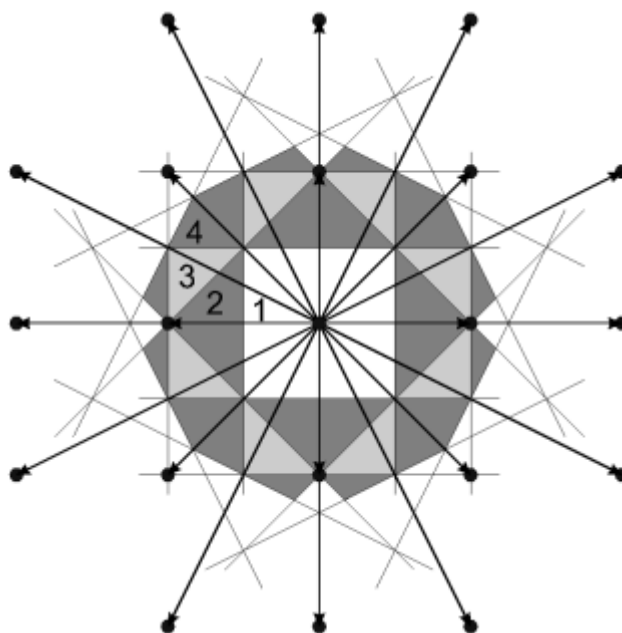


О.Ю.Шевченко

Основы физики твердого тела

Учебное пособие



Санкт-Петербург

2010

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ

**САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ**

О.Ю. Шевченко

ОСНОВЫ ФИЗИКИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Учебное пособие



Санкт-Петербург

2010

О.Ю.Шевченко «Основы физики твердого тела». Учебное пособие. – СПб: СПбГУ ИТМО, 2010. – 76с.

В рамках курса общей физики рассмотрены основы физики твердого тела. Представлены элементы кристаллографии, введение в зонную теорию полупроводников, а также тепловые, кинетические и термоэлектрические, контактные явления в твердых телах.

Для студентов технических специальностей.

Печатается по решению Ученого Совета ЕНФ.

Протокол № 6 от 2 марта 2010г.



В 2009 году Университет стал победителем многоэтапного конкурса, в результате которого определены 12 ведущих университетов России, которым присвоена категория «Национальный исследовательский университет». Министерством образования и науки Российской Федерации была утверждена Программа развития государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики» на 2009–2018 годы.

© Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, 2010

©О. Ю.Шевченко, 2010

Содержание

1. Кристаллическая структура твердого тела	5
1.1. Кристаллическая решетка. Ближний и дальний порядок.	
Симметрия кристаллов.....	5
1.2. Дефекты кристаллической решетки.....	9
<i>а.</i> Точечные дефекты.....	9
<i>б.</i> Дислокации.....	9
1.3. Химическая связь в кристаллах.....	10
1.4. Тепловые колебания кристаллической решетки.....	12
<i>а.</i> Теплоемкость.....	12
<i>б.</i> Теплопроводность.....	14
1.5. Дифракция волн в кристаллах.....	15
2. Электронная структура кристаллов. Элементы зонной теории твердого тела.....	18
2.1. Приближение сильной связи.....	19
2.2. Приближение слабой связи.....	20
<i>а.</i> Свободный электронный газ в металлах.....	20
<i>б.</i> Периодичность кристалла. Функция Блоха. Граничные условия Кармана–Борна. Зоны Бриллюэна.....	21
<i>в.</i> Обоснование использования приближения слабой связи.....	26
<i>г.</i> Эффективная масса электрона в кристалле.....	26
<i>д.</i> Механическая аналогия эффективной массы.....	28
3. Статистика электронов и дырок в полупроводниках.....	30
3.1. Плотность состояний.....	30
3.2. Функция Ферми.....	31
3.3. Концентрация электронного газа.....	33
3.4. Концентрация носителей заряда и положение уровня Ферми в полупроводниках.....	35
<i>а.</i> Собственный полупроводник.....	36
<i>б.</i> Невырожденный примесный полупроводник.....	38
<i>в.</i> Вырожденный полупроводник.....	41
4. Кинетические явления в полупроводниках.....	42
4.1. Подвижность.....	42
4.2. Температурная зависимость электропроводности полупроводников.....	44
4.3. Фотопроводимость.....	46

4.4. Эффект Холла.....	47
4.5. Квантовый эффект Холла.....	51
4.6. Сверхпроводимость.....	55
5. Контактные явления.....	57
5.1. Контакт металл – полупроводник.....	57
5.2. Электронно–дырочный переход.....	62
6. Термоэлектрические явления в полупроводниках.....	67
6.1. Эффект Зеебека.....	67
6.2. Эффект Пельтье.....	70
6.3. Эффект Томсона.....	72
Литература.....	73

Глава 1. Кристаллическая структура твердого тела.

1.1. Кристаллическая решетка. Ближний и дальний порядок. Симметрия кристаллов.

Многие свойства твердых тел объясняются тем, что большинство из них имеет кристаллическую структуру, то есть характеризуется закономерной периодичностью распределения элементов (атомов или группы атомов (ионов)) в пространстве на микроскопическом уровне. Поэтому введено такое понятие как *кристаллическая решетка*. Повторяющаяся в пространстве группа атомов (узлов решетки) образует *базис*. Кристаллическая решетка – это совокупность геометрических точек, представляющих собой центры этих базисов. Упорядоченность во взаимном расположении атомов в твердых телах может быть охарактеризована наличием дальнего и ближнего порядка, обусловленного взаимодействием между частицами. Упорядоченность на сравнимых с межатомными расстояниях называется *ближним порядком*, а упорядоченность, повторяющаяся на неограниченно больших расстояниях, — *дальним порядком*. Так, например, в идеальном газе расположение атома в какой-либо точке пространства не зависит от расположения других атомов, т.е. отсутствует дальний и ближний порядок, но уже в жидкостях и аморфных телах существует ближний порядок — некоторая закономерность в расположении соседних атомов.

В периодической кристаллической решетке можно выделить некоторую примитивную *элементарную ячейку*, которая повторяется периодически по всему кристаллу. Выделяя такую ячейку, удастся описать положения атомов и ионов в веществе и, следовательно, с ее помощью характеризовать структуру кристаллов. Каждую элементарную ячейку можно задать с помощью трех векторов $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, называемых *векторами трансляции*, которые могут быть не ортогональны и иметь разную длину. Вектор, соответствующий некоторой конкретной точке решетки, представляет трансляцию вида $\vec{R} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3$, где n_1, n_2, n_3 — произвольные целые числа. Трансляционное повторение этих векторов в пространстве позволяет получить так называемые *решетки Бравэ*. Решетка Бравэ – это бесконечная периодическая структура, имеющая одинаковый пространственный порядок и ориентацию независимо от того, какой узел мы приняли за начало отсчета. Одной из простейших объемных решеток Бравэ является простая кубическая решетка, изображенная на

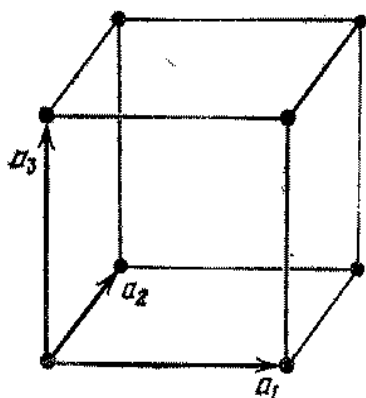


Рис.1.1. Простая кубическая решетка Бравэ.

рис. 1.1. В форме простой кубической решетки кристаллизуются щелочно-галогидные соединения, такие как NaCl, KCl, LiF и др. При этом ионы щелочного металла (например, Na^+) чередуются в узлах решетки с ионами галогена (например, Cl^-). Другой пример – гранецентрированная кубическая решетка (рис.1.2 *слева*). От простой кубической решетки она отличается дополнительными узлами, находящимися в центре каждой грани. Так кристаллизуются некоторые металлы – медь, серебро, золото, алюминий, свинец. Типичные полупроводники германий и кремний кристаллизуются в решетке *типа алмаза*

(рис.1.2 *справа*). Ее можно представить в виде двух гранецентрированных решеток, сдвинутых относительно друг друга на четверть диагонали куба.

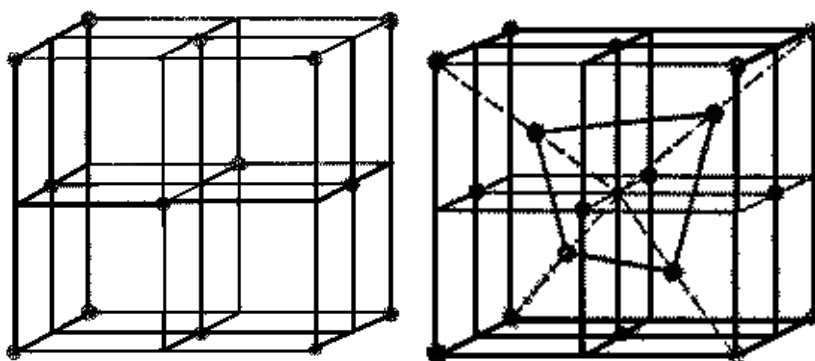


Рис.1.2. Гранецентрированная кубическая решетка (*слева*), решетка типа алмаза (*справа*).

Элементарную ячейку можно задать и другими способами. Например, в форме ячейки *Вигнера – Зейтца*, используемой при рассмотрении движения частиц в кристалле. Для выбора ячейки соединяют данный узел решетки с ближайшими к нему узлами и через середины полученных отрезков проводят перпендикулярные отрезкам плоскости. Полученный многогранник, отражающий симметрию кристалла и содержащий один узел кристаллической решетки, и образует ячейку Вигнера – Зейтца. Ячейку Вигнера – Зейтца строят в так называемом *обратном пространстве* (обратная решетка), откладывая

вдоль осей координат отрезки, обратные векторам трансляций в данном направлении. Для простой кубической решетки ячейка Вигнера – Зейтца по форме и размерам совпадает с элементарной ячейкой, то есть является кубом. Для более сложных решеток ячейка Вигнера – Зейтца имеет более сложную форму. Например, решетка типа алмаза в этом случае является четырнадцатигранником, шесть граней которого имеют форму квадрата, а восемь – шестиугольника (рис.1.3).

Цифровые обозначения на рисунке 1.3. называются *индексами Миллера* $[h,k,l]$. Это совокупность трех целых чисел, характеризующих кристаллографическое направление. Если любой атом кристаллической решетки принять за начало отсчета в декартовой системе координат и соединить его с другими ближайшими узлами решетки, то соответствующие длины отрезков, выраженные в единицах постоянной решетки, связаны с индексами Миллера обратной зависимостью

$$h:k:l = \frac{1}{x} : \frac{1}{y} : \frac{1}{z} \quad (1.1)$$

Для описания симметрии кристаллической решетки используют понятия *преобразование симметрии* и *элементов симметрии*. Преобразованием симметрии называется такое обобщенное движение, которое совмещает фигуру саму с собой, оставив ее инвариантной. Из него вытекает понятие элементов симметрии (оси, плоскости, центры симметрии), набор которых формирует точечные и трансляционные группы симметрии. На рисунке 1.4 для примера показаны элементы симметрии простой кубической решетки. Кубическая решетка имеет три плоскости симметрии, параллельные граням (рис.1.4а), шесть диагональных плоскостей симметрии, перпендикулярных диагоналям граней (рис.1.4б, в), три оси четвертого порядка (рис.1.4д), шесть осей второго порядка (рис.1.4з), четыре оси третьего порядка (рис.1.4е) и центр симметрии в центре куба (рис.1.4з,д,е). Существует всего 14 видов различных пространственных решеток Бравэ, из которых можно получить 32 группы точечной симметрии. Это все возможные

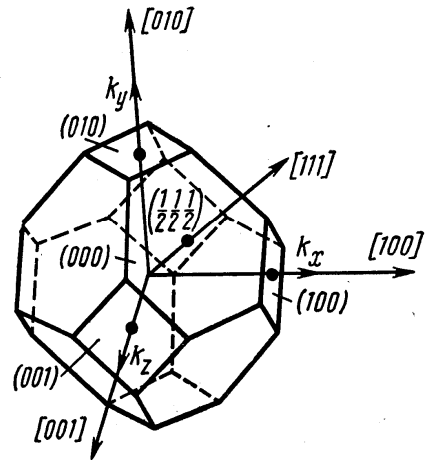


Рис.1.3. Ячейка Вигнера – Зейтца кристаллической решетки типа алмаза.

комбинации элементов симметрии для кристаллов. 32 вида точечной симметрии, имеющие аналогичные элементы симметрии, объединяются в сингонии.

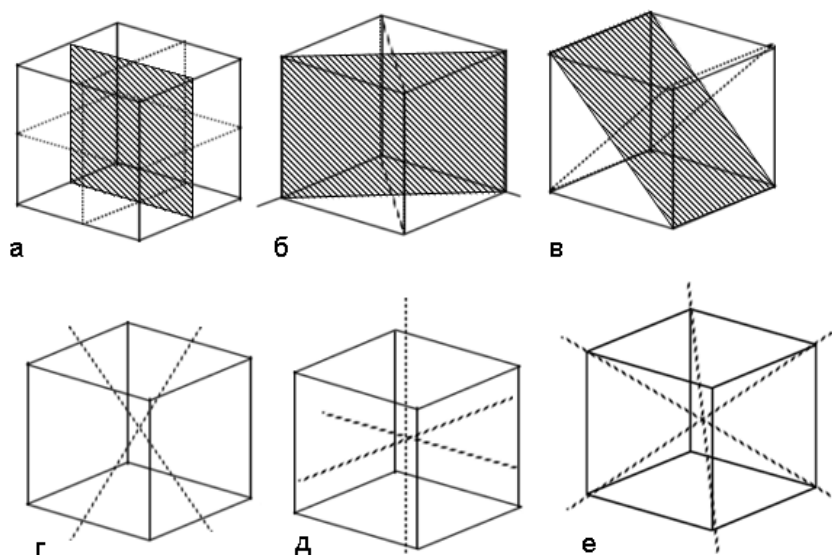


Рис.1.4. Элементы симметрии простой кубической решетки.

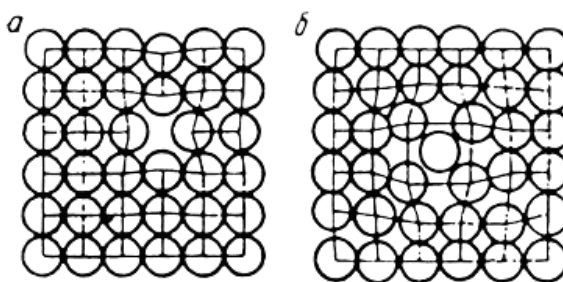
Всего имеется семь сингоний (триклинная, моноклинная, ромбическая, тетрагональная, тригональная, гексагональная, кубическая). В зависимости от порядка осей симметрии сингонии объединяются в категории. Таким образом, если подвергнуть решетки Бравэ преобразованиям симметрии (трансляция, отражение, инверсия), то можно построить все известные кристаллические структуры. Этим занимается кристаллография. Рассмотренные классификации кристаллической структуры приняты в теории групп, позволяющей математически описать симметрию любого кристалла.

Существует способ рассмотрения кристаллов не только в виде решеток, но и как плотных упаковок шаров. Атомам разных сортов соответствуют шары различных размеров. При этом вводят понятие координационного числа – количества атомов, находящихся в ближайшем окружении от данного атома. Наибольшее координационное число у кристаллов с так называемой плотной упаковкой, оно составляет 12, наименьшее – у ковалентных кристаллов (4). Из-за неодинаковой плотности атомов в различных направлениях кристалла наблюдаются разные свойства. Это явление называется анизотропией.

1.2. Дефекты кристаллической решетки.

Идеальная кристаллическая решетка представляет собой многократное повторение элементарных ячеек. В реальном кристалле всегда существуют дефекты, нарушающие периодичность расположения атомов в кристаллической решетке и оказывающие существенное влияние на свойства материала.

а). Точечные дефекты. К точечным дефектам относятся: а) свободные места в узлах кристаллической решетки — вакансии, называемые дефектами Шоттки (рис.1.5а); б) атомы, сместившиеся из узлов кристаллической решетки в межузельные промежутки — дислоцированные атомы, называемые дефектами по Френкелю (рис.1.5б); в) атомы других элементов, находящиеся как в узлах, так и в междоузлиях кристаллической решетки — примесные атомы.



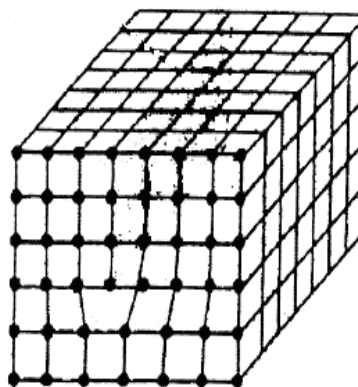
Точечные дефекты образуются в процессе кристаллизации под

воздействием тепловых, механических, электрических воздействий, а также при облучении нейтронами, электронами, рентгеновскими лучами.

Рис.1.5. Точечные дефекты в кристаллах: а) вакансии. б) дислоцированные атомы.

б). Дислокации. Рассмотрим линейные, поверхностные и объемные нарушения периодичности кристаллической структуры, то есть дислокации.

Линейные дислокации — это нарушения кристаллической структуры в одном направлении. Различают краевые (рис.1.6) и винтовые (рис.1.7) дислокации.



Краевые дислокации связаны с присутствием «лишней» атомной

Рис.1.6. Краевая дислокация.

полуплоскости в кристалле, а винтовые – с частичным сдвигом одной полуплоскости кристаллической решетки относительно другой.

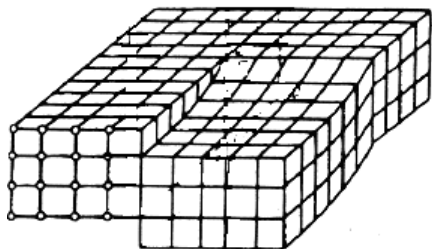


Рис.1.7. Винтовая дислокация.

Поверхностные дислокации – это дефекты, имеющие значительную протяженность в двух направлениях. К ним относятся границы между зернами, межфазные границы, дефекты упаковки кристаллической решетки, скопление дислокаций в одной плоскости и др.

Объемные дефекты имеют протяженность во всех трех измерениях. К этим дефектам относится совокупность точечных, линейных и поверхностных дефектов, которые приводят к искажению кристаллической решетки в больших объемах кристалла, микровключения других фаз, поры и трещины.

1.3. Химическая связь в кристаллах.

Рассмотрим вопрос, что удерживает вместе атомы в кристалле. Связь между атомами обеспечивается кулоновским взаимодействием между заряженными частицами: катионами и анионами, ядрами и электронами. При сближении атомов начинают действовать силы притяжения между ядром одного атома и электронами другого, а также силы отталкивания между ядрами и между электронами. На некотором расстоянии эти силы уравниваются друг друга, и образуется устойчивая химическая частица. Существование стабильных связей между атомами в кристалле предполагает, что полная энергия кристалла меньше суммарной энергии отдельных атомов в кристалле на величину так называемой энергии химической связи (или просто энергии связи). Ее величина сильно отличается для разных элементов периодической системы. Так, например, для инертных газов она составляет лишь сотые доли от энергии связи типичных полупроводников (Si, Ge). А кристаллы щелочных металлов имеют промежуточные значения энергии связи.

В твердых телах существуют три типа химической связи: *ионная* (гетерополярная), *металлическая* и *ковалентная* (гомеополярная). При

образовании химической связи может произойти существенное перераспределение электронной плотности атомов в соединении по сравнению со свободными атомами. В предельном случае это приводит к образованию заряженных частиц – ионов. Эти ионы образуют кристаллическую решетку за счет того, что кулоновское притяжение между ионами противоположного знака сильнее кулоновского отталкивания одноименно заряженных ионов. При этом возникает ионная химическая связь. К наиболее типичным ионным кристаллам относятся щелочно-галогидные соединения (например, NaCl, KCl), кристаллизующиеся в форме простой кубической решетки (рис.1.1).

Ковалентная связь – это основной тип химической связи, характеризующий формирование твердого тела. В результате ковалентной связи происходит обобществление электронов соседних атомов, в результате чего каждый атом имеет полностью заполненную валентную восьмиэлектронную оболочку. Ковалентная связь обладает определенной направленностью и характерна для большинства полупроводников (Si, Ge). Так, каждому атому кремния не хватает четырех электронов до заполнения его электронной оболочки, поэтому атомы соседних элементов могут притягиваться за счет перекрытия электронных оболочек. В результате атом оказывается помещенным в центр тетраэдра и окруженным четырьмя ближайшими соседями (рис.1.2.справа)

Если по типу химической связи кристаллы с ковалентными и ионными типами связи можно рассматривать как предельные случаи, тогда между ними имеются кристаллы с промежуточными типами связи, обладающие определенной степенью ионности связи. При этом атомы с почти заполненными оболочками (Na, Cl) обнаруживают тенденцию к ионной связи, а элементы III, IV и V групп (In, C, Ge, Si) – к ковалентной.

Существуют кристаллы, характеризующиеся высокой электропроводностью, вызванной наличием свободных электронов, способных перемещаться и участвовать в проводимости. Такая химическая связь, обусловленная взаимодействием обобществленных кристаллом свободных электронов с остовом положительно заряженных ионов кристаллической решетки, называется *металлической*. Взаимодействие ионных остовов с электронами проводимости влияет на величину энергии связи в металлических кристаллах. Эта связь характеризуется уменьшением кинетической энергии электронов в кристалле по сравнению с кинетической энергией электронов в

свободном атоме. Металлические кристаллы имеют тенденцию кристаллизоваться в плотноупакованные структуры, например, в форме гранцентрированной кубической решетки (рис.1.2 *слева*).

1.4. Тепловые колебания кристаллической решетки.

а. Теплоемкость.

Тепловые свойства кристаллов обусловлены в основном колебаниями кристаллической решетки. При температуре $T = 0^\circ K$ согласно классической теории атомы можно считать неподвижно “закрепленными” в узлах кристаллической решетки. При $T > 0^\circ K$ они совершают колебания относительно положений равновесия. В рамках классической теории в идеальном одноатомном газе каждый атом имеет три степени свободы и обладает кинетической энергией $\frac{3}{2}kT$. Если эту теорию применить к твердым телам, тогда внутренняя энергия одного моля кристалла составляет:

$$E = 3N_A kT = 3RT \quad (1.2)$$

где $R = 8.31 \frac{\text{Дж}}{\text{моль}K}$ – газовая постоянная, а молярная теплоемкость (количество тепла, необходимое для нагревания одного моля вещества на 1К) при постоянном объеме равна:

$$C_v = \frac{dE}{dT} = 3R \quad (1.3)$$

Этому соотношению, называемому законом Дюлонга и Пти, удовлетворяет большинство твердых тел при комнатной температуре. Однако при понижении температуры теплоемкость быстро уменьшается и приближается к нулю при $T \rightarrow 0^\circ K$. Причина этого связана с квантовыми эффектами. Согласно квантовой теории, колебания кристаллической решетки могут возбуждаться и поглощаться только порциями (квантами). По аналогии с фотонами кванты колебательной энергии называются *фононами*. Энергия звуковых волн квантуется точно так же, как энергия фотонов и электронов. Фононы можно рассматривать как квазичастицы с энергией $h\nu$ и импульсом $\hbar\vec{k}$, где $|k| = \frac{\omega}{v}$, v – скорость распространения колебаний в кристалле. При низких температурах $kT \ll h\nu$, т.е. имеется еще мало фононов. С

повышением температуры возникает много фононов низкой частоты, но пока мало фононов высокой частоты. И только при высоких температурах, когда $kT > h\nu$ даже для высокочастотных волн, дискретность энергии уже не имеет значения, и выполняется закон (1.3).

Математический расчет полной энергии фононов как функции температуры, проведенный Дебаем в 1912 г, привел к следующему выражению для теплоемкости любого твердого тела:

$$C_v = 9R \left(\frac{T}{\theta} \right)^3 \int_0^{\theta/T} \frac{e^x x^4 dx}{(e^x - 1)^2} \quad (1.4)$$

где $\theta = \frac{h\nu_D}{k}$ – характеристическая температура Дебая, различная для разных твердых тел, ν_D – частота волны наименьшей длины. Зависимость теплоемкости C_v от T/θ изображена на рисунке (1.8), где для сравнения приведены экспериментальные значения для серебра и алюминия. Для всех твердых тел теория согласуется с опытными данными.

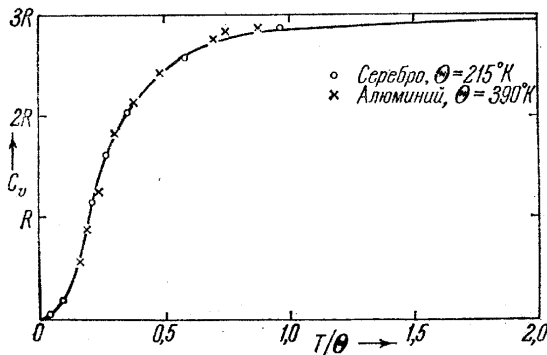


Рис. 1.8. Теплоемкость при постоянном объеме как функция температуры. Сплошная кривая рассчитана по формуле Дебая (1.4.3). На кривой нанесены экспериментальные точки для серебра и алюминия с целью определения температуры Дебая, после чего график перестраивался в функции T/θ .

Из рисунка (1.8) видно, что закон (1.3) хорошо выполняется при $T > \theta$, но не применим при $T < \theta$. Таким образом, экспериментальные зависимости теплоемкости от температуры для твердых тел

подтверждают применимость квантовой механики к описанию акустических процессов в твердом теле. В случае металлов к теплоемкости за счет колебаний кристаллической решетки добавляется теплоемкость за счет свободных электронов. Однако эту добавку можно обнаружить лишь при достаточно низкой температуре. Для простейших металлов найдено хорошее согласие теории с опытом.

б. Теплопроводность.

Теплота во всех твердых телах передается колебаниями решетки. Передача тепла колебаниями решетки происходит следующим образом. Каждый атом колеблется возле положения своего равновесия с амплитудой, определяемой температурой. С увеличением температуры увеличивается амплитуда его колебаний, следовательно, увеличивается периодическая сила, с которой он воздействует на соседние атомы. Если в кристалле создать разность температур, то возникнет перенос тепла от более нагретого конца к менее нагретому, обусловленный диффузией фононов.

Поток тепловой энергии Q , проходящей через поперечное сечение кристалла в единицу времени в направлении оси x равен:

$$Q = \lambda \frac{dT}{dx} \quad (1.5)$$

где λ – коэффициент теплопроводности, при расчете которого необходимо учитывать взаимодействие между фононами, т.е. фонон–фононное рассеяние, обусловленное ангармонизмом колебаний решетки. То есть в идеальном кристалле атомы должны были бы колебаться строго периодически, излучая упругие волны, переносящие тепло. Эти волны не взаимодействовали бы друг с другом, распространяясь со скоростью звука. В реальном кристалле существуют флуктуации плотности и самые разнообразные дефекты, о которых мы говорили ранее. Это приводит к рассеянию упругих волн как на дефектах решетки, так и при встрече друг с другом. По аналогии с кинетической теорией газов можно показать, что

$$\lambda = \frac{u \cdot l \cdot c_v}{3} \quad (1.6)$$

где u – модуль групповой скорости фононов, l – средняя длина свободного пробега фононов между двумя последовательными столкновениями, c_v – теплоемкость единицы объема.

Для диэлектриков в области высоких температур преобладает фотон–фотонное рассеяние, и длина свободного пробега должна быть обратно пропорциональна концентрации фононов, которая, согласно статистике Бозе – Эйнштейна

$$n = (e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)^{-1} \quad (1.7)$$

при высоких температурах $n \sim T$. При $T > \theta$, как показано выше, c_v практически не зависит от температуры, следовательно, $\lambda \sim \frac{1}{T}$, что качественно согласуется с опытом.

При $T < \theta$ длина свободного пробега, определяемая фотон–фотонным рассеянием, резко возрастает и практически не зависит от T . Теплопроводность в этой области целиком определяется зависимостью от T теплоемкости кристалла. В металлах в переносе тепла участвуют также электроны проводимости. В общем случае для металла коэффициент теплопроводности равен сумме решеточной фотонной и электронной составляющих:

$$\lambda = \lambda_s + \lambda_\phi \quad (1.8)$$

Вклад электронов в теплопроводность металлов примерно в два раза больше вклада решетки, поэтому чистые металлы значительно лучше проводят тепло, чем неметаллы. Для простейших металлов найдено хорошее согласие теории с экспериментом. Явление переноса теплоты в полупроводниках сложнее, чем в диэлектриках и металлах, так как в них могут быть существенными оба механизма теплопроводности $\lambda_s \approx \lambda_\phi$, что имеет место при сравнительно высокой концентрации заряда. Возможно также преобладание диэлектрического механизма теплопроводности, когда $\lambda_s < \lambda_\phi$.

1.5. Дифракция волн в кристаллах.

Обычно для исследования структуры кристаллов используют дифракцию рентгеновских лучей, для которых длина волны сравнима с

типичными межатомными расстояниями (порядка 10^{-8} см). Для исследования кристаллов требуется рентгеновское излучение с энергией квантов от 10 до 50 КэВ. В 1913г. У.Л.Брэгг показал, что в кристаллических веществах для некоторых определенных длинах волн и направлений падающих лучей наблюдаются дифракционные максимумы при их отражении от параллельных плоскостей ионов, отстоящих друг от друга на расстояние d (рис.1.8).

Чтобы лучи интерферировали с усилением, разность хода должна составлять целое число длин волн, что приводит к условию *Вульфа – Брэгга*

$$2d \sin \theta = m\lambda \quad (1.9)$$

где θ – угол скольжения, $m = 1, 2, 3, \dots$ – порядок дифракции.

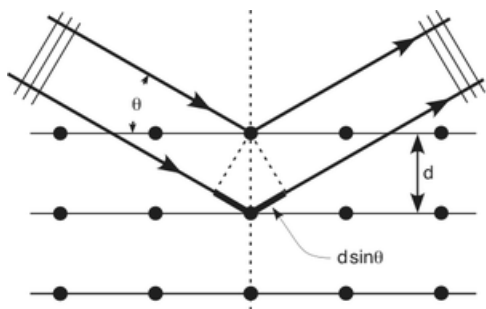


Рис.1.8. Ход лучей при наблюдении дифракции в кристаллах.

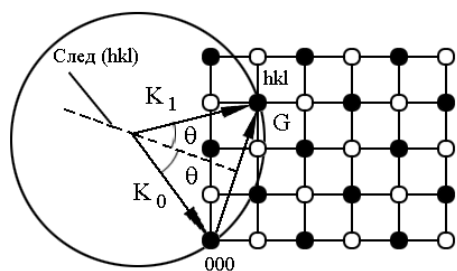


Рис.1.9. Построение сферы Эвальда.

Поясним смысл введенного ранее (п.1.1) понятия обратной решетки. Обратную решетку можно анализировать также как и кристаллическую решетку, рассматривать в ней узлы $[h, k, l]$, важные направления, плоскости, координаты точек и т.д. Можно сказать, что обратная решетка отображает дифракционную картину от трехмерной решетки. Обратная решетка жестко связана с кристаллической решеткой кристалла, при повороте кристалла вместе с ним поворачивается и обратная решетка. Для наблюдения дифракции кристалл поворачивают так, чтобы вектор рассеяния совпал бы с одним из узлов обратной решетки. Предсказать и наглядно изобразить это можно с

помощью построения *Эвальда* (рис.1.9). Отложим волновой вектор \vec{k}_0 падающей на кристалл волны, так что его конец совпадет с узлом $[0, 0, 0]$

обратной решетки. Поскольку частота и скорость рассеянной и падающей волны совпадают, вектор рассеянной волны \vec{k}_1 будет иметь ту же длину, что и \vec{k}_0 , но неопределенное направление, тогда его удобно изобразить в виде сферы (сферы Эвальда) с центром в начале вектора \vec{k}_0 . Из рис. 1.9. видно, что между длинами векторов \vec{k}_0 и \vec{G} существует связь:

$$|\vec{G}| = |\vec{k}_0| \cdot 2 \sin \theta \quad (1.10)$$

Можно найти множество всех волновых векторов \vec{k}_0 волн и частиц, отвечающих условию дифракции на кристалле. Уравнение (1.10) можно переписать как:

$$|\vec{G}| = |\vec{k}_0| \cdot 2 \cos(\vec{G}\vec{k}_0) \quad \text{или} \quad |\vec{G}|^2 = 2 \cdot (\vec{G}\vec{k}_0) \quad (1.10a)$$

Последнее есть уравнение (относительно \vec{k}_0) для плоскости перпендикулярной вектору \vec{G} и отстоящей от начала координат на расстоянии $\frac{|\vec{G}|}{2}$. Оно же описывает возможные координаты вектора \vec{k}_0 , удовлетворяющие условию дифракции. Тогда множество концов векторов \vec{k}_0 , отвечающих условию дифракции, лежит на плоскостях, проходящих через середины всех векторов обратной решетки и перпендикулярных им. Именно таким способом строится элементарная ячейка Вигнера – Зейтца. Ячейку Вигнера – Зейтца, построенную в обратном пространстве, принято называть первой зоной Бриллюэна. Она обладает важным свойством: волны и частицы, волновой вектор которых находится на ее границе, удовлетворяют условию дифракции. Зоны Бриллюэна играют важную роль при рассмотрении движения электронов, фононов и других частиц в кристалле и при анализе энергетических зон в кристаллах.

Глава 2. Электронная структура кристаллов. Элементы зонной теории твердого тела.

Зонная теория твердого тела позволяет с единой квантовомеханической точки зрения объяснить существование металлов, полупроводников и диэлектриков, их электрофизические свойства. В основе зонной теории лежит формирование и заполнение электронами разрешенных и запрещенных энергетических зон с учетом принципа Паули и элементов статистики.

Для определения энергетических состояний электрона в рамках зонной теории твердого тела решается нерелятивистское уравнение Шредингера

$$\Delta\psi(r) = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(r))\psi(r) \quad (2.0)$$

где $\psi(r)$ – волновая функция электрона.

Точный учет потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электрона с электрическим полем кристаллической решетки $V(r)$ приводит к тому, что решение уравнения Шредингера сводится к задаче многих частиц. В результате мы получаем систему уравнений порядка 10^{23} , решить которую даже современными компьютерными методами невозможно, поэтому для решения этой задачи используют различные приближения. Так, например, адиабатическое приближение основано на том, что масса ядра в атоме много больше массы электрона, поэтому скорость движения ядра уступает примерно на два порядка скорости движения электронов. Это позволяет в первом приближении рассматривать только движение электронов в поле неподвижных ядер. Другое, более распространенное приближение – одноэлектронное, или метод Хартри – Фока. В этой модели энергия попарного взаимодействия электронов в кристаллической решетке заменяется взаимодействием одного электрона с усредненным самосогласованным полем всех остальных электронов.

Мы рассмотрим два подхода к рассмотрению состояний энергии электрона в кристалле – приближения *сильной и слабой* связи.

2.1. Приближение сильной связи.

В рамках приближения сильной связи предполагается, что электроны находятся в потенциальных ямах своих атомов (являются квазисвязанными). Если энергия электрона меньше высоты потенциального барьера, то с классической точки зрения такой барьер не проницаем для электрона, а с точки зрения квантовой теории существует вероятность прохождения электрона сквозь потенциальный барьер конечной ширины вследствие туннельного эффекта. Рассмотрим формирование кристалла в рамках приближения сильной связи (рис.2.1).

Сначала N атомов, расположены далеко друг от друга, а их энергетические уровни $2N$ -кратно вырождены. При сближении атомов в кристаллическую решетку вырождение энергетических уровней снимается. Дискретные энергетические уровни атомов взаимодействуют друг с другом и расщепляются в энергетические зоны. Взаимодействие между атомами может привести к перекрытию двух отдельных зон, в таком случае получится одна зона с числом электронных состояний равным сумме этих состояний в перекрывшихся зонах. И в этом случае число электронных состояний окажется кратным $2N$.

Энергетическая зона или совокупность энергетических зон, образовавшихся в результате расщепления одного или нескольких энергетических уровней изолированных атомов при объединении их в кристаллы, называется *разрешенной зоной*. К разрешенным зонам относят валентную зону и зону проводимости. На зонных схемах приняты также обозначения дна зоны проводимости $-E_c$ и потолка валентной зоны $-E_v$ (рис.2.2).

В рамках приближения сильной связи рассматриваются связанные электроны валентной зоны, которые могут, преодолев потенциальный барьер, стать свободными электронами зоны проводимости. Этот процесс называется *генерацией* свободных носителей заряда (переход G на рис. 2.2).

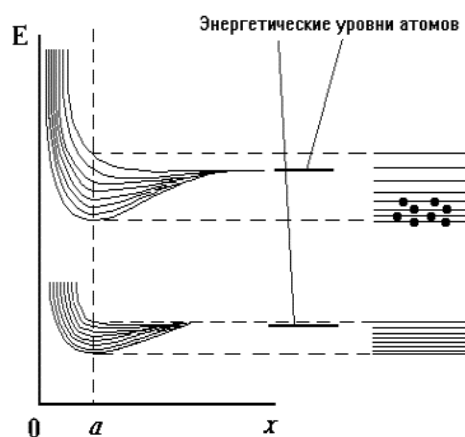


Рис.2.1. Расщепление энергетических уровней при сближении атомов.

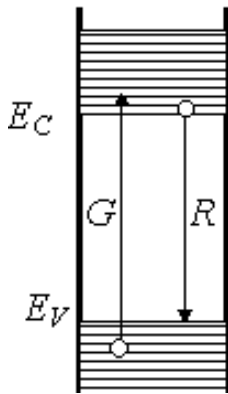


Рис.2.2. Зонная схема полупроводника.

В результате таких переходов в валентной зоне появляются свободные энергетические уровни, отсутствие электронов на которых следует трактовать как наличие на них фиктивных зарядов - дырок. Переход электронов из зоны проводимости в валентную зону называется *рекомбинацией* (переход R на рис. 2.2). Область значений энергии, которыми не может обладать электрон, называется *запрещенной зоной*. *Ширина запрещенной зоны* – это разность энергий между нижним уровнем одной разрешенной зоны и верхним уровнем

соседней запрещенной $E_g = E_C - E_V$. Чем шире запрещенная зона, тем меньше электронов способно преодолеть ее. Высота потенциального барьера соответствует ширине запрещенной зоны. По ширине запрещенной зоны можно провести классификацию твердых тел на металлы, диэлектрики и полупроводники. Если ширина запрещенной зоны $E_g > 2 \div 3$ эВ, то твердое тело называется *диэлектриком*. При абсолютном нуле температуры диэлектрик имеет полностью заполненную валентную зону и пустую зону проводимости. В случае, когда валентная зона заполнена частично, или наблюдается перекрытие зон, при этом запрещенная зона отсутствует $E_g \rightarrow 0$, такое твердое тело является *металлом*. Промежуточное положение занимают *полупроводники*. Различие между полупроводниками и диэлектриками чисто условное. Можно сказать, что полупроводники – это диэлектрики с $E_g < 2$ эВ, у которых при низкой температуре все состояния в валентной зоне заполнены электронами.

2.2. Приближение слабой связи.

а. Свободный электронный газ в металлах.

Для описания поведения электронов в твердом теле в рамках классической электронной теории металлов Друде – Лоренца используют понятие свободного электронного газа, когда каждый атом металла отдает в общее пользование по одному валентному электрону. Эти свободные электроны подобны идеальному газу

невозмущенных и не имеющих размеров молекул из молекулярной физики. При этом кулоновское отталкивание всеми другими электронами металла уравнивается притяжением ядрами (ионами) атомов. Свободные электроны участвуют в хаотическом (тепловом) движении и сталкиваются с ионами кристаллической решетки, что приводит к установлению теплового равновесия между электронным газом и кристаллической решеткой. При этом средняя скорость теплового движения электронов аналогична средней скорости молекул идеального газа. Таким образом, рассматривать электронный газ по аналогии с идеальным возможно только при выполнении условий термодинамического равновесия.

Если электрон движется со скоростью v , то его импульс

$$p = mv = \hbar k . \quad (2.1)$$

Длина волны де-Бройля электрона

$$\lambda = h/mv \quad (2.1a)$$

Кинетическая энергия свободного электрона

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (2.2)$$

Эта формула выражает зависимость кинетической энергии от волнового числа, которая называется дисперсионной зависимостью (законом дисперсии). Для свободного электрона закон дисперсии квадратичен. Но движение электрона в кристалле нельзя считать свободным. Электрон в этом случае будет являться *квазичастицей*, обладающей определенными значениями основных параметров – *квазиимпульса*, *квaziволнового числа* и *эффективной массой*, отличающейся от массы покоя электрона.

б. Периодичность кристалла. Функция Блоха. Граничные условия Кармана-Борна. Зоны Бриллюэна.

В рамках приближения слабой связи описывают состояние *квазисвободного* электрона, движущегося в периодическом поле кристаллической решетки. Так как в идеальном кристалле атомы расположены в узлах кристаллической решетки, образуя строго периодическую структуру, то потенциальная энергия электрона $V(r)$ также зависит от пространственных координат, т.е. обладает трансляционной симметрией:

$$V(r) = V(r + a_i) \quad (2.3)$$

где r – радиус-вектор электрона, $a_i (i = 1, 2, 3)$ – векторы трансляций.

Решением уравнения Шредингера (2.0) в случае периодического потенциального поля является функция Блоха $\psi_k(r)$

$$\psi_k(r) = u_k(r) \cdot e^{ikr} \quad (2.4)$$

где $u_k(r)$ отражает периодичность потенциала решетки, \bar{k} – волновой вектор электрона в кристалле. Можно отметить, что при $V(r) = 0$ уравнение (2.0) имеет решение в виде плоской волны

$$\psi_k(r) = A \cdot e^{ikr} \quad (2.4a)$$

где A – нормировочный множитель. Волновая функция (2.4a) описывает движение свободного электрона с импульсом (2.1) и энергией (2.2).

Рассмотрим подробнее граничные условия для решения уравнения Шредингера, связанные с периодичностью расположения атомов в кристаллической решетке. Пусть кристалл имеет форму параллелепипеда с размерами L_x, L_y, L_z по осям x, y, z соответственно.

Для кубической решетки с периодом a

$$L_x = aN_x, L_y = aN_y, L_z = aN_z \quad (2.5)$$

где N_x, N_y, N_z – число атомов на соответствующих ребрах кристалла.

Следствием периодичности расположения атомов в кристалле для волновой функции ψ являются циклические граничные условия Кармана – Борна

$$\psi(x + L_x, y + L_y, z + L_z) = \psi(x, y, z) \quad (2.6)$$

а с учетом (2.4)

$$\psi(x + L_x, y + L_y, z + L_z) = u_k(r) e^{ikr} e^{ik_x L_x} e^{ik_y L_y} e^{ik_z L_z} \quad (2.7)$$

для выполнения условий (2.6) и (2.7) необходимо, чтобы

$$e^{ik_x L_x} = e^{ik_y L_y} = e^{ik_z L_z} = 1$$

это возможно только в случае

$$k_x L_x = 2\pi n_1; k_y L_y = 2\pi n_2; k_z L_z = 2\pi n_3 \quad (2.8)$$

где n_1, n_2, n_3 – целые числа.

Следовательно,

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_1; k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_2; k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_3 \quad (2.9)$$

Таким образом, компоненты волнового вектора \vec{k} изменяются дискретно, следовательно, дискретно меняются компоненты импульса $\vec{p} = \hbar\vec{k}$, и в соответствии с этим энергия электронов в разрешенной зоне оказывается *квантованной*.

Из формул (2.5), (2.9) можно получить пределы изменения \vec{k}

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_x < \frac{\pi}{a} \quad (2.10)$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_y < \frac{\pi}{a} \quad (2.11)$$

$$-\frac{\pi}{a} \leq k_z < \frac{\pi}{a} \quad (2.12)$$

где k_x, k_y, k_z принимают N_x, N_y, N_z значений соответственно. Тогда в разрешенной зоне имеется всего $N = N_x \cdot N_y \cdot N_z$ энергетических состояний, соответствующих различным значениям \vec{k} , т.е. равное числу атомов в кристалле. Учет принципа Паули позволяет заключить, что в разрешенной зоне может находиться $2N$ квантовых состояний, что подтверждает сделанное ранее предположение. Если аналогично обычному пространству координат (x, y, z) рассматривать пространство *квазиволновых векторов* (k_x, k_y, k_z) или пространство *квазиимпульсов* (p_x, p_y, p_z) , то из формул (2.10) – (2.12) видно, что эти пространства являются *обратными* по отношению к пространству координат. Значениям квазиволнового вектора (квазиимпульса) в интервалах, определяемых формулами (2.10) – (2.12) в пространстве квазиволнового вектора (квазиимпульса) соответствует некоторая область, называемая *первой зоной Бриллюэна*. Первая зона Бриллюэна является ячейкой Вигнера – Зейца в обратном пространстве. Принцип ее построения рассмотрен в параграфе 1.1. На рисунке 1.3 приведена первая зона Бриллюэна для типичных полупроводников – кремния и германия.

Вторая (следующая) зона Бриллюэна состоит из двух участков: от π/a до $2\pi/a$ и от $-2\pi/a$ до $-\pi/a$. Аналогично определяются последующие зоны Бриллюэна. Каждая зона Бриллюэна содержит все возможные значения квазиимпульса. Все зоны Бриллюэна дают состояния,

физически эквивалентные состояниям первой зоны Бриллюэна, и всю зонную схему кристалла можно представить в пределах одной — *приведенной* зоны Бриллюэна (рис. 2.3).

В приведенной зоне Бриллюэна используются преимущественно две верхние разрешенные зоны — *валентная зона* и *зона проводимости*,

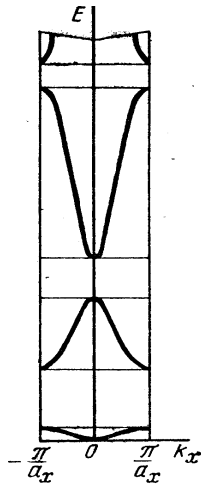


Рис.2.3. $E(k)$ для разных энергетических зон в приведенной зоне Бриллюэна.

возможные для данного кристалла значения квазиимпульса.

Графическое решение уравнения (2.0) в одномерном случае позволяет получить дисперсионную зависимость $E(k_x)$, показанную темными сплошными линиями на рис. 2.5. В отличие от свободного движения, в периодическом поле кристаллической решетки $V(r)$ уравнение (2.0) имеет решения не при всех значениях энергии. Области разрешенных энергий чередуются с зонами запрещенных энергий. В модели слабой связи это объясняется брэгговским отражением электронных волн в кристалле. Рассмотрим этот вопрос подробнее. Пусть электронная волна отражается от системы кристаллических плоскостей, перпендикулярных вектору обратной решетки \vec{G} , в обратном направлении $\vec{k}_0 = -\vec{k}_1$.

поскольку свободные носители заряда размещаются в этих зонах. Вблизи дна разрешенной зоны закон дисперсии $E(k)$ может быть близок к квадратичному (рис. 2.4), однако в большинстве случаев дисперсионные зависимости имеют сложный характер.

Таким образом, зона Бриллюэна удобна для характеристики кристаллов, так как она отражает симметрию кристаллов и при этом позволяет получить все

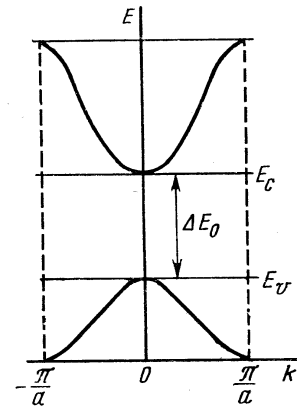


Рис.2.4. Параболический закон дисперсии $E(k)$ валентной зоны и зоны проводимости вблизи $k = 0$.

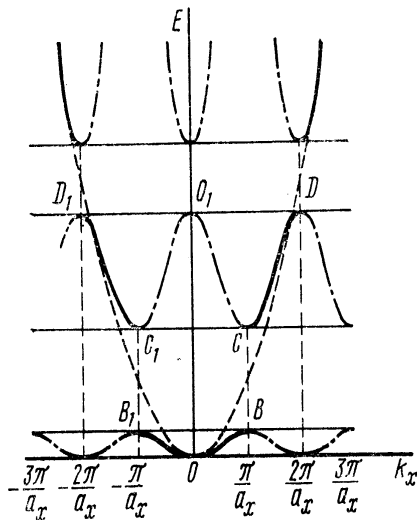


Рис. 2.5. Зависимость $E(k_x)$ для разрешенных энергетических зон.

Тогда амплитуды падающей (2.13) и отраженной (2.14) волн

$$\psi_k(r) = u_k(r) \cdot e^{ikr} \quad (2.13)$$

$$\psi_{-k}(r) = u_{-k}(r) \cdot e^{-ikr} \quad (2.14)$$

будут одинаковы

$$u_k(r) = u_{-k}(r) \quad (2.15)$$

Эти волны дают два решения уравнения Шредингера:

$$\psi_1(r) = 2u_k(r) \cdot \cos(kr) \quad (2.16)$$

$$\psi_2(r) = 2iu_k(r) \cdot \sin(kr) \quad (2.16a)$$

Согласно квантовой механике, плотность вероятности нахождения частицы в точке r равна квадрату модуля волновой функции. Следовательно, плотность распределения заряда в первом случае, согласно формуле

(2.16), равна:

$$\rho_1(r) = |\psi_1(r)|^2 = 4u_k^2(r) \cos^2(kr) \quad (2.17)$$

Эта функция описывает скопление отрицательного заряда на положительных ионах, где потенциальная энергия E_1 – наименьшая. Аналогично, из формулы (2.16a) получаем:

$$\rho_2(r) = |\psi_2(r)|^2 = 4u_k^2(r) \sin^2(kr) \quad (2.17a)$$

Эта функция описывает такое распределение электронов, при котором они располагаются преимущественно в областях, соответствующих серединам расстояний между ионами. При этом потенциальная энергия E_2 будет больше. Функции ψ_2 будет соответствовать энергия $E_2 > E_1$. Таким образом, одному и тому же значению \vec{k} на границе зон Бриллюэна соответствует два значения энергии, т.е. на границах зон энергия терпит разрыв $E_g = E_2 - E_1$, приводящий к образованию запрещенных зон шириной E_g . Энергия E_1 определяет верхнюю границу первой зоны, а энергия E_2 – нижнюю границу второй зоны. Это означает, что при распространении электронных волн в кристаллах возникают области значений энергии, для которых не существует решений уравнения Шредингера, имеющих волновой характер. Таким образом, приближение свободных электронов, как и приближение

сильной связи, приводит к возникновению разрешенных и запрещенных энергетических зон.

в. Обоснование использования приближения слабой связи.

Рассмотрим, насколько оправдано описанное приближение. Как известно из квантовой механики, движение свободного электрона с волновым вектором \vec{k} можно описать с помощью волнового пакета, представляющего собой суперпозицию плоских волн с непрерывно меняющимися значениями k в пределах от $k - \Delta k$ до $k + \Delta k$

$$\psi(x, t) = \int_{k-\Delta k}^{k+\Delta k} a_k e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (2.18)$$

Движение волнового пакета характеризуется групповой скоростью $v_{gp} = \frac{d\omega}{dk}$, равной скорости перемещения, например, его максимума.

Найдем координату максимума из условия $x - \frac{d\omega}{dk}t = 0$:

$$\frac{x}{t} = \frac{d\omega}{dk} = v = v_{gp} \quad (2.19)$$

Следовательно, скорость движения электрона равна групповой скорости волнового пакета. Мы получили, что движение электрона в кристалле описывается волновой функцией (2.4), которая является набором волновых функций с разными значениями k . Таким образом, движение электрона в кристалле можно описать волновым пакетом, составленным из блоховских волновых функций, групповая скорость которого равна средней скорости движения электрона в кристалле. Этот важный вывод придает квантовомеханический смысл методу эффективной массы, рассмотренному далее.

г. Эффективная масса электрона в кристалле.

Движение свободного электрона под действием внешней силы F подчиняется второму закону Ньютона, однако особенности движения электронов в кристалле обусловлены их взаимодействием с кристаллической решеткой. Поведение отдельного электрона в кристалле может быть описано тем же уравнением, что и для свободной частицы, если применить метод эффективной массы. Для свободных электронов

$$v = \frac{\hbar k}{m} \quad (2.20)$$

Определим из (2.2) путем дифференцирования:

$$dE/dk = k\hbar^2/m \quad (2.21)$$

После этого, подставляя k в (2.21), получим

$$v = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (2.22)$$

Положим далее, что энергия электрона изменяется под некоторым внешним воздействием. Тогда можем записать

$$dE = Fvdt \quad (2.23)$$

где F – внешняя сила, приводящая к изменению энергии. Подставляя (2.22) в уравнение (2.23), имеем

$$dE = \frac{F}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt \quad (2.24)$$

Отсюда получаем

$$\frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} F \quad (2.25)$$

Из уравнения (2.22) имеем также

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2E}{dk^2} \frac{dk}{dt} \quad (2.26)$$

с учетом (2.25)

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} F \quad (2.27)$$

Если ввести обозначение для эффективной массы электрона m^* ,

$$m^* = \frac{1}{\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2}} \quad (2.28)$$

то уравнение (2.27) есть закон Ньютона, связывающий внешнюю силу, массу и ускорение. Для свободных электронов формула (2.28) с учетом (2.2) дает $m^* = m$.

Рассмотрим рис. 2.4. Вблизи дна разрешенной зоны знак второй производной d^2E/dk^2 положителен, следовательно, эффективная масса электрона $m^* > 0$ и по порядку величины сравнима с массой свободного электрона. Но около средней части разрешенной зоны наблюдается перегиб кривой $E(k)$, так что d^2E/dk^2 обращается в нуль, а величина $m^* \rightarrow \infty$. Потом эффективная масса меняет знак и становится величиной

отрицательной. Это можно понять, если вместо электрона рассматривать дырку (вакансию электрона), имеющую положительные эффективную массу и элементарный заряд, но движущуюся в противоположном электрону направлении. Из рисунка 2.4 видно, что вблизи точек экстремума кривая $E(k)$ практически выходит на горизонталь, а в точках экстремума $\left(k = -\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right)$ величина $dE/dk = 0$. Следовательно, с учетом формулы (2.22) скорость электронов на границах зоны Бриллюэна равна нулю. Это соответствует брэгговскому отражению электронных волн в кристалле.

В общем случае эффективная масса электрона является тензором второго ранга

$$(m^*)^{-1} = \frac{1}{\hbar^2} \begin{vmatrix} \frac{d^2 E}{dk_x^2} & \frac{d^2 E}{dk_y dk_x} & \frac{d^2 E}{dk_z dk_x} \\ \frac{d^2 E}{dk_x dk_y} & \frac{d^2 E}{dk_y^2} & \frac{d^2 E}{dk_z dk_y} \\ \frac{d^2 E}{dk_x dk_z} & \frac{d^2 E}{dk_y dk_z} & \frac{d^2 E}{dk_z^2} \end{vmatrix} \quad (2.29)$$

Эффективная масса электрона, движущегося в определенном кристаллографическом направлении, зависит от направления движения электрона в кристалле и определяется через конкретную компоненту тензора (2.29). Экспериментальное определение эффективной массы электрона при движении в различных кристаллографических направлениях в кристалле производится разными методами, например, оптическими, при исследованиях термоэлектрических и гальваномагнитных явлений, с помощью эффекта поля или с использованием циклотронного резонанса.

d. Механическая аналогия эффективной массы.

В качестве механической аналогии эффективной массы электрона можно рассмотреть эффективную массу твердого шарика, находящегося в жидкости, плотность которой возрастает сверху вниз. Рассмотрим движение шарика массой m в сосуде, заполненном двумя жидкостями различной плотности (рис.2.6). Пусть плотность жидкости меняется от ρ_1 вверху сосуда до ρ_2 снизу. Сила тяжести

$$\vec{P} = \rho \vec{g} V \quad (2.30)$$

где ρ – плотность материала шарика.

Сила Архимеда

$$\vec{F}_A = \rho_{ж} \vec{g} V \quad (2.31)$$

где $\rho_{ж}$ – плотность жидкости. Согласно второму закону Ньютона

$$P - F_A = m a \quad (2.32)$$

Если рассматривать только внешние силы, то

$$P = m^* a \quad (2.33)$$

Из формул (2.32) и (2.33) получим

$$m^* = m \frac{P}{P - F_A} \quad (2.34)$$

или с учетом (2.30), (2.31)

$$m^* = m \frac{\rho}{\rho - \rho_{ж}} \quad (2.35)$$

Следовательно, эффективная масса шарика определяет действие на него внутренней силы F_A и изменяется аналогично эффективной массе электрона. При $\rho > \rho_{ж}$, то есть в верхней части сосуда, $m^* > 0$, в средней части $m \rightarrow \pm\infty$, а в нижней части, где $\rho < \rho_{ж}$, $m^* < 0$.

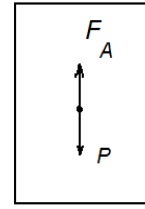


Рис.2.6. Твердый шарик в жидкости.

Глава 3. Статистика электронов и дырок в полупроводниках

В состоянии термодинамического равновесия для данного образца кристалла при заданной температуре существует определенное распределение электронов и дырок по энергиям, а также значения их концентраций. Вычисление концентраций основных и неосновных носителей заряда составляет главную задачу статистики электронов и дырок в кристаллах. Рассматриваемая задача распадается на две части: чисто квантово-механическую - нахождение числа возможных квантовых состояний электронов и статистическую - определение фактического распределения электронов по этим квантовым состояниям при термодинамическом равновесии.

3.1. Плотность состояний.

Соотношение неопределенностей Гейзенберга характеризует область пространственной локализации микрочастицы (dx, dy, dz) при заданном интервале проекций импульсов (dp_x, dp_y, dp_z) и может быть приведено к виду

$$dxdydzdp_x dp_y dp_z \geq h^3 \quad (3.1)$$

где минимальное значение полученного произведения

$$dx^0 dy^0 dz^0 dp_x^0 dp_y^0 dp_z^0 = h^3 \quad (3.2)$$

характеризует элементарную *фазовую ячейку* в шестимерном пространстве координат-импульсов $dxdydz dp_x dp_y dp_z$, которую может занять частица.

Найдем число ячеек в каком-либо объеме этого пространства dZ :

$$dZ = \frac{dV dp_x dp_y dp_z}{h^3} \quad (3.3)$$

где $dV = dxdydz$ – объем в обычном пространстве координат.

Тогда число элементарных фазовых ячеек для единицы обычного объема dz

$$dz = \frac{dZ}{dV} = \frac{dp_x dp_y dp_z}{h^3} \quad (3.4)$$

Найдем величину dz в шаровом слое пространства импульсов, ограниченном сферами радиусами p и $p + dp$ (рис.3.1):

$$dp_x dp_y dp_z = 4\pi p^2 dp \quad (3.5)$$

Учтем, что закон дисперсии для свободной частицы является квадратичной параболой, то есть

$$p^2 = 2mE, \quad dp = \left(\frac{m}{2E}\right)^{1/2} dE. \quad \text{Тогда число}$$

элементарных фазовых ячеек в единице обычного объема dz

$$dz = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} dE \quad (3.6)$$

Плотностью состояний $N(E)$ называется число элементарных фазовых ячеек в единице обычного объема, приходящихся на единичный интервал энергии:

$$N(E) = \frac{dz}{dE} = \frac{2\pi(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} \quad (3.7)$$

Из формулы видно, что зависимость плотности состояний N от энергии E является степенной функцией (рис.3.2). Из рисунка 3.2 видно, что для фиксированного интервала dE плотность состояний растет с ростом энергии E , что соответствует выводам квантовой механики о заполнении атомных уровней (оболочек) электронами.

3.2. Функция Ферми

В соответствии с принципом Паули в состоянии с одинаковым набором квантовых чисел (в элементарной фазовой ячейке) может находиться не более двух электронов с антипараллельными спинами. Но ячейка может быть занята частично или полностью, или свободна. Вероятность заполнения электронами с энергией E элементарной фазовой ячейки подчиняется квантовой статистике Ферми-Дирака

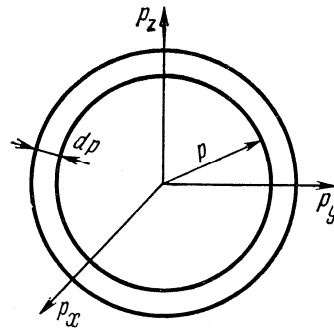


Рис.3.1. Шаровой слой в пространстве импульсов

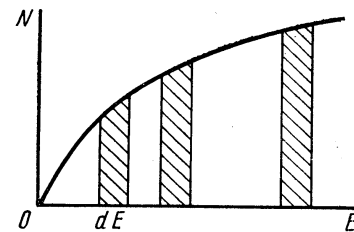


Рис.3.2 Зависимость плотности состояний N от энергии E .

$$f_F = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \quad (3.8)$$

где E_F – уровень Ферми. При абсолютном нуле $T = 0^\circ K$ все энергетические уровни, лежащие ниже уровня Ферми, заняты электронами ($f_F = 1$), а уровни, лежащие выше уровня Ферми, свободны ($f_F = 0$). При $T > 0^\circ K$ вероятности заполнения ниже (выше) лежащих уровней составляют $\frac{1}{2} < f_F < 1$ ($f_F < \frac{1}{2}$) соответственно (рис.3.3).

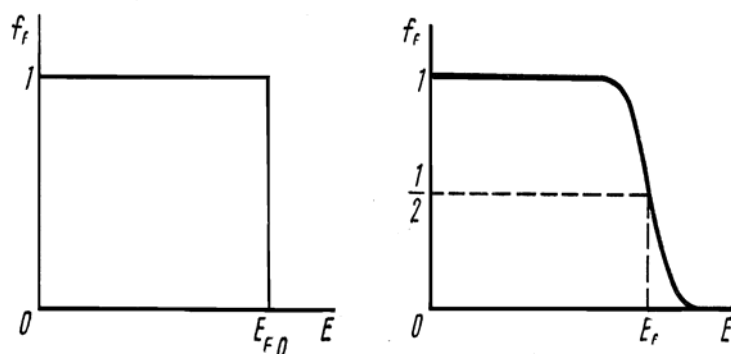


Рис. 3.3 (а, б). Распределение Ферми – Дирака при $T = 0^\circ K$ (а), при $T > 0^\circ K$ (б).

Из рисунка 3.3 видно, что с ростом температуры «хвост» функции Ферми сдвигается в сторону больших энергий и может попадать в зону проводимости. Это означает возникновение вероятности заброса электрона в С-зону. Таким образом, уровень Ферми – энергетический уровень, максимально заполненный электронами при абсолютном нуле температур, либо – заполненный наполовину при $T \neq 0^\circ K$.

С точки зрения термодинамики уровень Ферми представляет собой химический потенциал электронного газа в расчете на один электрон. Такая термодинамическая трактовка уровня Ферми позволяет дать еще одно определение этого понятия. В системе двух контактирующих тел (металл – полупроводник, два полупроводника и т.д.), между которыми возможен обмен носителями заряда в состоянии термодинамического равновесия, их химические потенциалы (уровни Ферми) выравниваются.

Электронный газ, свойства которого описываются функцией Ферми, называется *вырожденным* (квантовым). Однако если число разрешенных энергетических состояний становится значительно больше числа электронов, отпадает необходимость запрета Паули на заполнение этих состояний, и становится возможным использовать статистику

Максвелла – Больцмана. В этом случае вырождение электронного газа снимается, и он становится классическим.

Электронный газ можно считать невырожденным, если можно пренебречь единицей в формуле (3.8), то есть выполняется условие

$$e^{\frac{E-E_F}{kT}} \gg 1 \quad (3.9)$$

В этом случае получаем

$$f_F \rightarrow f_{M-B} = A * e^{-\frac{E}{kT}} \quad (3.10)$$

где $A = e^{\frac{E_F}{kT}}$

Условие (3.9) выполняется при $\frac{E - E_F}{kT} \ll 2 \div 3$ т. е. на «хвосте» кривой.

Другими словами, если за E принять дно зоны проводимости, то уровень Ферми в этом случае должен располагаться в запрещенной зоне на расстоянии несколько kT от ее краев, что выполняется для большинства полупроводников. Исключения составляют сильнолегированные (с большим количеством примесей) полупроводники, а также узкощелевые и бесщелевые полупроводники. Для описания их электронных свойств используют статистику Ферми – Дирака.

3.3. Концентрация электронного газа

Плотность состояний $N(E)$ определяет число состояний (элементарных фазовых ячеек), приходящихся на единичный интервал энергии на единицу объема. Значение функции Ферми дает вероятность нахождения электрона в состоянии с энергией E . Определим концентрацию свободных электронов, энергия которых заключена в интервале от E до $E + dE$

$$dn = dz \cdot 2 f_F = N \cdot 2 f_F dE \quad (3.11)$$

где множитель два связан с принципом Паули. Тогда с учетом формулы

(3.7)

$$dn = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} E^{1/2} f_F dE \quad (3.12)$$

Функция $\frac{dn}{dE}$ изображена на рис.3.4.

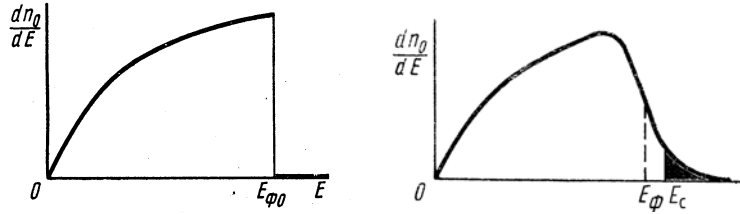


Рис.3.4 (а, б). Функция $\frac{dn}{dE}$ при $T = 0^\circ K$ (а) и при $T \neq 0^\circ K$ (б).

Из рис. видно, что при $T = 0^\circ K$ концентрация электронов возрастает для более высоких уровней и максимальна для уровня Ферми. При $T \neq 0^\circ K$ часть электронов приобретает энергию, достаточную для их термического заброса в С-зону, и их распределение по энергиям $\frac{dn}{dE}$ в зоне проводимости ограничивается дном С-зоны и распределением Ферми – Дирака (заштриховано на рис.3.4).

Интегрирование по энергии формулы (3.12) позволит оценить концентрацию вырожденного электронного газа

$$n = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\infty E^{1/2} f_F dE \quad (3.13)$$

При $T = 0^\circ K$ получим

$$n_0 = \frac{8\pi(2m)^{3/2}}{3h^3} E_{F0}^{3/2} \quad (3.14)$$

Для металлов характерно $n_0 \approx 10^{28} \text{ м}^{-3}$, тогда при абсолютном нуле в квантовом случае вырожденные электроны могут иметь энергию от 0 до $E_{F0} \approx 5 \text{ эВ}$, в то время как для классических электронов тепловое движение отсутствует, и их энергия (кинетическая и полная) равны нулю.

Найдем границу вырождения. Интегрирование формулы (3.13) с учетом условия (3.12) позволяет получить

$$n_0^{sp} = \frac{2(2\pi mkT)^{3/2}}{h^3} \quad (3.15)$$

тогда для металлов с $n_0 \approx 10^{28} \text{ м}^{-3}$, температура перехода электронного газа в невырожденный составляет $T \approx 5 \cdot 10^4 \text{ К}$. Таким образом, в металлах, находящихся в твердом состоянии, электронный газ всегда вырожден.

3.4. Концентрация носителей заряда и положение уровня Ферми в полупроводниках.

Полупроводники бывают *собственными* и *примесными*. Собственные полупроводники – это полупроводники, в которых нет примесей – *доноров* и *акцепторов* (рис.3.16 а).

Легирование – введение примеси в полупроводник, в этом случае полупроводник называется примесным. Если в полупроводник, состоящий из элементов 4 группы (например, кремний или германий), ввести в качестве примеси элемент 5 группы, то получим донорный полупроводник (у него будет электронный тип проводимости), или полупроводник *n* – типа. Основными носителями заряда в нем являются электроны (рис.3.16 б). Минимальная энергия, которую нужно сообщить электрону, находящемуся на донорном уровне, чтобы перевести его в зону проводимости, называется энергией ионизации донора $\Delta E_d = E_c - E_d$ (рис.3.16 в). Если же ввести в качестве примеси элемент 3 группы, то получится акцепторный полупроводник, обладающий дырочной проводимостью (*p*–тип). Основные носители заряда – дырки. Минимальная энергия, которую нужно сообщить электрону валентной зоны, чтобы перевести его на акцепторный уровень, называется *энергией ионизации акцептора* $\Delta E_a = E_c - E_g + E_a$ (рис. 3.17).

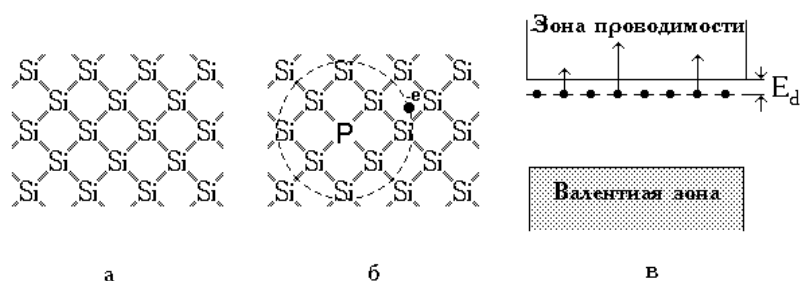


Рис.3.16. Тетраэдрическая решетка кремния (а – собственный кремний, б – кремний, легированный фосфором, в – донорный уровень)

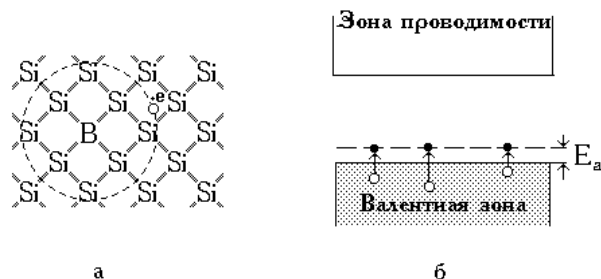


Рис.3.17. Акцепторный полупроводник (*a* – кремний, легированный фосфором, *б* – акцепторный уровень)

Рассмотрим подробнее концентрацию носителей заряда и положение уровня Ферми в зависимости от температуры в этих полупроводниках.

***a*). Собственный полупроводник.**

Интегрирование формулы для невырожденного полупроводника позволяет определить равновесную концентрацию электронов в зоне проводимости

$$n_0 = N_c e^{-\frac{E_c - E_F}{kT}} \quad (3.16)$$

$$\text{где } N_c = \frac{2(2\pi m_n kT)^{3/2}}{h^3} \quad (3.17)$$

- эффективная плотность состояний в зоне проводимости.

Аналогично находится равновесная концентрация дырок в валентной зоне

$$p_0 = N_v e^{-\frac{E_F - E_v}{kT}} \quad (3.18)$$

$$\text{где } N_v = \frac{2(2\pi m_p kT)^{3/2}}{h^3} \quad (3.19)$$

- эффективная плотность состояний в валентной зоне.

Для расчета n_0 и p_0 по формулам (3.16) и (3.18) необходимо знать положение уровня Ферми E_F . Однако произведение концентраций электронов и дырок для невырожденного полупроводника не зависит от уровня Ферми, хотя зависит от температуры:

$$n_0 p_0 = N_c N_v e^{-\frac{E_c - E_v}{kT}} = N_c N_v e^{-\frac{E_g}{kT}} \quad (3.20)$$

Выражение

$$n_0 p_0 = n_i^2 \quad (3.21)$$

называется *законом действующих масс*, а величина n_i – *собственной концентрацией* носителей заряда в полупроводнике. Таким образом,

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (3.22)$$

Следует отметить экспоненциальный рост концентрации носителей с температурой, при этом коэффициент перед экспонентой обнаруживает гораздо более слабую температурную зависимость. Зависимость $n_i(T)$

спрямляется в координатах $\lg n_i - 10^3/T$, следовательно, тангенс угла наклона α экспериментальной прямой позволяет определить ширину запрещенной зоны E_g собственного полупроводника при данной температуре (рис.3.18). Так, например, при $T = 300^\circ K$ для Si $n_i = 1.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}$, $E_g = 1.1 \text{ эВ}$.

Полупроводник будет электронным (n -типа), если выполняется соотношение $n_0 \gg n_i \gg p_0$, и дырочным (p -типа), если выполняется $p_0 \gg n_i \gg n_0$.

В состоянии термодинамического равновесия полупроводник электрически нейтрален, то есть суммарный заряд всех заряженных частиц должен быть равен нулю. Кроме свободных носителей — электронов и дырок неподвижные носители могут оказаться в запрещенной зоне, что отражено в уравнении электронейтральности

$$n_0 + N_a = p_0 + N_d \quad (3.23)$$

где N_a — число электронов на акцепторных уровнях, N_d — концентрация дырок на донорных уровнях. Это уравнение используется для расчета p_0 при известном n_0 или, наоборот, для расчета n_0 при известном p_0 .

В собственном полупроводнике уравнение электронейтральности (3.23) принимает вид

$$n_0 = p_0 \quad (3.24)$$

Тогда, с учетом формул (3.16) и (3.18) получим

$$N_c e^{\frac{E_c - E_F}{kT}} = N_v e^{\frac{E_F - E_v}{kT}} \quad (3.25)$$

Отсчет энергии на энергетической схеме проведем от дна зоны проводимости $E_c = 0$, тогда $E_v = -\Delta E = -E_g$, следовательно,

$$E_F = -\frac{E_g}{2} - kT \ln \left(\frac{N_v}{N_c} \right)^{1/2} \quad (3.26)$$

Или с учетом формул (3.17) и (3.19)

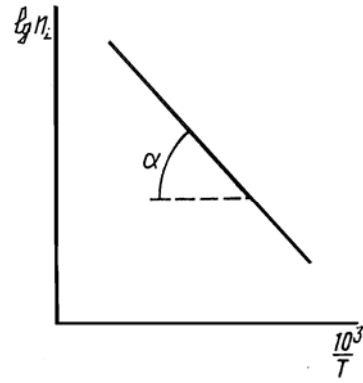


Рис.3.18. Зависимость n_i от температуры в координатах $\lg n_i - 10^3/T$.

$$E_F = -\frac{E_g}{2} - kT \ln\left(\frac{m_p}{m_n}\right)^{3/4} \quad (3.27)$$

При $T = 0^\circ K$ $E_F = -\frac{E_g}{2} = E_i$. При $T \neq 0^\circ K$ как правило $m_p \approx m_n$, поэтому второе слагаемое значительно меньше первого, и можно

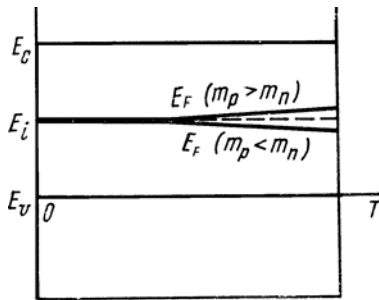


Рис.3.19. Положение уровня Ферми в собственном полупроводнике в зависимости от температуры.

сказать, что уровень Ферми находится вблизи середины запрещенной зоны (рис.3.19). Если $m_p > m_n$, то величина E_F располагается выше середины E_g . И наоборот, $m_p < m_n$, то E_F располагается ближе к валентной зоне. Отметим также, что с ростом температуры при $m_p > m_n$ уровень Ферми приближается к зоне проводимости.

б) Невырожденный примесный полупроводник.

Следуя уравнению электронейтральности (3.23), суммарный заряд всех заряженных частиц должен быть равен нулю. Найдем концентрацию и положение уровня Ферми на примере донорного полупроводника. При низких температурах наиболее вероятен заброс

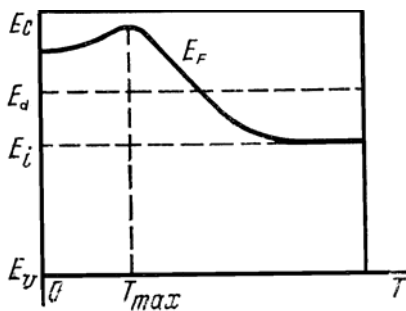


Рис.3.20. Положение уровня Ферми в донорном полупроводнике в зависимости от температуры.

электронов в зону проводимости с донорных уровней нежели из валентной зоны (рис.3.20).

Тогда концентрация электронов в зоне проводимости будет равна концентрации дырок на донорных уровнях $n_n = p_d$. Если концентрация свободных электронов невелика, то концентрация электронов в зоне проводимости донорного полупроводника вычисляется аналогично концентрации для собственного полупроводника (3.25), в этом случае

$$N_c e^{\frac{E_c - E_F}{kT}} = N_d e^{\frac{\Delta E_d - E_F}{kT}} \quad (3.28)$$

Если отсчет энергии на энергетической схеме проведем от дна зоны проводимости $E_c = 0$, тогда после логарифмирования и преобразования нетрудно получить

$$E_F = -\frac{\Delta E_d}{2} - kT \ln \left(\frac{N_d}{N_c} \right)^{1/2} \quad (3.29)$$

При $T = 0^\circ K$

$$E_F = -\frac{\Delta E_d}{2} \quad (3.30)$$

т. е. при абсолютном нуле уровень Ферми в донорном полупроводнике располагается посередине между донорными уровнями и дном зоны проводимости (рис.3.20). С повышением температуры, пока $N_c < N_d$, уровень Ферми поднимается к дну зоны проводимости, а при более высоких температурах, когда $N_c > N_d$, уровень Ферми опускается к середине запрещенной зоны, так как при высоких температурах начинается заметный переход электронов из валентной зоны в зону проводимости и возрастает концентрация собственных носителей n_i (рис.3.18).

Так как $n_n = p_d$, то с учетом $n = \sqrt{n_n p_d}$, из соотношения (3.28) следует температурная зависимость концентрации свободных электронов донорного полупроводника при сравнительно низких температурах и частичной ионизации примесных атомов:

$$n = (N_c N_d)^{1/2} e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}} \quad (3.31)$$

где $(N_c N_d)^{1/2}$ – величина, слабо зависящая от температуры по сравнению с экспоненциальным множителем.

Из рисунка 3.21 видно, что при низких температурах наклон зависимости $\lg n_{oi} - 1/T$ определяется энергией ионизации доноров ΔE_d для полупроводника n -типа.

При более высоких температурах, когда концентрация собственных носителей еще невелика $n_i \ll N_d$, а все электроны с донорных уровней

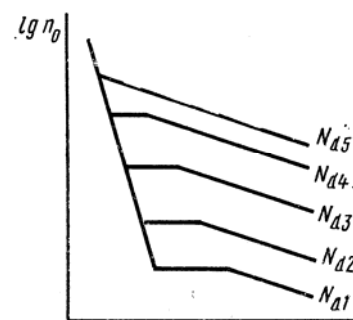


Рис.3.21. Зависимости n_0 от температуры в координатах $\lg n_0 - 1/T$ для донорного полупроводника при увеличении степени легирования с возрастанием порядкового номера.

перешли в зону проводимости, то концентрация электронов в зоне проводимости n становится равной концентрации донорной примеси N_d . Эта область температур носит название области истощения примеси (горизонтальный участок прямой на рис.3.21). При дальнейшем росте температуры будет расти вероятность перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости. В этом случае проводимость полупроводника из примесной превращается в собственную (одинаковый для всех кривых участок графика – прямая с максимальным наклоном на рис.3.18). Переход к собственной проводимости происходит при тем большей температуре, чем шире запрещенная зона и больше концентрация примеси. Область температур, в которой концентрация носителей заряда определяется термической генерацией электронно–дырочных пар (образования электрона в зоне проводимости и дырки в валентной зоне при возбуждении), это область собственной электропроводности полупроводников.

Для невырожденных акцепторных полупроводников рассуждения аналогичны, и при низкой температуре основным механизмом образования дырок является захват акцепторами электронов из валентной зоны вследствие теплового движения, при этом $p = n_a$. Положение уровня Ферми в запрещенной зоне при этом определяется формулой

$$E_F = -\frac{E_g - \Delta E_a}{2} - kT \ln\left(\frac{N_a}{N_v}\right)^{1/2} \quad (3.32)$$

При $T = 0^\circ K$

$$E_F = -\frac{E_g - \Delta E_a}{2} \quad (3.33)$$

т. е. при абсолютном нуле уровень Ферми в полупроводнике, содержащем акцепторы, располагается посередине между акцепторными уровнями и вершиной валентной зоны (рис.3.22). С повышением температуры, пока $N_v < N_a$, уровень Ферми приближается к потолку валентной зоны. В области истощения примеси все акцепторные уровни заполняются электронами, пришедшими из

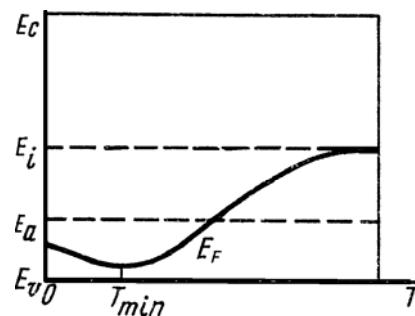


Рис.3.22. Положение уровня Ферми в акцепторном полупроводнике в зависимости от температуры.

валентной зоны. При более высоких температурах, когда $N_v > N_a$, наиболее вероятен процесс генерации электронно-дырочных пар, при этом уровень Ферми движется к середине запрещенной зоны в область собственной проводимости. Соотношение для температурной зависимости концентрации свободных дырок при низких температурах имеет следующий вид

$$p_0 = (N_v N_a)^{1/2} e^{-\frac{\Delta E_a}{2kT}} \quad (3.34)$$

Зависимость p_0 от температуры в координатах $\lg p_0 - 1/T$ для акцепторного полупроводника при увеличении степени легирования с возрастанием порядкового номера аналогична рисунку 3.21 для донорного полупроводника. Следовательно, как и в случае с донорным полупроводником при низких температурах наклон зависимости $\lg p_0 - 1/T$ определяется энергией ионизации акцепторов ΔE_a для полупроводника p -типа.

в). Вырожденный полупроводник.

Если концентрация примеси в полупроводнике велика, то среднее расстояние между примесными атомами становится настолько малым, что электроны могут переходить от одного атома к другому вследствие туннельного эффекта. При этом примесные уровни соединяются в зону, которая сливается с разрешенной зоной (для донорных уровней – с зоной проводимости, для акцепторных – с валентной), а уровень Ферми попадает в разрешенную зону. Такой полупроводник называется вырожденным, а носители заряда в нем подчиняются статистике Ферми – Дирака. Концентрация носителей в вырожденных полупроводниках выше из-за большой концентрации примеси. Например, в невырожденном германии концентрация носителей имеет порядок $10^{20} - 10^{22} \text{ м}^{-3}$, а в вырожденном германии – $10^{24} - 10^{26} \text{ м}^{-3}$.

Глава 4. Кинетические явления в полупроводниках.

4.1 Подвижность.

В отсутствие внешнего электрического поля при $T > 0^\circ K$ свободные электроны и дырки в полупроводнике совершают хаотическое движение. При включении электрического поля E электроны ускоряются в направлении, противоположном полю, а дырки – по направлению поля. Вследствие теплового движения атомов происходит рассеяние электронов и дырок на атомах и дефектах кристаллической решетки. Средняя скорость, приобретаемая электронами \bar{v}_n (дырками \bar{v}_p) под действием электрического поля \vec{E} , равна

$$\bar{v}_n = \frac{q\vec{E}}{m_n} \tau_n \quad (4.1)$$

$$\bar{v}_p = \frac{q\vec{E}}{m_p} \tau_p \quad (4.2)$$

где τ_n, τ_p – среднее время свободного пробега электронов и дырок соответственно.

Среднее время свободного пробега электронов и дырок

$$\tau_n = \frac{l_n}{v_n} \quad (4.3)$$

$$\tau_p = \frac{l_p}{v_p} \quad (4.4)$$

где l_n, l_p – средняя длина свободного пробега электрона и дырки;

v_n, v_p – модуль средней скорости теплового движения электронов и дырок соответственно. Подставив значения τ_n и τ_p в выражения (4.1) и (4.2), получим уравнения для подвижностей носителей заряда:

$$u_n = \frac{v_n}{E} = \frac{ql_n}{m_n v_n} \quad (4.5)$$

$$u_p = \frac{v_p}{E} = \frac{ql_p}{m_p v_p} \quad (4.6)$$

где u_n, u_p – подвижности электронов и дырок соответственно.

Подвижности u_n и u_p различны по величине вследствие различия в эффективных массах и времени свободного пробега электрона и дырки, которые зависят от механизма рассеяния электронов и дырок

в кристаллической решетке.

Можно выделить несколько основных *механизмов рассеяния* носителей заряда:

- 1) на тепловых колебаниях структурных элементов кристаллической решетки;
- 2) на ионизированных примесях (ионы примеси);
- 3) на нейтральных примесях (атомы примеси);
- 4) на дефектах решетки (вакансии, точечные дефекты, дислокации, границы кристаллитов, плоскости спайности и др.);
- 5) на носителях заряда.

Ввиду обычно малой концентрации дефектов и носителей заряда четвертым и пятым видами рассеяния в теории полупроводников обычно пренебрегают.

1. *Рассеяние носителей на тепловых колебаниях атомной решетки* (Ge, Si, Te и др.). Из общих рассуждений следует, что вероятность рассеяния носителей тем больше, чем больше поперечное сечение объема, занимаемого колеблющимся атомом. Это поперечное сечение, как и энергия тепловых колебаний атомов решетки, прямо пропорционально квадрату амплитуды колебаний атомов решетки. А энергия решетки растет с температурой по линейному закону. Тогда вероятность рассеяния прямо пропорциональна температуре, и, следовательно, длина свободного пробега обратно пропорциональна абсолютной температуре

$$l \sim \frac{1}{T} \quad (4.7)$$

Средняя скорость теплового движения носителей заряда в невырожденных полупроводниках зависит от температуры так же, как скорость движения молекул идеального газа:

$$v \sim \sqrt{T} \quad (4.8)$$

Объединяя зависимости (4.5), (4.6), (4.7) и (4.8) получим для подвижности

$$\mu \sim T^{-3/2} \quad (4.9)$$

т. е. с ростом температуры подвижность, обусловленная рассеянием на тепловых колебаниях решетки, уменьшается. Рассеяние на тепловых колебаниях решетки играет преобладающую роль при высоких температурах, а рассеяние на дефектах решетки и примесях в основном сказывается при низких температурах.

2. *Рассеяние носителей на ионизированных примесях.* Для этого механизма рассеяния характерно уменьшение эффективности рассеяния движущегося заряда при увеличении скорости движения, так как с

увеличением скорости уменьшается время воздействия центров рассеяния на движущиеся заряды. Вследствие этого длина свободного пробега носителя растет с увеличением скорости по закону: $l \sim v^4$, а подвижность $u \sim v^3$. Тогда температурная зависимость подвижности при рассеянии на ионизированных примесях

$$u \sim T^{3/2} \quad (4.10)$$

Этот механизм рассеяния преобладает над первым при низких температурах.

Если в рассеянии носителей участвуют оба рассмотренных механизма рассеяния и они независимы, то температурная зависимость подвижности носителей может быть представлена согласно формулам (4.9) и (4.10) соотношением

$$\frac{1}{u} = aT^{3/2} + bT^{-3/2} \quad (4.11)$$

где a и b – коэффициенты пропорциональности.

В целом зависимость подвижности носителей заряда от температуры оказывается весьма сложной, и формула (4.11) справедлива лишь в сравнительно узком интервале температур. Это объясняется тем, что в реальных полупроводниках при данной температуре имеют место и другие механизмы рассеяния, такие, например, как рассеяние на оптических колебаниях, на носителях заряда.

4.2. Температурная зависимость электропроводности полупроводников

Электропроводность полупроводников σ зависит от концентрации носителей заряда (n, p) и их подвижности (u_n, u_p)

$$\sigma_n = qnu_n \quad (4.12)$$

$$\sigma_p = qpu_p \quad (4.13)$$

И в общем случае является суммой электропроводностей всех носителей заряда, для полупроводников – электронов и дырок

$$\sigma = \sigma_n + \sigma_p \quad (4.14)$$

Учитывая зависимость концентрации и подвижности носителей заряда от температуры (см. формулы (3.16) и (4.9)), удельную электропроводность собственного полупроводника σ_i можно записать в виде

$$\sigma_i = cT^{-3/2} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (4.15)$$

где множитель $cT^{-3/2}$ медленно меняется с температурой, тогда как множитель $e^{-\frac{E_g}{2kT}}$ сильно зависит от температуры при $E_g \gg kT$. Введя обозначение $\sigma_{0i} \equiv cT^{-3/2}$, получим

$$\sigma_i = \sigma_{0i} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (4.15a)$$

В примесном полупроводнике при достаточно высоких температурах проводимость полупроводника является *собственной*, а при низких температурах – *примесной*. В области низких температур для удельной электропроводности примесной проводимости с учетом формул (3.31), (3.34) удельная электропроводность донорного (или акцепторного) полупроводника

$$\sigma_n = \sigma_{0n} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (4.16)$$

$$\sigma_p = \sigma_{0p} e^{-\frac{E_g}{2kT}} \quad (4.17)$$

Из формул (4.16), (4.17) очевидно, что зависимость удельной электропроводности σ от абсолютной температуры T в полупроводнике, содержащем доноры (акцепторы) различной концентрации N_d (N_a), определяется главным образом температурной зависимостью концентрации носителей заряда и имеет вид, аналогичный рисунку 3.21. Из рисунка 3.21 видно, что в области собственной проводимости данного полупроводника угловой коэффициент прямой ($tg\alpha$) определяется шириной запрещенной зоны полупроводника E_g , а в области примесной проводимости наклон зависимостей $\lg\sigma - \frac{10^3}{T}$ по ($tg\alpha_d$) и ($tg\alpha_a$) позволяет оценить энергию активации донорных и акцепторных уровней для полупроводников n и p - типа соответственно.

В области истощения примеси концентрация основных носителей остается постоянной и проводимость меняется вследствие изменения подвижности с температурой. Если основным механизмом рассеяния носителей в области истощения примеси является рассеяние на тепловых колебаниях решетки, то проводимость уменьшается с ростом температуры. Если же основным механизмом рассеяния является рассеяние на ионизированных примесях, то проводимость будет увеличиваться с ростом температуры.

Практически при исследовании температурной зависимости проводимости полупроводников часто пользуются не проводимостью, а сопротивлением полупроводника

$$R = \frac{1}{\sigma} \quad (4.18)$$

тогда для собственного полупроводника

$$R_i = R_{0i} e^{\frac{E_g}{2kT}} \quad (4.19)$$

для полупроводника n – типа

$$R_n = R_{0n} e^{\frac{\Delta E_d}{2kT}} \quad (4.20)$$

для полупроводника p – типа

$$R_p = R_{0p} e^{\frac{\Delta E_a}{2kT}} \quad (4.21)$$

Измеряя температурный ход сопротивления полупроводника в определенном интервале температур, можно из выражения (4.19) определить ширину запрещенной зоны E_g , из формул (4.20) и (4.21) – энергию ионизации донорной ΔE_d или акцепторной ΔE_a примеси.

4.3. Фотопроводимость

Причиной возникновения проводимости в полупроводниках кроме теплового воздействия могут являться и другие процессы, например, действие электрического поля, ионизация под действием разного рода излучений (свет, рентгеновские лучи, γ – лучи). Остановимся подробнее

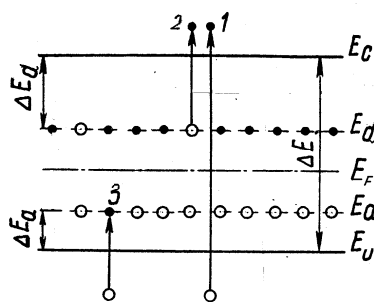


Рис.4.1. Возможные переходы электронов в полупроводнике при поглощении квантов света, приводящие к появлению свободных носителей: 1 – переход из v - зоны в c - зону; 2, 3 – переходы с примесных центров.

на световом воздействии. При поглощении квантов света возможны переходы, приводящие к появлению свободных носителей заряда (рис.4.1):

1) переход 1 соответствует собственному поглощению света (основными атомами кристалла), что приводит к образованию свободного электрона и свободной дырки на каждый поглощенный фотон (собственная фотопроводимость);

2) переход 2 соответствует поглощению света локальными

несовершенствами в кристалле (донорами), при этом на каждый поглощенный фотон образуется свободный электрон и дырка, связанная с соответствующим центром;

3) переход 3 соответствует случаю, когда каждый поглощенный фотон возбуждает на незанятый локальный уровень (акцептор) электрон из валентной зоны, в результате чего образуется свободная дырка и связанный электрон.

Существует *красная граница* фотопроводимости - максимальная длина волны, при которой свет является еще фотоэлектрически активным, т. е. создает свободные носители заряда. Для собственной фотопроводимости красная граница определяется соотношением

$$\lambda_{\text{макс } i} = \frac{ch}{\Delta E} = \frac{ch}{E_g} \quad (4.22)$$

для примесной фотопроводимости

$$\lambda_{\text{макс } d} = \frac{ch}{\Delta E_d} \quad (4.23)$$

$$\lambda_{\text{макс } a} = \frac{ch}{\Delta E_a} \quad (4.24)$$

4.4. Эффект Холла

Эффект Холла - гальваномагнитное явление, наблюдающееся в полупроводниках и широко применяется в практике, например, для исследования электрических свойств полупроводниковых материалов, на этом эффекте основано действие датчика Холла, предназначенного для измерения напряженности (индукции) магнитного поля. *Гальваномагнитными* называют кинетические явления, которые возникают при одновременном действии электрического и магнитного полей. В частности, эффект Холла состоит в возникновении электродвижущей силы в направлении, перпендикулярном току при помещении образца в поперечное магнитное поле.

Отметим, что применение формул классической физики в рамках квантовомеханического рассмотрения эффекта Холла (и предшествующей теории электропроводности) оправдано с точки зрения приближения слабосвязанных электронов. Так, следуя соотношению неопределенностей Гейзенберга,

$$\Delta r \Delta p \sim \hbar \quad (4.25)$$

неопределенность в координате для свободного электрона $\Delta r \rightarrow \infty$, что позволяет точно определить импульс и скорость электрона и использовать классические законы динамики.

Приведем элементарную теорию эффекта Холла для носителей заряда одного типа. Для этого рассмотрим образец полупроводника в виде прямоугольного параллелепипеда (рис.4.2).

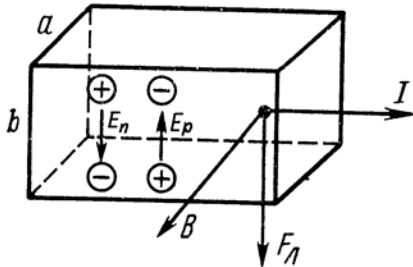


Рис.4.2. Отклонение электронов и дырок, движущихся в магнитном поле, в эффекте Холла.

Пусть ток протекает слева направо. Если ток создается дырками, то скорость дрейфа \vec{v}_{dp} имеет то же направление, что и ток I (рис.4.4); если же электронами, то направлена в противоположную сторону. Отметим, что дрейфовая скорость – это средняя скорость направленного электрическим полем движения носителей заряда. Поместим полупроводник во внешнее магнитное поле, чтобы индукция \vec{B} была направлена перпендикулярно току (к нам).

Сила Лоренца

$$\vec{F}_L = q[\vec{v}_{dp} \times \vec{B}] \quad (4.26)$$

для электронов и дырок сила Лоренца \vec{F}_L как результат векторного произведения будет направлена вниз, следовательно, как дырки, так и электроны будут отклоняться магнитным полем на нижнюю грань, а верхняя грань будет обеднена в первом случае дырками, во втором — электронами.

Таким образом, в полупроводнике p – типа нижняя грань заряжается положительно, а верхняя грань – отрицательно, и возникает холловское поле $q\vec{E}$, направленное снизу вверх. В полупроводнике n – типа нижняя грань (при том же направлении тока) заряжается отрицательно, верхняя – положительно, и холловское поле направлено сверху вниз. Если в переносе заряда участвуют и дырки, и электроны (смешанная проводимость), то картина усложняется. Если бы подвижности и концентрации носителей обоих знаков были одинаковы, то вследствие взаимной компенсации электронов и дырок у боковых граней образца суммарный заряд будет равен нулю. Как правило, концентрация и подвижность носителей одного знака больше, чем у другого, и у граней пластинки происходит частичная взаимная компенсация зарядов противоположных знаков, при этом возникает поперечная напряженность электрического поля нескомпенсированных зарядов и, следовательно, поперечная разность потенциалов (ЭДС Холла).

При одном типе носителей заряда условием стационарного распределения носителей заряда, определяющим холловское поле, является равенство абсолютных значений силы Лоренца \vec{F}_L и силы возникающего холловского поля $q\vec{E}$:

$$F_L = qE \quad (4.27)$$

или

$$qv_{cp}B = qE \quad (4.28)$$

В выражении (4.28) под v_{cp} подразумевается модуль средней скорости дрейфа, так как большинство носителей заряда движется со скоростями, близкими к средней. Умножая обе части (4.28) на концентрацию электронов n , получим для полупроводника n – типа

$$nqv_{cp} = qE_n n \quad (4.28a)$$

Так как плотность тока проводимости определяется по формуле

$$j_n = nqv_{cp} = \frac{I}{S} \quad (4.29)$$

где $S = ab$, a и b – геометрические размеры образца (рис.4.2), тогда с учетом (4.28a) получим

$$E_n = \frac{1}{qn} \cdot \frac{I_n B}{ab} = \frac{1}{qn} j_n B \quad (4.30)$$

Для разности потенциалов между верхней и нижней гранями (ЭДС Холла) $V_n = E_n b$ следует

$$V_n = \frac{1}{qn} \cdot \frac{I_n B}{a} = \frac{1}{qn} j_n B b \quad (4.31)$$

Формула (4.31) не учитывает статистический характер распределения носителей заряда по скоростям и может не выполняться носителей заряда, имеющих разные по величине и направлению скорости. Кроме того, более детально условие равновесного распределения электронов и дырок выполняется не в тот момент, когда сила Лоренца уравнивает силу электрического поля (4.27), а когда заряд перестает накапливаться на боковых гранях образца.

Учет распределения носителей заряда по скоростям для невырожденных полупроводников позволяет переписать формулу (4.31) в виде

$$V_n = \frac{A}{qn} \cdot \frac{I_n B}{a} = \frac{A}{qn} j_n B b \quad (4.32)$$

где коэффициент A называется *холл – фактором* и зависит от механизма рассеяния носителей заряда. В таких полупроводниках как

кремний, германий, InSb при высоких температурах преобладает рассеяние на тепловых колебаниях решетки, и постоянная $A = \frac{3\pi}{8} = 1.18$.

Если рассеяние происходит главным образом на ионах примеси, $A = 1.93$. В вырожденных полупроводниках и металлах в электропроводности участвуют носители заряда, обладающие высокой энергией, в этом случае распределение электронов и дырок по скоростям можно не учитывать и $A = 1$.

С учетом знака заряда формулу (4.32) можно переписать в следующем виде

$$V_n = R_n \cdot \frac{I_n B}{a} \quad (4.33)$$

где

$$R_n = -\frac{A}{qn} \quad (4.34)$$

– коэффициент Холла (или *постоянная Холла*) для электронного полупроводника, и аналогично для дырочного полупроводника получим

$$V_p = R_p \cdot \frac{I_p B}{a} \quad (4.35)$$

где

$$R_p = -\frac{A}{qp} \quad (4.36)$$

– коэффициент Холла для полупроводника p – типа.

Из формул (4.33) – (4.36) видно, что по знаку ЭДС Холла V_n, V_p , а следовательно, по знаку постоянной Холла R_n, R_p можно определить знак носителей заряда или тип проводимости. Измеряя на опыте величины $V_n(V_p), B, I_n(I_p), a$, можно вычислить коэффициент Холла по формулам (4.33) или (4.35), затем по формулам (4.34) или (4.36) найти концентрацию электронов n или дырок p в исследуемом примесном полупроводнике в области примесной проводимости. Определяя независимо удельную электропроводность примесного полупроводника σ_n или σ_p , можно оценить подвижность носителей заряда u_n или u_p , получив таким образом все основные сведения о носителях заряда в примесном полупроводнике.

При строгом расчете параметров эффекта Холла в случае смешанной проводимости с учетом максвелловского распределения

скоростей носителей заряда для невырожденных полупроводников для постоянной Холла получено

$$R = \frac{A}{q} \cdot \frac{pu_p^2 - nu_n^2}{(pu_p + nu_n)^2} \quad (4.37)$$

Если $n = p$ (собственный полупроводник) и $u_n = u_p$, то в случае собственной проводимости постоянная Холла равна нулю. Если $n = p$ и $u_n \neq u_p$, то

$$R = \frac{A}{qn} \cdot \frac{u_p - u_n}{u_p + u_n} \quad (4.38)$$

Таким образом, в области собственной проводимости знак ЭДС Холла определяется знаком носителей, подвижность которых больше, то есть знаку электронов. Из формулы (4.37) видно, что в области смешанной проводимости измерений коэффициента Холла и удельной электропроводности недостаточно для определения подвижностей и концентраций электронов и дырок.

4.5. Квантовый эффект Холла.

Квантовый эффект Холла и явление сверхпроводимости интересны прежде всего тем, что позволяют нам наблюдать квантовые явления на макроскопическом уровне. Квантовый эффект Холла был открыт Клаусом фон Клитцингом в 1985 году, за что им была получена Нобелевская премия. Этот эффект может быть осуществлен в двумерной системе, в которой движение электрона по одному из направлений квантовано. Для наблюдения квантового эффекта Холла двумерной является металлическая пленка толщиной несколько ангстрем, которая может быть реализована в полевом транзисторе (рис.4.3). Иногда его называют также МОП-транзистором (транзистор со структурой металл-окисел-полупроводник). На кремниевую пластину, имеющую дырочную проводимость, наносится слой окисла SiO_2 (поверхность окисляют). С двух сторон вжигаются электроды, которые называются истоком и стоком. Поверх окисла напыляется слой металла и приваривается

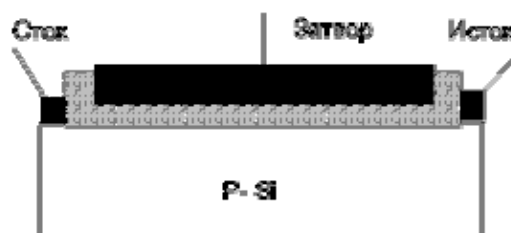


Рис.4.3. Принципиальная схема устройства полевого транзистора.

электрод. Эта часть устройства называется затвором. Если теперь на затвор подать положительный потенциал, то дырки, находящиеся в полупроводниковой пластине, будут уходить как можно дальше от затвора, а электроны, (которых мало в дырочном материале), будут наоборот подтягиваться к диэлектрическому слою, создавая между истоком и стоком проводящий электронный канал. Этот канал и представляет собой двумерный металл. Концентрация электронов в двумерном слое определяется напряжением на затворе и практически не зависит от температуры.

Открытию квантового эффекта Холла предшествовало обнаружение другого интересного эффекта – исчезновения сопротивления двумерного металла в сильном магнитном поле.

Для классического электрона в магнитном поле

$$m \frac{v^2}{r} = qvB \quad (4.39)$$

где m, q – масса и заряд электрона, v – модуль скорости электрона, B – модуль вектора индукции магнитного поля. Тогда для циклической частоты электрона

$$\omega = \frac{v}{r} = \frac{qB}{m} \quad (4.40)$$

В классической механике энергия электрона в магнитном поле может быть любой и определяется только значением скорости v . В квантовой механике вращательное движение в плоскости может быть получено суперпозицией двух колебаний, происходящих в двух взаимно перпендикулярных направлениях, с энергией квантового гармонического осциллятора E и частотой ω , совпадающей с вычисленной ранее классической циклической частотой обращения электрона в магнитном поле:

$$E = \hbar \omega \left(k + \frac{1}{2} \right), k = 0, 1, 2, \dots \quad (4.41)$$

В квантовом случае любой электрон локализован в определенной области пространства в двумерном канале, характерным размером которой является магнитная длина l . Так, из соотношения неопределенностей (4.25) при $\Delta r \sim r \equiv l$, с учетом формулы (4.40) получаем

$$l = \sqrt{\frac{\hbar}{qB}} \quad (4.42)$$

Таким образом, в квантовом случае энергия электронов пробегает дискретный ряд значений (квантуется), и электроны могут находиться на определенных энергетических уровнях - *уровнях Ландау*. Найдем число электронов на уровне Ландау n . С учетом принципа Паули, в предположении, что площадь двумерного канала равна единице, получим

$$n = \frac{1}{\pi l^2} = \frac{qB}{\pi \hbar} \quad (4.43)$$

для $B = 10^2$ Тл расчет по формуле (4.43) показывает, что на каждом уровне Ландау может разместиться примерно 10^{12} электронов на каждый квадратный сантиметр площади канала. С учетом спинового расщепления уровня Ландау на два подуровня в магнитном поле $\left(s = \pm \frac{1}{2}\right)$ для концентрации электронов на подуровне Ландау получим:

$$n = \frac{1}{\pi l^2} = \frac{qB}{2\pi \hbar} = \frac{qB}{h} \quad (4.43a)$$

Рассмотрим теперь проводимость и эффект Холла двумерного металла в квантующем магнитном поле. Схема проведения эксперимента аналогична представленной на рис. 4.2. С учетом формул (4.40), (4.41) расстояние между уровнями Ландау $\Delta E = \hbar \omega \ll E_F \sim B$, т.е. при уменьшении магнитного поля уменьшается расстояние между уровнями Ландау. Тогда электроны, которые размещались на первом и втором, займут третий уровень Ландау, и уровень Ферми будут поочередно пересекать уровни Ландау. Если под уровнем Ферми E_F находится i заполненный уровень Ландау, тогда концентрация электронов

$$n = i \frac{qB}{h} \quad (4.43б)$$

Тогда так называемое *холловское сопротивление*, выражаемое через постоянную Холла (4.34), выражается только через фундаментальные константы

$$R_H = RB = \frac{h}{iq^2}, i = 1, 2, 3, \dots \quad (4.44)$$

Таким образом, график зависимости $R_H(B)$ должен иметь вид прямой линии, выходящей из начала координат, тангенс угла наклона которой к оси абсцисс равен постоянной Холла. Для трехмерного металла при комнатной температуре и не слишком высоких значениях магнитного

поля (1–5 Тл) эксперимент показывает именно такой результат (эффект Холла). Однако в двумерной МОП–структуре при температуре 1К, когда классическое рассмотрение неприменимо, и нужно учитывать квантование движения электронов, холловское сопротивление обнаруживает ряд ярко выраженных ступенек, причем значение сопротивления для этих ступенек строго определяется выражением (4.44). Эти экспериментальные результаты представлены на рисунке 4.4. Кривая с острыми пиками – это зависимость омического сопротивления образца от магнитного поля. Омическим сопротивлением называется отношение продольной разности потенциалов к силе тока, пропускаемой через образец. Как следует из графика, сопротивление каждый раз обращается в нуль, когда квантовый эффект Холла выходит на плато. Как только уровень Ферми за счет движения уровней Ландау по мере роста магнитного поля попадает в область делокализованных электронов, омическое сопротивление сразу обращается в нуль и остается таковым, пока уровень Ферми не попадет в область локализованных состояний. Константа $\frac{h}{q^2}$ примерно равна 25 кОм.

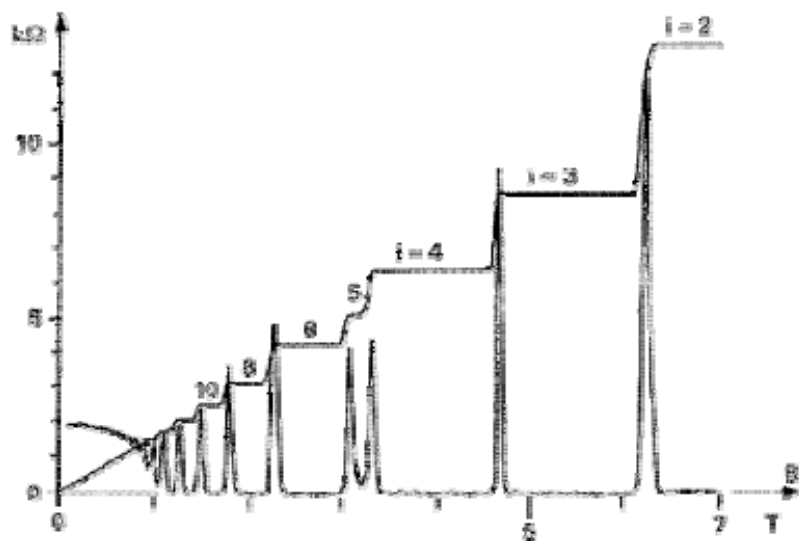


Рис.4.4. Зависимость холловского сопротивления от величины приложенного магнитного поля.

Величина холловского сопротивления оказывается настолько стабильной (не зависящей от параметров образца и температуры), что это позволило использовать ее в качестве национального стандарта электрического сопротивления в целом ряде развитых стран мира.

В 1982 г Цуи (Нобелевская премия 1998г.), Штермер и Госсард открыли дробный квантовый эффект Холла. Они обнаружили, что, если поместить беспримесный чистый образец при очень низкой

температуре (порядка 0.1 К) в магнитное поле напряженностью 15 – 20 Тл, то возникают холловские плато и глубокие провалы продольного сопротивления при дробных заполнениях самого нижнего уровня Ландау ($i = 1/3, i = 2/3$). Возможно, это обусловлено взаимодействием электронов в ультрасильных магнитных полях, когда область локализации электронов становится очень малой, а их плотность становится высокой. Существовала идея, что этот эффект есть первый случай экспериментального наблюдения квазичастиц с дробным электрическим зарядом. Так или иначе, природа дробного квантового эффекта Холла до сих пор до конца не объяснена.

4.6. Сверхпроводимость.

Явление *сверхпроводимости* было открыто в 1911 году голландским физиком Х. Камерлинг-Оннесом, который обнаружил, что при температуре 4,15 К, называемой критической температурой перехода T_k , сопротивление ртути почти скачком падало до нуля (рис.4.5). Позднее сверхпроводимость обнаружилась у некоторых металлов: олова, свинца, индия, алюминия, ниобия и многих сплавов. Это явление, в котором квантовомеханические эффекты проявляются в макроскопических масштабах. Его теория весьма сложна и была создана только в 1957 г. американскими физиками Бардиным, Купером и Шриффером и независимо от них в 1958г. Н.Н. Боголюбовым.

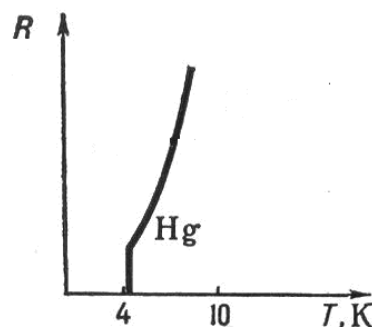


Рис.4.5. Зависимость сопротивления R от температуры T для ртути.

Сверхпроводимость не исчерпывается только обращением в нуль электрического сопротивления проводника (идеальной проводимостью). Для сверхпроводящего состояния характерно также то, что магнитное поле не проникает в толщу сверхпроводника, поскольку во внешнем магнитном поле в нем возникают индукционные токи, которые по закону Ленца создают магнитную индукцию, компенсирующую внешнюю индукцию. В результате магнитная индукция внутри тела будет равна нулю. Линии индукции выталкиваются из тела и огибают его (рис.4.6.). Такой сверхпроводник обладает нулевой магнитной проницаемостью $\mu = 0$, т.е. является идеальным диамагнетиком. Это явление получило название *эффекта Мейсснера*. Возникновение явления сверхпроводимости

обусловлено взаимодействием электронной подсистемы с кристаллической решеткой, благодаря которому на электроны в металле действуют силы взаимного притяжения, которые в сверхпроводящем состоянии превышают силы кулоновского отталкивания. Притяжение возникает вследствие деформации (поляризации) кристаллической решетки, в результате чего электрон оказывается окруженным облаком

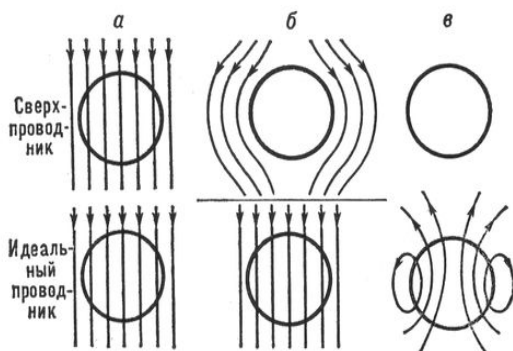


Рис.4.6. Распределение магнитного поля около сверхпроводящего шара и около шара из идеального полупроводника: а) при $T > T_k$, б) при $T < T_k$ во внешнем магнитном поле, в) при $T < T_k$ в отсутствии внешнего магнитного поля.

положительного заряда, к которому будет притягиваться другой электрон, образуя так называемую куперовскую пару.

На языке квантовой механики такое притяжение возникает как результат обмена квантами возбуждения решетки — фононами. Расстояние между электронами пары может достигать примерно 10^{-4} см, что на четыре порядка превышает межатомные расстояния в кристалле, и, следовательно,

внутри области, занимаемой любой парой, окажутся центры очень многих (от 105 до 1011) пар, сильно перекрываясь, что весьма существенно для стабильности состояния. Куперовские пары, придя в согласованное движение (под действием, например, электрического поля), остаются в этом состоянии неограниченно долго, создавая ток проводимости. В куперовские пары объединяются не все электроны проводимости, поскольку в вырожденном газе фермионов взаимодействовать между собой могут лишь те частицы, вблизи уровней которых имеются свободные состояния, т.е. фермиевские электроны. При $T > 0^\circ K$ имеется некоторая вероятность разрушения пары. Поэтому наряду с такими парами имеются “нормальные” электроны. Чем ближе T к T_k , тем доля нормальных электронов становится больше. При $T = T_k$ все электроны становятся нормальными, и сверхпроводящее состояние разрушается.

Глава 5. Контактные явления.

5.1. Контакт металл - полупроводник.

Электронный газ удерживается в кристалле полем положительных ионов решётки. Потенциальная энергия электрона в таком поле меньше потенциальной энергии электрона, находящегося вне кристалла, и для его удаления за пределы тела необходимо совершить некоторую работу. В металле при $T = 0^\circ K$ электроны заполняют все энергетические уровни вплоть до уровня Ферми. Минимальная работа (энергия), которую нужно затратить для удаления электрона с энергией, соответствующей уровню Ферми, на такое расстояние от тела, где можно пренебречь его (тела) воздействием на электрон (уровень вакуума), называют (термодинамической) *работой выхода* A_m (рис.5.1а).

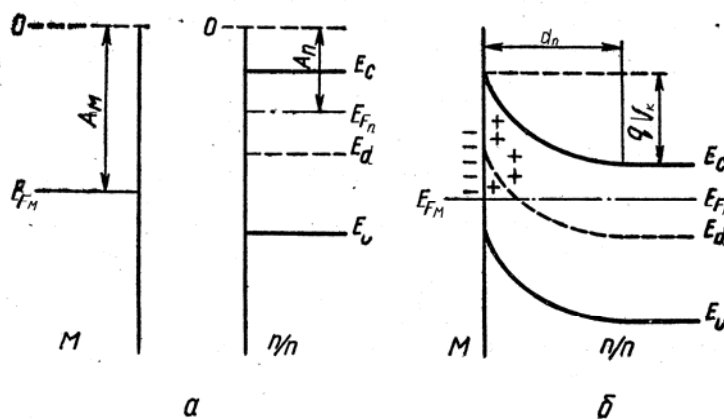


Рис.5.1. Энергетическая схема контакта металл – полупроводник n - типа ($A_m > A_n$): a – до соприкосновения, b – контакт металл – полупроводник n - типа в состоянии термодинамического равновесия.

При $T > 0^\circ K$ в металле появляются электроны на уровнях, выше уровня Ферми. Удаление электронов с энергией, меньшей E_{F_M} , нарушает равновесие в кристалле и вызывает переход быстрых электронов на освободившиеся уровни с выделением энергии и нагревом кристалла. Удаление же электронов с энергией, большей E_{F_M} , вызывает, наоборот, переход оставшихся электронов на более высокие уровни с отбором энергии от решётки и её охлаждением. Только удаление электрона с уровня Ферми не нарушает равновесия в кристалле, поэтому работу выхода всегда отсчитывают от уровня Ферми. Аналогичная картина

наблюдается также в полупроводниках, где, как правило, электроны расположены либо выше, либо ниже уровня Ферми и их удаление вызывает либо нагрев, либо охлаждение кристалла. Поэтому и в полупроводниках работу выхода принято отсчитывать от уровня Ферми, хотя на нём может вообще не оказаться электронов. Для примесных полупроводников значение работы выхода сильно зависит от температуры в связи с изменением положения уровня Ферми. Рассмотрим контакт электронного полупроводника с металлом при отсутствии поверхностных состояний и предположим, что работа выхода электронов из полупроводника A_n меньше, чем работа выхода электронов из металла A_m (рис.5.1а). Тогда при приведении в контакт металла и полупроводника электроны будут переходить главным образом из полупроводника в металл, так как уровень Ферми в полупроводнике до соприкосновения лежал выше, чем в металле. При этом металл заряжается отрицательно, а полупроводник – положительно. Переход электронов будет происходить до тех пор, пока уровни Ферми не выровняются, и не установится динамическое равновесие (рис.5.1б). В приповерхностной области полупроводника скапливается некоторый избыточный заряд (в данном случае – положительный). Эта область называется *областью пространственного заряда* в полупроводнике (ОПЗ). Из рисунка 5.1б видно, что в ОПЗ полупроводника происходит *изгиб* зон на величину, называемую *контактной разностью потенциалов* V_k . Она определяется через разность работ выхода

$$qV_k = A_m - A_n \quad (5.1.)$$

Концентрация электронов в металле значительно больше, чем в полупроводнике, следовательно, протяженность области объемного заряда в нем очень тонкая по сравнению с полупроводником. Поэтому практически все падение напряжения приходится на полупроводник. Если $A_m > A_n$ для полупроводника n – типа, то зоны будут изгибаться вверх (рис.5.1б). При этом на поверхности возникнет обедненный основными носителями слой толщины d_n , называемой *глубиной проникновения поля* в полупроводник n – типа.

Рассмотрим состояние *обогащения* основными носителями в невырожденном полупроводнике, например, n – типа, то есть когда на поверхности аккумулируются электроны. Решение *уравнения Пуассона* (теорема Гаусса для электрического поля в дифференциальной форме)

$$\frac{d^2V}{dz^2} = -\frac{\rho(z)}{\varepsilon_0 \varepsilon_{sc}} \quad (5.2)$$

где ε_0 – электрическая постоянная, ε_{sc} – диэлектрическая проницаемость полупроводника, $\rho(z)$ – плотность объемного заряда, зависящая от координаты z ,

позволит оценить толщину в данном случае обогащенного слоя на поверхности полупроводника в состоянии равновесия

$$d_n = \sqrt{\frac{2V_{\kappa} \varepsilon \varepsilon_0}{qN_d}} \quad (5.3)$$

Если работа выхода электрона из полупроводника n – типа больше работы выхода из металла, то электроны главным образом переходят из металла в полупроводник и ОПЗ полупроводника заряжается отрицательно (рис.5.2).

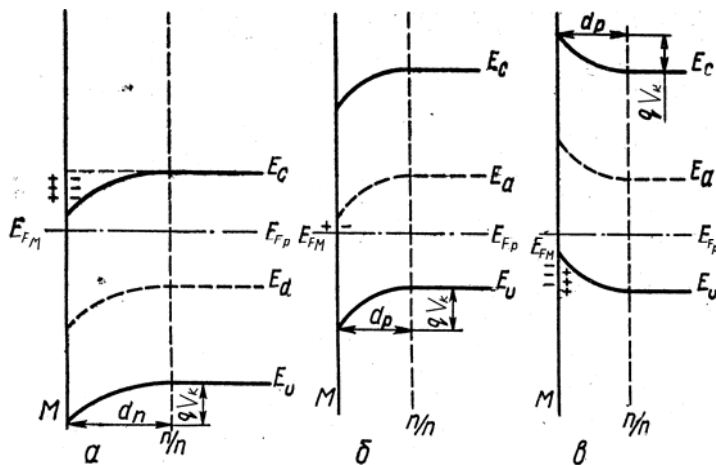


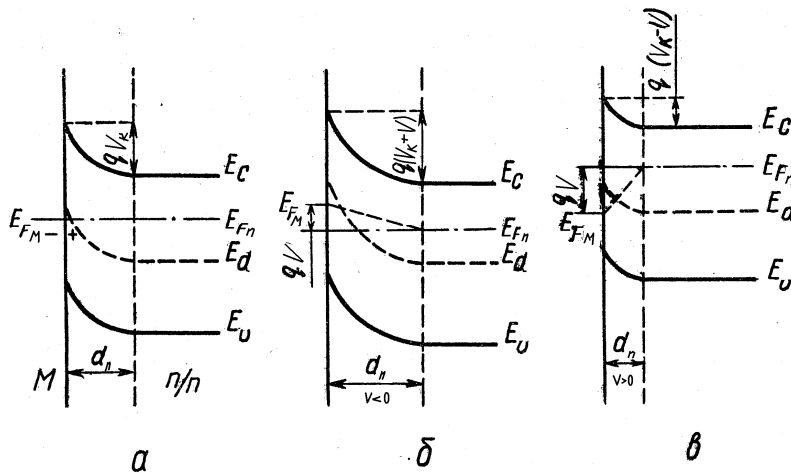
Рис.5.2. Энергетическая схема контакта металл – полупроводник: *а* – n – тип ($A_m < A_n$), *б* – p – тип ($A_m < A_n$), *в* – p – тип ($A_m > A_n$)

При этом происходит изгиб энергетических зон полупроводника вниз, и ОПЗ в полупроводнике n – типа оказывается обогащенной основными носителями – электронами. Это область *аккумуляции*, когда концентрация основных носителей на поверхности полупроводника больше их концентрации в объеме (*антизапирающий слой*).

При контакте металла с полупроводником p – типа *обедненный* слой в полупроводнике образуется в том случае, когда $A_m < A_n$. Состояние обеднения основными носителями на поверхности характеризуется уменьшением их количества в приповерхностной области по сравнению с объемным значением (*запирающий слой*). При сильном искривлении

зон, когда концентрация основных носителей в ОПЗ становится меньше их концентрации в объеме, а концентрация неосновных носителей на поверхности становится сравнимой с концентрацией основных в объеме, на поверхности возникает *инверсионный слой*. Существует также состояние, характеризующее отсутствие области пространственного заряда в полупроводнике. Когда зоны у поверхности не искривляются, это называется состоянием *плоских зон*.

Приложим внешнее поле V к контакту металл – полупроводник n – типа ($A_m > A_n$). При прямом смещении $V > 0$ (знак « \rightarrow » приложен к электронному полупроводнику, знак « $+$ » – к металлу) происходит сдвиг уровня Ферми в полупроводнике вверх на величину qV , и изгиб зон уменьшается (рис.5.3в). При подключении внешнего источника плюсом к электронному полупроводнику, а минусом – к металлу ($V < 0$) уровень Ферми в полупроводнике сдвигается вниз, и изгиб зон растет (рис.5.3б).



Р ис.5.3. Энергетическая схема контакта металл – полупроводник n - типа ($A_m < A_n$) a – в равновесии, $б$ – при обратном смещении $V < 0$, $в$ – при прямом смещении $V > 0$.

Оценим глубину проникновения поля в полупроводник при наличии внешнего напряжения. Формула (5.3) в этом случае будет иметь следующий вид при $V > 0$

$$d_n|_{V>0} = \sqrt{\frac{2(V_\kappa - V)\epsilon\epsilon_0}{qN_d}} \quad (5.3a)$$

и при обратном напряжении $V < 0$

$$d_n|_{V<0} = \sqrt{\frac{2(V_\kappa + V)\epsilon\epsilon_0}{qN_d}} \quad (5.3б)$$

Из формулы (5.3а) видно, что изгиб зон вверх в рассматриваемом полупроводнике существует лишь пока $V < V_k$. Из выражений (5.3а) и (5.3б) можно также сделать вывод о том, что при $V > 0$ глубина проникновения поля в полупроводник уменьшается, а при $V < 0$ - увеличивается. Обедненный слой, меняющий свою толщину согласно формуле (5.3а), называется физическим запирающим слоем или *барьером Шоттки*. Толщина этого слоя зависит от концентрации легирующей примеси: чем выше уровень легирования, тем тоньше слой Шоттки. Так, например, для германия n -типа $\varepsilon = 16, V_k = 0.3 \text{ эВ}, N_d = 10^{14} \text{ см}^{-3}$ при $V = 0$ $d_n = 2.3 \cdot 10^{-4} \text{ см}$.

Рассмотрим токи, протекающие на контакте металл – полупроводник, что связано с прохождением носителей заряда через возникающие на границе раздела потенциальные барьеры. Возможны два подхода к рассмотрению: квантовомеханический *туннельный эффект* и *надбарьерный перенос* носителей заряда.

Если барьер тонкий (длина свободного пробега электронов или дырок сравнима с толщиной барьера), тогда задача о вычислении тока сводится к задаче о вычислении тока термоэлектронной эмиссии с поверхности полупроводника в металл и обратно из металла в полупроводник с учетом приложенного внешнего напряжения. В основном расчет тока проводится так же, как и для вакуумного диода, а эта теория получила название *диодной* теории выпрямления. Она справедлива для полупроводников с высокой подвижностью (Ge, Si, InSb и др.).

Уравнение вольт–амперной характеристики для выпрямляющего контакта металл – полупроводник в рамках диодной теории (формула *Ричардсона – Дэймана*) имеет вид

$$j = j_s \left(e^{\pm \frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (5.4)$$

где j_s – плотность тока насыщения

$$j_s = AT^2 e^{-\frac{A_m}{kT}} \quad (5.5)$$

В формуле (5.5) A_m – работа выхода электронов из металла,

$$A = \frac{4\pi m^* k^2 e}{h^3} = 12 \cdot 10^5 \frac{A}{\text{м}^2 \text{град}^2} \text{ – постоянная Ричардсона.}$$

Знак «+» в выражении (5.4) соответствует прямому (*пропускному*) направлению тока, а знак «-» – обратному (*запорному*). Если предположить, что $V > 0$ при прямом включении, и $V < 0$ – при обратном, можно переписать формулу (5.4)

$$j = j_s \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (5.4a)$$

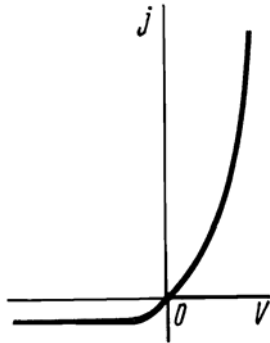


Рис.5.3. ВАХ контакта металл – полупроводник в диодной теории выпрямления.

Вид вольт–амперной характеристики, полученной в рамках диодной теории, показан на рисунке 5.3.

Если толщина запирающего слоя d_n значительно больше длины свободного пробега электронов, то такой слой называют толстым и для оценки токов, текущих через границу раздела металл – полупроводник, кроме дрейфовых токов, вызванных внешним полем, как в случае тонкого запирающего слоя, необходим учет диффузионных токов. В этом случае вольт–амперная характеристика описывается формулой *Давыдова*

$$j = qu_n E n_0 \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (5.6)$$

где E – напряженность поля. Отличие от формулы (5.5) состоит в том, что теперь ток насыщения зависит от внешнего напряжения. Графически эта зависимость представлена на рис.5.4.

5.2. Электронно-дырочный переход

В монокристалле германия, кремния или другого полупроводника с помощью диффузии или ионной имплантации примесей можно создать такое их распределение, что одна кристалла будет полупроводником n -типа, а другая – полупроводником p -типа. Таким образом, в некоторой тонкой области кристалла будет наблюдаться переход от n -типа к p -типу. Электронно – дырочным переходом ($p-n$ – переходом) называют слой полупроводника, располагающийся по обе стороны от

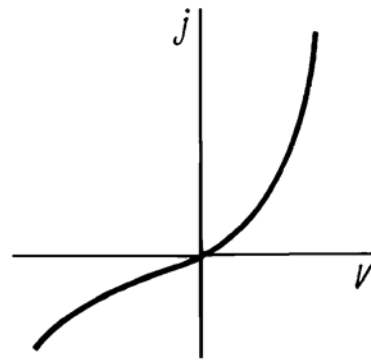


Рис.5.4. ВАХ контакта металл – полупроводник в диффузионной теории выпрямления.

границы раздела n и p -областей, обедненный основными носителями заряда. При этом концентрации неосновных носителей (дырок в полупроводнике n -типа N_d и электронов в полупроводнике p -типа N_a) равны равновесным концентрациям основных носителей вне области $p-n$ - перехода

$$N_d = n_0, N_a = p_0 \quad (5.7)$$

В этом случае говорят, что примеси *полностью ионизованы*.

Концентрация основных носителей (электронов в полупроводнике n -типа n_n и дырок в полупроводнике p -типа p_p) значительно превышает концентрацию неосновных носителей $n_n \gg p_n, p_p \gg p_n$, что приводит к возникновению *градиента концентрации* $\frac{dn}{dx}$ и *диффузии* электронов в

p -область, а также градиента $\frac{dp}{dx}$ и диффузии дырок в n -область.

Соответствующие диффузионные токи можно выразить формулами

$$I_{nD} = qD_n S \frac{dn}{dx} \quad (5.8)$$

$$I_{pD} = qD_p S \frac{dp}{dx} \quad (5.9)$$

где D_n и D_p – коэффициенты диффузии электронов и дырок, S – площадь $p-n$ - перехода.

В результате диффузии электронов и дырок в n -области вплоть до расстояния d_n создаются нескомпенсированные ионизованные доноры и неравновесные дырки, и эта область заряжается положительно, а в p -области возникают нескомпенсированные ионизованные акцепторы и неравновесные электроны, и p -область заряжается отрицательно. При этом в области $p-n$ - перехода возникает *двойной электрический слой* и электрическое поле E , препятствующее диффузионным переходам. Это поле приводит к появлению дрейфовых токов

из p -области в n -область

$$I_{nE} = qn_p E u_n S \quad (5.10)$$

из n -области в p -область

$$I_{pE} = qp_n E u_p S \quad (5.10a)$$

В установившемся динамическом равновесии, когда уровень Ферми одинаков для n и p -областей полупроводника диффузионные токи основных носителей заряда уравниваются дрейфовыми токами

неосновных носителей заряда, и полный ток через $p-n$ – переход равен нулю

$$I_{pD} - I_{nE} + I_{nD} - I_{pE} = 0 \quad (5.11)$$

Дно зоны проводимости в полупроводнике p -типа E_C занимает самое высокое положение, так что для электронов зоны проводимости полупроводника n -типа существует потенциальный барьер для перехода p -область, определяемый контактной разностью потенциалов равновесного $p-n$ – перехода V_κ (рис.5.5).

Из рисунка 5.5 видно, что

$$\begin{aligned} qV_\kappa &= E_{ip} - E_{in} = \\ &= (E_{ip} - E_F) + (E_F - E_{in}) \end{aligned} \quad (5.12)$$

тогда, предполагая, что в обедненной области в состоянии термодинамического равновесия справедливы соотношения Больцмана

$$n_0 = n_i e^{\frac{E_F - E_{in}}{kT}} \quad (5.13)$$

$$p_0 = n_i e^{-\frac{E_F - E_{ip}}{kT}} \quad (5.14)$$

с учетом формулы (5.7) получаем

$$qV_\kappa = kT \ln \frac{N_a}{N_d} \quad (5.15)$$

Следовательно, чем сильнее легированы обе области полупроводника, тем больше контактная разность потенциалов, тем больше потенциальный барьер для перехода электронов из n в p -область.

Если к $p-n$ – переходу приложить внешнее напряжение $V < 0$, т. е. плюс источника тока соединить с n -областью, а минус – с p -областью (рис.5.6а), то высота потенциального барьера для электронов, переходящих из n в p -область, увеличится на величину qV . При этом равновесие нарушается, и уровень Ферми смещается вверх на величину qV . В случае нарушения равновесия формулы для равновесных концентраций (5.13), (5.14) и понятие уровня Ферми неприменимы. В этом случае вводят понятие *квазиуровня Ферми* (E_{Fn}^* и E_{Fp}^* для n и p -областей соответственно), тогда *неравновесная* концентрация носителей заряда выражается аналогичными формулами, что и равновесная.

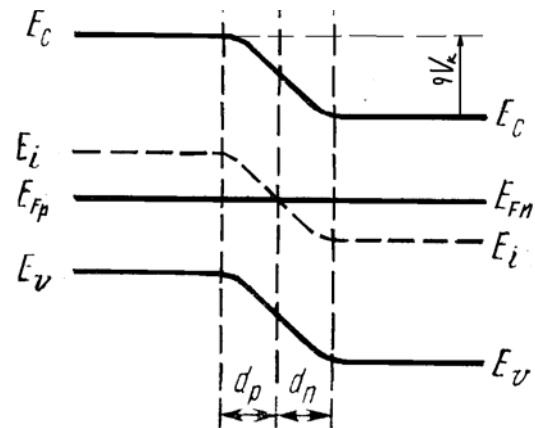


Рис.5.5. Зонная диаграмма $p-n$ – перехода в термодинамическом равновесии.

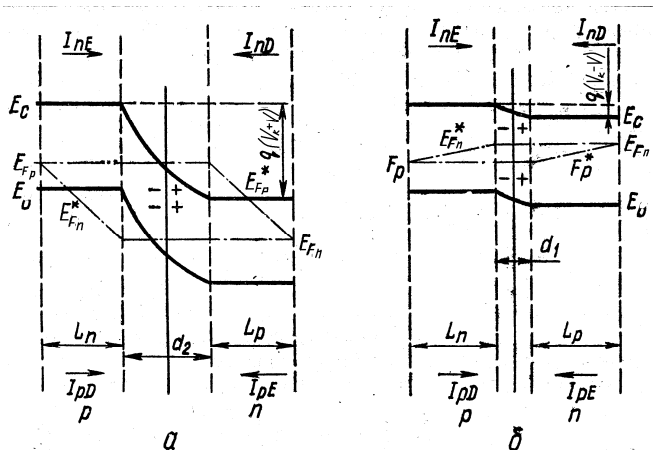


Рис.5.6. Зонная диаграмма при прямом (б) и обратном включении (а) $p-n$ – перехода.

При приложении обратного напряжения $V < 0$ в области $p-n$ – перехода происходят следующие физические процессы. Электроны вытягиваются из p –области в n –область, а дырки – из n –области в p –область, т.е. происходит процесс перехода носителей из области, где они были неосновными, в область, где они являются основными носителями, называемый *экстракцией*. Следует отметить, что каждый раз, когда физическая система выходит из состояния термодинамического равновесия, начинают проявляться кинетические процессы, стремящиеся вернуть систему в равновесное состояние. Это закон сохранения энергии. В случае экстракции носителей заряда, например, электрона в n –область (рис.5.6а), появляется избыточная энергия, отдаваемая другому электрону из валентной зоны, происходит процесс *генерации* электронно – дырочной пары.

Если к $p-n$ – переходу приложить внешнее напряжение $V > 0$, т. е. плюс источника соединить с p –областью, а минус – с n –областью, то потенциальный барьер уменьшится на величину qV для основных носителей заряда. При этом равновесие нарушается и уровень Ферми смещается на величину qV вниз (рис.5.6б). Потенциальный барьер для перехода электронов из n в p –область уменьшается, и происходит их инжекция в p –область, и, аналогично, инжекция дырок в n –область. *Инжекция* – это переход носителей заряда через $p-n$ – переход (или контакт металл – полупроводник) в область, где они не являются основными носителями. При инжекции возрастает концентрация неосновных носителей заряда в n и p –областях, однако это способствует росту концентрации основных носителей, так как при нарушении равновесия возникают кулоновские силы притяжения между

зарядами противоположного знака (неосновные носители притягивают основные). Происходит *рекомбинация* (процесс, обратный генерации), то есть исчезновение электронно – дырочной пары, и до границы контакта доходит только часть диффузионного тока.

При вычислении потока носителей заряда через потенциальный барьер $p-n$ – перехода возможны два случая:

а) тонкий переход, когда носители заряда почти не сталкиваются с решеткой ($l \gg d$), при этом рассеянием в $p-n$ – переходе можно пренебречь, а ток через $p-n$ – переход определяется только числом носителей, имеющих достаточную энергию для преодоления потенциального барьера. Тогда ток через $p-n$ – переход можно рассматривать как термоток, используя формулу Ричардсона – Дэшмана (5.4). В этом случае не учитываются рекомбинационно – генерационные процессы, и вид идеальной вольт-амперной характеристики $p-n$ – перехода аналогичен контакту металл – полупроводник (рис.5.3);

б) толстый переход, когда движение носителей заряда в $p-n$ – переходе имеет диффузионный характер ($l \ll d$). В этом случае при

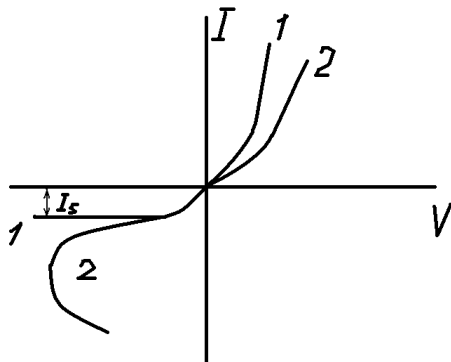


Рис.5.7. ВАХ : 1 – идеального $p-n$ - перехода), 2 – с учетом рекомбинационно– генерационных процессов.

расчете тока учитываются его рекомбинационно – генерационные составляющие, и вид ВАХ отличается от кривой для идеального $p-n$ – перехода (рис.5.7).

Рекомбинация возрастает с увеличением прямого напряжения, уменьшая поток носителей заряда через $p-n$ – переход, поэтому, как видно из рисунка 5.7, прямая ветвь ВАХ идеального $p-n$ – перехода выше, чем у реального. Генерационные процессы, происходящие на контакте полупроводников с различным

типом проводимости, наоборот, проявляются при обратном напряжении. Они способствуют увеличению количества носителей заряда на контакте и, следовательно, росту обратного тока (рис.5.7).

Выпрямляющее свойство $p-n$ – перехода получило практическое применение в производстве полупроводниковых выпрямительных диодов.

Глава 6. Термоэлектрические явления в полупроводниках.

Рассмотрим термоэлектрические эффекты в полупроводниках – *эффекты Зеебека, Пельтье и Томсона.*

6.1. Эффект Зеебека .

Эффект состоит в возникновении электродвижущей силы ЭДС в электрической цепи последовательно соединенных разнородных полупроводников или полупроводника и металла, если температура контактов различна.

Рассмотрим невырожденный полупроводник n -типа, в котором существует градиент температуры $\frac{dT}{dx} (T_2 > T_1)$. В горячем конце

полупроводника концентрация электронов и их кинетическая энергия выше, чем в холодном, поэтому будет преобладать диффузия электронов в направлении температурного градиента. Кроме того, электроны могут двигаться в направлении градиента температуры за счет увлечения их фононами. При наличии градиента температуры при низких температурах в полупроводнике число фононов, движущихся от горячего конца к холодному, больше, чем в противоположном. Фононы, сталкиваясь с электронами, увлекают их в направлении своего движения. Это явление играет существенную роль лишь при низких температурах.

Диффузионный поток электронов от горячего конца к холодному создает между ними разность потенциалов (*термо-ЭДС*), препятствующую этому потоку. В состоянии динамического равновесия ($T_2 = T_1$) диффузионный и дрейфовый потоки уравниваются, и результирующий ток равен нулю.

Рассмотрим контакт полупроводника и металла. Если температуры контактов полупроводника с металлом одинаковы, то контактные разности потенциалов равны по величине и направлены в противоположные стороны. При наличии градиента температуры $\frac{dT}{dx} (T_2 > T_1)$, контактная разность потенциалов V_k дает свой вклад в *термо-ЭДС* полупроводника.

$$\text{термо-ЭДС} = \left(\frac{dV_k}{dT} + \frac{dV_{об}}{dT} \right) \Delta T \quad (6.1)$$

где $V_{об}$ – объемная разность потенциалов, возникающая за счет диффузии электронов от горячего конца к холодному.

Диффузионный поток носителей заряда в сторону уменьшения градиента температуры вызван двумя причинами – градиентом концентрации свободных носителей $\frac{dn}{dx}$ при постоянном коэффициенте диффузии электронов (D_n): $D_n \frac{dn}{dx}$ и изменением коэффициента D_n с температурой при постоянной концентрации: $n \frac{dD_n}{dx}$.

При этом коэффициент диффузии D_n зависит от средней кинетической энергии E_T , которая в свою очередь зависит от механизма рассеяния носителей заряда и температуры

$$D_n = CE_T^{r+1/2}, E_T = (r+2)kT \quad (6.2)$$

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

В этом случае условие динамического равновесия свободных носителей заряда (электронов) в изолированном полупроводнике можно записать в

$$\text{виде } D_n \frac{dn}{dx} + n \frac{dD_n}{dx} = Eu_n n \quad (6.3)$$

где E — напряженность поля, создаваемого термо-ЭДС.

При $D_n = const$ уравнение (6.3) примет вид

$$D_n \frac{dn}{dx} = D_n \frac{dn}{dT} \frac{dT}{dx} = Eu_n n \quad (6.4)$$

Воспользовавшись соотношением Эйнштейна

$$D = \frac{kT}{q} u \quad (6.5)$$

получим из (6.4) выражение для коэффициента термо-ЭДС

$$\alpha_n = \frac{Edx}{dT} = \frac{k}{q} T \frac{\partial \ln n}{\partial T} \quad (6.6)$$

При $n = const$ уравнение (6.3) запишется

$$n \frac{dD_n}{dx} = n \frac{\partial D_n}{\partial E_T} \frac{\partial E_T}{\partial x} = Eu_n n \quad (6.7)$$

с учетом (6.2)

$$\alpha_D = \frac{Edx}{dT} = \frac{k}{q} \left(r + \frac{1}{2} \right) \quad (6.8)$$

Коэффициенты α_n и α_D определяют значение объемной термо-ЭДС.

Так как контактная разность потенциалов определяется разностью работ выхода полупроводника и металла

$$V_k = \frac{A_m - A_n}{q} = \frac{E_{Fm} - E_{Fn}}{q} \quad (6.9)$$

тогда коэффициент контактной термо-ЭДС

$$\alpha_k = \frac{\partial V_k}{\partial T} = -\frac{1}{q} \frac{\partial E_{Fn}}{\partial T} \quad (6.10)$$

С учетом формул (3.16), (3.17)

$$\alpha_k = -\frac{k}{q} \left(-\frac{3}{2} + \frac{E_{Fn}}{kT} + T \frac{\partial \ln n}{\partial T} \right) \quad (6.11)$$

Суммарный коэффициент термо-ЭДС полупроводника n -типа

$$\alpha_1 = \alpha_n + \alpha_D + \alpha_k = \frac{k}{q} \left(2 + r + \ln \frac{N_c}{n} \right) \quad (6.12)$$

Аналогично для невырожденного дырочного полупроводника

$$\alpha_2 = \alpha_p + \alpha_D + \alpha_k = \frac{k}{q} \left(2 + r + \ln \frac{N_v}{p} \right) \quad (6.13)$$

При высоких температурах, соответствующих области истощения примеси ($n = N_d, p = N_a$), выражения для коэффициентов α_1 и α_2 имеют вид:

$$\alpha_1 = \alpha_n + \alpha_D + \alpha_k = \frac{k}{q} \left(2 + r + \ln \frac{N_c}{N_d} \right) \quad (6.12a)$$

$$\alpha_2 = \alpha_p + \alpha_D + \alpha_k = \frac{k}{q} \left(2 + r + \ln \frac{N_v}{N_a} \right) \quad (6.13a)$$

Таким образом, величина α для примесных полупроводников в области истощения растет с увеличением температуры и уменьшается с ростом содержания примеси N_a или N_d .

В области собственной проводимости для коэффициента α теория дает следующее выражение:

$$\alpha = \frac{\alpha_2 u_p p - \alpha_1 u_n n}{u_p p + u_n n} \quad (6.14)$$

В этом случае электрический ток переносится электронами и дырками, а их термо-ЭДС взаимно противоположны по знаку, и результирующая термо-ЭДС значительно ниже, чем в примесной области, т. е. значение α при переходе от области истощения примеси к собственной проводимости уменьшается. В области низких температур наблюдается большое возрастание термо-ЭДС благодаря фоновому увлечению электронов.

Таким образом, характер зависимости $\alpha(T)$ достаточно сложный и не имеет универсального характера для большинства полупроводников.

Однако в небольшом интервале температур *термо*–ЭДС можно считать с достаточной для практической цели точностью пропорциональной разности температур

$$\text{термо - ЭДС} = \alpha \Delta T \quad (6.15)$$

При последовательном соединении электронного и дырочного полупроводников их *термо*–ЭДС

$$\text{термоЭДС} = (\alpha_1 + \alpha_2) \Delta T = \alpha_{12} \Delta T \quad (6.16)$$

где α_{12} – коэффициент дифференциальной *термо*–ЭДС, характеризующий пару полупроводников.

Так как в металлах концентрация свободных зарядов велика и не зависит от температуры; кинетическая энергия сильно вырожденного электронного газа металла практически не изменяется с температурой, так же как и контактный потенциал металла на его границах. В полупроводниках же с изменением температуры резко меняется концентрация и кинетическая энергия свободных носителей заряда. Кроме того, контактный потенциал и связанный с ним уровень Ферми в полупроводниках также являются функциями температуры. Поэтому *термо*–ЭДС полупроводниковых термопар составляет сотни микровольт на градус, что в сотни раз превышает *термо*–ЭДС металлических термопар. Следовательно, всю *термо*–ЭДС, возникающую в цепи металл—полупроводник—металл можно относить к полупроводнику, а по направлению *термо*–ЭДС полупроводника определять тип проводимости или знак носителей заряда.

6.2. Эффект Пельтье.

Эффект Пельтье – выделение или поглощение теплоты в контакте двух разнородных полупроводников или полупроводника и металла при протекании через контакт электрического тока. Количество выделившегося или поглощенного тепла Q_n в месте контакта пропорционально прошедшему через контакт количеству электричества

$$Q_n = \pm Pit \quad (6.17)$$

где P – коэффициент Пельтье.

Причина возникновения эффекта Пельтье состоит в том, что внешнее электрическое поле переносит электроны или дырки из одного материала в другой, причем равновесная энергия электронов (или дырок) в обоих материалах различна и электроны, пришедшие из другого материала через спай, имеют избыток или недостаток энергии по сравнению с остальными в данном материале. Этот избыток (или недостаток) энергии отдается решетке (или пополняется за счет

решетки), в результате температура спая соответственно растет или падает.

Рассмотрим контакт электронного полупроводника с металлом при $A_m > A_n$ в состоянии равновесия (рис.6.1). В случае дырочного полупроводника рассуждения аналогичны. Если внешнее напряжение таково, что «плюс» подан на металл, а «минус» – на полупроводник, то электроны переходят из полупроводника в металл, при этом каждый электрон опускается до уровня Ферми E_{Fm} и отдает при столкновениях энергию в виде *тепла Пельтье* ΔQ_n контакту

$$\Delta Q_n = E_T - E_{Fn} \quad (6.18)$$

При противоположном направлении тока («плюс» – на полупроводнике,

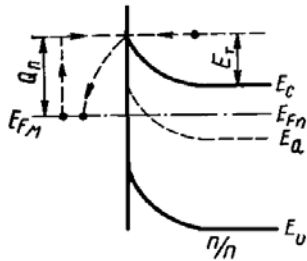


Рис.6.1. Энергетическая схема контакта полупроводника n - типа с металлом при $A_m > A_n$.

а «минус» – на металле) электроны переходят из металла в полупроводник с энергетических уровней, расположенных выше дна зоны проводимости. Эту дополнительную энергию электроны получают за счет атомов решетки, расположенных вблизи контакта. При этом теплота Пельтье (6.18) поглощается, контакт охлаждается.

В случае невырожденного полупроводника с учетом (6.2) имеем

$$P = \frac{\Delta Q_n}{q} = \frac{E_T - E_{Fn}}{q} = \frac{[(r + 2)kT - E_{Fn}]}{q} \quad (6.19)$$

тогда, учитывая равенство (6.12), получим

$$P = \alpha_1 T \quad (6.20)$$

При прохождении тока через контакт двух полупроводников с различными типами проводимости ($p-n$ – переход) также выделяется или поглощается теплота Пельтье, вследствие того что средняя энергия участвующих в токе электронов по обе стороны контакта различна: энергия свободных электронов полупроводника n -типа больше энергии связанных электронов полупроводника p -типа (рис.6.2).

Если через $p-n$ – переход проходит ток в прямом направлении («плюс» источника приложен к p -области, а «минус» – к n -области) (рис.6.2а), то электроны из полупроводника n -типа и дырки из полупроводника p -типа движутся к контакту и рекомбинируют, при

этом высвобождается энергия, которая сообщается кристаллической решетке и идет на нагревание спая.

При пропускании через $p-n$ – переход тока в заперном направлении (рис.6.2б) электроны переходят из зоны проводимости полупроводника p -типа в n -область, и происходит процесс генерации электронно-дырочных пар, при этом затрачивается энергия, заимствованная у решетки, спай охлаждается.

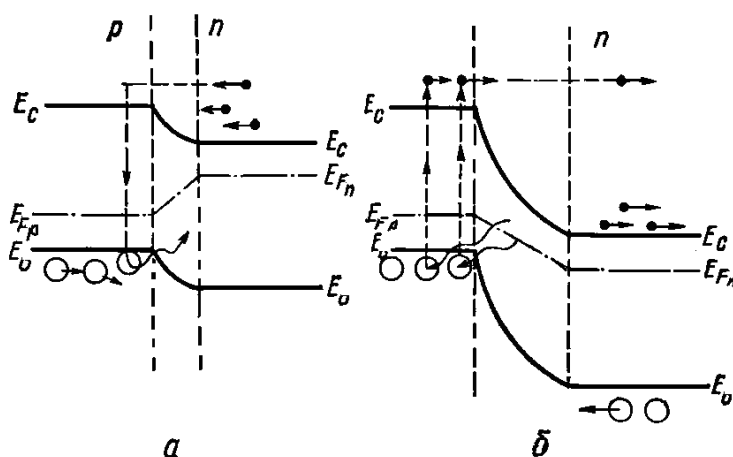


Рис.6.2. Энергетическая схема, поясняющая нагрев (а) и охлаждение (б) на контакте двух полупроводников с различными типами проводимости.

Электрический способ охлаждения при прохождении тока через контакт двух полупроводников получил практическое применение в различных охлаждающих устройствах: микрохолодильниках, термостатах, термоэлектрических гигрометрах и др. Перспективно также применять эффект Пельтье для электрического обогрева помещений при пропускании тока в направлении, при котором в спае выделяется теплота Пельтье.

6.3. Эффект Томсона.

Эффектом Томсона называется выделение или поглощение теплоты в однородном полупроводнике при протекании через него электрического тока при наличии в нем продольного градиента температуры. Количество теплоты Томсона пропорционально прошедшему через полупроводник количеству электричества q и

градиенту температуры $\frac{dT}{dx}$ вдоль полупроводника

$$Q_{\tau} = \tau \cdot It \frac{dT}{dx} = \tau \cdot q \frac{dT}{dx} \quad (6.21)$$

где τ – коэффициент Томсона, зависящий от материала полупроводника.

Эффект Томсона объясняется аналогично эффекту Пельтье. При прохождении тока в электронном полупроводнике в направлении возрастания температуры электроны будут переходить в обратном направлении, т. е. из мест с более высокой температурой (энергией) в места с более низкой температурой. При этом избыток своей энергии электроны отдают решетке, т. е. теплота Томсона выделяется. При прохождении тока в обратном направлении теплота Томсона будет поглощаться.

Согласно теории Томсона коэффициент Томсона связан с коэффициентом термо–ЭДС соотношением

$$\tau = T \frac{d\alpha}{dT} \quad (6.22)$$

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

Все три термоэлектрических явления взаимно связаны друг с другом. На основании законов термодинамики для обратимых процессов установлена связь между коэффициентами α, P, τ . Рассматривая замкнутую цепь из двух материалов при разности температур dT между контактами, на основании закона сохранения энергии можно написать выражение

$$\frac{\partial P_{12}}{\partial T} dT dI + (\tau_1 - \tau_2) dT dI = \alpha_{12} dT dI \quad (6.23)$$

из которого следует соотношение между коэффициентами $\alpha_{12}, P_{12}, \tau_1, \tau_2$ для контакта двух материалов полупроводников

$$\frac{\partial P_{12}}{\partial T} + (\tau_1 - \tau_2) = \alpha_{12} \quad (6.24)$$

Литература.

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М., Наука, 1978.
2. Орешкин П.Г. Физика полупроводников и диэлектриков. М., Высшая школа, 1977.
3. В.Л.Бонч-Бруевич, С.Г.Калашников. Физика полупроводников. М., Наука, 1990.
4. А.И.Ансельм. Введение в теорию полупроводников. М., Наука, 1978.
5. Н.Ашкрофт. Физика твердого тела. Т.1,2. Мир, 1979.



В 2009 году Университет стал победителем многоэтапного конкурса, в результате которого определены 12 ведущих университетов России, которым присвоена категория «Национальный исследовательский университет». Министерством образования и науки Российской Федерации была утверждена Программа развития государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики» на 2009–2018 годы.

КАФЕДРА ФИЗИКИ

Кафедра физики как одна из общеобразовательных кафедр существует с момента организации Ленинградского института точной механики и оптики. В довоенные и послевоенные годы кафедру возглавляли А.П. Ющенко, затем профессора В.Ф. Трояновский, Л.С. Поллак, И.В. Поройков, К.К. Аглинцев, Д.Б. Гогоберидзе, Н.А. Толстой, С.В. