Институт Автоматики и информационных технологий

В.Ф. Попов, А.И. Фесенко

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ НАНО- И МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Утверждено Методическим советом ТГТУ в качестве учебно-методического пособия для студентов, обучающихся по направлению 140400.62 «Электроэнергетика и электротехника» учебной дисциплине «Информационные системы в электроэнергетике», учебной дисциплине «Материаловедение» направления 200300.62 «Биомедицинская инженерия», учебным дисциплинам «Физические основы микроэлектроники» и «Физические основы микроэлектроники» и проектирование и технология электронных средств».

Тамбов 2014 Рецензенты: д.т.н., профессор П.А. Федюнин; д.т.н., профессор Е.И. Глинкин; д.т.н., профессор А.В. Душкин

Утверждено Методическим советом ТГТУ (протокол № <u>3</u> от <u>25</u>. <u>03</u>. <u>2014</u> г.)

Микроэлектроника – это область электроники, охватывающая проблемы конструирования, исследования. изготовления И применения микроэлектронных изделий. Под микроэлектронным изделием понимают электронное устройство с высокой степенью интеграции. Анализ развития микроэлектроники показывает, что уже во второй половине 70-х годов ХХ века в разработке сверхбольших интегральных схем (СБИС) и микропроцессоров применялись элементы с минимальным размером 1 мкм. Перспективы развития микроэлектроники связаны с принципиально другим видом интеграции – функциональной интеграцией. В отличие от схемотехнической интеграции, при которой в одном кристалле функционирует множество элементов, взаимодействующих подобно обычной схеме из дискретных элементов, функциональная интеграция предполагает интеграцию различных физических эффектов среды, когда функцию схемотехнического устройства (усилителя, генератора и т.п.) выполняет особым способом полученная материальная срела. Функциональные приборы являются представителями развивающихся областей электроники: акустоэлектроники, магнитоэлектроники, плазменной электроники, оптоэлектроники, электроники переноса заряда, хемотроники, диэлектрической криоэлектроники, электроники, биоэлектроники и др.

Нанотехнологии в электронике имеют дело с объектами с характерными размерами, лежащими в нанометровом диапазоне, и характеризуются совокупностью методов изготовления и обработки изделий с протяженностью 1 – 100 нм (1 нм= 10^{-9} м= 10^{-3} мкм=10 Å). Известно, что атом имеет размер порядка 0,1 нм, вирусы – от 10 до 500 нм, а минимальный размер элементов современных серийных интегральных микросхем (ИМС) ~ 22 нм.

Создатель американской водородной бомбы Э. Теллер утверждал, что тот, кто раньше овладеет нанотехнологией, будет занимать ведущее место в техносфере XXI столетия. За последние годы созданы десятки тысяч нанотехнологических компаний, что предопределяет мировую потребность в дипломированных специалистах в области нанотехнологии миллионами. Свойства микрообъектов (например, атомы, молекулы и т.д.) описываются квантовой механикой, а процессы, происходящие в микромире, практически полностью лежат за пределами чувственных восприятий, что обусловило лишение наглядности понятий квантовой теории, характерной классической физике.

В основе квантовой механики лежит представление о поведении микрообъектов (микрочастиц) в соответствии с волновой функцией –

функцией состояния, зависящей от пространственных координат и времени. Состояние объекта во времени может быть определено путем решения дифференциального волнового уравнения Шредингера или использования операторного метода, предложенного В. Гейзенбергом.

Впервые высказанная Луи де Бройлем мысль о сочетании в одном квантовом объекте корпускулярных и волновых свойств, т.е. дуализме получила экспериментальное подтверждение, что совместно с рядом принципов квантовой теории (квантование, принцип неопределенности Гейзенберга, принципы тождественности одинаковых микрочастиц и запрета Паули) имеет основополагающее значение для наноэлекроники.

Учебно-методическое пособие «Физические основы нанои микроэлектроники» предназначено для студентов, обучающихся по направлению 140400.62 «Электроэнергетика и электротехника» учебной дисциплине «Информационные системы в электроэнергетике», учебной дисциплине «Материаловедение» направления 200300.62 «Биомедицинская учебным инженерия», дисциплинам «Физические основы микроэлектроники» и «Физические основы микро- и наноэлектроники» направления 210200.62 «Проектирование и технология электронных средств», дневной и заочной форм обучения. После изучения указанных дисциплин студент должен знать основные этапы развития микроэлектроники, уметь классифицировать полупроводниковые приборы по принципу действия и владеть навыками использования современных подходов и методов к описанию, анализу, исследованию явлений и процессов в объеме, необходимом для освоения наук об электромагнитных процессах в полупроводниковых средах.

1 КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ

Объекты микромира проявляют одновременно волновые и корпускулярные свойства. Частицы света, получившие название фотонов, имеют энергию:

$$E = hv = \hbar\omega \tag{1.1}$$

и импульс:

$$p = \frac{h}{\lambda},\tag{1.2}$$

где h – постоянная Планка;

 $\hbar = \frac{h}{2\pi};$

 $\omega = 2\pi v$ – циклическая частота.

В явлениях дифракции и интерференции проявляются волновые свойства света.

По гипотезе де Бройля микрочастица, имеющая энергию *E* и импульс *p*, распространяется в пространстве с частотой:

$$v = \frac{E}{h}$$
,

для циклической частоты та же формула:

$$\omega = \frac{E}{\hbar},$$

и имеет длину волны:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mV},\tag{1.3}$$

где *V* – скорость движения частицы.

Приведенные формулы экспериментально подтверждены в 1927 году К. Дэвиссоном и Л. Джермером.

2 ФАЗОВАЯ И ГРУППОВАЯ СКОРОСТИ

Скорость движения волновой поверхности синусоидальных волн совпадает со скоростью распространения волны. Поэтому скорость V была названа фазовой скоростью.

Любая волна характеризуется длиной λ и частотой v, связанными соотношением:

$$\lambda = \frac{V_{\phi a3}}{V},\tag{2.1}$$

где V_{фаз} – фазовая скорость распространения волны.

Из курса физики известно, что волновой вектор К по направлению совпадает с направлением распространения волны де Бройля и численно равен:

$$k = \left(\frac{1}{\hbar}\right)\sqrt{2mE} \ . \tag{2.2}$$

Так как энергия свободной частицы $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}$ получим

 $k = \frac{2\pi}{\lambda}$, где λ – длина волны де Бройля.

Отсюда следует:

$$V_{\phi a3} = \frac{\omega}{k} = \lambda v,$$

$$V_{\phi a3} = \frac{\hbar \omega}{\hbar k} = \frac{W}{p} = \frac{mc^2}{mV} = \frac{c^2}{V} = \frac{c^2}{h} m\lambda ,$$
(2.3)
где $p = mV = \frac{h}{\lambda}$, откуда $V = \frac{h}{m\lambda}$.

Если частоты синусоидальных волн незначительно отличаются от некоторой основной частоты, то такую результирующую волну называют группой волн или волновым пакетом (рис. 1).



Рис. 1 – Волновой пакет, полученный наложением двух гармонических волн с близкими частотами и волновыми векторами:

1, 2 – гармонические волны; 3 – результирующая волна; А – точка, в которой волна имеет максимальную амплитуду (центр волнового пакета)

Скорость распространения в пространстве этого пакета называется групповой скоростью. Групповую скорость волн де Бройля можно найти из следующих соображений:

$$u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(\hbar\omega)}{d(\hbar k)} = \frac{dW}{dp}.$$
(2.4)

Для свободной частицы:

$$W = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2};$$

$$\frac{dW}{dp} = \frac{cp}{\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}} = \frac{c^2 p}{W} = \frac{c^2 mv}{mc^2} = V.$$

Следовательно, групповая скорость волн де Бройля равна скорости частицы:

$$u = \frac{d\omega}{dk} = V. \tag{2.5}$$

Или, на основании (2.4) и (2.5), можно записать:

$$u = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}.$$
 (2.6)

Групповая скорость в общем случае величина векторная и её направление совпадает с направлением волнового вектора.

3 СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Состояние частицы в классической механике однозначно определяется заданием её координат и трех составляющих импульса.

При движении микрочастицы в направлении оси X, обладающей импульсом p_x , соответствует волна длиной $\lambda = \frac{h}{p_x}$. Эта волна является объектом протяженным, монохроматической и простирается по оси X от $-\infty$ до $+\infty$. Поэтому интервал ΔX , в котором локализирована микрочастица с импульсом p_x , равен бесконечности. Отсюда следует, что микрочастица с импульсом p_x не имеет определенной координаты x (и наоборот, при заданном x импульс p_x не определен). Выразить состояние микрочастицы путем задания неопределенностей Δx , Δy , Δz в значениях координат частицы и неопределенность Δp_x , Δp_y , Δp_z в значениях составляющих импульса для волны де Бройля можно соотношением неопределенностей Гейзенберга:

$$\begin{cases} \Delta x \Delta p_x \ge \bar{\hbar} \\ \Delta y \Delta p_y \ge \bar{\hbar}. \\ \Delta z \Delta p_z \ge \bar{\hbar} \end{cases}$$
(3.1)

Между Δx и Δk (волновым числом) установлена однозначная связь:

 $\Delta x \Delta k \ge 1.$ (3.2) Если частица находится в течение времени Δt в нестационарном состоянии и обладает энергией $E \pm \Delta E$, то неопределенность в энергии определяется подобным соотношению (3.2):

$\Delta E \Delta t \geq \hbar$

(3.3)

Следовательно, при малых Δt неопределенность в значении энергии может быть весьма существенной.

4 УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА

Подобно второму закону Ньютона в классической механике своеобразие объектов микромира потребовало отыскание в квантовой механике соотношения, описывающего закон распространения волн де Бройля. Такое уравнение было впервые предложено Шрёдингером.

Для микрочастицы, движущейся в силовом поле со скоростью $V \square c$ и обладающей потенциальной энергией U(x, y, z, t) (строго говоря, потенциальная энергия не зависит от времени, а зависит только от координат), уравнение Шредингера имеет следующий вид:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right) - U(x, y, z, t)\psi(x, y, z, t), \tag{4.1}$$

где $\psi(x, y, z, t)$ – волновая функция.

Произведение ψ на функцию ψ^* , комплексно сопряженную с ψ , пропорционально вероятности того, что в момент времени *t*

микрочастица может быть обнаружена в элементарном объеме *dV*. Эта вероятность:

$$\omega(x, y, z, t) dV = \psi(x, y, z, t) \cdot \psi^*(x, y, z, t) dV.$$
(4.2)

При этом:

$$\int_{V} \omega dV = \int_{V} \psi \psi^* dV = 1, \qquad (4.3)$$

т.к. нахождение микрочастицы в этом пространстве *V* является достоверным фактом.

Условие (4.3) называется условием нормировки, а волновые функции, удовлетворяющие этому условию, называются нормированными.

Уравнение (4.1) описывает за неопределённый промежуток времени все состояния микрочастицы, что в практических целях делает его малопригодным. Для использования уравнения (4.1) в некоторых практических целях вводят различные его упрощения.

Квадрат модуля волновой функции $|\psi|^2$ – плотность вероятности нахождения частицы в объеме dV в момент времени t, так как волновая функция – вероятностная и, следовательно, комплексная (поэтому рассматривается квадрат модуля).

При этом интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dV$ должен быть конечным, где dV –

бесконечно малый объем, в котором заключена частица. Данный интеграл характеризует полную вероятность P обнаружения частицы в объеме dV.

Уравнение Шрёдингера в ряде случаев можно упростить. Например, потенциальная энергия U в уравнении Шредингера является в общем случае функцией координат и времени. Однако во многих практических задачах Uявляется функцией только координат и не зависит от времени. В этих задачах волновую функцию $\psi(x, y, z, t)$ можно представить в виде произведения:

$$\Psi(x, y, z, t) = \Psi(x, y, z)\varphi(t).$$
(4.4)

Рассмотрим простой случай движения микрочастицы вдоль оси X. Уравнение Шрёдингера, описывающее это движение примет вид:

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} - U(x)\psi(x,t).$$
(4.5)

Решением функции (4.5) является $\Psi(x,t)$, которую можно представить в виде произведения:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t). \tag{4.6}$$

Подставив это произведение в (4.5) и разделив обе части уравнения на это же произведение, получим:

$$-i\hbar\frac{1}{\varphi(t)}\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi(x)}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} - U(x). \tag{4.7}$$

Левая и правая части уравнения могут быть равны только при том условии, что они равны некоторой постоянной. Можно показать, что эта постоянная равна – Е, где Е – полная энергия микрочастицы. Приравняем к – *E* левую часть уравнения (4.7):

$$-i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -E,$$

отсюда:

$$\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -i \frac{\varphi(t)}{\hbar} E.$$
(4.8)

Уравнение (4.8) представляет собой временную часть уравнения Шредингера. Решение этого уравнения:

$$\ln \varphi = -i\frac{E}{h}t + \ln \varphi_0, \qquad (4.9)$$

легко преобразуется к виду:

$$\varphi(t) = \varphi_0 \exp(-i\omega t). \tag{4.10}$$

После приравнивая к - Е правой части уравнения (4.7) получим:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - U(x) = -E;$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (E - U) = 0;$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = (U - E).$$
Разделим обе части на
$$\frac{\hbar^2}{2m\psi}:$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = (U - E) \frac{2m\psi}{\hbar^2};$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (E - U) \frac{2m\psi}{\hbar^2} = 0. \qquad (4.11)$$
Упариение (4.11) изи изист станионали и изацияте Это

Уравнение (4.11) называют стационарным уравнением Шредингера. Это уравнение является важнейшим соотношением в нерелятивистской квантовой механике. Функции $\psi(x)$, удовлетворяющие стационарному уравнению Шредингера при данном U, называют собственными функциями. Значения E, при которых существуют решения уравнения (4.11) называют собственными значениями.

5 ПРИМЕРЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

5.1 Движение свободной микрочастицы

Для свободной микрочастицы, движущейся вдоль оси X, ее полная энергия совпадает с кинетической, а v = const, т.е. U(x) = 0. Направим ось X вдоль вектора скорости. Тогда стационарное уравнение Шредингера (24) приобретает вид:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + E \frac{2m\psi}{\hbar^2} = 0.$$
 (5.1)

Уравнение (5.1) является уравнением гармонических колебаний:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \omega^2 x = 0.$$

На этом основании уравнение (5.1) можно переписать как:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + k^2 \psi = 0. \tag{5.2}$$

Решением уравнения (5.2) является функция

$$\psi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx), \qquad (5.3)$$

где *А* и *В* – постоянные коэффициенты;

$$k = \left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}\right). \tag{5.4}$$

Так как полное решение уравнения Шредингера равно произведению $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t),$

где выражение для $\varphi(t)$ найдено в (4.10), то можно записать:

$$\psi(x) = A \exp\left[-i(\frac{E}{\hbar}t - \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x)\right] + B \exp\left[-i(\frac{E}{\hbar}t + \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x)\right]$$
(5.5)

Решение (5.5) представляет собой суперпозицию двух плоских монохроматических волн (так как распространяются с одной частотой), распространяющихся в противоположных направлениях относительно оси *X* (так как знаки волновых чисел различны).

В случае движения частицы в направлении, несовпадающем с направлением оси *X*, формула (5.5) принимает вид:

$$\psi(x, y, z, t) = C \exp(i(k\vec{r} - \omega t)), \qquad (5.6)$$

где \vec{r} — радиус-вектор; \vec{k} — волновой вектор, по направлению совпадающий с направлением волны де Бройля и численно равный (5.4).

Поскольку U = 0, найдем энергию свободной микрочастицы:

$$E = \frac{mV^2}{2} = \frac{m^2V^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}.$$
 (5.7)

Подставив (5.7) в (5.4), получим:

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{\hbar^2}{\lambda^2}} = \frac{2}{\lambda}\pi.$$
 (5.8)

Вероятность обнаружить микрочастицу в выраженном объеме V равна $|\Psi|^2 = C^2$. Из условия нормировки:

$$\int_{V} |\Psi|^2 dV = 1,$$

то есть

$$C^2 = \frac{1}{V}.$$

Из соотношений (5.4) и (5.8) следует, что энергия микрочастицы равна:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$
 (5.9)

Формула (5.9) носит название дисперсионной формулы: энергия свободной микрочастицы может быть любой, ее энергетический спектр непрерывен.



Рис. 2 – Зависимость энергии свободной микрочастицы от волнового вектора.

График этой функции представлен на рис. 2 и представляет собой квадратичную параболу.

5.2 Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер. Туннельный эффект

Предположим, что микрочастица движется по оси X в силовом поле, потенциал которого меняется скачком (рис. 3, а). В области I, расположенной от $-\infty$ до 0, U = 0; в области II, простирающейся от 0 до $+\infty$, потенциальная энергия равна U. Таким образом, при переходе из области I в область II микрочастице необходимо преодолеть потенциальный барьер высотой U.

Движение микрочастицы описывается стационарным уравнением Шредингера (4.11). Поскольку для области I: U = 0, то для нее уравнение примет вид:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\psi_1 = 0$$

или

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k_1^2\psi_1 = 0, (5.10)$$

где ψ_1 – волновая функция микрочастицы в области I;

$$k_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2mE}.$$
 (5.11)



a)



б)

Рис. 3 – Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер:

а) – бесконечно протяженный потенциальный барьер;

 б) – туннельное просачивание микрочастицы сквозь потенциальный барьер конечной толщины

Для области II:

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E-U)\psi_2 = 0$$

или

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + k_1^2\psi_2 = 0, (5.12)$$

где ψ_2 – волновая функция микрочастицы в области II;

$$k_2 = \left(\frac{1}{\hbar}\right) \sqrt{2m(E-U)} \ . \tag{5.13}$$

Решения, общие для уравнений (5.10) и (5.12), имеют следующий вид:

 $\psi_1 = A_1 \exp(ik_1 x) + B_1 \exp(-ik_1 x)$ при x < 0

 $\psi_2 = A_2 \exp(ik_2 x) + B_2 \exp(-ik_2 x)$ при x > 0

В решении уравнения (5.10) первое слагаемое отвечает волне, распространяющейся вдоль оси X в области I. Амплитуда этой волны равна A_1 . Соответственно второе слагаемое отвечает волне, распространяющейся в противоположном направлении и имеющей амплитуду равную B_1 . Это волна, отраженная от барьера. Отношение $R = |B_1|^2 / |A_1|^2$ представляет собой коэффициент отражения микрочастицы от барьера.

Первое слагаемое в решении уравнения (5.12) соответствует волне, распространяющейся в области II в направлении *X*. Отношение $D = |A_2|^2 / |A_1|^2$ представляет собой коэффициент прозрачности барьера.

Второе слагаемое в решении уравнения (5.12) соответствует отраженной волне, распространяющейся в области II. Очевидно, что такой волны нет, поэтому $B_2 = 0$.

Для барьера, высота которого U > E, волновой вектор k_2 является мнимым. Обозначим $k_2 = ik$, где $k_2 = \left(\frac{1}{h}\right)\sqrt{2m(E-U)}$ – действительное число. Тогда выражение для ψ_2 можно представить в виде:

$$\psi_2 = A_2 \exp(-kx).$$
 (5.14)

Тот факт, что $A_2 \neq 0$, означает, что имеется вероятность проникновения микрочастицы на некоторую глубину в область II.

$$P = |\psi_2|^2 = A_2^2 \exp\left(-\frac{2d}{\hbar}\sqrt{2m(U-E)}\right).$$
 (5.15)

Выражение (5.15) представляет собой математическую запись туннельного эффекта. На рис. 3, б представлена иллюстрация туннельного эффекта, т.е. возможности проникновения частицы через потенциальный барьер конечной толщины *d*.

Туннельный эффект играет большую роль в электронных приборах. Он обуславливает протекание таких явлений, как эмиссия электронов под

действием сильного поля, прохождение тока через диэлектрические пленки, проектировании изготовления туннельных диодов и т.д.

5.3 Движение микрочастицы в потенциальной яме

Рассмотрим движение микрочастицы, например электрона, в потенциальной яме (рис. 4).



Рис. 4 – Движение микрочастицы в потенциальной яме

Роль потенциальной ямы для электрона (микрочастицы) в данном случае может выполнять стержень из металла. Вне металла потенциальная энергия свободного электрона U = 0; внутри металла $U_0 = -eV_0$, где V_0 – положительный потенциал поля, созданный узлами решетки. Для выхода электрона из металла он должен совершить работу, численно равную U_0 .

