда дырки противоположен знаку заряда электрона, то для возникновения тока дырок, эквивалентного току, создаваемому коллективным движением электронов, знак эффективной массы дырок должен быть противоположен знаку эффективной массы электронов, располагающихся у вершины валентной зоны. Как известно, такие электроны обладают отрицательной эффективной массой. Поэтому эффективная масса дырок должна быть положительной.

Таким образом, дырка, как носитель заряда, обладает положительным зарядом  $+q$  и положительной эффективной массой. Так как дырки представляют собой вакансии электронов в валентной зоне, то их энергию следует отсчитывать от потолка валентной зоны вниз (рис. 3.2).

### 3.4. Примесные уровни в полупроводниках

Полупроводники любой степени очистки содержат всегда примесные атомы, создающие свои собственные энергетические уровни, получившие название примесных уровней. Они могут располагаться как в разрешенной, так и в запрещенной зонах полупроводника на различных расстояниях от вершины валентной зоны и дна зоны проводимости. В ряде случаев примеси вводят сознательно для придания полупроводнику необходимых свойств.

Рассмотрим основные типы примесных уровней [5, 6].

Предположим, что в кристалле кремния часть атомов кремния замещена атомами пятивалентного фосфора. Кремний имеет решетку типа алмаза, в которой каждый атом окружен четырьмя ближайшими соседями, связанными с ним валентными силами. Для установления связи с этими

соседями атом фосфора расходует четыре валентных электрона (рис. 3.3,а).

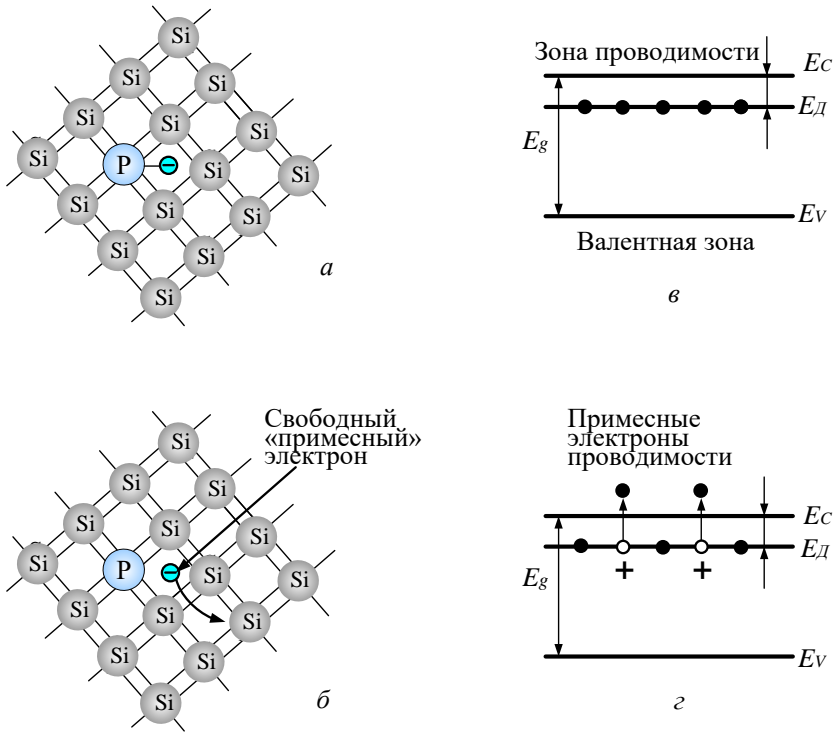


Рис. 3.3. Возбуждение носителей заряда в полупроводнике  $n$ -типа: а) –  $T = 0K$ ; б) –  $T > 0K$ ; в) – образование донорного уровня  $E_D$ ; з) – переход электронов в зону проводимости при  $T > 0K$  ( $E_C$  – дно зоны проводимости;  $E_V$  – потолок валентной зоны)

Пятый электрон в образовании связи не участвует. Он продолжает двигаться в поле атомного остатка фосфора. Можно показать, что энергия связи пятого электрона атома фосфора, помещенного в решетку кремния, должна

измеряться примерно сотыми долями электрон-вольта, а радиус орбиты этого электрона во много раз превышает постоянную решетки кремния.

Экспериментальное значение энергии ионизации примесных атомов пятивалентных элементов в кремнии равно примерно от 0,04 до 0,05 эВ. При сообщении электрону такой энергии он отрывается от атома и приобретает способность свободно перемещаться в кристалле, превращаясь таким образом в электрон проводимости (рис. 3.3,б).

С точки зрения зонной теории этот процесс можно представить следующим образом. Между заполненной валентной зоной и свободной зоной проводимости располагаются энергетические уровни  $E_D$  пятого валентного электрона примесных атомов фосфора (рис. 3.3,в). Эти уровни размещаются у дна зоны проводимости, отстоя от нее на расстояние  $E_D \approx 0,045\text{эВ}$ . При сообщении электронам таких примесных уровней энергии  $E_D$  они переходят в зону проводимости (рис. 3.3,г).

Образующиеся при этом положительные заряды локализуются на неподвижных ионизированных атомах фосфора и в электропроводности не участвуют.

Так как энергия возбуждения примесных электронов  $E_D$  значительно меньше энергии возбуждения собственных атомов кремния  $E_g$ , то при нагревании будут возбуждаться в первую очередь электроны примесных атомов, вследствие чего их концентрация может во много раз превосходить концентрацию собственных электронов. В этих условиях кремний будет обладать в основном примесной электронной проводимостью.

Примеси, являющиеся источником электронов проводимости, называются донорами, а энергетические уровни этих примесей – донорными уровнями.



Предположим теперь, что в решетке кремния часть атомов кремния замещена атомами трехвалентного бора (рис. 3.4).

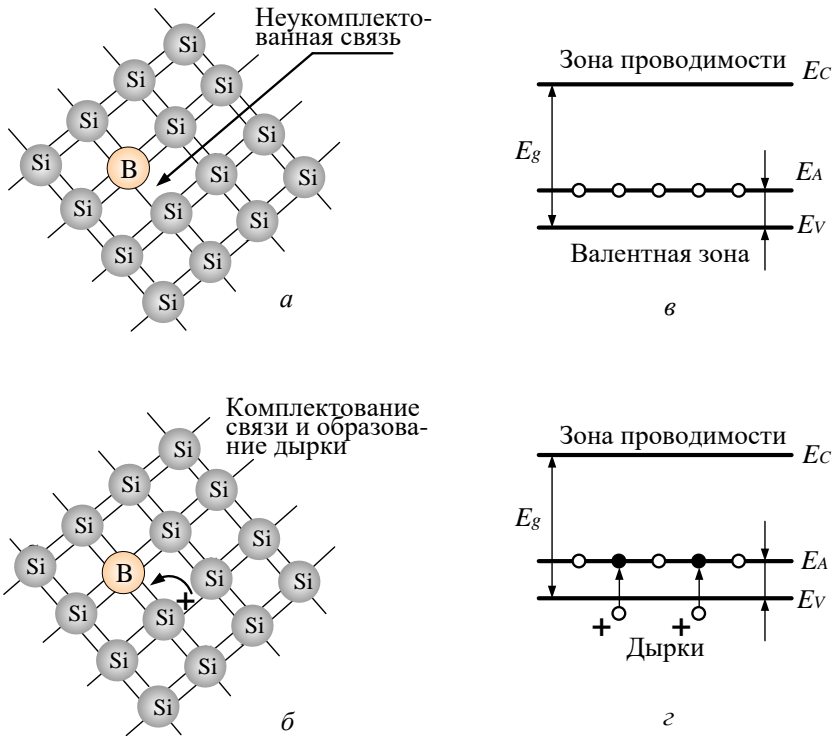


Рис. 3.4. Возбуждение носителей заряда в примесных полупроводниках  $p$ -типа:  $a$ ) –  $T = 0K$ ;  $b$ ) –  $T > 0K$ ;  $в$ ) – образование акцепторного уровня при  $T > 0K$ ;  $г$ ) – переход электронов на акцепторные уровни ( $E_C$  – дно зоны проводимости;  $E_V$  – потолок валентной зоны)

Для образования связей с четырьмя ближайшими соседями у атома бора не хватает одного электрона. Его можно “заимствовать” у атома кремния. Расчеты и

эксперименты показывают, что энергия  $E_A$ , необходимая для обеспечения такого “заимствования” электрона имеет тот же порядок величины, что и  $E_D$ .

На рис.3.4, в показана энергетическая диаграмма кремния, содержащего примесь бора. Непосредственно у вершины валентной зоны на расстоянии  $E_A$  располагаются незаполненные энергетические уровни атомов бора. Близость этих уровней к валентной зоне приводит к тому, что уже при сравнительно низких температурах электроны из валентной зоны переходят на примесные уровни. Связываясь с атомами бора, они теряют способность перемещаться в решетке кремния и в проводимости не участвуют. Носителями заряда являются лишь дырки, возникающие в валентной зоне.

Поэтому проводимость кремния в этом случае является в основном дырочной.

Примеси, захватывающие электроны из валентной зоны полупроводника, называются акцепторными примесями, а энергетические уровни этих примесей – акцепторными уровнями.

Донорные и акцепторные уровни располагаются на очень небольшом расстоянии от своих зон ( $0,01 \div 0,1$ ) эВ. Поэтому их называют мелкими уровнями.

### 3.5. Проводимость и подвижность носителей тока

При отсутствии внешнего поля электронный газ в кристалле находится в равновесном состоянии и описывается равновесными функциями распределения Максвелла–Больцмана, если газ невырожден, и Ферми–Дирака, если газ вырожден. Эти функции зависят от квадрата скорости движения электронов (энергия электронов  $E \sim v^2$ ) и поэтому являются симметричными относительно изменения знака скорости: при замене  $v$  на  $-v$  функция не меняется. Физически это означает, что плотность заполнения состояний,

отличающихся друг от друга направлением скорости, одинакова. По этой причине средняя скорость движения электронов в любом направлении равна нулю. Этим и объясняется тот факт, что в кристалле, содержащем сколько угодно большое число свободных носителей заряда, электрический ток отсутствует.

Установление равновесия в электронном газе происходит в результате взаимодействия электронов с дефектами решетки. Кроме того, электронная волна, распространяясь в кристалле, может также взаимодействовать с тепловыми колебаниями решетки и рассеиваться. Рассеяние при отсутствии внешнего электрического поля и приводит к установлению равновесного распределения. Если к кристаллу приложить внешнее поле напряженностью  $\vec{E}$ , то в нем возникает электрический ток, плотность которого  $\vec{j}$  согласно закону Ома пропорциональна  $\vec{E}$ :

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}. \quad (3.7)$$

Коэффициент пропорциональности  $\sigma$  называется удельной электропроводностью кристалла твердого тела, а величина  $\rho$ , обратная  $\sigma$ , называется удельным сопротивлением кристалла твердого тела:

$$\rho = \frac{1}{\sigma}. \quad (3.8)$$

Появление тока в кристалле свидетельствует о возникновении в нем под действием поля направленного движения электронов, которое называют дрейфом. Так как заряд электрона отрицателен, то дрейф происходит в

направлении, противоположном  $\vec{E}$ . Обозначим его среднюю скорость через  $\vec{v}_E$ .

Каждый электрон дает вклад в общий ток  $qv_E$ , а плотность полного тока, создаваемого всеми электронами, находящимися в  $1 \text{ см}^3$ , равна

$$\vec{j} = -qn\vec{v}_E. \quad (3.9)$$

Знак «минус» указывает на то, что вектор плотности тока направлен противоположно  $v_E$ . Сравнивая (3.7) и (3.9), находим

$$\vec{v}_E = -\frac{\sigma}{nq} \vec{E}. \quad (3.10)$$

Из (25) видно, что средняя плотность дрейфа электронов пропорциональна напряженности поля. Коэффициент пропорциональности

$$\mu_n = \frac{\sigma}{nq} \quad (3.11)$$

называется подвижностью носителей.

На основании (3.11) формулу (3.10) можно переписать так:

$$\vec{v}_E = -\mu_n \vec{E}. \quad (3.12)$$

Из выражения (27) видно, что  $\mu_n$  — это величина, численно равная средней скорости дрейфа электронов  $v_E$  в электрическом поле  $E=1 \text{ В/см}$  и имеющая размерность  $[\text{см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})]$ . Из формулы (3.11) следует, что

$$\sigma = nq\mu_n. \quad (3.13)$$

Таким образом, вопрос об определении удельной проводимости твердого тела сводится к определению концентрации и подвижности носителей заряда в нем.

В случае примесного полупроводника, содержащего электроны и дырки, выражение (3.13) обобщается следующим образом:

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p), \quad (3.14)$$

где  $n$ ,  $p$  – концентрации электронов и дырок соответственно,  $\mu_n$  и  $\mu_p$  – их подвижности.

В беспримесном (собственном) полупроводнике концентрации электронов и дырок одинаковы:  $n = p = n_i$ , а подвижности различны, так как подвижность носителя заряда зависит от эффективной массы ( $\mu_n > \mu_p$ ).

Следовательно, электропроводность собственного полупроводника определяется соотношением

$$\sigma_i = q n_i(\mu_n + \mu_p). \quad (3.15)$$

Механизм электропроводности, обусловленный генерацией пар электрон–дырка, при любом способе возбуждения называют собственным, а носители, образующиеся за счёт генерации пар электрон–дырка, называют собственными носителями заряда.

### **3.6. Механизмы рассеяния свободных носителей заряда**

Под действием электрического поля электроны получают ускорение. Следовательно, скорость электрона в направлении сил поля неограниченно возрастала бы. В

действительности, однако, это не так. Теория показывает, что в строго периодическом поле, т.е. в идеальной кристаллической решетке с покоящимися атомами, электроны действительно двигались бы ускоренно на протяжении очень больших промежутков времени. Но идеальных кристаллов не существует. В реальных же кристаллах всегда существуют нарушения периодического потенциала, обусловленные, во-первых, тепловыми колебаниями решетки и, во-вторых, всевозможными дефектами решетки [6].

Процесс рассеяния представляет собой искривление траектории движения носителей заряда под влиянием сил, действующих на электрон или дырку со стороны рассеивающего центра. В реальных кристаллах насчитывается сравнительно много различных механизмов рассеяния свободных носителей. Наиболее существенными из них являются: рассеяние на тепловых колебаниях решетки, на ионизированных и нейтральных атомах примеси, на дислокациях [5, 6]. Поэтому результирующая подвижность носителей определяется совокупным действием указанных механизмов рассеяния. Даже в случае приложения внешнего электрического поля каждый электрон в отдельности за счёт рассеяния перемещается в твердом теле хаотически, однако суммарный поток электронов движется вдоль поля (рис. 3.5). Вклад, вносимый отдельными составляющими рассеяния, различен. Обычно величиной рассеяния на нейтральных примесях пренебрегают. Величина рассеяния на дислокациях в кристаллах с малой плотностью дислокаций также незначительна.

Для таких кристаллов [5]

$$\frac{1}{\mu_n} = \frac{1}{\mu_{Ln}} + \frac{1}{\mu_{in}}, \quad (3.16)$$

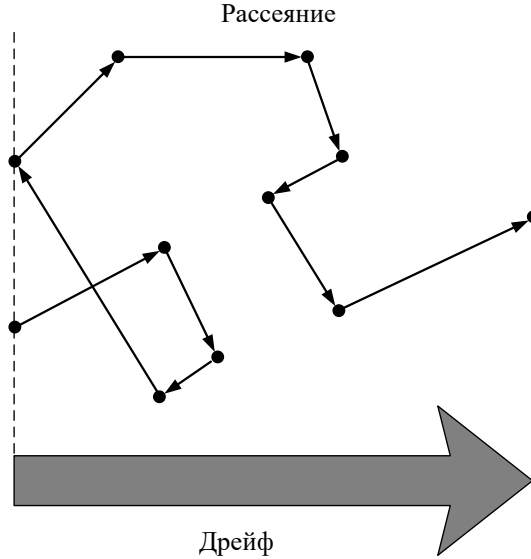


Рис. 3.5. Схематическое изображение рассеяния и дрейфа электронов в полупроводнике

где  $\mu_{Ln} = aT^{-3/2}$  – подвижность, обусловленная рассеянием электронов на тепловых колебаниях решетки;  $\mu_{in} = bT^{-3/2}$  – подвижность, обусловленная рассеянием электронов на ионизированных примесях. Рассеяние на ионах примеси, которое называют еще рассеянием Резерфорда, определяется кулоновским взаимодействием между носителями и ионами примеси. Построенная по уравнению (3.16) зависимость  $\mu_n(T)$  для кремния с различной концентрацией доноров  $N_D$  представлена на рис. 3.6.

С ростом температуры средняя скорость носителей увеличивается, их рассеивание на ионизированных центрах уменьшается (а на тепловых колебаниях еще очень мало) и подвижность увеличивается, достигая максимума, положение которого определяется также концентрацией примеси. При более высоких температурах рассеяние на тепловых

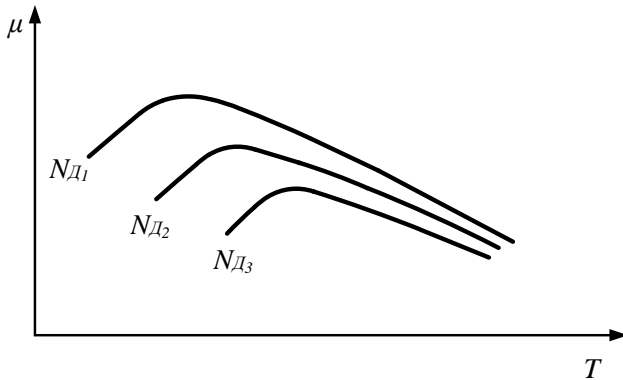


Рис. 3.6. Зависимость подвижности носителей от температуры для электронного кремния с различной концентрацией примесей ( $N_{D1} < N_{D2} < N_{D3}$ )

колебаниях решетки становится преобладающим и подвижность электронов уменьшается с ростом температуры.

В целом зависимость  $\mu_n(T)$  для полупроводника оказывается весьма сложной, и лишь в сравнительно узком интервале температур ее можно аппроксимировать простой степенной зависимостью вида  $\mu_n \sim T^m$ .

### 3.7. Примесная проводимость полупроводников

Температурная зависимость электропроводности невырожденных примесных полупроводников, как и собственных проводников, определяется в основном температурной зависимостью концентрации носителей [7].

Поэтому качественный характер зависимости  $\sigma(T)$  должен быть аналогичен зависимости  $n(T)$ , с учетом зависимости подвижности носителей заряда от температуры  $\mu_n(T)$ , (рис. 3.7), на котором можно выделить три характерные области:  $ab$ ,  $bc$ ,  $cd$ .



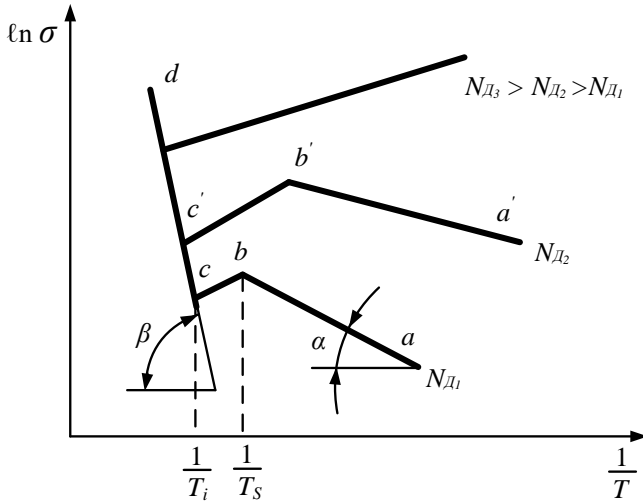


Рис. 3.7. Зависимость  $\ln \sigma(1/T)$  для примесного полупроводника

Область  $ab$  соответствует низким температурам и ограничивается температурой истощения примеси  $T_s$ .

Концентрация носителей в этой области определяется выражением

$$n = A \exp\left(-\frac{E_D}{2kT}\right),$$

где  $A = \sqrt{2N_D \left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2}}$ .

Подвижность носителей заряда определяется в основном рассеянием на примесях и пропорциональна  $T^{3/2}$ . При этом электропроводность полупроводника  $n$ -типа будет равна

$$\sigma_n = \sigma_{n0} \exp\left(-\frac{E_D}{2kT}\right), \quad (3.17)$$

где  $\sigma_{n0}$  – коэффициент, слабо зависящий от температуры.  
Логарифмируя (3.17), находим

$$\ln \sigma_n = \ln \sigma_{n0} - \frac{E_D}{2kT}.$$

Очевидно, что величина  $tg\alpha = E_D/2k$  пропорциональна энергии ионизации примеси  $E_D$ . Таким образом, область  $ab$  соответствует примесной проводимости полупроводника, возникающей вследствие ионизации примесных атомов.

Область  $bc$  ограничивается температурой истощения примесей  $T_S$  и температурой перехода к собственной проводимости  $T_i$ .

В этой области все примесные атомы ионизированы, но еще не происходит заметного возбуждения собственных носителей, вследствие чего концентрация носителей сохраняется приблизительно постоянной и равна концентрации примесей  $n \approx N_D$ . Поэтому температурная зависимость проводимости полупроводника в этой области определяется температурной зависимостью подвижности носителей. Если основным механизмом рассеяния носителей в рассматриваемой области является рассеяние на тепловых колебаниях решетки, для которого характерно уменьшение их подвижности с ростом температуры, то проводимость на этом участке будет падать.

Область  $cd$  соответствует переходу от примесной проводимости к собственной проводимости полупроводника. В этой области концентрация носителей равна концентрации собственных носителей заряда. Поэтому проводимость полупроводника в этой области имеет вид

$$\sigma \approx \sigma_i = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right).$$

В полулогарифмических координатах  $\ln\sigma(1/T)$  графиком этой зависимости является прямая  $cd$ , составляющая с осью абсцисс угол  $\beta$ , тангенс которого пропорционален ширине запрещенной зоны  $E_g$ :  $\operatorname{tg} \beta = E_g/(2k)$ .

Ярко выраженная зависимость сопротивления полупроводников от температуры лежит в основе функционирования большого класса полупроводниковых приборов – терморезисторов или термисторов. Они представляют собой объемные полупроводниковые области с большим температурным коэффициентом сопротивления и нелинейной вольт-амперной характеристикой.

Термисторы используются для измерения температуры, мощности электромагнитного излучения, температурной компенсации характеристик разнообразных элементов электрических цепей, а также элементов различных реле времени.

### **Вопросы и задачи для самоконтроля**

1. Какие частицы являются носителями заряда в полупроводниках?
2. Понятие о дырках.
3. Изобразите энергетическую диаграмму донорного полупроводника.
4. Изобразите энергетическую диаграмму акцепторного полупроводника.
5. Какова природа дрейфового электрического тока в полупроводнике?
6. Определение подвижности носителей заряда в полупроводнике.
7. Как подвижность носителей заряда зависит от температуры?
8. Зависимость электропроводности примесного полупроводника от температуры.

9. В чём существенная особенность полупроводников, отличающая их от других видов веществ?

10. Чем объясняется большая чувствительность полупроводников к внешним воздействиям?

11. Каковы различия в зонной структуре металлов, полупроводников и диэлектриков?

12. Что такое собственный полупроводник?

13. Что такое доноры и акцепторы?

14. Какие изменения вносят примеси замещения в энергетический спектр электронов?

15. Какая внешняя сила приводит к возникновению электропроводности?

1. Какова вероятность найти электрон на нижнем уровне зоны проводимости в собственном германии, если температура образца равна: а) 30 К; б) 300 К.

Ответ: а)  $10^{-60}$ ; б)  $10^{-6}$ .

2. Какова вероятность найти электрон на нижнем уровне зоны проводимости при комнатной температуре ( $T = 300$  К): а) в собственном германии; б) в собственном кремнии; в) в алмазе ( $E_g = 5,6$  эВ)? Объясните физический смысл полученных результатов. На какие свойства полупроводника влияет ширина запрещенной зоны?

Ответ: а)  $10^{-6}$ ; б)  $10^{-9,3}$ ; в)  $10^{-47}$ .

3. Найти положение уровня Ферми в собственном полупроводнике относительно середины запрещенной зоны при комнатной температуре ( $T = 300$  К), если эффективная масса электрона в 2 раза больше массы дырки.

Ответ: на  $\frac{3}{4}kT \ln\left(\frac{m_n}{m_p}\right) = 13,5 \cdot 10^{-3}$  эВ ниже середины

запрещенной зоны.

4. В собственном полупроводнике концентрация электронов проводимости при температуре  $T = 300$  К равна  $1,5 \cdot 10^{16}$  см<sup>-3</sup>. Найти ширину запрещенной зоны и положение

уровня Ферми для этого полупроводника, если плотность состояний в зоне проводимости выражается формулой  $N_c = GT^{3/2}$ , где постоянная  $G = 4,83 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3} \cdot \text{К}^{-3/2}$ .

Ответ:  $E_g = 1 \text{ эВ}$ ; уровень Ферми расположен на  $0,5 \text{ эВ}$  ниже дна зоны проводимости.

**5.** Определить положение уровня Ферми в германии  $n$ -типа при температуре  $T = 300 \text{ К}$ , если на  $2 \cdot 10^6$  атомов германия приходится один атом примеси. Концентрация атомов в германии равна  $4,4 \cdot 10^{28} \text{ атом/м}^3$ . Расстояние между дном зоны проводимости и донорным уровнем составляет  $0,01 \text{ эВ}$ .

Ответ: уровень Ферми находится на  $0,18 \text{ эВ}$  ниже дна зоны проводимости.

**6.** Кристалл кремния содержит  $10^{17}$  атомов бора в  $1 \text{ см}^3$ . Найти положение уровня Ферми относительно середины запрещенной зоны при температуре  $T = 300 \text{ К}$ .

Ответ: уровень Ферми находится на  $0,416 \text{ эВ}$  ниже середины запрещенной зоны.

**7.** Определить относительное положение уровня Ферми в кремниевом полупроводнике  $p$ -типа проводимости и концентрацию неосновных носителей заряда, если концентрация акцепторной примеси  $N_a = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , а температура окружающей среды  $T = 343 \text{ К}$ .

Ответ: уровень Ферми сместится к середине запрещенной зоны и будет отличаться от нее на  $0,05 \text{ эВ}$ ;  $n_p = 2,25 \cdot 10^4 \text{ см}^{-3}$ .

**8.** В кристалле германия  $n$ -типа на каждые  $10^8$  атомов германия приходится один атом донорной примеси. Полагая, что эффективная масса электрона равна  $1/2$  массы покоя электрона, найти положение уровня Ферми относительно дна зоны проводимости при комнатной температуре ( $300 \text{ К}$ ).

Ответ: уровень Ферми находится на  $0,256 \text{ эВ}$  ниже дна зоны проводимости.

**9.** В кристалле кремния  $p$ -типа на каждые  $10^8$  атомов кремния приходится один атом акцепторной примеси. Найти положение уровня Ферми при комнатной температуре ( $T = 300$  К) относительно валентной зоны.

Ответ: уровень Ферми находится на 0,279 эВ выше потолка валентной зоны.

**10.** При какой концентрации акцепторной примеси уровень Ферми в кристалле германия  $p$ -типа проводимости при комнатной температуре ( $T = 300$  К) будет совпадать с потолком валентной зоны, если  $m_p = 0,4 m$  ( $m$  – масса электрона)?

Ответ:  $6,33 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

**11.** Удельное сопротивление собственного германия при  $T = 300$  К  $\rho = 0,43$  Ом·м. Подвижности электронов и дырок в германии равны соответственно 0,39 и 0,19  $\text{м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ . Определите собственную концентрацию электронов и дырок.

Ответ:  $n_i = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$ .

**12.** Определить концентрацию электронов и дырок в образце германия при  $T = 300$  К, который имеет концентрацию донорных атомов  $N_d = 2 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$  и концентрацию акцепторных атомов  $N_a = 3 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ .

Ответ:  $n_p = 6,25 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ,  $p_p = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ .

**13.** Определить при  $T = 300$  К: а) удельное сопротивление образца собственного германия; б) удельное сопротивление такого образца с донорной примесью, когда один атом донорной примеси приходится на каждые  $10^8$  атомов германия?

Ответ: а) 43,2 Ом·см; б) 3,64 Ом·см.

**14.** Определить при  $T = 300$  К: а) удельное сопротивление собственного образца кремния; б) удельное сопротивление такого образца с донорной примесью, когда один атом донорной примеси приходится на каждые  $10^8$  атомов кремния?

Ответ: а)  $3,29 \cdot 10^5$  Ом·см; б) 8,93 Ом·см.

**15.** Определить удельные сопротивления кремния n-типа проводимости при  $T = 300$  К, если концентрации доноров  $N_d$  равны  $10^{14}$  и  $10^{18}$  см<sup>-3</sup>.

Ответ: 44,7 Ом·см и  $44,7 \cdot 10^{-4}$  Ом·см.

**16.** Решить задачу **5** для германия при таких же концентрациях донорной примеси.

Ответ: 16 Ом·см и  $16 \cdot 10^{-4}$  Ом·см.

**17.** Решить задачу **5** для кремния при таких же концентрациях акцепторной примеси.

Ответ: 125 Ом·см и  $1,25 \cdot 10^{-2}$  Ом·см.

**18.** Образец германия легирован атомами алюминия с концентрацией  $N_a = 2 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup>. Определить удельную проводимость этого образца при  $T = 300$  К. [8]

Ответ:  $\sigma = 0,608$  См/см.

## 4. СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ. КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ. ЭЛЕКТРОННО-ДЫРОЧНЫЙ ПЕРЕХОД

### 4.1. Явление сверхпроводимости

Хорошо известно [5], что у ряда металлов и металлических сплавов наблюдается явление сверхпроводимости: ниже некоторой критической температуры  $T_k$ , их электрическое сопротивление становится равным нулю.

Сверхпроводимость используется для получения больших магнитных полей (вплоть до 15 Тл) в лабораторных условиях. С ее помощью измерены очень малые напряжения (до  $10^{-14}$  В). Возможно также ее применение для создания элементов памяти компьютеров и передачи энергии. Сверхпроводимость – весьма необычный феномен, отличающийся от всего того, к чему мы привыкли. Буквально это явление из иного мира. Мы живем в классическом мире, а сверхпроводимость – явление квантовое, но в макроскопических масштабах. Например, волновые функции в квантовой механике вводят искусственно, а в сверхпроводимости они выступают естественным образом как измеряемые величины. Открытие сверхпроводимости было не слишком драматическим. Когда Камерлинг Оннес в 1908 г. сумел добиться получения жидкого гелия, он начал искать, чтобы такое измерить при таких низких температурах. Его выбор пал на удельное сопротивление металлов. Вначале он испытал платину и убедился, что ее удельное сопротивление продолжает уменьшаться при низкой температуре, стремясь к некоторой малой, но конечной величине по мере приближения к абсолютному нулю. Он мог бы испытать множество других металлов и получить столь же тривиальный результат. Но ему повезло: поведение второго исследованного им металла – ртути – оказалось совершенно



необычным. Ее удельное сопротивление, как это показано на рис. 4.1, внезапно уменьшилось до столь малой величины, что он не смог его измерить, и до сих пор это не удалось сделать никому. Обычная методика состоит в том, что в кольце, выполненном из сверхпроводящего материала, возбуждают ток, а затем измеряют магнитное поле этого тока. В нормальных металлах ток обычно исчезает приблизительно через  $10^{-12}$  с. В сверхпроводнике ток может циркулировать в течение куда большего времени, измеряемого не пикосекундами, а годами [6].

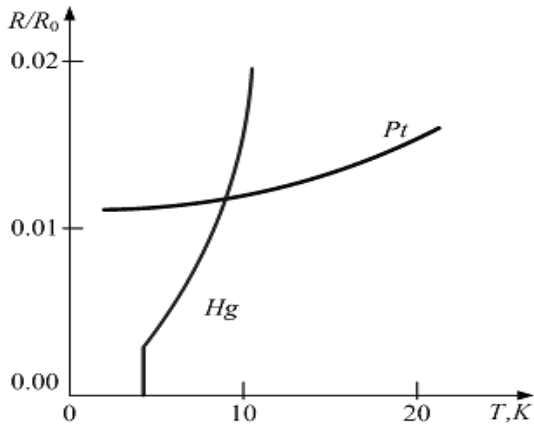


Рис. 4.1. Зависимость сопротивления образцов платины и ртути от температуры ( $R_0$  – сопротивление при  $0^\circ\text{C}$ )

Один из самых длительных экспериментов был проведен в США; ток циркулировал без существенного уменьшения в течение целых трех лет. К несчастью, эксперимент внезапно прервался, потому что аспирант однажды забыл заполнить сосуд Дьюара жидким азотом. Во всяком случае, так гласит предание.

Таким образом, со всех практических точек зрения мы действительно сталкиваемся с недиссипативным явлением.

Это столь необычно, что никто не знал, как подойти к проблеме. Родилось несколько феноменологических теорий, но истинная причина происходящего оставалась неизвестной в течение полувека. Вплоть до 1957 г. все попытки были безуспешными, так что исподволь появилась новая теорема, гласящая: «все теории сверхпроводимости опровержимы». Сейчас эти героические времена позади. В 1957 г. Бардин, Купер и Шриффер создали теорию (называемую сегодня теорией БКШ), которая сумела объяснить все главные особенности сверхпроводимости. Сущность теории заключается в том, что сверхпроводимость вызывается электрон – решеточным взаимодействием, а сверхпроводящие электроны являются обычными электронами, сгруппированными в пары.

Теория слишком сложна, и нет смысла углубляться в детали, но суть ее в первом приближении можно пояснить с помощью качественной модели, предложенной Литтлом.

На рис. 4.2,*а* приведена кривая зависимости энергии от импульса для семи электронов обычного проводника, находящихся на дискретных энергетических уровнях и на дискретных расстояниях друг от друга.

В отсутствие электрического поля ток электронов, движущихся направо, точно скомпенсирован током электронов, перемещающихся налево. В результате общий ток равен нулю.

Если приложить электрическое поле, то все электроны приобретут некоторый дополнительный импульс, что эквивалентно смещению общего распределения в направлении электрического поля, как это показано на рис. 4.2, *б*. Ну а что произойдет, если убрать электрическое поле? Столкновения с колеблющейся решеткой, с атомами примесей или с любыми другими нерегулярностями приведут к тому, что более быстрые электроны станут переходить в более низкие энергетические состояния, пока не

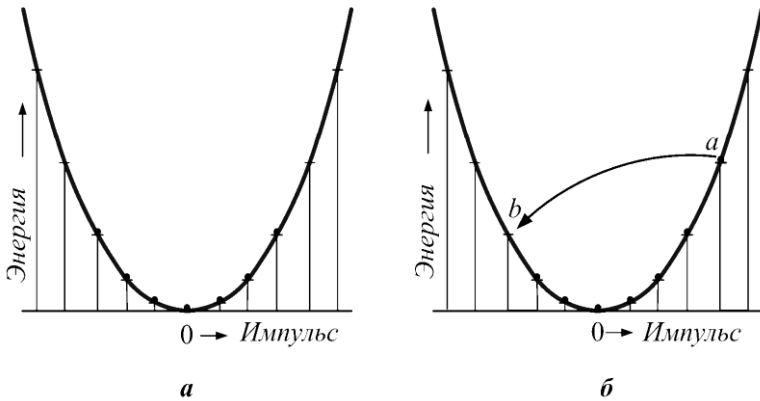


Рис. 4.2. Зависимость энергии от импульса для одномерной модели проводника, состоящего из семи электронов: *а*) – электрическое поле отсутствует, полный импульс равен нулю, все электроны находятся на своих наинизших энергетических уровнях; *б*) – из-за внешнего электрического поля результирующий импульс справа отличен от нуля

восстановится первоначальное распределение. В рамках нашей простой модели это будет означать, что электрон перейдет с энергетического уровня *a* на энергетический уровень *b*.

Электрону в сверхпроводнике становится энергетически выгодным найти себе компаньона. Электроны, обладающие противоположно направленными моментами (спины, между прочим, должны быть также направлены в противоположные стороны, но, поскольку спины в дальнейшем не имеют никакого значения, о них забывают, когда говорят о сверхпроводимости), собираются в пары, чтобы сформировать новую частицу, называемую сверхпроводящим электроном, или по имени ее первооткрывателя –

куперовской парой [5]. Такая связь между двумя электронами изображена на рис.4.3, *a* в форме воображаемой механической пружинки.

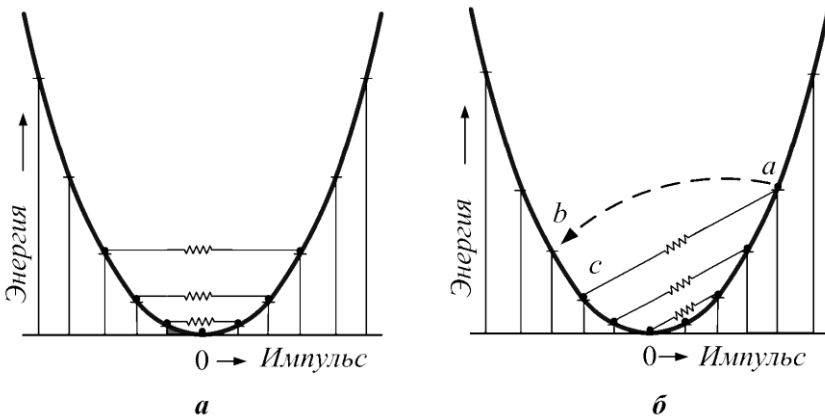


Рис. 4.3. Зависимости энергии от импульса для семи электронов в сверхпроводнике. Электроны с противоположными импульсами объединяются в пары: *a*) – полный импульс равен нулю, все пары находятся на наиминимальных энергетических уровнях; *б*) – из-за внешнего электрического поля результирующий импульс справа отличен от нуля

Теперь уместно задать несколько вопросов, касающихся куперовской пары. Прежде всего: как определить ее скорость? Две части, из которых состоит частица, движутся со скоростями  $v$  в противоположных направлениях, так что скорость центра масс равна нулю. Воспользовавшись соотношением де Бройля ( $\lambda = h/p$ ), получим, что длина волны, характеризующая такую частицу, будет бесконечно велика. И это справедливо для всех сверхпроводящих электронов.

Хотя это и не следует целиком из вышеприведенных упрощенных объяснений (но выводится из теории), все

сверхпроводящие электроны ведут себя совершенно одинаково.

Применительно к нашим электронам это означает, что придется полностью отказаться от прошлого. До сих пор все электроны, подчиняясь принципу Паули, должны были отличаться друг от друга. В сверхпроводящем состоянии они обретают право быть одинаковыми. Таким образом, имеется огромное число идентичных частиц, все с бесконечной длиной волны, т. е. возникает квантовое явление на макроскопическом уровне.

Внешнее электрическое поле вновь будет перемещать электроны так, как показано на рис. 4.3, б, но если электрическое поле убрать, то ничего не изменится. Теперь переход с энергетического уровня  $a$  на уровень  $b$  невозможен, поскольку в этом случае электроны как на уровне  $b$ , так и на уровне  $c$  остались бы без пары, что энергетически невыгодно. Можно мысленно допустить большое число одновременных переходов, которые как раз восстановили бы симметричное распределение, показанное на рис. 4.3, а, однако это чрезвычайно маловероятное событие. Поэтому асимметричное распределение сохранится; электронов, движущихся направо, будет больше, чем движущихся налево, и ток будет существовать «вечно» – или по крайней мере в течение трех лет.

## 4.2. Влияние магнитного поля

Одно из применений сверхпроводимости, которое сразу же приходит в голову, это создание мощных электромагнитов. Было бы замечательно получить большие магнитные поля, без каких-либо затрат энергии, однако в результате экспериментов, выяснилось что сверхпроводник переходит в нормальное состояние, если магнитное поле выше некоторого уровня. Так что для получения нулевого сопротивления

нужно поддерживать ниже определенного порогового значения не только температуру, но и напряженность магнитного поля. Эксперименты с различными сверхпроводниками показали, что зависимость критического магнитного поля от температуры хорошо описывается формулой [1]

$$H_k = H_0[1 - (T/T_k)^2].$$

Соответствующая кривая построена на рис. 4.4.

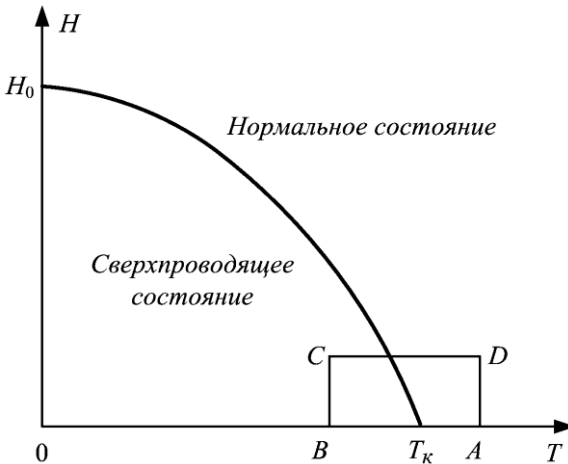


Рис. 4.4. Зависимость критического магнитного поля от температуры

Можно видеть, что выше кривой материал находится в нормальном состоянии, а ниже – в сверхпроводящем. Значение  $H_0$  определяется величиной напряженности магнитного поля, необходимой для разрушения сверхпроводимости при температуре абсолютного нуля. Значения  $H_0$  и  $T_k$  для ряда сверхпроводников приведены в табл. 4.1.

У некоторых сплавов и соединений  $T_k$  может достигать значений нескольких десятков градусов Кельвина, можно добиться существенно больших значений магнитных полей, однако это более сложная задача, в чем мы убедимся позже.

Таблица 4.1

Критическая температура и критическая напряженность магнитного поля для некоторых сверхпроводящих элементов

Элемент	$T_k$ , К	$H_0 \cdot 10^{-4}$ , А/м	Элемент	$T_k$ , К	$H_0 \cdot 10^{-4}$ , А/м
Al	1,19	0,8	Pb	7,18	6,5
Ga	1,09	0,4	Sn	3,72	2,5
Hg $\alpha$	4,15	3,3	Ta	4,48	6,7
Hg $\beta$	3,95	2,7	Th	1,37	1,3
In	3,41	2,3	V	5,30	10,5
Nb	9,46	15,6	Zn	0,92	0,4

### 4.3. Эффект Мейснера

Мы уже видели, что удельное электрическое сопротивление некоторых материалов ниже определенных значений температуры и магнитного поля полностью исчезает. Что произойдет в таком материале, если перемещаться из точки  $A$  в точку  $C$  (рис. 4.5) по пути  $ABC$  или  $ADC$  соответственно? В точке  $A$  внешнее магнитное поле отсутствует, а температура выше критической (рис.4.5,  $a$ ).

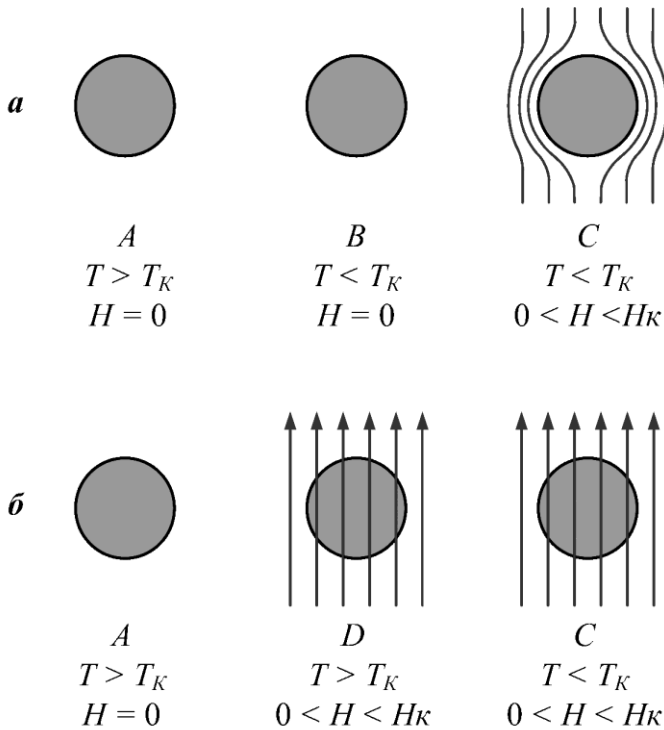


Рис. 4.5. Изменение магнитных состояний сверхпроводника при движении по пути  $ABC$  (а), по пути  $ADC$  (б) (см. рис. 4.4)

При перемещении из  $A$  в  $B$  температура становится ниже критической, поэтому удельное сопротивление материала оказывается равным нулю и ничего более интересного не происходит. Переход из  $B$  в  $C$  означает включение магнитного поля. Изменяющийся поток возбуждает электрическое поле, которое создает ток, препятствующий внешнему магнитному полю. Это не что иное, как проявление закона Ленца, и прежде мы уже говорили о таких токах, которые называют вихревыми.



Существенное отличие состоит в том, что в данном случае удельное сопротивление равно нулю. Вихревые токи не затухают и создают магнитное поле, которое полностью компенсирует внешнее магнитное поле внутри материала. В этой связи наш сверхпроводник может быть отнесен к совершенным диамагнетикам.

Начав вновь с точки  $A$ , где магнитное поле отсутствует (рис. 4.5, б), перейдем в точку  $D$ , что соответствует приложению к материалу магнитного поля при постоянной температуре. Если предположить, что наш материал является немагнитным (на самом деле сверхпроводники выше критической температуры слегка парамагнитны благодаря их металлической природе), то магнитное поле будет проникать внутрь материала. Перемещение от  $D$  к  $C$  соответствует уменьшению температуры при постоянном магнитном поле. В некоторой точке материал станет сверхпроводящим, однако нет причины считать, что при этом распределение магнитного поля должно каким-то образом измениться. В точке  $C$  магнитное поле должно бы проникать внутрь материала, также как и в  $D$ . Таким образом, распределение магнитного поля в точке  $C$  зависит от выбора пути. Если идти через точку  $B$ , то магнитное поле выталкивается, если идти через точку  $D$ , то магнитное поле внутри материала будет тем же самым, что и вне его. Следовательно, для совершенного проводника (т. е. материала, у которого отсутствует сопротивление) окончательное состояние зависит от выбранного пути. Это вполне правдоподобный вывод; известно множество физических явлений, в которых проявляется это свойство. Интересно, что на самом деле сверхпроводник ведет себя не так, а, будучи охлажден в постоянном магнитном поле, при достижении критической температуры создает свой собственный ток, вытесняя магнитное поле.

После открытия этого эффекта Мейснером в 1933 г. сверхпроводимость предстала в новом свете. Стало ясно, что

сверхпроводимость представляет собой явление нового типа, которое не подчиняется законам классической электродинамики.

#### 4.4. Микроскопическая теория

Микроскопическая теория далеко выходит за пределы студенческого курса для инженерных специальностей, а на самом деле за пределы практически любого курса. Эта часть квантовой теории поля оперирует различными функциями Грина и содержит в своем арсенале массу различных операторов.

Основополагающий принцип данной теории состоит в том, что сверхпроводимость обязана своим существованием наличию непрямого взаимодействия между электронами и колеблющейся решеткой. Это довольно странно. Нам ведь хорошо известно, что тепловые колебания способствуют возникновению электрического сопротивления, а не его исчезновению. Как правило, это так: чем выше температура, тем больше электрическое сопротивление. Однако для определенной группы материалов взаимодействие с решеткой ниже некоторой температуры играет другую роль, выступая как род связи между двумя электронами, расположенными соответствующим образом. В результате между двумя электронами возникает эквивалентная сила притяжения, большая, чем кулоновская сила отталкивания. Поэтому электрон изменяет свои свойства. Он перестает подчиняться статистике Ферми – Дирака, и в одном и том же состоянии может находиться любое число электронов (или, точнее, любое число электронных пар).

Имеется ли какое-нибудь экспериментальное подтверждение того, что сверхпроводимость обусловлена электрон – решеточным взаимодействием? Да, имеется, это так называемый изотопический эффект. Критическая

температура сверхпроводника зависит от общей атомной массы. Если добавить нейтрон, т. е. использовать изотоп элемента, критическая температура уменьшится.

Является ли столкновение электрона с решеткой неотъемлемой частью механизма сверхпроводимости? Могли бы какие-то другие взаимодействия выполнить сходную роль? Вероятно, могли бы. В настоящее время предложено несколько таких механизмов, но экспериментального подтверждения пока нет.

#### **4.5. Виды электрических контактов**

Контактные явления играют исключительно важную роль в электронике вообще и в радиоэлектронике в особенности. Все электрические контакты могут быть разбиты на три группы: омические, нелинейные и инжектирующие [3].

Омический контакт должен обладать очень малым сопротивлением, не искажать форму передаваемого сигнала и не создавать в цепи электрических шумов. Его вольт-амперная характеристика (ВАХ) должна быть линейной.

Нелинейные контакты осуществляют нелинейное преобразование электрических сигналов (выпрямление, модуляцию, умножение частоты и др.). Они имеют ярко выраженную нелинейную характеристику, к которой предъявляются специальные требования в каждом конкретном случае.

Инжектирующие контакты лежат в основе биполярных транзисторов. Они должны обладать способностью инжектировать неосновные носители только в одном направлении.

Среди всего многообразия возможных вариантов контактов в электронике находят применение следующие группы контактов: металл-металл, металл-полупроводник,

металл-диэлектрик, полупроводник-полупроводник, полупроводник-диэлектрик.

Проблема электрического контакта двух металлов представляется особенно существенной в микроэлектронике. Это обусловлено тем, что в микроэлектронных устройствах используются рабочие напряжения, близкие по величине к контактным разностям потенциалов. Интегральные микросхемы представляют собой устройства с огромным количеством контактов.

Контакт металл-полупроводник может быть как омическим, так и выпрямляющим.

Омические контакты металла с полупроводником широко применяются в диодах, транзисторах и пассивных полупроводниковых элементах интегральных схем.

Выпрямляющие контакты типа металл-полупроводник используются в тонкопленочных структурах для построения активных элементов пленочных интегральных схем (ИС).

Контакты двух полупроводников, образующих  $p-n$ -переход, исключительно широко распространены как для создания активных и пассивных элементов ИС, так и для изоляции между этими элементами.

Важной характеристикой твердого тела для описания контактных явлений является работа выхода  $\chi$ . Работа выхода – это энергия, необходимая для удаления электрона с уровня Ферми твердого тела в бесконечность. Для каждого твердого тела характерна своя величина работы выхода. Введем следующие обозначения:  $\chi_m$  – работа выхода металла;  $\chi_{п/п}$  – работа выхода полупроводника [6].

#### 4.6. Контакт двух металлов

Если два металла привести в соприкосновение, то при различии работ выхода ситуация будет явно неустойчивой (рис. 4.6.) Электроны начнут двигаться через контакт слева

направо, стремясь занять более низкое энергетическое состояние. Однако как только электроны переместятся из одного металла в другой, появится избыточный заряд – слева положительный, справа отрицательный. В результате возникнет электрическое поле, которое будет препятствовать движению электронов слева направо и, более того, породит поток электронов, движущихся справа налево. Когда потоки электронов, движущихся в обоих направлениях, сравняются, установится динамическое равновесие. Этому состоянию будет соответствовать некоторая разность потенциалов.

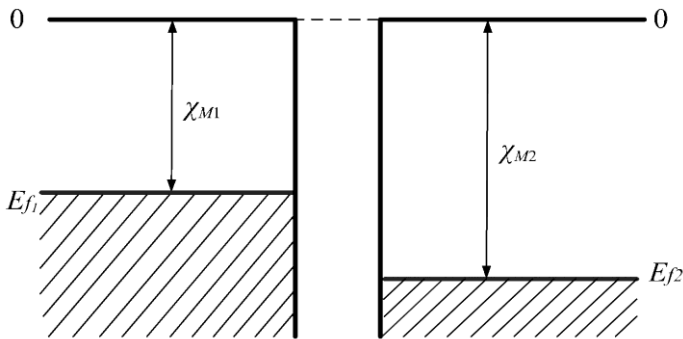


Рис. 4.6. Уровень Ферми и работы выхода двух металлов, приводимых в соприкосновение

Разность потенциалов между металлами (ее называют контактной разностью потенциалов) равна разности работ выхода или в более общем виде разность потенциалов находится путем совмещения уровней Ферми. Этот общий закон справедлив для любой температуры и любого числа соприкасающихся материалов. Когда два металла соприкасаются, между ними возникает разность потенциалов  $\chi_{M2} - \chi_{M1}$ .

Результатирующая энергетическая диаграмма показана на рис. 4.7.

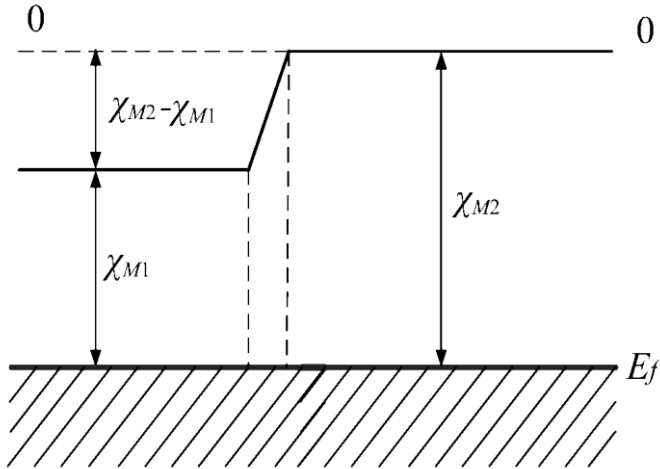


Рис. 4.7. Энергетическая диаграмма контакта двух металлов

Разность потенциалов, возникающая между двумя соприкасающимися металлами, – вполне реальная величина. На электрон, помещенный в область контакта, будет действовать сила, увлекающая его влево. Несмотря на то, что разность потенциалов действительно существует, ее нельзя использовать в качестве источника. Вы спросите, почему? Да потому, что в реальной жизни нельзя из ничего извлечь что-то – отбор энергии в состоянии равновесия противоречит второму закону термодинамики.

#### 4.7. Контакт полупроводника с металлом

Рассмотрим контакт полупроводника с металлом. На рис. 4.8 показана энергетическая диаграмма металла и полупроводника  $n$ -типа до контактирования. Положим, что  $\chi_M > \chi_{п/п}$ .

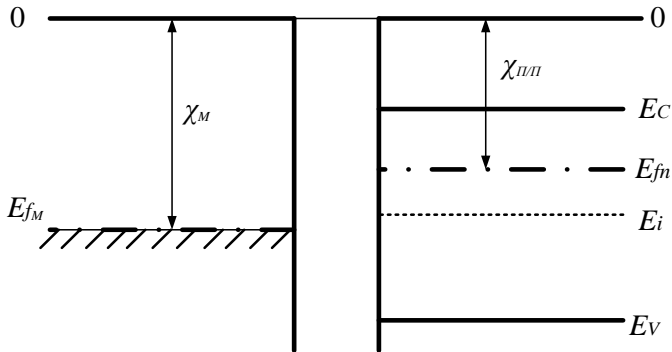


Рис. 4.8. Энергетическая диаграмма металла и полупроводника  $n$ -типа до контактирования

В первоначальный момент контактирования установление энергетического равновесия между металлом и полупроводником происходит путем обмена электронами. Так как уровень Ферми  $E_{fn}$  в полупроводнике расположен выше, чем в металле, то поток электронов из полупроводника будет в начальный момент преобладать над потоком из металла, вследствие чего металл начнет заряжаться отрицательно и его уровень Ферми  $E_{fM}$  будет подниматься, а полупроводник начнет заряжаться положительно и его уровень Ферми  $E_{fn}$  будет опускаться. Равновесие достигается при установлении этих уровней на одной высоте и сопровождается возникновением потенциального барьера [8]

$$\varphi_0 = \chi_M - \chi_{п/п}$$

для электронов, переходящих из полупроводника в металл.

Если полупроводник и металл привести в непосредственный контакт, то энергетическая диаграмма примет вид, представленный на рис. 4.9,  $a$ .

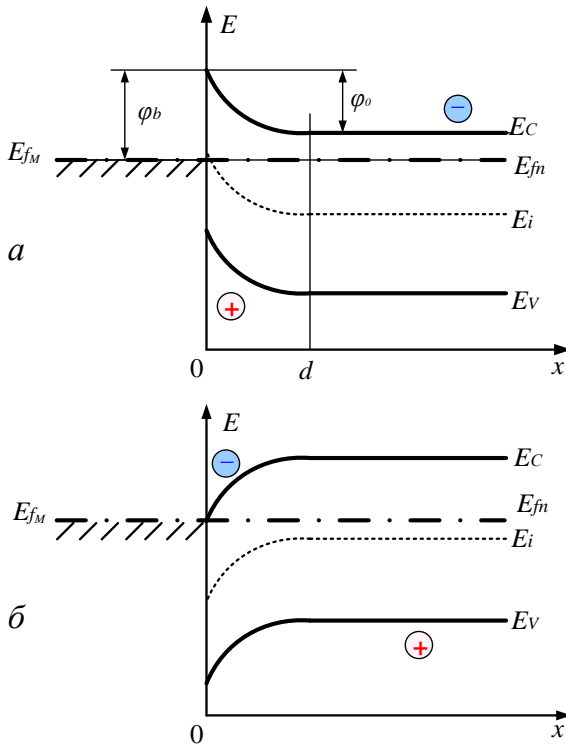


Рис. 4.9. Энергетическая диаграмма контакта металл-полупроводник  $n$ -типа в равновесном состоянии:

$a) - \chi_M > \chi_{П/П}; \quad б) - \chi_M < \chi_{П/П}$

Что касается зазора между металлом и полупроводником, то при хорошем контакте он настолько мал, что расстояние между соседними атомами металла и полупроводника примерно такое же, как и между атомами внутри полупроводника, и электроны проходят через этот зазор так же свободно, как и от одного атома полупроводника к другому. Поверхностный слой полупроводника оказывается обедненным электронами (рис. 4.9,  $a$ ).



В нем образуется неподвижный заряд ионизированных доноров. Этот слой называют запорным. В нем и сосредоточивается контактное поле, возникшее за счет контактной разности потенциалов  $\varphi_0/q$ . Знание закона изменения высоты потенциального барьера с изменением координаты  $x$  позволяет определить закон изменения концентрации электронов в зоне проводимости в области запорного слоя [7, 8]:

$$n(x) = N_c \exp\left(-\frac{E_{f_n} + \varphi(x)}{kT}\right) = n_0 \exp\left(-\frac{\varphi(x)}{kT}\right),$$

где  $n_0$  – равновесная концентрация электронов в объеме полупроводника.

Мы рассмотрели случай контакта электронного полупроводника с металлом, когда работа выхода полупроводника меньше работы выхода металла.

При обратном соотношении работ выхода, т.е. при  $\chi_m < \chi_{п/п}$ , концентрация электронов в приповерхностном слое не уменьшается, а увеличивается, становясь равной

$$n(x) = n_0 \exp\left(\frac{\varphi(x)}{kT}\right).$$

Поэтому проводимость этого слоя возрастает (рис.4.9, б). Такой слой называется антизапорным.

Для определения вида функции  $\varphi(x)$  воспользуемся уравнением Пуассона [4]:

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_0 \varepsilon_{п}}, \quad (4.1)$$

где  $\varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$  Ф/м – электрическая постоянная;  
 $\varepsilon_{\text{п}}$  – относительная диэлектрическая проницаемость  
 полупроводника.

Перейдем в выражении (4.1) от потенциала  $V(x)$  к  
 потенциальной энергии электрона  $\varphi(x) = -qV(x)$ :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_{\text{п}}} \rho(x). \quad (4.2)$$

Объемная плотность заряда определяется соотношением

$$\rho(x) = qN_D.$$

Тогда уравнение (4.2) можно записать в виде

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{q^2}{\varepsilon_0\varepsilon_{\text{п}}} N_D. \quad (4.3)$$

Граничные условия данной задачи определим как

$$\varphi(d) = 0, \quad \left( \frac{d\varphi}{dx} \right)_{x=d} = 0. \quad (4.4)$$

Интегрирование уравнения (4.3) с граничными  
 условиями (4.4) приводит к следующему результату:

$$\varphi(x) = \frac{q^2 N_D}{2\varepsilon_0\varepsilon_{\text{п}}} (d-x)^2. \quad (4.5)$$

Видно, что с увеличением  $x$  потенциальная энергия  
 $\varphi(x)$  убывает по параболическому закону. Для  $x = 0$   $\varphi(x) =$   
 $\varphi_0$ . Тогда из (4.5) можно получить

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{\text{п}}\varphi_0}{q^2N_D}} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{\text{п}}\varphi_0}{q^2n_0}}, \quad (4.6)$$

где  $n_0$  – концентрация основных носителей в полупроводнике, равная  $N_D$ .

Из (4.6) следует, что толщина обедненного слоя увеличивается с ростом контактной разности потенциалов  $\varphi_0/q$ , определяемой разностью работ выхода, и уменьшается с повышением концентрации основных носителей в полупроводнике. Результаты вычислений величины  $d$  по (4.6) при  $\varphi_0 = 1$  эВ и  $\varepsilon_{\text{п}} = 10$  представлены в табл. 4.2.

Таблица 4.2  
Зависимость толщины обедненного слоя от концентрации носителей в полупроводнике

$n_0, \text{м}^{-3}$	$d, \text{м}$
$10^{24}$	$3 \cdot 10^{-8}$
$10^{22}$	$3 \cdot 10^{-7}$
$10^{20}$	$3 \cdot 10^{-6}$

#### 4.8. Выпрямление напряжения на контакте полупроводника с металлом

Замечательным свойством запирающего контакта является сильная зависимость его сопротивления от направления внешней разности потенциалов, приложенной к контакту. Эта зависимость настолько сильна, что приводит практически к односторонней (униполярной) проводимости контакта: контакт легко проводит ток в так называемом прямом направлении и значительно хуже – в противоположном

(обратном) направлении. В этом состоит выпрямляющее действие контакта полупроводника с металлом.

Рассмотрим изменение приконтактного слоя во внешнем электрическом поле. В равновесном состоянии омический и диффузионный токи в области объемного заряда равны и направлены в противоположные стороны. При приложении внешнего электрического поля равновесие нарушается, и через контакт течет ток. Основным сопротивлением для тока является запирающий слой, концентрация подвижных носителей заряда в котором значительно меньше, чем в объеме полупроводника.

При изменении величины электрического поля изменяется и высота потенциального барьера, и концентрация носителей в запирающем слое, поэтому его сопротивление зависит как от величины, так и от направления приложенного поля, и зависимость тока от напряжения (ВАХ) является нелинейной. С целью получения уравнения вольт-амперной характеристики контакта рассмотрим эти процессы более подробно.

В равновесном состоянии контакта полупроводника с металлом потоки электронов из металла в полупроводник и из полупроводника в металл одинаковы, а обусловленные ими токи  $i_{S1}$  и  $i_{S2}$  равны по величине и противоположны по направлению:

$$i_{S1} = i_{S2} = i_S .$$

Результирующий ток через контакт

$$i = i_{S1} - i_{S2} = 0 .$$

При приложении к контакту внешней разности потенциалов  $U$  в прямом направлении поток электронов из металла в полупроводник сохраняется неизменным, а поток

электронов из полупроводника в металл увеличивается в  $e^{qU/kT}$  раз, так как в соответствии с законом Больцмана потенциальный барьер  $\varphi_0$  больше барьера  $\varphi_0 - qU$ .

Поэтому в контакте возникает прямой ток, направленный от металла к полупроводнику и равный [6]:

$$i = i_s e^{qU/kT} - i_s = i_s (e^{qU/kT} - 1). \quad (4.7)$$

В случае приложения к контакту внешней разности потенциалов  $\varphi_0 - qU$  поток электронов, идущих из полупроводника в металл, уменьшается в  $e^{-qU/kT}$  раз вследствие увеличения для них потенциального барьера от значения  $\varphi_0$  до значения  $\varphi_0 + qU$ . Поток же электронов из металла в полупроводник сохраняется неизменным. Это приводит к возникновению тока в запертом направлении (обратного тока), равного

$$i_{обп} = i_s (e^{-qU/kT} - 1). \quad (4.8)$$

Объединяя (4.7) и (4.8), получим уравнение статической вольт-амперной характеристики контакта:

$$i = i_s (e^{\pm qU/kT} - 1). \quad (4.9)$$

На рис. 4.10 показан график зависимости (4.9), из которого видно, что контакт полупроводника с металлом, приводящий к образованию запертого слоя, обладает практически односторонней проводимостью: при одной и той же величине приложенного напряжения ток в прямом направлении во много раз выше тока в обратном направлении.

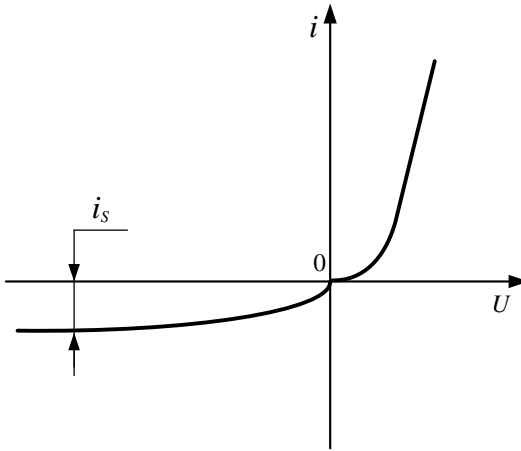


Рис. 4.10. Вольт-амперная характеристика выпрямляющего контакта полупроводника с металлом

#### 4.9. Контакт двух полупроводников с различными типами проводимости. Электронно-дырочный переход

Контакт двух полупроводников с различными типами проводимости получил название  $p-n$ -перехода. В настоящее время  $p-n$ -переходы применяются исключительно широко для создания активных и пассивных элементов интегральных микросхем. Способы создания  $p-n$ -переходов достаточно широко разработаны, а их свойства глубоко исследованы как экспериментально, так и теоретически.

Создать  $p-n$ -переходы можно различными путями. Наибольшее практическое применение нашли способы сплавления, диффузии, эпитаксии, ионной имплантации.

Диффузия – медленное проникновение атомов или молекул одного вещества (газа, жидкости, твердого тела) в другое при их непосредственном соприкосновении, обусловленное тепловым движением атомов или молекул.

Эпитаксиальным наращиванием называют процесс роста слоев, решетка которых определенным образом ориентирована относительно исходного кристалла-подложки.

Эпитаксиальный метод получения  $p$ - $n$ -переходов состоит в наращивании на полупроводниковой подложке с данным типом проводимости слоя полупроводника с противоположным типом проводимости.

Указанные способы позволяют создавать самые разнообразные по своей структуре  $p$ - $n$ -переходы.

По характеру структуры  $p$ - $n$ -переходы подразделяются на резкие и плавные, симметричные и несимметричные. В резких  $p$ - $n$ -переходах концентрация доноров и акцепторов скачкообразно изменяется на границе слоев с различным типом проводимости. Такие  $p$ - $n$ -переходы могут быть получены, например, сплавлением. Резкие  $p$ - $n$ -переходы представляют собой предельный случай более широкого класса плавных переходов, в которых градиент концентрации примесей является конечным. Плавные переходы могут быть получены, например, диффузией примеси в полупроводник.

В симметричных переходах концентрация примесей и концентрация основных носителей в обеих областях одинаковы. Наибольшее распространение получили несимметричные переходы, у которых  $p_{p0} \gg n_{n0}$  или  $n_{n0} \gg p_{p0}$ .

#### **4.10. Электронно-дырочный переход в условиях равновесия**

Пусть два образца полупроводника с различным типом проводимости приведены в соприкосновение. На рис. 4.11 изображен схематически  $p$ - $n$ -переход и приведены графики распределения примеси, зонная диаграмма  $p$ - $n$ -перехода, распределение носителей заряда и распределение объемного заряда в области  $p$ - $n$ -перехода в равновесном состоянии.

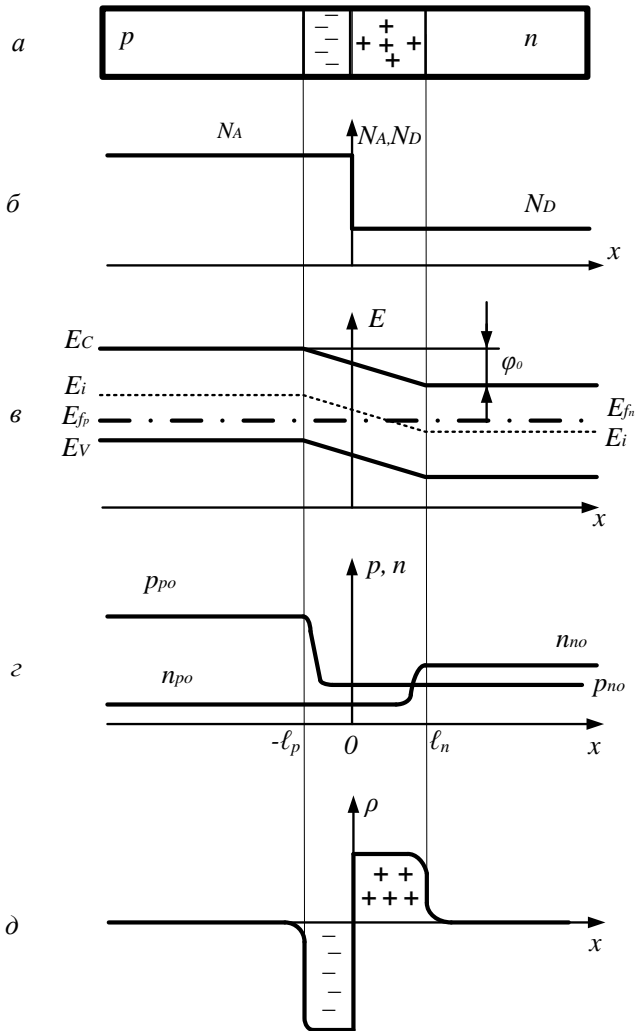


Рис. 4.11. Электронно-дырочный переход в условиях равновесия: *a*) – образование объемных зарядов; *б*) – распределение примесей; *в*) – энергетическая диаграмма *p*-*n*-перехода; *г*) – распределение носителей заряда; *д*) – распределение объемного заряда



Очевидно, что работа выхода электронов в  $n$ -полупроводнике, отсчитываемая от уровня Ферми до уровня энергии свободного электрона, меньше, чем работа выхода электронов в полупроводнике  $p$ -типа. Поэтому между полупроводниками возникнет поток электронов из полупроводника  $n$ -типа в полупроводник  $p$ -типа и аналогичный поток дырок, направленный в противоположную сторону. Уход электронов из приконтактной области полупроводника  $n$ -типа создает слой положительного объемного заряда, образованного неподвижными ионизированными атомами донорной примеси. Со стороны полупроводника  $p$ -типа в результате ухода дырок из приконтактной области возникает слой отрицательного объемного заряда, образованного неподвижными ионизированными атомами акцепторной примеси (рис. 4.11, *а*). Процесс перемещения носителей заряда прекратится лишь тогда, когда контактная разность потенциалов будет полностью скомпенсирована разностью потенциалов, созданной объемным зарядом. При этом уровни Ферми в  $n$ - и  $p$ -типах полупроводников сравняются (рис. 4.11, *б*). Ток, создаваемый электрическим полем, возникшим в слое объемного заряда, полностью компенсируется диффузионным током, обусловленным градиентом концентрации носителей.

При не слишком низких температурах примесные атомы ионизируются практически полностью, вследствие чего равновесная концентрация электронов в  $n$ -области равна  $n_{n0} \approx N_D$ , а равновесная концентрация дырок в  $p$ -области равна  $p_{p0} \approx N_A$ .

Концентрация неосновных носителей в этих областях может быть определена из соотношения  $p_{n0} n_{n0} = n_i^2$ , называемого законом действующих масс,

$$n_{n0} = n_i^2 / p_{n0}, \quad p_{p0} = n_i^2 / n_{p0}.$$

На рис. 4.11, *з* показано изменение концентрации дырок и электронов при переходе из одной области полупроводника в другую. Распределение плотности зарядов на *p-n*-переходе показано на рис. 4.11, *д*.

Рассмотрим поведение *p-n*-перехода под действием приложенного напряжения. Уровень Ферми будет смещен по обе стороны от перехода на величину  $qU$ . Если *n*-область сделать положительной по отношению к *p*-области, то высота барьера для диффузионного тока возрастёт. При этом число электронов, способных пройти через переход, экспоненциально уменьшится. С другой стороны, ток, вызванный тепловой генерацией, не изменится. Таким образом, при увеличении приложенного напряжения от нуля баланс между двумя токами нарушается всё в большей степени за счёт уменьшения диффузионного тока. Это будет происходить до тех пор, пока диффузионный ток не станет пренебрежимо мал. Вследствие этого результирующий ток через переход увеличивается при росте напряжения до тех пор, пока он не станет равным току тепловой генерации, или постоянному току «насыщения»  $i_s$ , независящему от напряжения.

Если же, наоборот, *n*-область сделать отрицательной по отношению к *p*-области, то ток диффузии будет возрастать при увеличении напряжения смещения очень быстро, так как через барьер сможет проходить всё больше и больше электронов, в то время как ток тепловой генерации по прежнему будет оставаться постоянным. Следовательно, результирующий ток в этом направлении при увеличении смещения будет быстро нарастать.

Дырки в обоих случаях ведут себя одинаково. Сумма дырочного и электронного токов обуславливает изменение результирующего тока в зависимости от величины и полярности смещения. Оценку величины результирующего тока можно получить из соотношения [6]

$$i = i_s(e^{qU/kT} - 1).$$

Форма полученной характеристики представлена на рис. 4.12.

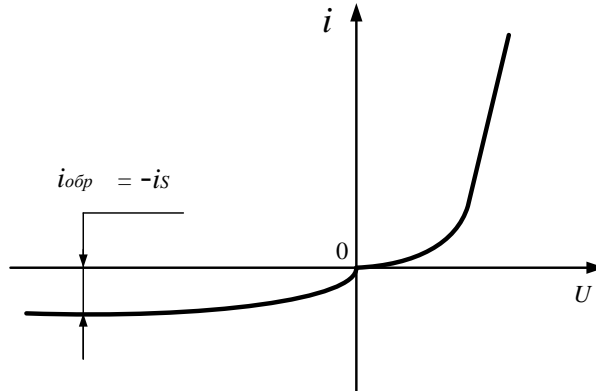


Рис. 4.12. Вольт-амперная характеристика  $p$ - $n$ -перехода

Несимметричные характеристики такого вида сходны с характеристиками идеального выпрямителя, вследствие чего  $p$ - $n$ -переход находит широкое применение в электронных схемах.

#### 4.11. Гетероструктуры

Все  $p$ - $n$ -переходы, речь о которых шла раньше, выполнялись из одного и того же материала. Некоторые свойства этого материала модифицировались, например, за счет легирования одна часть образца превращалась в полупроводник  $n$ -типа, а другая – в полупроводник  $p$ -типа. Тем не менее, ширина запрещенной зоны при этом оставалась неизменной. Такие структуры мы можем назвать гомоструктурами в отличие от гетероструктур, которые образованы материалами с разными значениями ширины запрещенной зоны [5].

Пусть имеются два полупроводника с различными значениями ширины запрещенной зоны, работы выхода и диэлектрической проницаемости (рис. 4.13).

Для определенности будем считать, что полупроводник с широкой запрещенной зоной имеет дырочную проводимость, а полупроводник с узкой запрещенной зоной – электронную проводимость. Будем также считать, что работа выхода электрона из полупроводника с широкой запрещенной зоной  $\chi_{вых1}$  больше, чем работа выхода электрона из полупроводника с узкой запрещенной зоной  $\chi_{вых2}$ . Расположение энергетических зон и уровней Ферми для этих полупроводников, изолированных друг от друга, показано на рис. 4.13.

Физические процессы, приводящие к образованию запирающего слоя в переходе между двумя такими полупроводниками, в основном аналогичны процессам в обычном  $p$ - $n$ -переходе. Между двумя полупроводниками возникает контактная разность потенциалов  $U_K$ , при этом уровень Ферми во всем объеме полупроводника одинаков (рис. 4.14). Контактная разность потенциалов может быть вычислена из выражения [7, 8]:

$$qU_K = \chi_{вых1} - \chi_{вых2} = E_{f2} - E_{f1}.$$

Электрическое поле в переходе отталкивает электроны внутрь  $n$ -области, а дырки – внутрь  $p$ -области, что приводит к образованию объемного заряда ионизованных примесей в переходе. Энергетические зоны в переходе изгибаются. На границе между полупроводниками вследствие различной ширины энергетических зон энергия края зоны проводимости и края валентной зоны изменяется скачком (рис. 4.14).

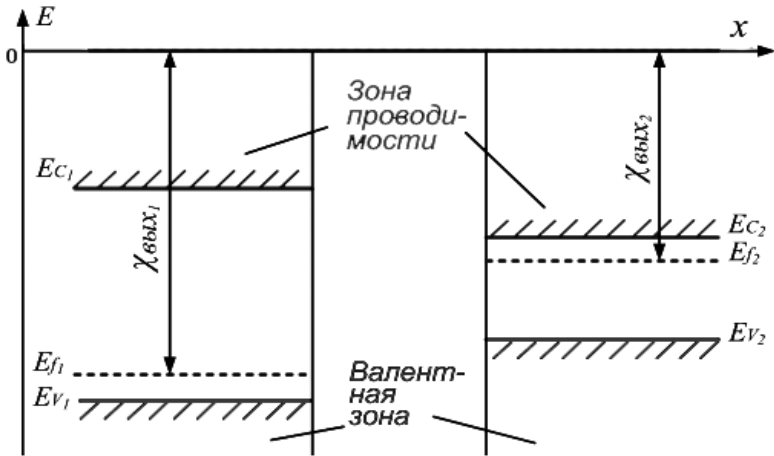


Рис. 4.13. Расположение энергетических зон и уровней Ферми для электронного полупроводника (справа) и дырочного полупроводника (слева), изолированных друг от друга

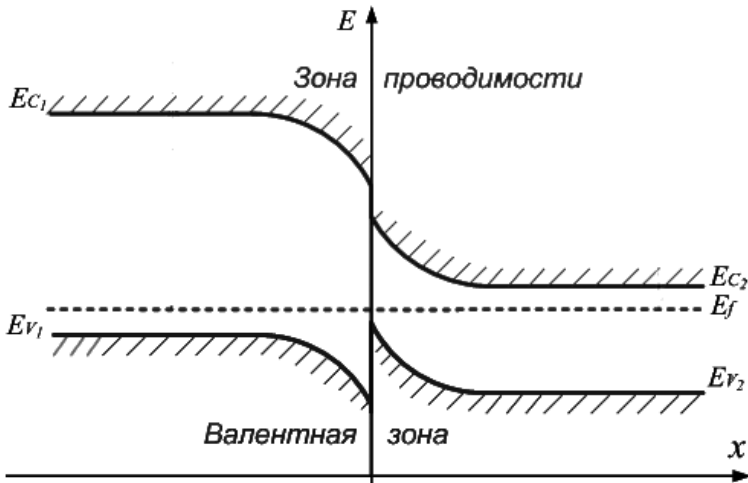


Рис. 4.14. Расположение энергетических зон в гетеропереходе при отсутствии внешнего напряжения

В отличие от обычного  $p$ - $n$ -перехода потенциальные барьеры для электронов и для дырок различны и не равны контактной разности потенциалов. Изменение потенциальной энергии в рассматриваемом переходе показано на рис. 4.15.

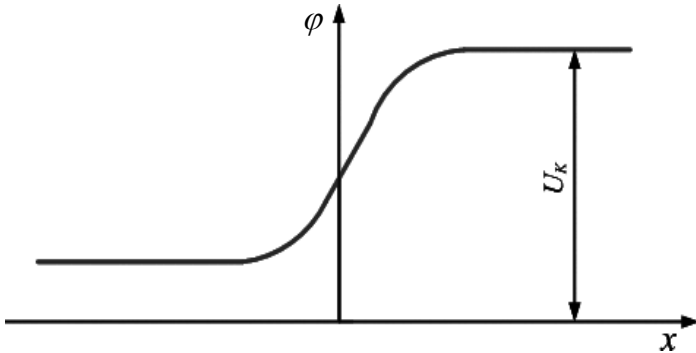


Рис. 4.15. Распределение потенциальной энергии  $\varphi$  в гетеропереходе

Вольт-амперная характеристика гетероперехода может быть выражена формулой

$$i = i_s (e^{qU/\eta kT} - 1), \quad (4.10)$$

где  $\eta$  – коэффициент, учитывающий генерационно-рекомбинационные процессы в области  $p$ - $n$ -перехода, равный обычно нескольким единицам. Введение этого коэффициента вызвано особенностями границ раздела гетероперехода, обусловленными разными величинами постоянных кристаллических решеток полупроводников с различной шириной запрещённой зоны.

На основе гетеропереходов можно получить не только  $p$ - $n$ , но  $n$ - $n$ - или  $p$ - $p$ -структуры. На рис. 4.16 показана энергетическая диаграмма  $n$ - $n$ -гетероперехода.

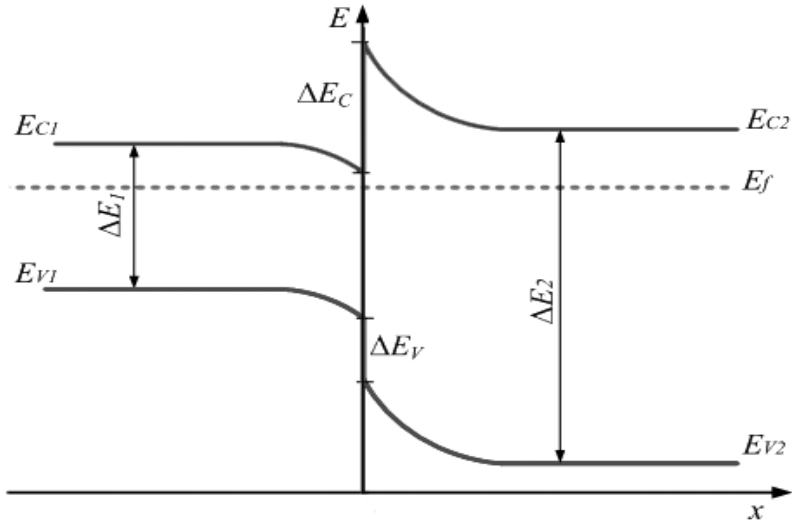


Рис. 4.16. Энергетическая диаграмма  $n-n$ -гетероперехода

В такой структуре условия движения электронов слева направо и наоборот оказываются неодинаковыми. Это означает, что вольт-амперная характеристика такой структуры является несимметричной, а сама структура обладает выпрямляющими свойствами. Ток в такой структуре может быть описан формулой (42). Отличительной особенностью диода на основе  $n-n$ -гетероперехода является тот факт, что в прямой проводимости участвуют только основные носители. Следовательно, на основе подобных гетеропереходов могут быть созданы высокоскоростные диоды с временем переключения  $0,3 \div 1$  нс.

Помимо указанного применения, гетеропереходы могут использоваться для создания быстродействующих транзисторов, светоизлучающих диодов, полупроводниковых лазеров и других приборов и устройств радиотехнической электроники.

## Вопросы и задачи для самоконтроля

1. Почему термодинамическая работа выхода в полупроводнике с электропроводностью  $n$ -типа меньше, чем в полупроводнике  $p$ -типа?

2. Можно ли использовать контактную разность потенциалов, возникающую на границе двух разнородных тел, в качестве источника напряжения?

3. Чем объяснить, что в металле заряды образуются на поверхности, а в полупроводнике в некотором приповерхностном слое? От чего зависит толщина этого слоя?

4. Нарисовать энергетические диаграммы контакта металл-полупроводник  $n$ -типа в равновесном состоянии при различных соотношениях работ выхода электронов из металла и полупроводника.

5. Нарисовать энергетические диаграммы контакта металл-полупроводник  $p$ -типа в равновесном состоянии при различных соотношениях работ выхода электронов из металла и полупроводника.

6. Почему при контакте двух полупроводников разного типа электропроводности начинается процесс диффузии носителей заряда?

7. Чем определяется высота потенциального барьера на границе контакта двух полупроводников?

8. Что такое работа выхода электрона?

9. Что такое контактная разность потенциалов? Каким образом она возникает?

10. Как изменяется зонная структура полупроводника в приповерхностном слое в случае контакта металл-полупроводник?

11. Что такое запирающие и антизапирающие слои?

12. Объясните механизм выпрямления тока на контакте металл-полупроводник.



13. Что такое  $p$ - $n$ -переход? В чём его отличие от контакта металл–полупроводник?

14. Какое напряжение принято считать прямым при подсоединении  $p$ - $n$ -перехода к источнику внешнего напряжения?

15. Нарисуйте зависимость сопротивления сверхпроводника от температуры?

16. Что такое сверхпроводимость?

17. Объясните сверхпроводимость с помощью качественной модели формирования куперовских пар электронов.

18. Как сверхпроводящее состояние материала зависит от напряжённости магнитного поля? Эффект Мейснера.

**1.** Ток, текущий в идеальном  $p$ - $n$ -переходе при большом обратном напряжении и  $T = 300$  К, равен  $2 \cdot 10^{-7}$  А. Найти ток, текущий при прямом напряжении, равном 0,1 В.

Ответ: 10 мкА.

**2.** Вычислить прямое напряжение на  $p$ - $n$ -переходе при токе диода 1 мА, если обратный ток насыщения  $i_s$  при  $T = 300$  К равен: а) 1 мкА; б) 1 нА.

Ответ: а) 0,23 В; б) 0,58 В.

**3.** Германиевый сплавной  $p$ - $n$ -переход имеет обратный ток насыщения  $i_s = 1$  мкА, а кремниевый с такими же размерами – ток  $i_s = 10^{-8}$  А. Вычислите и сравните прямые напряжения на переходах при  $T = 293$  К, если через каждый диод протекает ток 100 мА.

Ответ: 288 мВ и 407 мВ.

**4.** Рассчитать и построить вольтамперную характеристику идеального полупроводникового диода при  $T = 300$  К, если обратный ток насыщения диода  $i_s = 10$  мА, предположив, что диод имеет омическое сопротивление  $p$ - и  $n$ -областей, равное 25 Ом. Расчет провести в интервале напряжений от 0 до – 10 В (через 1 В) и от 0 до 0,2 В (через 0,05 В).

5. Диод имеет обратный ток насыщения  $i_s = 10$  мкА, напряжение, приложенное к диоду, равно 0,5 В. Пользуясь упрощенным уравнением вольтамперной характеристики диода, найти отношение прямого тока к обратному при  $T = 300$  К.

Ответ:  $21,8 \cdot 10^7$ .

6. Определить концентрацию акцепторной примеси  $N_a$  в  $p$ -области и концентрацию донорной примеси  $N_d$   $n$ -области германиевого диода, если известно, что при  $T = 300$  К удельные проводимости областей равны:  $\sigma_n = 1$  См/см;  $\sigma_p = 100$  См/см.

Ответ:  $N_a = 1,6 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup>;  $N_d = 1,6 \cdot 10^{15}$  см<sup>-3</sup>.

7. В идеальном  $p$ - $n$ -переходе прямое напряжение 0,1 В вызывает определенный ток носителей заряда при  $T = 300$  К. Какое необходимо прямое напряжение, чтобы ток увеличился в 2 раза?

Ответ: 0,118 В.

8. Для идеального  $p$ - $n$ -перехода при  $T = 300$  К определить: а) какое необходимо приложить напряжение к переходу, чтобы получить прямой ток, равный обратному току насыщения  $i_s$ ; б) какое необходимо прямое напряжение для получения тока, в 100 раз большего, чем обратный ток насыщения  $i_s$ .

Ответ: а) 0,018 В; б) 0,12 В.

9. В отсутствие электрического поля электрический ток изменяется во времени по закону  $i = i_s \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$ , где  $\tau$  – время релаксации, связанное с проводимостью соотношением

$$\sigma = \left(\frac{q}{m}\tau\right)Nq.$$

Экспериментально получено, что ток, целый год протекающий в сверхпроводниковом кольце, не испытывает никакого сопротивления.

Рассчитайте нижний предел времени релаксации, считая, что точность измерения равна 0,01% ( $N=10^{28} \text{ м}^{-3}$ ). Во сколько раз проводимость кольца в этот момент времени выше проводимости меди?

Ответ:  $\tau = 3,15 \cdot 10^{11} \text{ с}$ ;  $n = 1,5 \cdot 10^{24}$  раз.

## Заключение

В настоящем учебном пособии отражена тенденция изменения учебных планов в направлении усиления фундаментальной подготовки студентов по физике, обучающихся по направлению 11.05.00 «Радиоэлектронные системы и комплексы».

В частности, в учебном пособии рассмотрены такие вопросы, как элементы электронной теории металлов, классической и квантовой статистик, даны общие сведения о полупроводниках, описаны механизмы подвижности носителей заряда и проводимость полупроводников. Даны модельные представления о явлении сверхпроводимости и влияния на него магнитного поля. Достаточно подробно изложены контактные явления: контакт двух металлов, контакт полупроводника с металлом, выпрямление на контакте двух полупроводников с различным типом проводимости. Обсуждаются особенности гетеропереходов.

При изложении материала основное внимание уделено выяснению физической сущности рассматриваемых явлений и процессов, лежащих в основе работы твердотельных электронных приборов различных радиотехнических систем. Вместе с тем, где необходимо, приводится математическое описание этого материала, как правило, без приведения строгих аналитических выкладок.

Интересными и весьма полезными для студентов могут оказаться вопросы для самопроверки и задачи, приведенные в конце каждого раздела. Они помогут определить необходимый уровень усвоения материала, изложенного в учебном пособии, необходимого для успешного изучения последующих общетехнических и специальных дисциплин.

**Библиографический список**

1. Савельев И.В. Курс общей физики: учеб. пособие для студ. вузов. Т.3 : Квантовая оптика. Атомная физика. Физика твердого тела. Физика атомного ядра и элементарных частиц. – СПб.: Лань, 2007. – 317 с.

2. Курс физики: учебник для вузов: Т.2/ под ред. В.Н. Лозовского. – СПб.: Лань, 2000.

3. Степаненко И.П. Основы микроэлектроники: учеб. пособие для вузов. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Лаборатория базовых знаний, 2001. – 488 с.

4. Фистуль В.И. Введение в физику полупроводников: учеб. пособие для вузов. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1984. – 352 с.

5. Драгунов В.П., Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Основы наноэлектроники: учебное пособие. – М.: Университетская книга; Логос; Физматкнига, 2006. – 496 с.

6. Захаров А.Г. Физические основы микроэлектроники: учеб. пособие. – 2-е изд., перераб. и доп. – Таганрог: Изд-во ТРТУ, 2006. – 335 с.

7. Захаров А.Г., Богданов С.А., Набоков Г.М., Какурин Ю.Б., Какурина Н.А., Нестюрина Е.Е. Руководство к лабораторным работам по дисциплинам «Физические основы микроэлектроники», «Физические основы электроники». – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2010. – 155 с.

8. Захаров А.Г., Богданов С.А., Какурин Ю.Б., Какурина Н.А. Учебно-методическое пособие для выполнения индивидуальных заданий по дисциплинам: «Физические основы микроэлектроники», «Физические основы электроники». – Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ, 2010. – 80 с.

Учебное издание

**Захаров Анатолий Григорьевич  
Какурина Наталья Андреевна  
Какурин Юрий Борисович  
Черепанцев Александр Сергеевич**

**ФИЗИКА. ВВЕДЕНИЕ В ТВЕРДОТЕЛЬНУЮ  
ЭЛЕКТРОНИКУ**

Учебное пособие

Ответственный за выпуск Какурин Ю.Б.  
Редактор Надточий З. И.  
Корректор Селезнева Н. И.

Подписано в печать 2017 г.  
Заказ № . Тираж экз.  
Формат 60x84 1/16. Усл. п. л. – 5,8. Уч.-изд. л.– 5,5.

---

Издательство Южного федерального университета  
344091, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки, 200/1, тел. (863)2434166.  
Отпечатано в Секторе обеспечения полиграфической продукцией в  
г. Таганроге отдела полиграфической, корпоративной и сувенирной  
продукции ИПК КИБИ МЕДИА ЦЕНТРА ЮФУ.  
ГСП 17А, Таганрог, 28, Энгельса, 1. Тел (8634)371717.