Если энергию электрона отсчитывать от длины ямы, то для описания его движения запишем стационарное уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi \equiv \frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0.$$
 (5.16)

Решением уравнения (5.16) является

$$\psi = C \exp(ikx) + D \exp(-ikx). \tag{5.17}$$

Для бесконечно глубокой потенциальной ямы $\psi = 0$ вне промежутка 0 < x < L, так как электрон из этой ямы выйти не может. Если считать, что функция ψ непрерывна, то ее значение равно нулю в точках x = 0 и x = L:

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

I граничное условие:

$$C + D = 0, \quad D = -C,$$

тогда решение (5.17) примет вид:
 $\psi = C(\exp(ikx) - \exp(-ikx)) = C_1 \sin kx$ (5.18)

II граничное условие:

$$k_n L = n\pi$$
, $n = 1, 2, 3, \dots$,

откуда

$$k_n = \frac{n\pi}{L}.$$
(5.19)

Подставив (5.19) в (5.18), получим:

$$\psi_n = C_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \tag{5.20}$$

Энергию состояния, описываемую волновой функцией (5.20), получим, подставив *k* в выражение:

$$k = \left(\frac{1}{\hbar}\right)\sqrt{2mE};$$

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2m};$$

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2n^2}{2mL^2} = n^2\frac{\hbar^2}{8mL^2}.$$
(5.21)

Найдем выражение для волновой функции (5.20), т. е. найдем C_n , используя условие нормировки вероятностей:

$$\int_{0}^{2} C_n^2 \sin^2\left(\frac{nx\pi}{L}\right) dx = 1.$$
(5.22)

Решая (5.22), найдем $C_n = \sqrt{\frac{2}{L}}$.

В этом случае:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \,. \tag{5.23}$$

6 ОСНОВЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Современная электронная теория твердых тел основывается на зонной теории. Последняя предполагает, что:

1. Электроны движутся в периодическом потенциальном поле кристалла.

2. Энергия электрона квантуется. Распределение электронов по уровням диктуется принципом Паули.

3. В периодическом потенциальном поле на электрон действуют силы.

В твёрдом теле ионы создают электрическое поле. Поведение электронов в этом поле на основании уравнения Шрёдингера описать

практически невозможно. Поэтому принимается гипотеза о совокупности большого числа изолированных атомов, у каждого из которых электроны имеют свою систему дискретных энергетических уровней. Предполагается, что энергия связи электронов со «своими» атомами значительно больше, чем их кинетическая энергия перемещения в кристалле. Анализируется процесс сближения изолированных атомов и образование из них кристаллов с учетом формирования энергетических уровней. Учитывается, что связь электронов со своими атомами настолько сильна, что лишь валентные электроны при сближении атомов на расстояния, сравнимые с размерами атомов, переходят от одного атома к другому.

В каждом изолированном атоме имеются дискретные уровни энергий, которые, как считается, зависят от главного n и орбитального l квантовых чисел. Предполагается также, что энергетические уровни, соответствующие разным значениям магнитного m и спинового m_s , совпадают.

В изолированном атоме узкий энергетический уровень валентного электрона расширяется в кристалле в широкую полосу – зону разрешенных значений энергии электронов (до единиц электрон-вольт). При этом разрешенные энергетические зоны разделены между собой запрещенными зонами значений энергии электронов (рис. 5).



Рис. 5 – Образование энергетических зон в кристалле

Разрешенная зона тем шире, чем больше энергия электрона на соответствующем уровне в изолированном атоме. Возможные значения энергии электронов квантованы, т.е. дискретны, а общее их число конечно. В кристалле, состоящем из N атомов, уровню энергии изолированного атома соответствует зона, состоящая из (2l + 1)N дискретных уровней, на каждом из которых может находиться не более двух электронов с антипараллельными спинами. Для электронов внутренних оболочек атомов вероятность туннельного перехода электрона от одного атома к другому оказывается очень малой. Это связано с уменьшением прозрачности

потенциального барьера, в результате чего вероятность просачивания электрона сквозь потенциальный барьер оказывается ничтожно малой.

6.1 Металлы, диэлектрики и полупроводники

В зонной теории различные типы твердых тел по электрическим свойствам отличаются характером расположения разрешенных и запрещенных зон энергий, а также различным заполнением зон электронами. Заметим, что ширина разрешенных зон энергий возрастает с ростом энергии электрона в изолированном атоме, а ширина запрещенных зон при этом уменьшается. Для достаточно высоких уровней энергии электронов изолированных атомов образовавшиеся из них энергетические зоны иногда перекрывают друг друга. В зонной теории твердого тела различия в электрических свойствах разных типов твердых тел объясняются шириной запрещенной зоны и различным заполнением разрешенных энергетических зон. Запрещенные зоны могут как разделять разрешенные, так и отсутствовать вообще. Если разрешенные зоны перекрываются, то образуется гибридная зона. Подобно тому, как в отдельном атоме электроны могут переходить с одного энергетического уровня на другой, так электроны в кристаллах могут переходить из одной разрешенной зоны в другую, а также совершать переходы внутри одной и той же зоны. Для перехода электрона из нижней энергетической зоны в соседнюю верхнюю разрешенную зону необходима энергия, равная ширине запрещенной зоны, лежащей между ними. Можно показать, что под действием даже очень сильного внешнего электрического поля электроны совершают только внутризонные перемещения. Повышение температуры приводит к передаче электрону энергии достаточной для перехода в расположенную выше разрешенную зону.

По характеру заполнения энергетических зон твердые тела делятся на две группы:

1. Металлы – твердые тела, над целиком заполненной нижней зоной, называемой валентной зоной, очень маленькой или совсем отсутствующей запрещенной зоны, и частично заполненной зоной проводимости.

2. Полупроводники и диэлектрики – над целиком заполненной нижней зоной располагаются полностью свободные от электронов зоны (рис. 6). Запрещенная зона отделяет зону проводимости от валентной зоны, т.е. они не перекрываются. Следовательно, диэлектрики отличаются от полупроводников шириной запрещенной зоны и заполнением валентной зоны и зоны проводимости. При T = 0 полупроводники и диэлектрики отличаются только шириной запрещенной зоны.



Рис. 6 – Валентная, запрещенная зона и зона проводимости в диэлектрике и полупроводнике: E_c – зоны проводимости; E_g – ширина запрещенной зоны; E_v – потолки валентной зоны

Такая энергетическая схема относится только к собственным полупроводникам, получаемым в результате высокой степени очистки.

На рис. 7 приведены зависимости сопротивления от температуры. Из них видно, что сопротивление металла при T = 0 стремится к нулю, в то время как для полупроводников и диэлектриков оно приближается к бесконечности. Таким образом, становится очевидно, что различие в электропроводности (величине, обратной сопротивлению) между металлами и полупроводниками качественное, а между полупроводниками и диэлектриками – количественное:

$$\sigma_{Me} = 7...8 \times 10^4 O M^{-1} \times C M^{-1};$$

$$\sigma_{nonvmn} \approx 10^{-14} O M^{-1} \times C M^{-1}.$$



Рис. 7 – Зависимость сопротивления твердых тел от температуры: *I* – металлы; *II* – полупроводники и диэлектрики

Проводимость у полупроводников возникает лишь в результате возбуждения электронов. Возбуждение может осуществляться путем нагрева или возбуждения. Возбуждение проводимости означает перевод электронов

из валентной зоны в зону проводимости.

6.2 Понятие о дырках

Под действием внешнего возбуждения, например при повышении температуры, электроны валентной зоны могут переходить на свободные уровни, оставляя на своем месте пустое место, именуемое фиктивной микрочастицей или дыркой. Таким образом, электроны перемещаются вверх по энергетической лестнице, а дырки – вниз. На рис. 8 приведена иллюстрация этого процесса для собственного полупроводника.

При абсолютном нуле валентная зона укомплектована не полностью, а зона проводимости, расположенная над валентной зоной на расстоянии E_{g} , является пустой. Поэтому при абсолютном нуле собственный проводник, как и диэлектрик, обладает нулевой проводимостью (рис. 8, а).

Однако при повышении температуры вследствие термического возбуждения электронов валентной зоны часть из них приобретает энергию, достаточную для преодоления запрещенной зоны и перехода зону проводимости (рис. 8, δ), а в валентной зоне появляются дырки. Если к такому кристаллу приложить внешнее электрическое поле, то в нем возникнет направленное движение электронов зоны проводимости, т.е. он становится проводящим.



Рис. 8 – Зонная структура собственного полупроводника: a - T = 0 K; 6 - T > 0 K

Чем у́же запрещенная зона и выше температура кристалла, тем больше электронов переходит в зону проводимости. Так, у германия, имеющего $E_g = 0,72$ эВ, уже при комнатной температуре удельное сопротивление составляет всего лишь $\rho_t \approx 0,48$ Ом·м. В то же время у алмаза, являющегося прекрасным

диэлектриком и имеющего $E_g = 5,20$ эВ, $\rho_i \approx 10^8$ Ом·м. Но уже при T = 600 K концентрация электронного газа в алмазе увеличивается на много порядков и удельное сопротивление становится того же порядка, что и у германия при комнатной температуре.

Из сказанного вытекает весьма важный вывод: разделение тел на полупроводники и диэлектрики носит в значительной мере условный характер. По мере того, как в качестве полупроводников начинают использовать материалы с все более широкой запрещенной зоной, деление тел на полупроводники и диэлектрики постепенно утрачивает свой смысл.

Рассмотрим теперь более подробно поведение электронов в валентной зоне, в которой возникли свободные уровни вследствие перехода части электронов в зону проводимости (рис. 8, δ).

Под действием внешнего поля электроны валентной зоны теперь имеют возможность переходить на свободные уровни и создавать в кристалле электрический ток. Определим мгновенную силу этого тока.

Сила тока, создаваемая одним электроном, движущимся со скоростью *V*_i, равна:

$$Ii = eV_i$$
.

Результирующая сила мгновенного тока, создаваемого всеми электронами валентной зоны, равна:

$$Ip = eV_i$$
,

где суммирование проводится по всем состояниям, занятым электронами.

Для зоны, укомплектованной электронами полностью, $I_p = 0$, так как любому электрону, имеющему скорость $+V_i$, можно сопоставить электрон со скоростью $-V_i$.

Теперь представим, что в валентной зоне заняты все состояния, кроме одного, характеризующегося скоростью V_S . Суммарная сила тока в такой зоне равна:

$$I = -e\sum_{i \neq s} V_i = -e\sum_i V_i + eV_s$$

Так как первое слагаемое правой части равно нулю, то

$$I = eV_s$$
,

Таким образом, суммарная сила тока всех электронов валентной зоны, имеющей одно вакантное состояние, эквивалентна силе тока, обусловленного движением в ней фиктивной частицы с положительным зарядом +*e*, помещенную в это состояние – дырки.

6.3 Примесные уровни в полупроводниках

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

Рассмотрим основные типы примесных уровней.

6.3.1 Донорные уровни

Предположим, что в кристалле германия часть атомов германия замещена атомами пятивалентного мышьяка. Германий имеет решетку типа алмаза, в которой каждый атом окружен четырьмя ближайшими соседями, связанными с ним валентными силами (рис. 9, а).

Для установления связи с этими соседями атом мышьяка расходует четыре валентных электрона. Пятый электрон в образовании и связи не участвует. Он продолжает двигаться вокруг иона мышьяка, электронное поле которого ослаблено в германии в $\varepsilon = 16$ раз (ε – диэлектрическая проницаемость германия). Вследствие ослабления поля радиус орбиты электрона увеличивается в 16 раз, а энергия связи его с атомом мышьяка уменьшается примерно в $\varepsilon^2 = 256$ раз, становясь равной $E_{\rm д} \approx 0,01$ эВ. При сообщении электрону такой энергии он отрывается от атома, превращаясь в электрон проводимости (рис. 9, б).

На языке зонной теории этот процесс можно представить следующим образом: между заполненной валентной зоной и свободной зоной проводимости располагаются энергетические уровни пятого электрона атомов мышьяка (рис. 9, в). Эти уровни размещаются непосредственно у зоны проводимости, находясь от нее на расстоянии $E_g \approx 0,01$ эВ. При сообщении электронам таких примесных уровней энергии E_g они переходят в зону проводимости. Образующиеся при этом положительные заряды ("дырки") локализуются на неподвижных атомах мышьяка и в электропроводности не участвуют.



Рис. 9 – Возбуждение носителей заряда в *n*-полупроводниках: $a - T \approx 0 K$, b - T > 0 K, в – процесс с точки зрения зонной теории

Примеси, являющиеся источниками электронов проводимости, называются донорами, а энергетические уровни этих примесей – донорными уровнями. Полупроводники, содержащие донорную примесь, называются электронными полупроводниками или полупроводниками *n*-типа; часть их называют также донорными полупроводниками.

6.3.2 Акцепторные уровни

Предположим теперь, что в решетке германия часть атомов германия замещена атомами трехвалентного цезия (рис. 10, а).

Для образования связей с четырьмя соседями у атомов индия не хватает одного электрона. Его можно "позаимствовать" у атома германия. Расчет показывает, что для этого требуется энергия порядка $E_a \approx 0,01$ эВ. Разорванная связь представляет собой "дырку" (рис. 10, б), так как она отвечает образованию в валентной зоне германия вакантного состояния.

На рис. 10, в показана зонная структура германия, содержащего примесь индия. Непосредственно у потолка валентной зоны на расстоянии $E_a \approx 0,01$ эВ располагаются незаполненные уровни атомов индия. Близость этих уровней к заполненной валентной зоне приводит к тому, что уже при относительно невысоких температурах электроны из валентной зоны

переходят на примесные уровни. Связываясь с атомами индия, они теряют способность перемещаться в решетке германия и в проводимости не участвуют. Свободными носителями заряда являются лишь дырки, возникающие в валентной зоне.



Рис. 10 Возбуждение носителей заряда в примесных *p*-полупроводниках: $a - T \approx 0 K$; 6 - T > 0 K; e – процесс с точки зрения зонной теории.

Примеси, захватывающие электроны из валентной зоны полупроводника, называются акцепторными, а энергетические уровни этих примесей – акцепторными уровнями. Полупроводники, содержащие такие примеси, называются дырочными полупроводниками или полупроводниками *р*-типа; часто их называют акцепторными полупроводниками.

6.4 Эффективная масса электрона

Рассмотрим движение электрона под действием внешнего электрического поля. Предположим сначала, что мы имеем дело со свободным электроном, помещенным в однородное электрическое поле. Введем условные обозначения:

- v скорость электрона в металле;
- *w* циклическая частота электрона (волны);
- *k* волновой вектор;
- е напряженность внешнего электрического поля;

Е – энергия электрона (работа по его перемещению);

а – ускорение электрона.

$$v = \frac{r}{T} = \frac{2\pi\lambda}{2\pi T} = \frac{\omega}{k}.$$
(6.1)

Выражение (6.1) справедливо, если ω не зависит от k. Если ω зависит от k, необходимо записать в более общем виде:

$$v = \frac{d\omega}{dk},$$

т.е. средняя скорость движения электрона равна групповой скорости волнового пакета. Известна формула Планка:

$$E = \hbar \omega , \qquad (6.2)$$

или

$$\omega = \frac{E}{\hbar}.$$
 (6.3)

Подставляя (6.3) в (6.1), получаем:

$$v = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar dk},\tag{6.4}$$

Откуда

$$dE = \hbar v dk. \tag{6.5}$$

Продифференцируем (6.4) по времени:

$$a = \frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar dk dt} \left(\frac{dk}{dk}\right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 E}{dk} \frac{dk}{dt}.$$
(6.6)

Со стороны поля на электрон действует сила $F=-e\varepsilon$. Приращение энергии электрона равно:

$$dE = FdS$$
.

Поскольку dS' = vdt, то

 $dE = e \varepsilon v dt.$ (6.7) Приравниваем (6.5) и (6.6):

$$e\varepsilon v dt = \hbar v dk;$$

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} e\varepsilon = F.$$
(6.8)

Последнее выражение представляет собой уравнение движения электрона в кристалле. Подставим теперь выражения (6.8) в выражение для ускорения (6.7):

$$a = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk} e\varepsilon.$$
(6.9)

Уравнение (6.9) связывает ускорение электрона с внешней силой -еЕ.

Если предположить, что величина $\hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)^{-1}$ имеет смысл массы, то (6.9)

приобретает вид второго закона Ньютона:

$$a = \frac{F}{m} = \frac{e\varepsilon}{m},\tag{6.10}$$

где

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)^{-1}.$$
(6.11)

Величина *m*^{*} получила название эффективной массы электрона. Эффективная масса отражает влияние периодического потенциала решетки на движение электрона в кристалле под действием внешней силы.

Покажем, что выражение (6.11) удовлетворяет соотношению для свободного электрона:

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2k^2}{2m}.$$
 (6.12)

Продифференцируем (6.12) по k:

$$\frac{dE}{dK} = \frac{h^2 k}{m};$$

$$\frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{h^2}{m};$$

$$m = \frac{h^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2}\right)} = m^*.$$
(6.13)

Таким образом, для свободного электрона эффективная и объемная массы тождественны. На рис. 11 иллюстрируется зависимость *E* от *k*.

1. Параболический участок – электрон свободен. Кривизна, описываемая выражением $\frac{d^2E}{dk^2}$, постоянна и положительна, эффективная масса равна

m - m *

массе свободного электрона:

2. Точка перегиба
$$\frac{d^2 E}{dk^2} = 0; m^* = 0^{-1} \to \infty.$$

3. $\frac{d^2 E}{dk^2} = \text{const} < 0; m^* < 0.$



Рис. 11 – Зависимость энергии электрона от волнового числа

В отличие от объемной массы, эффективная масса не определяет запас энергии электрона, его гравитационных и инерционных свойств.

Она служит теоретическим инструментом для упрощенного расчетарассмотрения электрона в поле решетки как свободного, не обладающим эффективной массой.

6.5 Рекомбинационные эффекты

При температуре, отличной от абсолютного нуля, в полупроводнике происходит, как мы знаем, процесс возбуждения, или *генерации*, свободных носителей заряда. Если бы этот процесс был единственным, то концентрация носителей непрерывно возрастала бы с течением времени. Однако вместе с процессом генерации возникает процесс *рекомбинации* свободных носителей. Он состоит в том, что свободный электрон при встрече с вакантным местом (дыркой) занимает его, в результате чего происходит уничтожение пары свободных носителей.

При любой температуре между процессом тепловой генерации носителей и процессом их рекомбинации устанавливается равновесие, которому соответствует *равновесная концентрация* носителей. Такие носители называют *равновесными*. Помимо теплового возбуждения возможны и другие способы генерации свободных носителей в полупроводниках: под действием света, ионизирующих частиц, введения (инжекции) их через контакт и др. Действие таких агентов приводит к появлению дополнительных, *избыточных* против равновесной концентрации, свободных носителей. Их называют также *неравновесными носителями*. Обозначим концентрацию таких носителей соответственно через Δn и Δp . Тогда полная концентрация носителей будет равна:

$$n = n0 + \Delta n, \quad p = p0 + \Delta p, \tag{6.14}$$

где n_0, p_0 – концентрация равновесных носителей.

Каждый неравновесный носитель, возникнув в полупроводнике, "живет" в нем ограниченное время до своей рекомбинации (гибели), разное для разных носителей. Поэтому вводят *среднее время жизни носителей* τ , которое для электронов обозначают τn , для дырок – τp .

Процесс генерации носителей характеризуют *скоростью рекомбинации R*, равной числу носителей (числу пар носителей), ежесекундно рекомбинирующих в единице объема полупроводника. Для электронов

$$R_n = -\frac{dn}{dt} = -\frac{d(\Delta n)}{dt}.$$
(6.15)

Для дырок

$$R_p = -\frac{dp}{dt} = -\frac{d(\Delta p)}{dt},\tag{6.16}$$

где n, p – суммарная концентрация электронов и дырок в данный момент; $\Delta n, \Delta p$ – избыточная их концентрация в этот момент; знак "–" указывает на то, что в процессе рекомбинации концентрация носителей уменьшается. Так как каждый избыточный носитель, например электрон,

живет в среднем τ_n , то в одну секунду их прорекомбинирует $\frac{\Delta n}{\tau_n}$

Поэтому скорость рекомбинации:

$$R_n = -\frac{d(\Delta n)}{dt} = \frac{\Delta n}{\tau_n}.$$
(6.17)

Аналогичное соотношение будет иметь место для дырок:

$$R_p = -\frac{d(\Delta p)}{dt} = \frac{\Delta p}{\tau_p}.$$
(6.18)

Интегрируя эти уравнения, получим:

$$\Delta n = \Delta n_0 e^{-\frac{t}{\tau_n}}, \ \Delta p = \Delta p_0 e^{-\frac{t}{\tau_p}}. \tag{6.19}$$

Из уравнений (6.19) видно, что при $t = \tau$ $\Delta n = \frac{\Delta n_0}{e}$ и $\Delta p = \frac{\Delta p_0}{e}$. Таким

образом, среднее время жизни избыточных носителей равно времени, в течении которого их концентрация вследствие рекомбинации уменьшается в e=2,73 раза. Свободные носители заряда, диффундируя в объеме полупроводника, за время своей жизни τ перемещаются в среднем на расстояние L, которое называют $\partial u \phi \phi y зионной$ *длиной*носителей. Как показывает расчет, <math>L следующим образом зависит от τ :

$$L = \sqrt{D\tau}, \qquad (6.20)$$

где *D* – коэффициент диффузии носителей, связанный с их подвижностью *и* соотношением Эйнштейна:

$$D = \frac{kTu}{q} \tag{6.21}$$

где *k* – постоянная Больцмана;

q – заряд электрона.

Процесс перехода электрона из зоны проводимости в валентную зону при рекомбинации может протекать или непосредственно через всю запрещенную зону E_{g} , как это показано стрелкой l на рис. 12, или сначала на примесный уровень E_{n} (стрелка 2), а затем с примесного уровня в валентную зону (стрелка 3). Первый тип рекомбинации называется межзонным, второй – рекомбинацией через примесный уровень.

При обоих типах рекомбинации выделяется одна и та же энергия E_g . Различие состоит в том, что в первом случае эта энергия выделяется сразу, во втором – по частям, отвечающим переходам 2 и 3.

Выделение энергии может происходить или в форме кванта света *hv*, или в виде тепла (фононов). В первом случае рекомбинацию называют *излучательной*, во втором – *безызлучательной*. Как показывают расчет и опыт, межзонная излучательная рекомбинация может иметь существенное значение для полупроводников с узкой запрещенной зоной при относительно высоких температурах (комнатной и выше). Для полупроводников же с широкой запрещенной зоной основным механизмом, ответственным за рекомбинацию, является безызлучательная рекомбинация через примесные уровни. Однако при некоторых условиях и в таких полупроводниках можно достичь относительно высокого уровня излучательной рекомбинации.



Рис. 12 – Схема межзонной рекомбинации и рекомбинации через локальный уровень в запрещенной зоне

Этому способствует, в частности, повышение концентрации избыточных носителей в полупроводнике, а в ряде случаев – так же увеличение степени легирования. Замечательным в этом отношении является арсенид галлия (GaAs), у которого при благоприятных условиях доля излучательной рекомбинации может достигать 50% и более от общего числа актов рекомбинации. Поэтому арсенид галлия является в настоящее время основным материалом для изготовления светодиодов и источников когерентного излучения (лазеров), получивших широкое практическое применение.

7 ОСНОВЫ СТАТИСТИКИ ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Одной из целей статистических исследований нередко является построение гистограмм распределения вероятности определенных событий, происходящих среди определенного количества исследуемых объектов. Поскольку любое твердое тело представляет собой систему или коллектив, состоящий из огромного числа микрочастиц, методы статистики вполне применимы для их описания.

На рис. 13 приведена гистограмма распределения частоты вероятности встречи *f* микрочастицы с определенной энергией. Данная гистограмма строится для какой-либо определенной физической ситуации.



Рис. 13 - Гистограмма распределения электронов по энергиям

Все микрочастицы по характеру поведения в коллективе делятся на две группы: фермионы и бозоны.

Фермионы подчиняются принципу Паули, когда для данного квантового состояния можно относить только один фермион (электроны, протоны, нейтроны и т.д. с полуцелым спином $\frac{1}{2}\hbar, \frac{3}{2}\hbar, \dots$).

К бозонам относят частицы, которые обладают стремлением к «объединению» (фотоны, фононы и др. частицы с целочисленным спином

 $0, \hbar, 2\hbar, ...$). Они могут неограниченно заселять одно и то же состояние, причем делают это тем «охотнее», чем больше их уже в этом состоянии.

При распределении *N* одинаковых частиц по *G* различным состояниям рассмотрим два случая.

Микрочастицы встречаются редко при

$$\frac{N}{G}\square 1. \tag{7.1}$$

Вопрос о заселении одного и того же состояния несколькими микрочастицами практически не возникает в этом случае. Условие (7.1) называют условием невырожденности, а коллективы микрочастиц невырожденными. Если

$$\frac{N}{G} \approx 1,\tag{7.2}$$

то такие коллективы называют <u>вырожденными</u>, т.к. вопрос о заселении состояния поодиночке или коллективно становится весьма актуальным, что определяет свойства коллектива.

Для задания состоянии частиц надо указать их координаты и составляющие импульса или задать энергию частиц, которая определяется их координатами и составляющими импульса. Число частиц с энергией от E до E+dE в системе с термодинамическими параметрами μ и T (например) осуществляется функция N(E)dE.

Полную функцию распределения представим в виде произведения числа состояний g(E)dE, приходящихся на интервал энергии dE, на степень заполнения f(E) этих состояний частицами. f(E) можно считать как среднее число частиц, находящихся в данном состоянии. Например, если на 100 состояний приходится в среднем 10 частиц, то f(E) = 0,1.

$$N(E)dE = f(E)g(E)dE.$$
(7.3)

Функция f(E) называется функцией распределения и зависит от того, является ли газ вырожденным или невырожденным, а для вырожденных газов от того, из каких частиц он состоит: фермионов или бозонов.

7.1 Функция распределения для невырожденного газа

Функция распределения Максвелла-Больцмана для невырожденного газа:

$$f(E) = e^{\frac{\mu}{kT}} e^{\frac{-E}{kT}},$$
(7.4)

где *k* – постоянная Больцмана, µ – химический потенциал.



Рис. 14 - Средняя степень заполнения состояний частицами



Рис. 15 – Полная функция распределения для невырожденного газа

7.2 Функция распределения для вырожденного газа фермионов

Функция распределения для вырожденного газа фермионов (впервые получена Ферми и Дираком):

$$f_{\Phi-\mathcal{I}}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{E-\mu}{kT}\right]},$$
(7.5)

где μ – химический потенциал, который применительно к электронному газу называют обычно энергией Ферми.

При $E = \mu$ функция распределения $f_{\Phi-\mathcal{I}}(E) = \frac{1}{2}$ при любой $T \neq 0$.

7.2.1 Распределение электронов в металле при абсолютном нуле.

Металл для свободных электронов является потенциальной ямой, выход из которой требует определенной энергии у электрона.

Энергетические уровни, которые могут занимать электроны, показаны горизонтальными линиями. На каждом уровне могут разместиться два электрона (принцип Паули). При N электронов в газе последним уровнем будет уровень под номером N/2, который называется уровнем Ферми для

вырожденного электронного газа. Этот уровень соответствует максимальной кинетической энергии, которой может обладать электрон в металле при абсолютном нуле.



Рис.16 – Заполнение квантовых состояний электронами в металле



Рис.17 – График функции распределения для вырожденного газа фермионов при абсолютном нуле:
а) средняя степень заполнения квантовых состояний;
б) полная функция распределения

При T = 0 K все состояния с энергией $E < \mu$ заняты электронами, а состояния с энергией $E > \mu$ свободны. Таким образом, вероятность заполнения электронами состояний с энергиями $E < \mu$ и $E > \mu$ (рис.17, а):

$$f_{\Phi-\mathcal{I}}(E) = \begin{cases} 1 - \text{для } E < \mu \\ 0 - \text{для } E > \mu \end{cases}$$

7.2.2 Влияние температуры на распределение Ферми-Дирака

С повышением температуры электроны подвергаются тепловому возбуждению и переходят на более высокие энергетические уровни, вследствие чего смещается распределение их по состояниям. Как показывают

расчеты, тепловому возбуждению могут подвергаться электроны узкой полосы kT, непосредственно расположенной у уровня Ферми (рис. 18, а).

Электроны более глубоких уровней остаются практически не затронутыми, так как энергии kT теплового движения недостаточно для их возбуждения (для перевода за уровень Ферми).

В результате теплового возбуждения часть электронов, имевших энергию, меньшую ε_0 , переходит на уровни с энергией, большей ε_0 и устанавливается новое их распределение по состояниям. На рис. 18, б показаны кривые распределения электронов по состояниям при T = 0 K и при T > 0 K. Из рисунка видно, что повышение температуры вызывает размытие распределения на глубину kT и появление "хвоста" распределения AB, располагающегося правее ε_0 . Чем выше температура, тем более существенному изменению подвергается функция распределения. Сам "хвост" AB описывается уже максвеловской функцией распределения.



Рис. 18 – Тепловое возбуждение электронов (а); график функции распределения Ферми-Дирака при T > 0 (б)

7.3 Функция распределения для вырожденного газа бозонов

34

Функция распределения бозонов по состояниям была впервые получена индийским физиком Бозе и А. Эйнштейном и имеет следующий вид:

$$f_{\mathcal{B}-\mathcal{P}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_0}{kT}\right) - 1}.$$
(7.6)

Для таких бозонов, как фотоны (кванты электромагнитного излучения) и фононы (кванты энергии упругих колебаний решетки), энергия Ферми $E_0 = 0$, а их энергия $E=hv=\hbar\omega$. Поэтому функция распределения для них принимает вид:

$$f_{\mathcal{B}-\mathcal{P}} = \frac{1}{exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}.$$
(7.7)

Эта формула была получена впервые Планком и носит его имя. Она выражает среднее число фононов, обладающих энергией $E=\hbar\omega$. Пользуясь формулой, легко установить закон распределения энергии в спектре абсолютно черного тела.

7.4 Положение уровня Ферми и зависимость концентрации носителей от температуры в полупроводниках 7.4.1 Зависимость концентрации свободных носителей от положения уровня Ферми.

Как известно, уровень Ферми является одним из основных параметров, характеризующих газ свободных носителей в металлах и полупроводниках. В металлах при T = 0 K уровень Ферми находится в зоне проводимости. Концентрация электронного газа в металлах сравнима по порядку величины с числом состояний в зоне проводимости, т.е.

$$\frac{N}{G} \approx 1$$

вследствие чего газ является вырожденным и распределение электронов по состояниям описывается квантовой статистикой Ферми–Дирака. Концентрация электронов такого газа практически не зависит от температуры, что вызывает нечувствительность к температуре и такого технически важного свойства, как удельная электропроводность. В собственных и слаболегированных примесных полупроводниках электронный газ является невырожденным:

$$\frac{N}{G}$$
 \Box 1.

Поэтому

$$f = \frac{1}{exp\left(\frac{E - E_0}{kT}\right) + 1};$$
(7.8)

$$exp\left(\frac{E-E_0}{kT}\right) \Box \quad 1. \tag{7.9}$$

Выражение (7.9) будет выполняться и для E=0, т.е.

$$exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right) \Box \quad 1. \tag{7.10}$$

Чтобы выполнялось (7.10), необходимо, чтобы уровень Ферми был меньше 0 (E_0 <0), и по абсолютному значению $|E_0| >> kT$. Тогда единицей в знаменателе выражения (7.8) можно пренебречь, и получить следующее выражение для функции распределения невырожденного электронного газа:

$$f(E) = exp\left(-\frac{E}{kT}\right)exp\left(-\frac{E_0}{kT}\right).$$
(7.11)

Выражение (7.11) показывает, что в собственных и слаболегированных примесных полупроводниках невырожденный электронный газ описывается распределением Максвелла–Больцмана, как и любой другой невырожденный газ. Для таких полупроводников концентрация свободных носителей зависит от положения уровня Ферми и температуры *T*. Установим эту зависимость.

На рис. 19 показана зонная структура невырожденного полупроводника. При температуре T, отличной от абсолютного нуля, в зоне проводимости такого полупроводника находятся электроны, в валентной зоне – дырки. Обозначим их концентрацию соответственно через n и p. Примем за нулевой уровень отсчета кинетической энергии электронов дно зоны проводимости. Выделим около этого дна узкий интервал энергий dE, заключенный между Eи E+dE. Число электронов, заполняющее интервал энергии dE (в расчете на единицу объема), можно определить, воспользовавшись полной функцией распределения Ферми-Дирака при абсолютном нуле:

$$dn = \frac{4\pi}{h^3} (2m_n)^{1.5} E^{0.5} e^{-\frac{\mu}{kT}} e^{\frac{-E}{kT}} dE, \qquad (7.12)$$

где m_n – эффективная масса электронов, располагающихся у дна зоны проводимости.

Полное число электронов n, находящееся при температуре T в зоне проводимости, получим, интегрируя в пределах от 0 до E_{6} :
$$n = 4\pi \left(\frac{2m_n}{h^2}\right)^{1.5} \int_{0}^{E_s} \exp\left(-\frac{E-\mu}{kT}\right) E^{0.5} dE.$$
 (7.13)



Рис. 19 – Положение уровня Ферми в собственном полупроводнике

С ростом T функция $e^{-\frac{E}{kT}}$ спадает очень быстро, поэтому верхний предел можно заменить на бесконечность:

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_n}{h^2}\right)^{1.5} \int_0^\infty E^{0.5} \exp\left(-\frac{E-\mu}{kT}\right) dE =$$

= $2\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{1.5} \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right)$ (7.14)

Обозначим

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi k m_n k T}{h^2}\right)^{1.5}.$$
 (7.15)

Множитель N_c в (7.15) называют эффективным числом состояний в зоне проводимости, приведенным ко дну зоны. Физический смысл этого числа состоит в том, что если совместить N_c с дном зоны проводимости, то умножив это число на вероятность заполнения дна, равную

$$f_{M-\mathcal{E}}(0) = \exp\left(\frac{E_0}{kT}\right),$$

получим концентрацию электронов в этой зоне. Тогда с учетом (7.15) выражение (7.14) перепишется:

$$n = N_c exp\left(\frac{E_0}{kT}\right). \tag{7.16}$$

Аналогично для дырок:

$$p = 2\left(\frac{2\pi m_p kT}{h^2}\right)^{1,5} \exp\left(\frac{E_0'}{kT}\right).$$
(7.17)

Из рис. 18 видно, что

$$E_{\mathcal{I}} = -(E_0 + E'_0), E'_0 = -(E_{\mathcal{I}} + E_0),$$
 (7.18)

тогда

$$p = N_V exp\left(-\frac{E_{\mathcal{A}} + E_0}{kT}\right),\tag{7.19}$$

где N_V – эффективное число состояний в валентной зоне, приведенное

к потолку зоны; $m_n^* = \frac{h^2}{d^2 E / dk^2} - эффективная масса.$

Из формул (7.16) и (7.19) следует, что концентрация свободных носителей заряда в данной зоне определяется расстоянием этой зоны от уровня Ферми: чем больше это расстояние, тем меньше концентрация носителей.

7.4.2 Положение уровня Ферми и зависимость концентрации носителей от температуры в собственных полупроводниках

В собственных полупроводниках концентрация электронов в зоне проводимости n равна концентрации дырок в валентной зоне *p*:

$$ni = pi$$

так как каждый электрон, переходящий в зону проводимости, "оставляет" в валентной зоне после своего ухода дырку. Приравнивая правые части соотношений (7.16) и (7.19), получаем:

$$N_{c}exp\left(\frac{E_{0}}{kT}\right) = N_{V}exp\left(-\frac{E_{\mathcal{A}} + E_{0}}{kT}\right).$$
(7.20)

Решаем это уравнение относительно ε₀:

$$\begin{split} N_c \exp\!\left(\frac{2E_0+E_{\mathcal{I}}}{kT}\right) &= N_V;\\ \ln N_c + \frac{2E_0+E_{\mathcal{I}}}{kT} &= \ln N_V;\\ &38 \end{split}$$

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{2} \left(kT \ln \frac{N_V}{N_c} - E_{\mathcal{A}} \right). \tag{7.22}$$

Подставляя в (7.21) значения для N_V и N_c из (7.16) и (7.19), получим:

$$E_{0} = \frac{1}{2} \left(kT ln \left(\frac{m_{p}^{*}}{m_{n}^{*}} \right)^{1,5} - E_{\mathcal{I}} \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} kT ln \left(\frac{m_{p}^{*}}{m_{n}^{*}} \right) - E_{\mathcal{I}} \right).$$
(7.22)

Соотношение (7.22) и определяет положение уровня Ферми в собственных полупроводниках. При абсолютном нуле (T = 0 K)

$$E_0 = -\frac{1}{2} E_{\mathcal{I}}.$$
 (7.23)

Для большинства практических задач можно считать, что

$$m_p^* = m_n^*,$$

т.е. уровень Ферми располагается посредине запрещенной зоны. Подставляя *E*₀ из (7.22) в (7.16) и (7.19), получим:

$$n_{i} = p_{i} = 2 \left(\frac{2\pi kT \sqrt{m_{n}^{*} m_{p}^{*}}}{h^{2}} \right)^{1,5} exp\left(-\frac{E_{\mathcal{A}}}{2kT} \right);$$
(7.24)

$$n_i = p_i = \left(\frac{N_c}{N_V}\right)^{0.5} exp\left(-\frac{E_{\mathcal{I}}}{2kT}\right).$$
(7.25)

Прологарифмируем выражение (7.25):

$$\ln n = \frac{1}{2} \ln \frac{N_c}{N_V} - \frac{E_{\mathcal{A}}}{2k} \frac{1}{T}.$$
(7.26)

Выражение (7.26) можно изобразить графически (рис. 20). Для этого случая тангенс угла наклона прямой, который можно принять равным углу *а*, который будет равен:

$$\alpha = \frac{E_{\mathcal{I}}}{2k}.\tag{7.27}$$

Например, для германия повышение температуры от 100 до 600 K вызывает увеличение n в 10¹⁰ раз. Проводимость σ в собственном проводнике есть величина, зависящая от концентрации электронов и дырок:

$$\sigma = q \left(n_i U_n + p_i U_p \right)$$

где U_n и U_p – подвижность (скорость) носителей под действием единичных сил;

q – величина заряда.



Рис. 20 – Зависимость концентрации основных носителей заряда от температуры для собственных полупроводников



Рис. 21 – Температурная зависимость проводимости для собственных полупроводников

Тогда

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_{\mathcal{A}}}{2kT}\right),$$

или

$$\ln \sigma = \ln \sigma_0 - \frac{E_{\mathcal{A}}}{2k} \frac{1}{T}.$$
(7.28)

График зависимости (7.28) приведен на рис. 21. В этом случае угол *а* такой же, как и в (7.27).

7.4.3 Положение уровня Ферми и температурная зависимость концентрации носителей в примесных полупроводниках

В характере зависимости положения уровня Ферми от температуры в примесных полупроводниках существуют три области: область низких температур, истощения примеси и перехода к собственной проводимости.

а) Область низких температур.

Так как для возбуждения и переброса в зону проводимости электронов с донорных уровней (рис. 22, а) требуется энергия, меньшая чем $E_{\mathcal{I}}$ примерно

в 100 раз, электроны в зоне проводимости появляются в этом случае практически только за счет ионизации атомов донорных примесей. Обозначим их концентрацию *n*. Тогда

 $n = N_{\Pi} - n_{\Pi}$,

где N_Д – концентрация донорных атомов;

 $n_{\underline{J}}$ – число электронов, оставшихся на донорных уровнях.

Известно, что концентрация электронов в зоне проводимости определяется выражением:

$$n = 2\left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2}\right)^{1,5} \exp\left(\frac{E_0}{kT}\right).$$

С другой стороны

$$N_{\mathcal{A}} - n_{\mathcal{A}} = N_{\mathcal{A}} [1 - f(-E_{\mathcal{A}})],$$

где $[1-f(-E_{\mathcal{I}})]$ – вероятность того, что донорные уровни не заполнены;

-ЕД – энергия донорного уровня.

Тогда

$$N_{\mathcal{A}} - n_{\mathcal{A}} = \frac{N_{\mathcal{A}}}{1 + \exp\left(\frac{N_{\mathcal{A}} - N_0}{kT}\right)}.$$

Так как при низких температурах $N_{\mathcal{A}} - n_{\mathcal{A}} \square N_{\mathcal{A}}$, то единицей в знаменателе можно пренебречь. Тогда

$$N_{\mathcal{A}} - n_{\mathcal{A}} = N_{\mathcal{A}} \exp\left(\frac{-E_{\mathcal{A}} - E_0}{kT}\right).$$
(7.29)

Очевидно, что выражение (7.29) равно выражению (7.7):

$$2\left(\frac{2\pi m_n kT}{h^2}\right)^{1.5} \exp\left(\frac{E_0}{kT}\right) = N_{\mathcal{A}} \exp\left(\frac{-E_{\mathcal{A}} + E_0}{kT}\right).$$
(7.30)





Перепишем последнее выражение с учетом (7.8). Получим:

п

$$= N_{c} \exp\left(\frac{E_{p}}{kT}\right) = N_{\mathcal{A}} \exp\left(\frac{-E_{\mathcal{A}} + E_{0}}{kT}\right);$$

$$\exp\left(\frac{2E_{\mathcal{A}} + E_{0}}{kT}\right) = \frac{N_{\mathcal{A}}}{N_{c}};$$
(7.31)

$$\left(\frac{2E_{\mathcal{A}} + E_{0}}{kT}\right) = ln \frac{N_{\mathcal{A}}}{N_{c}};$$

$$\varepsilon_{0} = \frac{1}{2} \left[kT \ln\left(\frac{N_{\mathcal{A}}}{N_{c}}\right) - E_{\mathcal{A}} \right].$$
(7.32)

Исследуем выражение (7.32): 1. *T* = 0 *K*.

$$E_0 = -\frac{E_{\mathcal{I}}}{2},$$

т.е. уровень Ферми располагается посередине между дном зоны проводимости и донорными уровнями.

2. T > 0 K.

В этом случае $\ln\left(\frac{N_{\mathcal{A}}}{N_c}\right)$ меняет знак: в области низких температур он

положителен, при более высоких температурах он становится отрицательным. Поэтому с повышением температуры уровень Ферми сначала поднимается вверх ко дну проводимости, а затем начинает опускаться (область 2 на рис. 22, а).

Для того чтобы получить выражение для равновесной концентрации электронов в зоне проводимости при низких температурах, подставим в (7.16) энергию Ферми (7.32):

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_0}{kT}\right);$$

$$n = N_c \exp\left(\left(-\frac{E_{\mathcal{A}}}{2kT}\right) + \frac{1}{2}\ln\frac{N_{\mathcal{A}}}{N_c}\right);$$
 (7.33)

$$n = \left(N_{\mathcal{A}}N_c\right)^{0.5} \exp\left(-\frac{E_{\mathcal{A}}}{2kT}\right);\tag{7.34}$$

$$\ln n = \frac{1}{2} \ln \left(N_{\mathcal{A}} N_c \right) - \frac{E}{2kT}.$$
(7.35)

б) Область истощения примеси.

По мере повышения температуры концентрация электронов на примесных уровнях уменьшается – примесные уровни истощаются. При полном истощении примеси концентрация электронов в зоне проводимости электронного полупроводника становится равной концентрации донорной примеси N_{d} , если концентрацией собственных носителей можно пренебречь:

$$n = N_{\mathcal{I}};$$

$$N_c \exp\left(\frac{E_0}{kT}\right) = N_{\mathcal{I}},$$
(7.36)

откуда

$$\varepsilon_0 = kT \ln\left(\frac{N_{\mathcal{A}}}{N_c}\right). \tag{7.37}$$

Подставляя (7.37) в (7.16), получим:

$$n = N_c \exp\left(\ln\frac{N_{\mathcal{A}}}{N_c}\right). \tag{7.38}$$

За температуру истощения примесей T_s обычно принимают температуру, при которой уровень Ферми совпадает с донорными уровнями

$$-E_{\mathcal{A}}$$
; $E_0 = -E_{\mathcal{A}}$. Положив в формуле (7.16) $T = T_s$ и $n = \frac{N_{\mathcal{A}}}{2}$, получим:

$$T_{S} = \frac{E_{\mathcal{A}}}{k \ln\left(\frac{2N_{c}}{N_{\mathcal{A}}}\right)}.$$
(7.39)

Из (7.39) следует, что T_s тем выше, чем выше донорный уровень и ее концентрация $N_{\rm A}$.

Выше температуры истощения примеси уровень Ферми понижается приблизительно линейно с ростом температуры (область 1 на рис. 22, а).

в) Область высоких температур.

При дальнейшем повышении температуры начинается все большее интенсивное возбуждение собственных носителей, полупроводник все более приближается к состоянию собственного полупроводника, вследствие чего уровень Ферми приближается к положению уровня Ферми в собственном полупроводнике.

При достаточно высоких температурах концентрация собственных носителей может не только достичь величины $N_{\rm A}$, но и значительно превзойти ее ($n_{\rm i} \square N_{\rm A}$). В этом случае положение уровня Ферми определяется выражением (7.22):

$$E_{0i} = -\frac{E_{\mathcal{I}}}{2} + \frac{3}{4} kT \ln\left(\frac{m_p^*}{m_n^*}\right).$$
(7.40)

На рис. 22, а, область 3 показано положение уровня Ферми в области высоких температур. Для того, чтобы приблизительно определить

температуру перехода к собственной проводимости T_i , положим в формуле (7.37) $E_0 = E_{0i}$ и, приравняв его к (7.32), получаем:

$$E_{0i} = kT_i \ln\left(\frac{N_{\mathcal{A}}}{N_c}\right) = -E_{\mathcal{A}} + \frac{kT_i}{2} \ln\left(\frac{N_{\mathcal{A}}}{N_c}\right),$$

откуда

$$T_i = \frac{E_{\mathcal{A}}}{k \ln\left(\frac{N_c N_V}{N_{\mathcal{A}}^2}\right)}.$$
(7.41)

Температура T_i тем выше, чем больше ширина запрещенной зоны полупроводника и концентрация примеси в нем.

На рис. 22, б показана схематическая кривая зависимости натурального логарифма концентрации электронов в зоне проводимости электронного полупроводника от обратной температуры. На кривой можно выделить три участка: 1 – отвечающий примесной проводимости полупроводника, 2 – соответствующий области истощения примеси и 3 – отвечающий собственной проводимости полупроводника.

7.4.4 Закон действующих масс

В отличие от собственных полупроводников, в которых проводимость осуществляется одновременно электронами и дырками, в примесных полупроводниках проводимость обусловливается в основном носителями одного знака: электронами в полупроводниках донорного типа и дырками в полупроводниках акцепторного типа. Эти носители называются основными. Помимо основных, полупроводники содержат всегда и неосновные носители: донорный проводник – дырки, акцепторный полупроводник – электроны.

Для установления связи между основными и неосновными носителями рассмотрим невырожденный полупроводник донорного типа. Основными носителями в нем являются электроны. Их концентрация описывается формулой (7.16). Неосновными носителями являются дырки, концентрация которых определяется формулой (7.19). Умножая (7.16) на (7.19), получаем:

$$n_p = N_c N_P \exp\left(-\frac{E_{\mathcal{I}}}{kT}\right) = n_i^2.$$
(7.42)

Такой же результат получился бы, если мы рассматривали невырожденный полупроводник акцепторного типа, в котором основными носителями являются дырки, неосновными – электроны.

Обозначим концентрации носителей следующим образом:

 n_{n0} , p_{n0} – концентрация электронов (основных носителей) и дырок (неосновных носителей) в полупроводнике *n*-типа; p_{p0} , n_{p0} – концентрация дырок (основных носителей) и электронов (неосновных носителей) в полупроводнике *p*-типа. С использованием этих обозначений можно переписать соотношение (7.42) следующим образом:

$$n_{n0}p_{n0} = p_{p0}n_{p0} = n_i^2 \tag{7.43}$$

Формула (7.43) показывает, что произведение концентраций основных и неосновных носителей заряда в данном полупроводнике равно квадрату концентрации собственных носителей в этом полупроводнике. В этом состоит закон действующих масс в применении к газу свободных носителей в полупроводниках.

8 ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

8.1 Удельная электропроводность металлов

Электронный газ в проводнике находится в равновесном состоянии при отсутствии электрического поля. Равновесие электронного газа устанавливается в результате взаимодействия электронов с дефектами решетки, которое сопровождаются обменом энергией и импульсом. К таким дефектам относят прежде всего тепловые колебания решёток (фононы) и примесные атомы. Происходит рассеяние электронов и устанавливается беспорядочное движение их в проводнике.

Электрический ток в проводнике согласно закону Ома:

$$j = \sigma E$$
,

(8.1)

где *j* – плотность тока; *E* – напряженность поля; σ – удельная электропроводность проводника.

Направленное движение электронов называется дрейфом электронов, а средняя их скорость – скоростью дрейфа υ_{Π} .

Влияние решеток на электрон можно представить как действие силы сопротивления *F*_c на шарик, движущийся в вязкой среде (рис. 23):

$$= -(1/\tau)m_n v_\partial, \tag{8.2}$$

где m_n – эффективная масса электрона; $1/\tau$ – коэффициент.

 F_c

На основании (8.2) можно записать:

$$m_n \left(d\upsilon_{\mathcal{I}}(t) / dt \right) = -qE - (1/\tau)m_n \upsilon_{\mathcal{I}}(t).$$
(8.3)

Из (8.3) видно, что ускоренное движение электрона прекратится, когда F_c станет равной $F_c = -qE$. С этого момента электроны движутся с постоянной скоростью дрейфа:

$$\upsilon_{\Pi} = -qE\tau / m_n. \tag{8.4}$$



Рис. 23 – Движение электрона в поле с напряженностью Е

Если поле E выключить, скорость дрейфа начинает уменьшаться и электронный газ переходит в равновесное расстояние, т.е. происходит релаксация. Полагая в (8.3), что E = 0, получим уравнение процесса релаксации:

$$d\upsilon_{\underline{\mathcal{I}}}(t)/dt = -(1/\tau)\upsilon_{\underline{\mathcal{I}}}(t).$$
(8.5)

После интегрирования уравнения (8.5)

$$\upsilon_{\varPi}(t) = \upsilon_{\varPi} \exp(-t/\tau), \qquad (8.6)$$

где $v_{\Pi}(t)$ – скорость электрона во времени после выключения поля.

Таким образом, из (8.6) видно, что τ характеризует скорость установления в системе равновесного состояния. За время $t = \tau$ скорость уменьшается в е раз. Время τ называют временем релаксации.

Величину, равную отношению скорости дрейфа к напряженности поля

$$\mu = \frac{|v_{\partial}|}{E} = q\tau / m_n, \qquad (8.7)$$

(8.8)

называют подвижностью носителей. Соответственно подвижность – это дрейфовая скорость, приобретенная электронами в поле единичной напряженности.

Можно пользоваться понятием длины свободного пробега электронов

 $\lambda = \upsilon \tau$,

где *v* – средняя скорость движения электронов.

При $\delta = 1,6\cdot 10^6$ м/с и $\tau = 2\cdot 10^{-14}$ с, $\lambda = 3,2\cdot 10^{-8}$ м, что примерно в 100 раз больше межатомных расстояний в решетке меди. Это свидетельствует о том, что рассеяние электронов происходит не в узлах решеток, а на ее дефектах.

За 1 секунду все электроны цилиндра пройдут через основание и образуют ток плотностью

$$j = -qnv_{\partial} = qn\mu E, \tag{8.9}$$

где *n* – концентрация электронного газа в проводнике.

На основании (8.1):

$$\sigma = qn\mu. \tag{8.10}$$

Подставив в (8.10) μ из (8.7) и τ из (8.8) получим:

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m_n} = \frac{nq^2\lambda}{m_n\upsilon}.$$
(8.11)





Это выражение для удельной электропроводности проводника через микроскопические параметры, характеризующие электронный газ в нем. На основании (8.11) выполняется анализ влияния состояния газа на его электропроводность.

8.2 Оценка подвижности. Эффект Холла

Кинетические явления, возникающие в твердых телах при совместном действии на них электрического и магнитного полей, называют гальваномагнитными явлениями.

Одно из наиболее изученных гальваномагнитных явлений получило название эффекта Холла.

Предположим, что образец прямоугольной формы, по которому течет ток с плотностью j в направлении OX, помещен в магнитное поле с индукцией B, направленное по OZ (рис. 25). Пусть носителями заряда являются электроны. Электрическое поле ускоряет электроны, и они приобретают дрейфовую скорость, описываемую формулой (8.4).

Явление, открытое Холлом в 1879 г., состоит в появлении поперечной разности потенциалов в образце, помещенном в магнитное поле, при пропускании вдоль него электрического тока. При этом направление магнитного поля перпендикулярно направлениям тока и возникающей разности потенциалов.

Эффект был открыт на металлах и для большинства их изучен в конце XIX – начале XX вв. При этом оказалось, что знак возникающей поперечной

разности потенциалов (э.д.с. Холла) у большинства металлов отрицателен и соответствует электронной проводимости, однако у некоторых металлов (например, вольфрама) он положителен.

С появлением различных полупроводниковых материалов сфера исследований эффекта Холла расширилась, однако и здесь получались э.д.с. различных знаков, причем даже для различных образцов одного и того же вещества, в соответствии со знаком носителей тока – дырок или электронов. Так было открыто явление дырочной проводимости.

Рассмотрим элементарную теорию Холла. Пусть образец прямоугольной формы, по которому течет ток с плотностью *j* в направлении *OX*, помещен в магнитное поле с индукцией *B*, направленное по оси *OZ* (рис. 25). Сила Лоренца F_{π} направлена перпендикулярно векторам *V* и *B*. Под действием сил εE и F_{π} электрон движется по траектории, образующейся в результате сложения двух видов движения: перемещения вдоль образца и вращения (обусловленного действием силы Лоренца). Такой траектории является циклоида. Магнитное поле, при котором радиус кривизны траектории много больше длины свободного пробела электрона, называют слабым.



Рис. 25 – Возникновение холловской разности потенциалов. Носителями заряда являются электроны. Электрическое поле ускоряет электроны, и они приобретают дрейфовую скорость, описываемую формулой (8.4). На частицу, движущуюся с этой скоростью, действует сила Лоренца F_л = −e[VB]

Под действием силы Лоренца электроны отклоняются к боковой поверхности образца, в результате чего на ней создается избыток отрицательного заряда. На противоположной стороне возникает недостаток отрицательного заряда, т.е. избыток положительного. Разделение зарядов

происходит до тех пор, пока сила, действующая на электроны со стороны возникшего электрического поля E_y , направленного от одной боковой поверхности к другой, не скомпенсирует силу Лоренца. Поле E_y получило название поля Холла, а само явление возникновения в образце с текущим по нему током поперечного электрического поля под действием магнитного поля было названо эффектом Холла.

Итак, разделение зарядов прекратится при условии:

$$eVB = eE_y,$$

отсюда получим:

 $E_y = VB$.

Практически измеряется не поле E_y , а разность потенциалов V_y между боковыми гранями образца, называемая э.д.с. Холла. Если b – ширина образца, то

$$V_v = E_v b = VBb. \tag{8.12}$$

Определяя V из выражения для плотности тока:

$$= -enV$$

и подставляя ее в (8.12), получаем:

$$V_y = -\frac{1}{ne}jBb = RjBb.$$

Коэффициент пропорциональности *R* называется постоянной Холла:

$$R=-\frac{r}{ne},$$

где $r = \frac{3\pi}{8}$.

Если носителями заряда являются дырки, то, как уже говорилось выше, сила Лоренца, действующая на них, отклоняет их в ту же сторону, куда отклоняются электроны. При этом для постоянной Холла имеем:

$$R = -\frac{r}{pe}$$

Произведение постоянной Холла на проводимость определяет подвижность носителей заряда (называемую холловской проводимостью):

$$R\sigma = \mu_{\mu}.$$

Измерение эффекта Холла совместно с измерениями проводимости образца позволяет получать информацию о знаке носителей заряда, концентрации носителей и их подвижности.

Подвижность заряда – это скорость, приобретаемая им под действием единичного поля:

$$U = \frac{V}{Ee} . \tag{8.13}$$

Предположим, что в идеальной кристаллической решетке под действием электрического поля напряженностью E движется электрон, сила, действующая на электрон равна F = -eE. Под действием этой силы электрон должен был бы двигаться ускоренно, и его скорость должна была бы непрерывно возрастать. Однако при своем движении электрон сталкивается с дефектами решетки и, рассеиваясь, теряет скорость, приобретаемую под влиянием поля. Действие решетки можно формально свести к действию силы сопротивления F_c , которую испытывает электрон при своем движении электрона и направлена противоположно ей:

$$F_e = -\frac{1}{\tau} m^* \vec{V}, \qquad (8.14)$$

где l/τ — коэффициент пропорциональности (физический смысл которого будет выяснен в дальнейшем); m^* — эффективная масса электрона.

Используя (8.14), уравнение направленного движения электрона в решетке можно записать в виде:

$$m_n \frac{d\vec{V}_{\mathcal{A}}(t)}{dt} = -e\vec{E} - \frac{1}{\tau}m^*\vec{V}_{\mathcal{A}}.$$
(8.15)

Из (8.15) видно, что после включения поля скорость направленного движения электрона будет возрастать, и они будут двигаться ускоренно до тех пор, пока сила сопротивления F_c , пропорциональная скорости $F_{\rm R}(t)$, не окажется равной силе \vec{F} , действующей со стороны поля. Когда эти силы сравняются, результирующая сила, действующая на электрон, и ускорение его движения будут равны нулю. Начиная с этого момента, направленное движение электронов будет совершаться с постоянной скоростью

$$\vec{V} = -\frac{e\vec{E}\tau}{m}.$$
(8.16)

Так как заряд электрона отрицателен, то дрейф происходит в направлении, противоположном \vec{E} .

Запишем выражение подвижности с учетом (8.16):

$$U = \frac{V}{Ee} = \frac{\tau}{m},$$

$$\tau = Um.$$
 (8.17)

откуда

При постоянной напряженности поля E скорость дрейфа, согласно (8.17), достигает постоянного значения. Это возможно лишь в том случае если сила F=-eE, с которой поле действует на электрон, компенсируется силой сопротивления F_c . В противном случае скорость дрейфа непрерывно росла бы и даже для малых полей могла бы стать сколь угодно большой.

Электропроводность в этом случае была бы бесконечной, а электрическое сопротивление равнялось бы нулю.

Подобная картина имела бы место при движении свободных электронов сквозь правильную решетку со строго периодическим потенциалом. Электронная волна, описывающая поведение электрона в такой решетке, распространялась бы в ней практически без ослабления, подобно световой волне, распространяющейся в оптически прозрачной среде.

Причиной появления конечного электрического сопротивления являются всевозможные нарушения решетки, вызывающие искажения периодичности потенциала, на которых происходит рассеяние электронных волн, ослабление направленного потока электронов подобно рассеянию световых волн и ослаблению светового луча при прохождении его через мутную среду.

Очевидно, физический смысл коэффициента τ в том, что он характеризует скорость установления в системе равновесного состояния: чем меньше τ , тем быстрее возбужденная система приходит в равновесие. Через время τ электрон начинает двигаться с постоянной скоростью. Время τ называется временем релаксации. Для чистых металлов $\tau \approx 10^{-14}$ с.

Движение электронов в кристалле удобно описывать, используя понятие длины свободного пробега. По аналогии с кинетической теорией газов можно считать, что электрон движется в кристалле прямолинейно до тех пор, пока не встретится с дефектом решетки и не рассеется. Средний отрезок пути λ , который проходит электрон между двумя последовательными актами рассеяния, принимают за длину свободного пробега электрона. Для полного уничтожения скорости в данном направлении требуется не одно, а несколько столкновений с рассеивающими центрами. В таком случае имеет смысл говорить о $\langle V \rangle$ – средней скорости хаотического движения электронов. Тогда средняя длина свободного пробега:

$L = \tau < V >$.

До настоящего времени мы не делали никакого различия между невырожденными и вырожденными электронными газами. Теперь попытаемся установить, как сказывается состояние электронного газа на его электропроводность. Для этого рассмотрим более подробно механизм проводимости невырожденного и вырожденного газов.

1. Невырожденный газ. В случае невырожденного газа плотность заполнения зоны проводимости электронами настолько небольшая, что они практически никогда не встречаются так близко, чтобы их поведение могло ограничиваться принципом Паули. Электроны являются полностью свободными в том смысле, что на движение любого из них другие не оказывают заметного влияния. Поэтому все электроны проводимости невырожденного газа принимают независимое друг от друга участие в создании электрического тока и форсировании электропроводности

проводника. Следовательно, в формулу (8.10) для электропроводности невырожденного газа должна входить средняя скорость движения $\langle V \rangle$ всех свободных электронов, полученная усреднением этой величины по всему коллективу.

Учитывая это, выражение для подвижности и удельной электропроводности невырожденного газа необходимо записать следующим образом:

$$U = \frac{\langle V \rangle}{Ee}; \tag{8.18}$$

$$\sigma = ne^2 U. \tag{8.19}$$

В собственных и слаболегированных примесных полупроводниках электронный (дырочный) газ является невырожденным, поэтому их электропроводность описывается формулой (8.19).

2. Вырожденный газ. Иная картина наблюдается для вырожденного газа. В этом случае в формировании электропроводности могут участвовать не все свободные электроны, а лишь те из них, которые обладают энергией, практически равной энергии Ферми. Соответственно и выражение подвижности и электропроводности будет входить не V, а V_F – скорость дрейфа электронов, обладающих энергией Ферми:

$$U = \frac{V_F}{Ee};$$
(8.20)

$$\sigma = ne^{2}U = me^{2}\frac{\tau_{F}}{m} = \frac{ne^{2}l}{mV_{F}} = \frac{ne^{2}l}{P_{F}},$$
(8.21)

где τ_F – время релаксации электронов, обладающих энергией Ферми;

 $P_F = mV_F - импульс$ электронов, обладающих энергией Ферми.

В металлах электронный газ является вырожденным, поэтому в них основной вклад в величину сопротивления дает длина свободного пробега, зависящая от температуры.

8.3 Подвижность свободных носителей заряда и ее зависимость от температуры

В области высоких температур в основном происходит рассеивание электронов на тепловых колебаниях решетки – на фононах. Отсюда средняя длина свободного пробега электронов должна быть обратно пропорциональна концентрации фононного газа: $\lambda \sim 1/n_{\phi}$. В области

высоких температур $n_{\phi} \sim T$, соответственно

$$\mu \sim T^{-3/2}$$
 (8.22)

для невырожденного газа, а для вырожденного

$$\mu \sim T^{-1}$$
. (8.23)

В области низких температур основное значение, как правило, имеет рассеяние на ионизированных примесных атомах. Рассеяние заключается в том, что ионы примеси отклоняют электроны, проходящие вблизи них, меняя направление скорости их движения. Впервые задачу о рассеянии заряженных частиц заряженными центрами решил Резерфорд.

Подвижность носителей заряда в области низких температур, обусловленная рассеянием на ионизированных примесях, пропорциональна $T^{3/2}$ для проводников с невырожденным газом и не зависит от T для проводников с вырожденным газом.

Рассмотрим теперь один из основных вопросов теории электропроводности твердых тел – процессы взаимодействия носителей с различными источниками рассеяния.

1. Рассеяние на примесях. Этот вид рассеяния носителей тока существен при низких температурах, когда колебания кристаллической решетки не ограничивают длину свободного пробега.

Пусть τ – время свободного пробега носителя до столкновения с атомом примеси. Величина, обратная τ , $W = \frac{1}{\tau}$ – вероятность столкновения

носителя с атомом примеси.

Вероятность столкновения носителей, обладающих энергией Ферми, на единице куба определится выражением:

$$\frac{1}{l} = V_F W. \tag{8.24}$$

При наличии нескольких механизмов рассеяния можно считать, что вероятности столкновений, вызванных различными механизмами, суммируются:

$$W = \sum W i.$$

По аналогии с правилом Матиссена вероятность столкновения на единице пути в решетке, имеющей примесь, равна сумме вероятности столкновений с атомами идеальной решетки и вероятности столкновения с атомами примеси:

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_{u\partial}} + \frac{1}{l_{ocm}}.$$

Попытаемся дать определение вероятности столкновения с атомом примеси, исходя из микроскопических представлений. Очевидно, источником рассеяния будет сфера радиусом *a*, где *a* – параметр решетки. Тогда площадь поперечного сечения этой сферы:

 $S = \pi a^2$.

Очевидно, что

$$\frac{1}{l_{ocm}} = N_{npum} \pi a^2,$$

где N_{npum} — количество атомов примеси. Если принять количество атомов в рассматриваемом веществе за N, то

$$N_{npum} = C_{npum}N,$$

где *С_{прим}* – концентрация примеси.

2. Рассеяние на тепловых колебаниях решетки. В области высоких температур основное значение имеет рассеяние электронов на тепловых колебаниях решетки (на фононах). Каждый атом решетки совершает беспорядочные колебания около положения равновесия (рис. 26), оставаясь в пределах сферы с радиусом, равным амплитуде колебаний *a*_т.

Тогда, приняв площадь поперечного сечения этой сферы $S = \pi a_r^2$, вероятность столкновения электрона на единице пути с источником рассеяния будет равна:

$$\frac{1}{l_{M\mathcal{I}}} = N\pi a_T^2,\tag{8.25}$$

где N – количество атомов в решетки.



Рис. 26 - Схема источника рассеяния при высоких температурах

Таким образом, для чистых металлов зависимость удельного сопротивления от температуры будет определяться различными факторами:

 $\rho_{U\!\mathcal{I}\!\mathcal{I}}^{(II)}(T) = \begin{cases}
P_{\mathcal{R}}\partial^*\left(\frac{T}{Q}\right), T \Box Q \\
P_{\mathcal{R}}\partial^*\left(\frac{T}{Q}\right), T \Box Q
\end{cases}$ (8.26)

В области высоких температур (выше температуры Дебая Q) удельное сопротивление $\rho \sim T$, в области низких температур (значительно ниже Q) удельное сопротивление $\rho \sim T^5$.

3. Электрон-электронное взаимодействие. При взаимодействии движущегося электрона с кристаллической решеткой происходит упругое соударение, в результате чего осуществляется передача импульса величиной

 $p = \frac{2\pi h}{a}$ от электрона к решетке.

При движении электронного газа в кристаллической решетке импульс не всегда сохраняется. Решетка принимает только квантованные порции импульса. Причем проекция импульса на ось кристалла должна быть целой величиной, кратной $p = \frac{2\pi h}{a}$. Это явление получило название явление переброса.

Вероятность столкновения между электронами на единицу пути определяется выражением:

$$\frac{1}{l_{I\!I\!I\!I}^e} = \frac{1}{a} \left(\frac{e^2}{m v_F} \right) \left(\frac{KT}{\varepsilon_F} \right).$$
(8.27)

Очевидно, что при $T \to 0, 1 \to \infty$ длина свободного пробега бесконечна и столкновения между электронами обнаружить нельзя.

4. *Рассеяние в тонких пленках*. В тонких пленках основной причиной рассеяния является поверхность кристалла.

Во многих случаях температурная зависимость сопротивления сплавов является значительно более сложной, чем та, которая вытекает из простой аддитивной закономерности $\rho = \rho_{HII}$ (T) + ρ_{OCT} В экспериментах при очень низких температурах на кривой зависимости удельного сопротивления от температуры обнаруживается минимум.

Высокое удельное сопротивление и низкая зависимость его от температуры у различных сплавов открыли для них широкие возможности практического применения для изготовления разнообразных проволочных и пленочных резисторов и переменных сопротивлений, используемых в различных областях техники.

8.4 Электропроводность металлов и сплавов

В металлах концентрация n электронного газа практически не зависит от температуры, поэтому зависимость удаленной электропроводности σ от температуры определяется температурной зависимостью подвижности μ_n электронов вырожденного электронного газа. При малой концентрации примесей в металле подвижность μ_n зависит от рассеяния электронов на колебаниях решетки.

В области высоких температур согласно (8.23) подвижность μ_n обратно пропорциональна *Т*. Подставив (8.23) в (8.10), получим:

$$\sigma \sim 1/T. \tag{8.28}$$

Удельное сопротивление

$$\rho = 1/\sigma = \alpha T, \tag{8.29}$$

где а – температурный коэффициент сопротивления.

В области низких температур концентрация фононного газа пропорциональна T^3 . При этом длина свободного пробега электронов в результате рассеяния их на фононах обратно пропорциональна кубу абсолютной температуры:

 $\lambda \sim T^{-3}$.

Данное соотношение не учитывает малое значение среднего импульса фононов по сравнению с импульсом электронов проводимости. Расчеты показывают, что эффективная длина свободного пробега электронов

$$\lambda_{\phi} = \nu\lambda \sim T^{-5}, \qquad (8.30)$$

отсюда

$$\sigma \sim T^{-5}, \, \rho \sim T^{-5}.$$
 (8.31)

При температурах близких, к абсолютному нулю, основное значение имеет рассеяние на примесных атомах. Подвижность μ_n в этом случае не зависит *T*, удельное сопротивление ρ приобретает постоянное значение, которое называется остаточным сопротивлением ρ_{ocm} .



Рис. 27 – Зависимость сопротивления чистых металлов и сплавов от температуры

Для бинарных сплавов подвижность носителей µ_{спл} определяется соотношением Нордгейма:

$$\mu_{cn\pi} \sim \left[P(1-P) \right]^{-1},$$
 (8.32)

где P и (1-P) – относительные доли металлов, образующих сплав.

С учетом (8.10) и равенства $\rho = 1/\sigma$, получим:

$$\rho_{cnn} = \beta \left[P \left(1 - P \right) \right], \tag{8.33}$$

где β – коэффициент пропорциональности.

При температуре отличной от абсолютного нуля, к остаточному сопротивлению ρ_{ocm} добавляется сопротивление ρ_m , обусловленное рассеянием на тепловых колебаниях решетки:

$$\rho = p_{ocm} + \rho_m. \tag{8.34}$$

Данное соотношение выражает правило Матиссена об аддитивности сопротивления. Как правило, ρ_{ocm} \square ρ_m .

8.5 Электропроводность сплавов

В металлических сплавах концентрация носителей не зависит от температуры. Поэтому температурная зависимость электропроводности сплавов целиком определяется зависимостью подвижности носителей от температуры. Рассмотрим этот вопрос более подробно.

Предположим, что в идеальной решетке металла, например меди, имеющей строго периодический потенциал (рис. 28, *a*), часть узлов беспорядочно замещена атомами другого элемента, например золота. Так как поле вблизи примесных атомов иное, чем вблизи основных атомов, то потенциал решетки не сохранится строго периодически (рис. 28, б). Он нарушается беспорядочно распределенными примесными атомами. Такое нарушение приводит, естественно, к рассеянию носителей и дополнительному электрическому сопротивлению.

Как показал Л. Нордгейм, в простейшем случае бинарных сплавов типа твердых растворов удельное сопротивление определяется следующим приближенным соотношением:

$$r_{cun} = r_0[p(1-p)],$$

где *р* – доля 2-го компонента.

Функция p(1-p) имеет максимум при p = 1, т. е. при равном содержании в сплаве обоих компонентов. В качестве примера на рис. 28, *а* показана зависимость удельного сопротивления сплавов меди с золотом от содержания золота. Штриховая кривая проходит через максимум, отвечающий 50% меди и золота в сплаве.



Рис.28 – Электропроводность сплавов (схема): а – потенциал идеальной решетки металла; б – потенциал двухкомпонентного твердого раствора

На рис. 28, *а* видно, что абсолютное значение r_{cun} значительно выше r_0 чистых компонентов. Так, при комнатной температуре $\rho_{Cu} = 1,7 \cdot 10^{-8}$ Ом·м, $\rho_{Au} = 1,56 \cdot 10^{-8}$ Ом·м, а $\rho_{50\% Cu+50\% Au} = 15 \cdot 10^{-8}$ Ом·м . Это вполне естественно, так как примеси вызывают значительно более сильное нарушение периодичности потенциала решетки, чем тепловые колебания атомов. Если, однако, сплавливаемые металлы при определенном соотношении компонентов образуют упорядоченные твердые растворы, то периодичность потенциала решетки восстанавливается (рис. 28, б), и сопротивление, обусловленное рассеянием на примесях, практически полностью исчезает. Для сплавов меди с золотом это имеет место при соотношении компонентов, отвечающем стехиометрическому составу Cu₃Au и CuAu (рис. 28, *a*, сплошные кривые).

8.6 Собственная и примесная проводимости полупроводников

Для собственного полупроводника удельная проводимость

$$\sigma_i = q\left(\mu_n n_i + \mu_p p_i\right) \tag{8.35}$$

или

$$\sigma_i = \sigma_o exp\left(-\frac{\Delta W_3}{2kT}\right). \tag{8.36}$$

Логарифмируя (8.36) получим:

$$\ln \sigma_i = \ln \sigma_o - \frac{\Delta W_3}{2kT}$$

Угловой коэффициент прямой равен $-\Delta W_3/2k$. По данному графику можно определить σ_0 и ширину запрещенной зоны ΔW_3 .



Рис. 29 – Температурная зависимость электропроводности собственных полупроводников

В полупроводнике концентрация носителей сильно зависит от температуры в отличие от металлов.

При конкретной температуре концентрация носителей заряда и проводимость собственных проводников определяется шириной их запрещенной зоны.

Температурная зависимость электропроводности невырожденных примесных полупроводниках, как и собственных, определяется в основном температурной зависимостью концентрации носителей.

8.7 Разогрев электронного газа. Эффекты сильного поля

Закон Джоуля-Ленца. Если ток создается электронами, движущимися со скоростью $V_{\mathcal{I}}$, то за единицу времени в единицу объема от электрического

лектронному газу передается энергия
$$\omega$$
, равная:
 $\omega = nv_{\square}F = nv_{\square}qE, F = qE$,

поля э

где *n* – концентрация электронов; *F* – сила, действующая на электрон со стороны поля.

Ввиду рассеяния электронов на дефектах решеток и беспорядочности их движения происходит увеличение энергии беспорядочного теплового движения электронного газа – его разогрев. При этом электроны все время обмениваются энергией с атомами решеток. Данный обмен происходит путем поглощения и испускания квантов энергии колебаний решетки –

фононов. В стационарном состоянии в единице объема выделяется следующее количество тепла:

$$\omega = n V_{\underline{A}} q E = q n \mu_n E^2 = \sigma E^2 = i E.$$
(8.37)

Соотношение (8.37) выражает закон Джоуля-Ленца в дифференциальном виде.

Эффект сильного поля. При малых E повышение температуры электронного газа ΔT относительно невелико $(\Delta T/T_0)$ 1, где T₀ – начальная температура, среднюю скорость теплового движения электронов можно считать неизменной и не зависящей от E, при этом выполняется закон Ома.

Если существенно возрастает напряженность *E*, то и температура электронного газа сильно повышается ($\Delta T \ge T_0$), что наступает отклонение от закона Ома (в полях с напряженностью 10^3 - 10^4 B/см).

Термоэлектронная ионизация Френкеля. Электрическое поле E, созданное в полупроводнике, действует на электрон, связанный с атомом примеси с силой F = -qE, снижая потенциальный барьер, который удерживает его около атома. В результате увеличивается вероятность перехода электрона в зону проводимости в области низких температур (до истощения примеси).

Ударная ионизация. При разогреве электронного газа в сильном поле *Е* электроны зоны проводимости могут приобрести энергию, достаточную для переброса других электронов из валентной зоны в зону проводимости.

Электростатическая ионизация. При высоких *E* возможен переход электронов из валентной зоны в зону проводимости путем туннельного просачивания через запрещенную зону. Этот эффект также называется эффектом Зиннера.

8.8 Явление сверхпроводимости

Голландский физик Г. Камерлинг-Оннес в 1911 г. обнаружил, что при температуре $\approx 4,2 \ K$ сопротивление ртути практически скачком падает до нуля (рис. 30).

Это явление было названо сверхпроводимостью и обнаружено у многих веществ – металлов, металлических сплавов и интерметаллических соединений, а также у ряда вырожденных полупроводников. При этом температура перехода в сверхпроводящее состояние, названная критической температурой перехода Т _{кр}, колеблется у разных вещество от сотых долей

градуса до $\approx 20 K$.

Исследования показали, что сверхпроводимость не характеризуется только падением до нуля электрического сопротивления проводника (идеальной проводимостью), но и проявлением идеального диамагнетизма.

Это свойство было открыто Мейсснером и Оксенфельдом в 1922 г. и характеризуется тем, что вещество в магнитном поле при переходе в сверхпроводящее состояние не «замораживает» находящееся в нем магнитное пол, а выталкивает его из своего объема (рис. 31).



Рис. 30 – Зависимость удельного электрического сопротивления некоторых металлов от температуры



Рис. 31 – Эффект Мейсснера-Оксенфельда (выталкивание магнитного поля из проводника при переходе в сверхпроводящее состояние)

При простом переходе вещества в магнитном поле в состояние с нулевым сопротивлением для металлов без примесей при приближении к абсолютному нулю их сопротивление должно было бы снижаться до нуля. Бездефектная решетка, имеющая строго периодический потенциал, не способна рассеивать свободные носители заряда. В этом случае поведение металлов не являлось бы сверхпроводимостью.

Идеальные диамагнетики обладают нулевой магнитной проницаемостью. Отсюда следует, что проявление сверхпроводимости характеризуется приобретением веществом двух различных фундаментальных свойств – идеальной проводимости и идеального диамагнетизма.

В 1957 г. Бардиным, Купером и Шриффером была создана теория явления сверхпроводимости, названная БКШ теорией. В основе её заложено

представление, что между электронами проводимости металла могут действовать силы притяжения, возникающие вследствие поляризации ими кристаллической решетки.

Между электронами помимо сил отталкивания могут возникать косвенные силы притяжения, т.к. электрон, движущийся в решетке, притягивает к себе положительно заряженные ионы, тем самым сближая их и создавая таким образом на пути своего движения избыточный положительный заряд поляризованной решетки, к которому могут быть притянуты другие электроны. Последнее обстоятельство эквивалентно возникновению силы притяжения между электронами, действующими через поляризованную решетку.

На основании изложенного, сверхпроводимость следует ожидать у металлов, имеющих сильное взаимодействие электронного газа с решеткой, приводящее к низкой электропроводности. Из чистых металлов лучшими сверхпроводниками оказались наиболее высокоомные – свинец, олово, ртуть и др. У высокопроводящих материалов (медь, серебро) с электронным газом в значительной мере свободным сверхпроводимость не наблюдается.

Силы притяжения между электронами превалируют над силами отталкивания в решетке и делают электронный газ в металлах неустойчивым к процессу образования из электронов электронных пар, которые называются куперовскими парами. Купер впервые показал, что образование таких пар является энергетически выгодным. Ввиду относительно слабой силы притяжения между электронами в куперовской паре спаренные электроны не «слипаются» друг с другом, а находятся на достаточно большом расстоянии один от другого. Это расстояние определяет размер пары ε и по порядку величины равно 10^{-6} м. При этом в кристалле в таком объеме находятся примерно 106 других электронов, объединенных в куперовские пары. Пары не могут двигаться независимо друг от друга, подобно электронам в нормальном металле, каждая пара взаимодействует со всеми остальными и движется согласовано (как бы в «унисон»), что приводит к строгой взаимной корреляции их движения. Согласно теории БКШ подобная корреляция достигается тогда, когда центры масс всех пар металла движутся с одинаковым импульсом. Пары образуют единый коллектив или так называемый конденсат, откуда вырвать отдельную пару тем труднее, чем больше их содержится в этом конденсате.

Следует отметить, что не все электроны зоны проводимости металла могут объединяться в куперовские пары, а только те из них, которые способны возбуждаться и изменять свои состояния. Такими являются лишь фермиевские электроны, ответственные за электропроводность металлов и составляющие 10^{-4} от общего числа электронов проводимости в металле.

Для перевода электронов из сверхпроводящего в нормальное состояние необходимо затратить энергию E_{c6} связи на разрыв пар. Этой энергией обеспечивается разрыв пар и означает, что нормальное состояние электронов в сверхпроводнике отделено от сверхпроводящего состояния энергетической щелью E_{c6} , напоминающей запрещенную зону полупроводника (рис. 32).

При возбуждении в проводнике электрического тока электроны, объединенные в куперовские пары, движутся как единый коллектив в одном и том же направлении с дрейфовой скоростью. Поведение таких пар существенно отличается от поведения обычных электронов, совершающих направленное движение. Нормальные электроны испытывают рассеяние на тепловых колебаниях и других дефектах решетки, что приводит к хаотизации их движения и обуславливает причину возникновения электрического сопротивления. Но куперовские пары, пока они не разорваны, рассеиваться на дефектах решеток не могут, т.к. выход любой из них из коллектива маловероятен. Пару можно вырвать из конденсата только разрушив её. Но число фононов при очень низких температурах, обладающих достаточной энергией, достаточно мало. Вследствие этого большинство куперовских пар сохраняется неразрушенным. При отсутствии рассеяния при своем направлении движения они обуславливают появление сверхпроводящего тока, который протекает через сверхпроводник без сопротивления. Ввиду слабости связи в куперовских парах совершенный конденсат, охватывающий все электроны, способные объединяться в пары, может существовать лишь при абсолютном нуле. С ростом температуры в кристалле появляются фононы, разрушающие пары и переводящие электроны в нормальное состояние.



Рис. 32 – Образование щели в энергетическом спектре электронов проводника при переходе его в сверхпроводящее состояние Нормальные электроны, действуя на пары, нарушают их импульсную упорядоченность и ослабляют корреляционную связь в конденсате, уменьшая

ширину энергетической щели E_{cB} (рис. 32). При критической температуре T_{kp} энергетическая щель сужается до нуля и сверхпроводящее состояние разрушается: все электроны становятся нормальными.

9. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

Получать, аккумулировать и отдавать тепло – свойство, присущее всем веществам, независимо от их природы и агрегатного состояния. В не меньшей степени это касается радиоэлектронного оборудования, имеющего элементную базу, выделяющую тепло при работе. Для стабилизации функционирования радиоэлектронных схем своевременный отвод выделяющегося тепла – одна из первоочередных задач.

В идеальном случае тепловое движение эквивалентно распространению в кристаллическом теле спектра упругих колебаний. Если бы на тело действовали упругие силы, то распространение волн происходило бы независимо друг от друга, скорость распространения тепла была бы равна скорости распространения звука и зависела бы только от модуля упругости материала. В действительности силы, действующие на атом, нелинейны.

Данный случай нельзя описать, основываясь лишь на одних представлениях об упругости материала. Одна волна превращается в несколько других с различными частицами. Такое взаимодействие волн резко уменьшает скорость теплопередачи.

В квантовой физике любая упругая волна рассматривается как некая частица – *фонон* (по аналогии с фотоном) с энергией

E = hv,

т.е. с такой же, как и энергия фотона.

Фононы взаимодействуют друг с другом, могут в реакции. При этом возможно как создание фононов с новыми свойствами, так и расщепление старых. Таким образом, можно сделать вывод, что наряду с ионами, образующими как бы ионный скелет кристалла, в нем существует еще один элемент симметрии – фононы, сообщающие процессу распределения тепла диффузионный характер.

Принято считать, что изобилие фононов образует фононовый газ и на данный газ распределяются законы идеальных газов, состоящих из молекул.

Пусть χ_d – элемент фононовой теплопроводности:

$$\chi_{\phi} = \frac{1}{3} \overline{\lambda vc},$$

где $\overline{\lambda}$ – длина свободного пробега фонона;

v – средняя скорость фонона;

с – удельная теплоемкость рассматриваемого материала.

При высоких температурах (выше 300 K) действует закон Дюлонга и Пти:

 $c = 3N_a \chi$,

где *N_a* – число Авогадро.

Для нахождения $\overline{\lambda}$ введем следующие величины:

µ – коэффициент рассеяния фононов (вероятность встреч);

S – эффективное поперечное сечение фононов;

n – число фононов в единице объема;

r – радиус фонона;

 g – коэффициент ангармоничности при разложении функции в ряд Тейлора.

Из простых физических соображений принимаем:

$$r = g;$$

 $\mu = nS = n\pi r^2 = n\pi g^2.$ (9.1)

Энергия фотонов есть теплоемкость по определению:

$$nhv = cT$$
,

где с – удельная теплоемкость.

$$n = \frac{cT}{hv} = \frac{3N_a kT}{hv};$$

$$c = \frac{\varepsilon(Q)}{T};$$

$$\mu = \frac{3n_a \chi \pi g^2}{hv} T.$$
(9.2)

Весьма существенно, что $\mu \sim T$, так как число фононов в единице объема пропорционально температуре, коэффициент рассеяния также линейно связан с температурой.

Из физических соображений:

$$\lambda \sim \frac{1}{\mu} = \frac{hv}{N_a \chi \pi g^2} \frac{1}{T}.$$
(9.3)

При высоких температурах, учитывая, что теплоемкость и средняя скорость фонона постоянны, получим с учетом вышеизложенного из (9.3) выражение (9.4), описывающее зависимость коэффициента фононовой теплопроводности от температуры для металлов и для полупроводников:

$$\chi_{\phi} \sim \frac{1}{T},\tag{9.4}$$

что подтверждается экспериментально (рис. 33, а).



Рис. 33 – Зависимость решеточной теплопроводности от температуры для сапфира (а) и меди (б)

В металлах основной вклад в теплопроводность дают свободные электроны. Введем коэффициент, связанный с вкладом свободных электронов: $\chi_{_{37}}$ – коэффициент электронной теплопроводности.

По закону Видемана-Франца отношение теплопроводности металлов к их электропроводности и температуре постоянны

$$\frac{\chi_{\Im \Pi}}{\sigma T} = const , \qquad (9.5)$$

где *о* – удельная электропроводность.

Величин σ обратно пропорциональна удельному электросопротивлению

$$\sigma = \frac{1}{\rho}$$
.

В свою очередь, удельное сопротивление слабо, но зависит от температуры:

$$\rho = \alpha \rho_0 T$$
,

где ρ_0 – удельное электросопротивление при T = 0 K.

$$\sigma \sim \frac{1}{T};$$

$$\chi_{3\pi} = \sigma T const \sim \frac{1}{T} T const;$$

$$\chi_{3\pi} \neq f(T).$$
(9.6)

Коэффициент электронной теплопроводности не зависит от температуры, что подтверждается экспериментально. При высоких температурах (~80-100 К) теплопроводность меди практически не зависит от температуры (рис. 33, б).

Тогда полный коэффициент теплопроводности металла будет состоять из двух слагаемых – фононной и электронной теплопроводности:

$$\chi = \chi_{\Phi} + \chi_{\Im \Pi}. \tag{9.7}$$

10 КОНТАКТНЫЕ И ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ

10.1 Поверхностные явления

При сближении атомов и образовании из них кристаллов потенциальные барьеры для электронов, которые отделяют соседние атомы, понижаются и становятся более узкими. При этом потенциальный барьер у поверхности кристалла остается высоким, как и у изолированных атомов. Соответственно электроны в кристалле находятся как бы в потенциальной яме, выход из которой требует затраты работы по преодолению силы, действующей на них со стороны кристалла.

В электронных лампах применяются термоэлектронные катоды, нагревание которых обеспечивается за счет протекания переменного или постоянного тока.

Плотность эмиссионного тока Je – величина тока эмиссии с одного квадратного сантиметра поверхности катода – характеризует эмиссионную способность катода и определяется выражением:

$$j_e = BT^2 \exp\left(\frac{-\Delta W}{kT}\right),\tag{10.1}$$

 $B = (55...150) \frac{A}{cm^2 \cdot K^2}$ – постоянная термоэлектронной эмиссии, значение которой зависит от материала катода; T – абсолютная температура катода, K; ΔW – работа выхода из катода, Дж; k – постоянная Больцмана, Дж/K.

Если у поверхности катода существует внешнее ускоряющее электрическое поле (что имеет место в некоторых режимах работы

электронных ламп), то величина ΔW уменьшается, а плотность тока эмиссии j'_{e} возрастает:

$$j'_e = j_e \exp\left(\frac{0.45\sqrt{E}}{T}\right),\tag{10.2}$$

где ^{Je} – плотность тока эмиссии в отсутствии ускоряющего электрического поля; ^E – напряженность внешнего электрического поля. Эффект увеличения ^je при наличии внешнего ускоряющегося поля называется эффектом Шоттки.

Большое влияние на работу выхода оказывают мономолекулярные абсорбционные слои. На рис. 34 показан одноатомный слой цезия, покрывающий поверхность вольфрама.



Рис. 34 – Образование двойного электрического слоя при нанесении пленки цезия на поверхность вольфрама (а) и при адсорбции атомов кислорода на поверхности вольфрама (б)

Внешний валентный электрон цезия, являющегося щелочным металлом, связан с ядром значительно слабее, чем валентные электроны в вольфраме. Поэтому при адсорбции атомы цезия отдают вольфраму свои валентные электроны и превращаются в положительно заряженные ионы. Возникающий двойной электрический слой помогает выходу электронов из вольфрама (рис. 34, а), а работа выхода электронов из вольфрама уменьшается с 4,52 до 1,36 эВ.

Подобно цезию действуют одноатомные слои других электроположительных металлов – бария, цезия, тория и т.д., что находит широкое применение при изготовлении катодов электронных ламп, фотокатодов и т.д.

Кислород, адсорбированный поверхностью металла, действует совершенно иначе, т.к. связь валентных электронов в атоме кислорода значительно сильнее, чем в металлах (рис. 34, б). В результате при адсорбции

атом кислорода не отдает, а, наоборот, получает от металла два электрона и превращается в отрицательно заряженный ион. Внешняя сторона двойного электрического слоя при этом оказывается заряженной отрицательно. Поэтому электрическое поле двойного слоя тормозит выход электронов из металла и работа выхода увеличивается.

Холодная эмиссия электронов. Внешнее ускоряющее поле вызывает не только снижение энергетического барьера, но и уменьшает его толщину, что

при достаточно высокой напряженности поля ($E > 10^9$ В/м) позволяет электронам просачиваться и выходить из твердого тела (туннелировать). Это явление названо холодной эмиссией электронов. Плотность тока при этом экспоненциально растет с увеличением напряженности ускоряющего поля

$$j = cE^2 \exp(-\alpha / E), \qquad (10.3)$$

где *с*, ^{*α*} – постоянные, характеризующие потенциальный барьер.

10.2 Контактная разность потенциалов

Два металлических проводника приведены в контакт (рис. 35). В каждом проводнике, находящимся в изолированном состоянии, электронный газ характеризуется электрохимическими потенциалами μ_1 и μ_2 , а также работами выхода χ_1 и χ_2 . На рис. 35, а в зоне проводимости проводника 2 заняты все состояния вплоть до уровня Ферми μ_2 , а напротив этих состояний располагаются занятые уровня зоны проводимости проводника *l*. Поэтому при абсолютном нуле электроны из проводника 2 не могут перейти в проводник *l*. При T > 0 *K* электроны из проводника 2, термически возбужденные на уровни, расположенные выше μ_1 , могут переходить в проводник *l*, но ввиду малого количества таких электронов при обычных температурах набор n_{21} будет небольшим. В проводнике *l* зона проводимости тоже укомплектована вплоть до

в проводнике *1* зона проводимости тоже укомплектована вплоть до уровня Ферми μ_1 , но ввиду $\chi_1 < \chi_2$, против занятых состояний этого проводника выше уровня Ферми μ_2 расположены свободные уровни зоны проводимости проводника *2*. При наличии контакта даже при T = 0 *К* электроны с занятых уровней проводника *1* будут переходить на свободные уровни проводника *2*, формируя поток n_{12} , который первоначально значительно выше потока n_{21} .

В результате потери электронов проводник *1* заряжается положительно, а проводник *2*, получив дополнительно электроны, заряжается отрицательно. Это приводит к смещению друг относительно друга энергетических уровней

проводников *1* и 2. Причем в проводнике *1*, заряженном положительно, все уровни опускаются вниз, а в проводнике 2, заряженном отрицательно, все уровни поднимаются вверх относительно своих положений до перераспределения зарядов в проводниках.



Рис. 35 – Возникновение контактной разности потенциалов между двумя металлами

При переводе электрона с нулевого уровня O_1 металла I на нулевой уровень O_2 металла 2, который находится под отрицательным потенциалом U, относительно металла I необходимо совершить работу, численно равную qU, которая переходит в потенциальную энергию электрона. Поэтому потенциальная энергия электрона, находящегося на нулевом уровне отрицательно заряженного проводника, будет на $\Delta W = qU$ больше положительно заряженного проводника. Отсюда следует, что нулевой уровень проводника 2 располагается на $\Delta W = qU$ выше нулевого уровня положительно заряженного проводника.

Уровень Ферми в проводнике $l \mu_1$ понижается, а в проводнике $2 \mu_2$ повышается до установления одного уровня, когда они окажутся на одной линии. Причина, по которой происходит перетекание электронов из проводника l в проводник 2, исчезает. Напротив заполненных уровней проводника l располагаются заполненные уровни проводника 2. В установившемся равновесии между проводниками l и 2 разность потенциалов между ними

$$\varphi_{\kappa} = \frac{1}{q} (\chi_2 - \chi_1) \tag{10.4}$$

называется контактной разностью потенциалов.

Она зависит от разности работ выхода электронов из контактирующих проводников и создает для электронов, переходящих в проводник с большей

работой выхода, энергетический барьер величиной $e^{\varphi_{\kappa}}$.

Контактные явления лежат в основе работы многих полупроводниковых и других твердотельных приборов и устройств. Приведенный результат справедлив для любых способов обмена двух материалов электронами.

В проводнике, содержащем большое количество электронов, электрический ток в отсутствие внешнего поля не возникает. Взаимодействие электронов с дефектами решеток (тепловые колебания решеток и примесные атомы) приводит к рассеянию электронов и установлению беспорядочного движению их в проводнике и, соответственно, к установлению равновесия электронного газа. Ток в проводнике возникает при приложении к нему электрического поля.

Токи в полупроводнике. Дрейфовый ток, его плотность:

$$I_{\partial p} = I_{n\,\partial p} + I_{p\,\partial p} = eE\left(n\mu_n + p\mu_p\right),\tag{10.5}$$

где *I_{n др}* – электронная составляющая дрейфового тока;

*I*_{*p др*} – дырочная составляющая дырочного тока;

е – заряд электрона;

 μ_n , μ_p – подвижности электронов и дырок;

Е – напряженность электрического поля.

При наличии градиента концентрации в полупроводнике возникает диффузионный ток:

$$I_{n \partial u \phi} = e D_n \frac{dn}{dx};$$

$$I_{p \partial u \phi} = -e D_p \frac{dp}{dx};$$

$$I_{\partial u \phi} = I_{n \partial u \phi} + I_{p \partial u \phi} = e D_n \frac{dn}{dx} - e D_p \frac{dp}{dx};$$

$$I = I_{\partial p} + I_{\partial u \phi}$$
(10.6)
(10.7)

Контактные явления на примере образования p-n-перехода. Сплавной pn-переход.

Контактная разность потенциалов:

$$\varphi_k = \frac{kT}{e} \ln \frac{n_n}{n_p} = \frac{kT}{e} \ln \frac{p_p}{p_n}.$$
На рис. 36 показана энергетическая схема вольфрама и кривая распределения электронов по энергиям при T = 0 K (непрерывная линия) и при высокой температуре (штриховая линия). Из рис. 36 видно, что при повышении температуры "хвост" кривой распределения заходит за нулевой уровень потенциальной ямы, что свидетельствует о появлении некоторого числа электронов, обладающих кинетической энергией, превышающей высоту потенциального барьера.

Такие электроны способны выходить из металла ("испаряться"). Поэтому нагретый металл испускает электроны. Это явление получило название термоэлектронной эмиссии. В заметной степени оно наблюдается лишь при высокой температуре, когда число термически возбужденных электронов, способных выйти из металла, оказывается достаточно большим.

Поместив вблизи нагретого металла проводник и создав между ним и металлом поле, отсасывающее электроны, можно получить термоэлектронный ток. Подсчитаем плотность этого тока, предполагая, что все эмитированные электроны по внешней цепи возвращаются к поверхности, так что электрод, испускающий электроны, остается в целом электронейтральным.



Рис. 36 – Энергетическая схема вольфрама и кривые распределения электронов по энергиям *n*(*E*) при *T* = 0 *K* (непрерывная кривая) и при высокой температуре (штриховая кривая)

Число электронов в единице объема металла, составляющие импульса которых лежат в интервале от p_x до p_x+dp_x , от p_y до p_y+dp_y , от p_z до p_z+dp_z , равно:

$$= \frac{n(p_x, p_y, p_z)dp_xdp_ydp_z}{h^3} = \frac{2dp_xdp_ydp_z}{\exp[(E - \mu/kT)] + 1},$$
(10.8)

где $\frac{2dp_x dp_y dp_z}{h^3}$ – число квантовых состояний (с учетом спина) в

элементе фазового объема $dp_x dp_y dp_z$;

 $(\exp[(E - \mu / kT)] + 1)^{-1}$ – функция Ферми–Дирака, определяющая вероятность заполнения этих состояний электронами.

Выделим на поверхности металла единичную площадку и построим на ней, как на основании, прямоугольный параллелепипед с боковым ребром v_z (рис. 37). Число электронов в параллелепипеде, составляющие импульса которых заключены в указанных выше пределах, равно:

$$dN = v_z n(p_x, p_y, p_z) dp_x dp_y dp_z =$$

$$= \frac{2v_z dp dp_y dp_z}{h^3 \{ \exp[(E - \mu/kT)] + 1 \}}.$$
(10.9)

Из этих электронов покинуть металл могут лишь те, у которых кинетическая энергия в направлении v_z равная будет не меньше высоты барьера $\chi_{_{6H}}$, т.е. те, у которых импульс в направлении оси v_z не меньше, чем $p_{z0} = \sqrt{2m_n\chi_{_{6H}}}$.



Рис. 37 - К расчету плотности термоэлектронного тока

Интегрируя (10.9) по p_x и p_y в пределах от $-\infty$ до $+\infty$ (пределы, в которых могут теоретически меняться p_x и p_y) и по p_z в пределах от p_{z0} до ∞ , получим число электронов, ежесекундно покидающих единичную площадку нагретого металла:

$$N = \frac{2}{h^3 m_n} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{p_{z0}}^{\infty} \frac{p_z dp_x dp_y dp_z}{\exp[(E - \mu)/kT] + 1}.$$
 (10.10)

Вычисление этого интеграла для случая, реализуемого обычно на практике, когда $\chi_0 \square kT$, приводит к следующему результату:

$$N = 2\left(\frac{2\pi m_n k^2}{h^3}\right) T^2 \exp\left(-\frac{\chi_{6H} - \mu}{kT}\right).$$
(10.11)

Умножив N на заряд электрона q, получим плотность тока:

$$j = AT \exp\left(-\frac{\chi_{\theta H} - \mu}{kT}\right) = AT \exp\left(-\frac{\chi_0}{kT}\right), \qquad (10.12)$$

Γде $A = 4\pi m_n k^2 q / h^3 = 1,2 \cdot 10^6 A / M^2 \cdot K^2$.

Соотношение (10.8) называют формулой Ричардсона-Дешмена, а коэффициент А – постоянной Ричардсона.

Логарифмируя (10.8), получаем:

$$\ln \frac{j}{T^2} = \ln A - \frac{\chi_0}{k} \frac{1}{T}.$$
 (10.13)

График этой функции изображен на рис. 38. Экстраполируя его до пересечения с осью ординат, можно найти постоянную Ричардсона *A*.

Если между эмиттером (термокатодом К) и коллектором (анодом А) создать разность потенциалов V, препятствующую движению электронов к коллектору (рис. 39, а), то на коллектор смогут попасть лишь те электроны, которые вылетели из эмиттера с запасом кинетической энергии, не меньшим -qV(V < 0). Для этого их энергия в эмиттере должна быть не меньше $\chi_{\rm 6H} - qV$. Заменив в выражении (10.12) $\chi_{\rm 6H}$ на $\chi_{\rm 6H} - qV$, получим следующее соотношение для тока, текущего в цепи:

$$I = AST^{2} \exp\left(-\frac{\chi_{_{\theta H}} - qV - \mu}{kT}\right) = I_{0} \exp\left(\frac{qV}{kT}\right), \qquad (10.14)$$

где *S* – площадь поверхности, эмитирующей электроны; *I*₀ – ток эмиссии. Логарифмируя это выражение, находим:

$$\ln I = \ln I_0 + \frac{qV}{kT}.$$
 (10.15)



Рис. 38 – Зависимость плотности тока термоэлектронной эмиссии от температуры



Рис. 39 – Направление внешнего поля и силы, действующей на электрон, при задерживающем (а) и ускоряющем (б) напряжении на аноде

На рис. 40 показан график зависимости $\ln I$ от V. Для V < 0 он представляет собой прямую, отсекающую на оси ординат (V = 0) отрезок $\ln I_0$.



Рис. 40 - Зависимость тока от напряжения на аноде

При положительном потенциале на коллекторе все электроны, покидающие эмиттер, попадают на коллектор. Поэтому ток в цепи меняться не должен, оставаясь равным току насыщения I_0 (штриховая кривая на рис. 40).

10.4 Эффект Шоттки

При V > 0 ускоряющее поле у эмиттирующей поверхности, действуя на электрон с силой $F = -qV_{en}$, совершает на пути x работу $F_x = -qV_x$ и тем самым уменьшает потенциальную энергию электрона на $U_{en} = q\zeta x$. На рис. 41, а показана зависимость от x потенциальной энергии электрона V(штрихпунктирная прямая). Из рис. 41, а видно, что ускоряющее поле,

действующее у эмитирующей поверхности, понижает потенциальный барьер на $\Delta \chi$. Расчет показывает, что для полей не слишком высокой напряженности:

$$\Box \chi = \sqrt{\frac{q_3 \xi}{4\pi\varepsilon_0}} \infty \sqrt{\xi}.$$
 (10.16)

Понижение потенциального барьера под действием внешнего поля называется эффектом Шоттки. Он приводит к тому, что с ростом положительного потенциала на коллекторе ток эмиссии не сохраняется постоянным (I_0) , а несколько увеличивается (непрерывная кривая, рис. 40).

Холодная эмиссия электронов. Внешнее ускоряющее поле вызывает не только понижение потенциального барьера, но и уменьшение его толщины d (рис. 41, б), что в полях достаточно высокой напряженности (>10⁹ В/м) делает такой барьер достаточно прозрачным для туннельного просачивания электронов и выхода их из твердого тела. Это явление получило название холодной эмиссии электронов.



Рис. 41 – Влияние внешнего поля на высоту и форму потенциального барьера на границе металл-вакуум при эффекте Шоттки (а) и холодной эмиссии (б)

77

Рассмотрим контакт металла с полупроводником.

Пусть металл M, имеющий работу выхода χ_M , приведен в контакт с электронным полупроводником П, имеющим работу выхода χ_{Π} .

Если $\chi_M > \chi_\Pi$, то электроны будут перетекать из полупроводника в металл до тех пор, пока химические потенциалы E_M и E_Π выровняются, и не установится равновесие. Между металлом и полупроводником возникает контактная разность потенциалов V_κ , имеющая примерно тот же порядок величины, что и в случае контакта двух металлов (единицы вольт). Для получения такой разности потенциалов необходимо, чтобы из полупроводника в металл перетекло примерно такое же число электронов, как и при контакте двух металлов.

Таким образом, при контакте металлов с полупроводником выравнивание химических потенциалов может происходить только путем перехода на контактную поверхность металла электронов из граничного слоя полупроводника значительной толщины. Ионизированные атомы примеси, остающиеся в этом слое, образуют неподвижный объемный положительный заряд. Так как этот слой практически лишен свободных электронов, а его толщина, как правило, значительно превосходит их длину свободного пробега, то он обладает очень большим сопротивлением. Поэтому его называют запорным слоем.

На рис. 42, а показаны энергетические схемы металла и электронного полупроводника до приведения их в контакт.

Работа выхода из металла больше, чем из полупроводника. После установления контакта и наступления равновесия в полупроводнике возникает неподвижный объемный положительный заряд на протяжении толщины запорного слоя (рис. 42, б). При отсутствии контактного поля энергетические уровни в металле и в полупроводнике изображаются горизонтальными прямыми. Этим выражается то, что энергия электрона, находящегося на данном уровне, например, на дне зоны проводимости, во всех точках полупроводника одна и та же. Она не зависит от координат электронов. При наличии контактной разности потенциалов картина меняется: в слое, в котором сосредоточено контактное поле, на электрон действует сила, стремящаяся вытолкнуть его из слоя. Преодоление этой силы требует работы, которая переходит в потенциальную энергию электрона. Поэтому по мере перемещения электрона внутри слоя объемного заряда его потенциальная энергия увеличивается, достигая максимального значения на границе полупроводника. Это и означает, что контактное поле вызывает изгиб энергетических зон полупроводника.



Рис. 42 – Энергетические схемы металла и полупроводника до приведения их в контакт (*a*) и после установления контакта (б)

Потенциальный барьер, возникающий в выпрямляющем контакте полупроводника с металлом, называют часто барьером Шоттки. В последние годы на его основе разрабатываются диоды Шоттки (рис. 43), обладающие исключительно малым временем установления тока при переключении их с прямого направления на обратное.

В современных диодах оно доведено до ≈10⁻¹¹ с. Это позволяет с успехом применять их в импульсных схемах радиоэлектроники, вычислительной техники и автоматики, от которых требуется высокое быстродействие.

Невыпрямляющий (антизапорный) контакт полупроводника и металла используют для устройства омических контактов, посредством которых полупроводниковое устройство подключают к электрической цепи.



Рис. 43 – Схема диода Шоттки

10.6 Равновесное состояние *p-n*-перехода

Пусть внутренней границей раздела двух областей полупроводника с различным типом проводимости является плоскость *MM* (рис. 44, а): слева от нее находится полупроводник *p*-типа, например *p*-германий с концентрацией акцепторов N_a ; справа – полупроводник *n*-типа (*n*-германий с концентрацией доноров N_a). Для простоты будем считать, что $N_a = N_a$ и равно, например, 10^{22} м⁻³. На рис. 44, б показано изменение концентрации акцепторных и донорных атомов при перемещении вдоль оси *X*, перпендикулярной плоскости *MM*. В точке *O*, лежащей в этой плоскости, N_a скачкообразно падает до нуля, N_a скачкообразно увеличивается от нуля до N_a .

Для *n*-области основными носителями являются электроны, для *p*области – дырки. Основные носители возникают почти целиком вследствие ионизации донорных и акцепторных примесей. При не слишком низких температурах эти примеси ионизированы практически полностью, вследствие чего концентрацию электронов в *n*-области (n_{n0}) можно считать практически равной концентрации донорных атомов $N_{\rm A}$ ($n_{n0} \approx N_{\rm A}$), а концентрацию дырок в *p*-области (p_{p0}) можно считать равной концентрации акцепторных атомов $N_{\rm a}$ ($p_{p0} \approx N_{\rm a}$).

Помимо основных носителей эти области содержат неосновные носители: *n*-область – дырки (p_{p0}), *p*-область – электроны (n_{n0}). Их концентрацию можно определить, пользуясь законом действующих масс:

$$n_{n0}p_{p0} = p_{p0}n_{n0} = n_i^2$$

где *n_i* – концентрация носителей в собственном полупроводнике.

При $n_{n0} = p_{p0} = 10^{22} \,\mathrm{m}^{-3}$ и $n_i = 10^{19} \,\mathrm{m}^{-3}$ получаем $p_{p0} = n_{p0} = 10^{16} \,\mathrm{m}^{-3}$.

Как видим, концентрация дырок в *p*-области на шесть порядков выше концентрации их в *n*-области; точно так же концентрация электронов в *n*области на шесть порядков выше концентрации их в *p*-области. Такое

различие в концентрации однотипных носителей в контактирующих областях полупроводника приводит к возникновению диффузионных потоков электронов из n-области в p-область и диффузионного потока дырок из p- в *п*-область. При этом область *n*, из которой диффундировали электроны, заряжается положительно, а область *p*, из которой диффундировали дырки, отрицательно. Это заряжение приводит соответственно к понижению всех энергетических уровней, в том числе и уровня Ферми в *n*-области и повышению их в *p*-области. Перетекание электронов справа налево и дырок слева направо происходит до тех пор, пока постепенно поднимающийся уровень Ферми в *p*-области (μ_p) не установится на одной высоте с постепенно опускающимся уровнем Ферми в *n*-области (µ_n). С установлением этих уровней на одной высоте между п- и р-областями устанавливается равновесие, при котором поток электронов из n- в p-область (n_{n-p}) уравновешивается потоком электронов из *p*- в *n*-область (n_{p-n}) , а поток дырок из *p*- в *n*-область (*p*_{*p*-*n*}) уравновешивается потоком дырок из *n*- в *p*-область (p_{n-p}) :

$$n_{n-p} = n_{p-n};$$
$$p_{p-n} = p_{n-p};$$



Рис. 44. Равновесное состояние *p*-*n*-перехода

Уход электронов из приконтактного слоя *n*-области приводит к возникновению в этом слое неподвижного положительного объемного заряда ионизированных атомов донорной примеси (рис. 44, в); обозначим толщину этого слоя через d_n . Уход дырок из приконтактного слоя *p*-области вызывает появление в этом слое неподвижного отрицательного объемного заряда, локализованного на атомах акцепторной примеси; обозначим толщину этого слоя через d_p .

Между этими слоями возникает контактная разность потенциалов V_k , создающая в *p*-*n*-переходе потенциальный барьер φ_0 , препятствующий переходу электронов из *n*- в *p*-область и дырок из *p*- в *n*-область. Как показывает расчет:

$$\varphi_0 = \frac{kT}{e} ln \frac{n_{n0}}{n_{p0}} = \frac{kT}{e} ln \frac{p_{p0}}{p_{n0}}.$$
(10.17)

Из (10.17) видно, что φ_0 тем выше, чем больше отношение концентрации основных носителей в данной области полупроводника к концентрации этих носителей в другой области полупроводника, в которой они являются неосновными.

При $n_{n0} = 10^{22} \text{ м}^{-3}$, $n_{p0} = 10^{16} \text{ м}^{-3}$ и $T = 300 \text{ K} \ \varphi_0 \approx 0.45 \text{ эB}$.

На рис. 44, г показана энергетическая схема p- и n-областей до установления между ними соприкосновения. Из рис. 44, г видно, что μ_n лежит выше μ_p .

На рис. 44, д приведена энергетическая схема этих областей после установления между ними равновесия. Уровни Ферми μ_n и μ_p расположились на одной высоте, между областями *p* и *n* возник слой объемного заряда, простирающийся в *n*-область на глубину d_n и в *p*-область на глубину d_p , и потенциальный барьер $\varphi_0 = qV_k$. Из сравнения рис. 44, г, д легко видеть, что

$$\varphi_0 = \mu_n - \mu_p$$

Толщина слоя объемного заряда $d = d_n + d_p$, как и в случае контакта полупроводника с металлом, определяется высотой потенциального барьера φ_0 и концентрацией основных носителей n_{n0} и p_{p0} :

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon \varphi_0(n_{n0} + p_{p0})}{q^2 n_{n0} p_{p0}}} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon V_k(n_{n0} + p_{p0})}{q^2 n_{n0} p_{p0}}}$$

10.7 Внутренний фотоэффект

Эффекты поглощения света в полупроводниках находят практическое применение для создания модуляторов световых потоков, фотоприемников и преобразователей световой энергии в электрическую. Для модуляции

световых потоков можно использовать зависимость коэффициента поглощения у края собственной полосы от давления, внешнего электрического поля и концентрации свободных носителей заряда или зависимость поглощения света свободными носителями от их концентрации.

При собственном и примесном поглощениях возникают избыточные свободные носители заряда, приводящие к увеличению проводимости полупроводника. Процесс внутреннего освобождения электронов под действием света называется внутренним фотоэффектом. Добавочная проводимость, приобретаемая полупроводником при облучении светом, называется фотопроводимостью. Основная же проводимость, обусловленная тепловым возбуждением свободных носителей заряда, называется тепловой проводимостью. Приборы, предназначенные для регистрации светового излучения по величине фотопроводимости, называются фоторезисторами. На рис. 45 показаны устройство фоторезистора и схема его включения. Чувствительный элемент фоторезистора представляет собой брусок или пленку монокристаллического или поликристаллического полупроводника с двумя омическими контактами. Он подключается к источнику смещения V0 через нагрузочное сопротивление R_н. Толщина чувствительного элемента должна быть достаточно большой, чтобы в нем поглощался практически весь свет $W_0(1-r)$, прошедший через освещенную поверхность (W_0 – мощность падающего света; r – коэффициент отражения поверхности). Это требование легко выполнить для собственных фоторезисторов и часто трудно выполнить для примесных. Если оно выполнено, то число носителей (или пар носителей при собственном поглощении), генерируемых светом в единицу времени в чувствительном элементе при $\lambda < \lambda_{max}$, будет равно:

$$G = \frac{N_0(1-r)\eta}{\hbar\omega},\tag{10.18}$$

где η – квантовый выход внутреннего фотоэффекта, равный числу носителей (пар носителей), рождаемых в среднем каждым поглощенным фотоном. Он может быть больше 1, если при поглощении одного фотона высокой энергии рождается две и более электронно-дырочные пары, и меньше 1, если часть фотонов поглощается свободными носителями заряда.

Под действием напряжения V, приложенного к фоторезистору, созданные светом носители заряда совершают дрейф и создают в цепи ток, который называют фототоком I_{ϕ} . Его легко определить из следующих соображений. Каждый носитель заряда за время своей жизни проходит через резистор τ/t_{np} раз, где t_{np} – время пролета, или, точнее, время дрейфа носителя через резистор. Оно равно длине чувствительного элемента резистора, деленной на скорость дрейфа V_{α} :

$$t_{np} = \frac{1}{V_{\partial}} = \frac{1}{u\xi},$$
(10.19)

где u – подвижность носителей. Сила фототока I_{ϕ} равна числу носителей G, ежесекундно генерируемых в полупроводнике под действием света, умноженному на τ/t_{np} и заряд электрона q:

$$I_{\phi} = \frac{qG\tau}{t_{np}} = \frac{qG\tau V}{l^2} = \frac{q\Delta N uV}{l^2},$$
(10.20)

где $\Delta N = G\tau$ – число избыточных носителей в фоторезисторе. Если свет генерирует пару носителей, то вместо *и* следует писать сумму подвижностей $u_n + u_p$.



Рис. 45 – Устройство фоторезистора и схема его включения.

Подставив в (10.20) *G* из (10.18), получим:

$$I_{\phi} = \frac{W_0(1-r)q\eta\tau uV}{\hbar\omega l^2} = \frac{W_0(1-r)q}{hcl^2}\eta\tau u\lambda V.$$
 (10.21)

Отношение

$$\frac{I_{\phi}}{W_0} = \frac{q(1-r)}{hcl^2} \eta \tau u \lambda V \tag{10.22}$$

характеризует чувствительность фоторезистора. Она прямо пропорциональна длине волны падающего света (вплоть до λ_{max}), приложенному напряжению V, времени жизни носителей τ и их подвижности u, и обратно пропорциональна квадрату длины чувствительного элемента фоторезистора.

Время жизни носителей τ определяет не только чувствительность, но и инерционность фоторезистора: чем больше τ , тем выше чувствительность, но тем выше и инерционность прибора. Действительно, рассмотрим, например, характер спада фотопроводимости фоторезистора после выключения источника света (рис. 46). Вследствие протекания процесса рекомбинации концентрация избыточных носителей убывает по закону:

$$\sigma_{\phi} = \sigma_{\phi 0} e^{\frac{-t}{\tau}}, \qquad (10.23)$$

где
 σ_{φ} – стационарная (установившаяся) фотопроводимость в условиях постоянной освещенности фоторезистора.



Рис. 46 – Кривая нарастания фотопроводимости при облучении полупроводника светом и спада фотопроводимости после прекращения облучения

Характер нарастания фотопроводимости полупроводника после включения светового импульса (кривая 0*B*), описываемого следующим уравнением:

$$\sigma_{\phi} = \sigma_{\phi 0} \left(1 - e^{\frac{-t}{\tau}} \right). \tag{10.24}$$

Следует указать, что в поликристаллических фоторезисторах чувствительность определяется часто процессами на границах монокристаллических зерен, а не процессами в объеме полупроводника; в этом случае соотношение (10.22) неприменимо.

10.7.1 Экситонные состояния

При возбуждении фотопроводимости электроны из валентной зоны перебрасываются в зону проводимости. Однако возможно и иное течение процесса, когда возбужденный электрон не разрывает связи с дыркой, оставаясь связанным с ней в водородоподобном состоянии. Энергия образования такого возбужденного состояния, названного Я. И. Френкелем экситоном, меньше ширины запрещенной зоны, поскольку последняя есть не что иное как минимальная энергия, требуемая для создания разрешенной ширины. Экситон может перемещаться в кристалле, но фотопроводимость

при этом не возникает, так как электрон и дырка движутся вместе. При столкновении с фононами, примесными атомами и другими дефектами решетки экситоны или рекомбинируют, или "разрываются". В первом случае возбужденные атомы переходят в нормальное состояние, а энергия возбуждения передается решетке или излучается в виде квантов света; во втором случае образуется пара носителей – электрон и дырка, которые обусловливают повышение электропроводности полупроводника.

10.8 Эффект Ганна

В 1963 г. Дж. Ганн, изучая поведение арсенида галлия в области сильных полей, обнаружил новое явление, заключающееся в возникновении колебаний тока с частотой $10^9 - 10^{10}$ Гц при приложении к кристаллу постоянного электрического поля. Этот эффект Ганна наблюдали позднее в фосфиде галлия, фосфиде индия и ряде других полупроводников. Величиной, ответственной за эффект Ганна, является подвижность носителей. Он не появляется, когда кристалл разогревается джоулевым теплом. Рассмотрим механизм возникновения эффекта. Многие полупроводники, в частности арсенид галлия, имеют достаточно сложную зонную структуру. Так, зона проводимости арсенида галлия кроме минимума E(k) при k = 0 имеет второй минимум при $k \approx 0.8k_0$, где k_0 – волновой вектор, соответствующий границе зоны Бриллюэна. Схематически зонная структура GaAs изображена на рис. 47.

Второй минимум (Б) расположен выше первого (А) на 0,36 эВ. Поскольку кривизна зависимости E(k) в области этих двух экстремумов различна, различны и эффективные массы электронов, находящихся в этих минимумах. В области минимума А $m_A^* \approx 0,07$ (т.е. электроны легкие). В области минимума Б $m_B^* \approx 1,2m$ (т.е. электроны тяжелые). Подвижность легких электронов составляет $\mu_A \approx (400-800) \text{ см}^2/(\text{B}\cdot\text{c})$, подвижность тяжелых $\mu_B \approx (100-200) \text{ см}^2/(\text{B}\cdot\text{c})$.

Изменение подвижности носителей в сильных полях связано с переходом электронов из минимума А в минимум Б. При слабых полях электроны находятся в термодинамическом равновесии с решеткой. Поскольку энергия электронов в обычных условиях много меньше расстояния (по шкале энергий) между минимумами $k_{B}T \square \Delta E$, практически все электроны занимают уровни в минимуме А, т.е. $n_{A} = n_{0}$. Плотность тока в этом случае:

$$j_1 = e n_0 \mu_A \xi \; .$$



Рис. 47 – Зонная структура арсенида галлия: *I* – зона проводимости; *2* – валентная зона

С ростом напряженности поля энергия электронов повышается и при некотором критическом значении ξ становится возможным их переход из минимума А в минимум Б, где подвижность значительно ниже. Плотность тока при этом падает и в конечном итоге становится равной

 $j_2 = e n_0 \mu_E \xi$.

В результате на зависимости $j(\xi)$ появляется участок с отрицательной дифференциальной проводимостью (рис. 48). Рассмотрим более подробно механизм электрической неустойчивости, приводящий к высокочастотным осцилляциям тока. Это удобно сделать на примере опыта Ганна. Предположим, что к образцу полупроводника, имеющему форму параллелепипеда длиной L, приложено внешнее напряжение. Если полупроводник однороден, то электрическое поле в образце также однородно. Однако любой реальный кристалл содержит некоторые неоднородности. Наличие неоднородности с повышенным сопротивлением приводит к тому, что в этом месте образца напряженность электрического поля имеет повышенное значение. При увеличении напряженности внешнего поля значение $\xi_{\kappa p}$ здесь достигается раньше, чем в остальной части образца.

Вследствие этого в области неоднородности начинаются переходы из минимума А в минимум Б, т.е. появляются тяжелые электроны. Подвижность здесь уменьшается, а сопротивление дополнительно возрастает. Это приводит к увеличению напряженности поля в месте локализации неоднородности и более интенсивному переходу электронов в минимум Б. Поле в образце становится резко неоднородным. Такая зона с сильным электрическим полем получила название электрического домена.



Рис. 48 – Зависимость плотности тока от напряженности электрического поля для полупроводника, имеющего зонную структуру, изображенную на рис. 47

Домен, содержащий тяжелые электроны, под действием поля перемещается вдоль образца с относительно низкой скоростью (так как подвижность тяжелых электронов мала). Легкие электроны также перемещаются в поле, причем с большей скоростью. Те электроны, которые движутся сзади домена, догоняют его и образуют область отрицательного объемного заряда, а те, которые движутся впереди, уходят от домена, и, таким образом, формируется область, обедненная электронами, т. е. область положительного объемного заряда (рис. 49). Через некоторое время устанавливается стационарное состояние, при котором скорость движения домена равна скорости перемещения электронов вне домена. Это происходит потому, что поле внутри домена сильно возросло и вследствие этого возрастает скорость движения электронов в нем. Поле вне домена, наоборот, резко уменьшилось. Поэтому дрейфовая скорость электронов за пределами домена снижается. Когда домен достигает границы образца, он разрушается.

Пусть внешнее напряжение прикладывается к образцу в момент времени t_0 . При этом возникает ток, имеющий некоторое максимальное значение силы тока I_{max} (рис. 50). Сразу же на одной из неоднородностей начинается образование домена. Этот процесс протекает очень быстро, так как постоянная времени, связанная с переходом электронов из минимума A в минимум B, составляет примерно 10^{-12} с. Сила тока резко уменьшается до значения I_{\min} , определяемого скоростью движения домена.

Это значение тока сохраняется до тех пор, пока домен не разрушится на границе образца.

Очевидно, что время движения домена:

$$t = \frac{L}{\mathbf{v}_{\mathrm{A}}},$$

где $v_{\rm d}$ – скорость движения домена; L – длина пути.



Рис. 49 - Структура электрического домена



Рис. 50 – Осцилляции тока в эффекте Ганна

Сила тока снова возрастает до значения $I_{\rm max}$, снова образуется домен и ток уменьшается. Так возникают колебания тока. Частота колебаний определяется длиной образца. Например, при L = 50 мкм она составляет 2 ГГц. Скорость движения домена не зависит от внешнего поля и составляет 10^5 м/с. Поле лишь изменяет толщину домена.

10.9 Поверхностные состояния

В главе 6 было показано, что энергетический спектр электрона, движущегося в строго периодическом поле неограниченного кристалла, имеет зонную структуру: полосы разрешенных энергий отделены друг от друга зонами запрещенных энергий. Нарушение периодичности потенциала, вызванное дефектами решетки (примесными атомами, вакансиями и др.), приводит к возникновению в запрещенной зоне дискретных уровней.

Подобными дефектами являются и свободные поверхности кристалла, на которых происходит обрыв решетки и нарушение периодичности ее потенциала (рис. 51, а). Влияние такого рода дефектов на энергетический спектр электронов было исследовано Таммом в 1932 г. Он показал, что обрыв решетки приводит к появлению в запрещенной зоне полупроводника разрешенных дискретных уровней энергии для электронов, расположенных в непосредственной близости от поверхности кристалла (рис. 51, б). Такие уровни получили название *поверхностных уровней* или *поверхностных состояний*.

Наглядное представление о возникновении поверхностных состояний можно получить из рассмотрения связей, действующих между атомами в объеме и на поверхности кристалла. На рис. 52 изображена плоская модель решетки германия. Атом в объеме кристалла окружен четырьмя ближайшими соседями, связь с которыми осуществляется путем попарного обобществления валентных электронов. У атомов, расположенных на свободной поверхности АА, одна валентная связь оказывается разорванной, а электронная пара неукомплектованной. Стремясь укомплектовать эту пару и заполнить свою внешнюю оболочку до устойчивой восьмиэлектронной конфигурации, поверхностные атомы ведут себя как типичные акцепторы, которым в запрещенной зоне соответствуют акцепторные уровни E_a (рис. 51, б). Электроны, попавшие на эти уровни из валентной зоны, не проникают в глубь кристалла и локализуются на расстоянии порядка постоянной решетки от поверхности. В валентной зоне возникают при этом дырки, а в поверхностном слое полупроводника – дырочная проводимость.

Рассмотренные поверхностные состояния возникают на идеально чистой бездефектной поверхности, получить которую практически невозможно. В реальных условиях поверхностные свойства полупроводников определяются поверхностными состояниями, созданными главным образом чужеродными атомами (молекулами) на поверхности. На рис. 51, в показана зонная структура полупроводника. Вертикальной прямой обозначена одна из свободных его поверхностей. Предположим, что на этой поверхности химически сорбировалась частица *M*. При такой сорбции волновые функции решетки и частицы перекрываются настолько, что частицу можно рассматривать как примесь, локально нарушающую периодичность потенциала решетки и приводящую к возникновению в запрещенной зоне поверхностного уровня.

Характер таких уровней зависит от природы поверхности и частиц. Они могут быть акцепторными, донорными и рекомбинационными (рис. 51, г). Так, кислород, сорбированный на поверхности германия, создает акцепторные уровни, вода – донорные. Если уровни *Р* являются акцепторными, то они захватывают электроны и заряжают поверхность

полупроводника отрицательно с поверхностной плотностью $\sigma^- = q N f_{\Phi-A}^-$, где N – число молекул, адсорбированных единицей поверхности кристалла; $f_{\Phi-A}^-$ – функция Ферми-Дирака, выражающая вероятность заполнения поверхностных уровней электронами; q – заряд электрона. Если уровни P являются донорными, то они, отдавая электроны кристаллу, заряжают поверхность полупроводника положительно с плотностью $\sigma^+ = q N f_{\Phi-A}^+$, где

 $f_{\Phi-\mathcal{I}}^+$ – вероятность того, что поверхностные уровни являются пустыми, т.е. частицы M ионизированы.



Рис. 51 – Возникновение поверхностных состояний: а – обрыв периодического потенциала решетки у поверхности кристалла; б – поверхностные состояния, возникающие вследствие обрыва решетки; в – чужие атомы М на поверхности; г – типы поверхностных состояний (*E*_д – донорные, *E*_a – акцепторные, *E*_p – рекомбинационные)





Рис. 52 – Схема возникновения акцепторных поверхностных состояний на чистой поверхности полупроводника

При высокой плотности поверхностных состояний они, взаимодействуя друг с другом, могут размыться в поверхностную зону. Электроны в этой зоне могут двигаться только вдоль поверхности.

10.10 Приповерхностный слой объемного заряда

Заряжение поверхности полупроводника при заполнении поверхностных состояний сопровождается возникновением у поверхности слоя объемного заряда, нейтрализующего поверхностный заряд. Нейтрализация происходит путем притяжения к поверхности носителей со знаком заряда, противоположным знаку заряда поверхности, и отталкивания носителей одного знака. Поэтому поверхностный слой полупроводника оказывается обедненным носителями одного знака со знаком поверхностного заряда и обогащенным носителями противоположного знака.

Толщина слоя объемного заряда, на протяжении которой происходит нейтрализация поверхностного заряда, зависит от концентрации носителей. В то время как в металлах, имеющих очень высокую концентрацию носителей (~10²⁸ м⁻³), нейтрализация происходит уже на расстоянии нескольких параметров решетки, в полупроводниках область пространственного заряда может простираться на значительную глубину (~10⁻⁶ м и более). Обычно ее принимают равной так называемой дебаевской длине экранирования $L_{\mathcal{A}}$, имеющей следующий смысл: $L_{\mathcal{A}}$ представляет собой расстояние, на протяжении которого потенциал поля в веществе со свободными носителями заряда уменьшается в е раз. Расчет показывает, что при небольшом относительном обогащении приповерхностной области полупроводника

свободными носителями заряда:

$$L_{\mathcal{I}} = (\varepsilon_0 \varepsilon k T / q^2 n_0)^{1/2}, \qquad (10.25)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость вещества; ε_0 – диэлектрическая постоянная; n_0 – концентрация свободных носителей в нем.

Таким образом, у поверхности полупроводника существует область, электрические свойства которой определяются не объемными концентрациями примеси, а величиной поверхностного заряда. В этой области концентрация носителей может существенно отличаться от объемной концентрации. Наличие такой области оказывает существенное влияние на многие свойства полупроводника: электропроводность, работу выхода, фото-э.д.с. и др., а также на параметры приборов.

Заряжение поверхности полупроводника вызывает возникновение разности потенциалов между поверхностью и объемом полупроводника и, следовательно, искривление энергетических зон. При заряжении поверхности отрицательным знаком энергетические зоны изгибаются вверх, так как при перемещении электрона из объема на поверхность его потенциальная энергия увеличивается (рис. 53). При положительном заряжении поверхности зоны изгибаются вниз. Изгиб простирается вглубь полупроводника примерно на дебаевскую длину экранирования L_{π} .



Рис. 53 – Изгиб зон у поверхности полупроводника *n*-типа при отрицательном заряжении поверхности

При формировании приповерхностной области полупроводника могут встретиться три важных случая: обеднение, инверсия и обогащение этой области носителями заряда.

Изменять заряжение поверхности полупроводника можно посредством внешнего электрического поля. На рис. 54 приведена принципиальная схема прибора, предназначенного для этой цели. На одну сторону полупроводниковой пластины П напыляют омический контакт Э, второй

электрод М прижимается к противоположной стороне пластины через тонкий слой диэлектрика Д. На электроды подается внешняя разность потенциалов от источника V. Меняя величину и знак потенциалов на электродах Э и М, можно в широких приделах менять величину и знак заряда, индуцируемого на поверхности полупроводника прижатой к электроду М.



Рис. 54 – Схема МДП структуры

Явления изменения поверхностной проводимости полупроводника под действием поперечного электрического поля называют эффектом поля. Оно широко используется для исследования поверхностных состояний, позволяя определять величину заряда, захваченного этими состояниями, их плотность, глубину залегания и т.д.

10.11 Поверхностная рекомбинация

Среди быстрых поверхностных состояний можно выделить центры прилипания, размещающиеся вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, и центры рекомбинации, располагающиеся вблизи середины запрещенной зоны. Наличие поверхностных центров рекомбинации делает возможным протекание рекомбинации через эти центры. Такую рекомбинацию называют поверхностной. В чистых кристаллах, в которых концентрация объемных центров мала, поверхностная рекомбинация может приобрести важную роль, особенно в образцах малой толщины.

Рассмотрим полупроводник, в запрещенной зоне которого имеются поверхностные рекомбинационные центры. Пусть в этом полупроводнике генерируются неравновесные носители заряда. Обозначим избыточную концентрацию их вблизи поверхности через Δn_s и Δp_s . Наличие на свободной поверхности полупроводника рекомбинационных центров, т.е. стока для неравновесных носителей, приводит к возникновению направленных потоков

носителей к поверхности, пропорциональных их избыточной концентрации: потока электронов $j_n / q = s \Delta n_s$ и потока дырок $j_p / q = s \Delta p_s$, где j_n , $j_p - электронная и дырочная составляющие тока, текущего к поверхности. В$ условиях равновесия, когда ток через поверхность равен нулю, потокиэлектронов и дырок к поверхности равны друг другу и равны числу $носителей <math>n_{Rs}$ ежесекундно рекомбинирующих на единице поверхности полупроводника:

$$j_n / q = j_p / q = n_{Rs} = s\Delta n_s = s\Delta p_s.$$

Отсюда находим
 $s = n_{Rs} / \Delta n_s = n_{Rs} / \Delta p_s.$ (10.26)

Из (10.26) видно, что коэффициент пропорциональности *s* равен отношению числа избыточных носителей, ежесекундно рекомбинирующих на единице поверхности полупроводника, к концентрации их в поверхностном слое. Он имеет размерность скорости и называется *скоростью поверхностной рекомбинации* неравновесных носителей.

Скорость поверхностной рекомбинации зависит от поверхностного изгиба зон φ_s (рис. 55). При $\varphi_s = 0$ скорость поверхностной рекомбинации достигает максимального значения. При больших положительных значениях φ_s концентрация электронов в зоне проводимости резко уменьшается, вследствие чего резко падает скорость поверхностной рекомбинации (правая ветвь кривой, рис. 55). При высоких отрицательных значениях φ_s в валентной зоне поверхностного слоя практически отсутствуют дырки, вследствие чего скорость поверхностной рекомбинации также становится низкой (левая ветвь кривой, рис. 55). Кривую (рис. 55) называют *рекомбинационным колоколом*.



Рис. 55 – Зависимость скорости поверхностной рекомбинации от поверхностного изгиба зон

Скорость поверхностной рекомбинации весьма чувствительна к состоянию поверхности. Адсорбция на этой поверхности посторонних

молекул может резко изменить потенциал поверхности φ_s и тем самым скорость поверхностной рекомбинации. Механическая обработка поверхности (шлифовка, полировка и др.), нарушая кристаллическую структуру поверхностного слоя, приводит к возникновению большого числа поверхностных рекомбинационных центров, способных резко увеличить скорость поверхностной рекомбинации. При травлении такой поверхности нарушенный слой удаляется, и скорость поверхностной рекомбинации, как правило, падает.

При одновременном протекании в образце объемной и поверхностной рекомбинаций эффективное время жизни неравновесных носителей $\tau_{3\phi}$ зависит от времени жизни в объеме τ_{of} и скорости поверхностной рекомбинации *s*. Как показывает расчет, для тонких (по сравнению с длиной диффузии) образцов полупроводника эффективное время жизни неравновесных носителей равно:

$$1/\tau_{ab} = 1/\tau_{ob} + 2s/d, \qquad (10.27)$$

где *d* – толщина образца.

11 ПЕРЕНОС НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ

При рассмотрении этого вопроса возможны два случая:

а) пленка тонкая (рис. 56).

Предположим, что из точки 0 внутри телесного угла $\varphi = \varphi_0$ распространяются электроны на расстояние $x = \lambda$, где λ – длина свободного пробега электрона (рис. 56).

Если толщина пленки много меньше d длины свободного пробега λ $(d \Box \lambda)$, то электроны рассеиваются на поверхности пленки, удельное сопротивление ρ увеличивается, так как появляются дополнительные механизмы рассеивания (например, за счет взаимодействия электронов с колеблющимися ионами кристаллической решетки).

б) более толстая пленка (рис. 57).

В более толстых пленках учитываются все механизмы рассеяния.

Пусть *z* – переменное расстояние от центра рассеяния до поверхности *l*. В точке 0 начинается движение *n* штук электронов.

Если телесный угол φ меньше некоторого угла φ_0 , то все электроны распространяются на расстояние λ , если $\varphi < \varphi_0$, то $x < \lambda$.

Очевидно, телесный угол $\phi = 2\pi \sin \varphi d\varphi$.

Из геометрических соображений:

$$\chi = d\cos\varphi$$

$$\cos\varphi_0 = \frac{d}{A}.$$

Обозначим

 l^1 – путь, пройденный электронами, не претерпевшими столкновения с поверхностями:

$$l^{1} = \int_{\varphi_{0}}^{\frac{\pi}{2}} \lambda_{1} \sin\varphi d\varphi;$$

*l*¹¹ – путь, пройденный электронами, рассеянными от поверхности:

$$l^{11} = \int_{0}^{\varphi_0} x n_1 \sin\varphi d\varphi;$$

 $\lambda_{\phi\phi}$ – эффективный путь (средний путь, пройденный электроном).







Рис. 57 – Перенос носителей зарядов в толстых пленках

Очевидно, что

$$\lambda_{\vartheta\phi} = \frac{l^1 + l^{11}}{n} = \frac{1}{n} \left(\int_{0}^{\varphi_0} xn \sin\varphi d\varphi + \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \lambda n \sin\varphi d\varphi \right) = \dots = d\left(1 + \ln\frac{\lambda}{2}\right).$$

Обозначим за σ удельную электропроводность:

$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{e^2 n}{mv} \lambda.$$
97

Примем $\lambda = \lambda_{3\phi}$, тогда:

$$\sigma = \frac{e^2 n d}{2mv} \left(1 + \ln \frac{\lambda}{d} \right).$$

Примем электропроводимость толстых пленок бесконечно большой $\sigma=\sigma_\infty$, тогда:

$$\frac{\sigma}{\sigma_{\infty}} = \frac{d}{\lambda} \left(1 + \ln \frac{d}{\lambda} \right). \tag{11.1}$$

Учитывая, что удельное сопротивление обратно пропорционально удельной проводимости перепишем выражение:

$$\frac{\rho}{\rho_{\infty}} = \frac{\lambda}{d} \left(1 + \ln \frac{d}{\lambda} \right). \tag{11.2}$$

На рис. 58 представлена графическая зависимость удельного электросопротивления от толщины пленки. На нем видны три области:

I – сильная зависимость удельного электросопротивления от толщины пленки. Структура пленки – островная. Основной механизм проводимости – туннельный эффект.

II – слабая зависимость удельного электросопротивления от толщины пленки. Структура пленки – сплошная, $\frac{d}{\lambda} \approx 0, 1...1$. Следовательно, пленка еще остается тонкой.

III – удельное электросопротивление не зависит от толщины пленки. Следовательно, пленка толстая.



Рис. 58 – Зависимость удельного сопротивления от толщины пленки

На основании анализа графика можно сделать вывод: пленка считается тонкой до тех пор, пока ее удельное сопротивление зависит от толщины.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ И ЛИТЕРАТУРЫ

1. Антипов, Б.Л. Материалы электронной техники / Б.Л. Антипов, В.С. Сорокин, В.А. Терехов. – М.: Высшая школа, 1990. – 208 с. : ил.

2. Бонч-Бруевич, В.Л. Физика полупроводников / В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. – М.: Наука, 1977. – 672 с. : ил.

3. Готра, З.Ю. Технология микроэлектронных устройств / З.Ю. Готра. – М.: Радио и связь, 1991. – 528 с. : ил.

4. Епифанов, Г.И. Физические основы конструирования и технологии РЭА и ЭВА / Г.И. Епифанов, Ю.А. Мома. – М.: Сов. радио, 1979. – 352 с. : ил.

5. Павлов, П.В. Физика твердого тела / П.В. Павлов, А.Ф. Хохлов. – М.: Высш. шк., 2000. – 494 с. : ил.

6. Лозовский, В.Н. Нанотехнология в электронике. Введение в специальность / В.Н. Лозовский, Г.С. Константинова, С.В. Лозовский. – 2-е изд., испр. – СПб.: Лань, 2008. – 336 с. : ил.

7. Попов, В.Ф. Физические основы микроэлектроники: учеб.-метод. пособие / В.Ф. Попов. – Тамбов: изд-во ТГТУ, 2001. – 116 с. : ил.

8. Шишкин, Г.Г. Наноэлектроника. Элементы и приборы, устройства: учеб. пособие / Г.Г. Шишкин, И.М. Агеев. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 408 с. : ил.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1 КОРПУСКУЛЯРНО-ВОЛНОВОЙ ДУАЛИЗМ	5
2 ФАЗОВАЯ И ГРУППОВАЯ СКОРОСТИ	5
3 СООТНОШЕНИЕ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТЕЙ ГЕЙЗЕНБЕРГА	7
4 УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА	8
5 ПРИМЕРЫ ПРАКТИЧЕСКОГО ПРИМЕНЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА	10
5.1 Движение свободной микрочастицы	10
5.2 Прохождение микрочастицы через потенциальный барьер.	
Туннельный эффект	12
5.3 Движение микрочастицы в потенциальной яме	15
6 ОСНОВЫ ЗОННОЙ ТЕОРИИ ТВЕРДЫХ ТЕЛ	16
6.1 Металлы, диэлектрики и полупроводники	18
6.2 Понятие о дырках	20
6.3 Примесные уровни в полупроводниках	22
6.3.1 Донорные уровни	22
6.3.2 Акцепторные уровни	23
6.4 Эффективная масса электрона	24
6.5 Рекомбинационные эффекты	27
7 ОСНОВЫ СТАТИСТИКИ ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ	30
7.1 Функция распределения для невырожденного газа	31
7.2 Функция распределения для вырожденного газа фермионов	32
7.2.1 Распределение электронов в металле при абсолютном нуле. Энергия Ферми	32
7.2.2 Влияние температуры на распределение Ферми-Дирака	33
7.3 Функция распределения для вырожденного газа Бозонов	35

	7.4 П темп	Іоложение уровня Ферми и зависимость концентрации носителей от ературы в полупроводниках	35
	7 3	7.4.1 Зависимость концентрации свободных носителей от положени ровня Ферми	ія 35
) H	7.4.2 Положение уровня Ферми и зависимость концентрации носителей от температуры в собственных полупроводниках	.38
) H	7.4.3 Положение уровня Ферми и температурная зависимость концентрации носителей в примесных полупроводниках	.41
	-	7.4.4 Закон действующих масс	45
8	ЭЛЕІ	КТРОПРОВОДНОСТЬ МЕТАЛЛОВ	46
	8.1	Удельная электропроводность металлов	46
	8.2	Оценка подвижности. Эффект Холла	48
	8.3 темп	Подвижность свободных носителей заряда и ее зависимость от ературы	53
	8.4	Электропроводность металлов и сплавов	56
	8.5	Электропроводность сплавов	58
	8.6	Собственная и примесная проводимости полупроводников	53
	8.7	Разогрев электронного газа. Эффекты сильного поля	60
	8.8	Явление сверхпроводимости	61
9	ТЕП.	ЛОПРОВОДНОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ	65
1	0 KOI	НТАКТНЫЕ И ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ	68
	10.1	Поверхностные явления	68
	10.2	Контактная разность потенциалов	70
	10.3	Термоэлектронная эмиссия	73
	10.4	Эффект Шоттки	76
	10.5	Барьер Шоттки	78
	10.6	Равновесное состояние <i>p-n</i> -перехода	80
	10.7	Внутренний фотоэффект	82
	1	0.7.1. Экситонные состояния	85
	10.8	Эффект Ганна	86

10.9 Поверхностные состояния	89	
10.10 Приповерхностный слой объемного заряда		
10.11 Поверхностная рекомбинация		
11 ПЕРЕНОС НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ		
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ		
ИСТОЧНИКОВ И ЛИТЕРАТУРЫ		
СОДЕРЖАНИЕ	100	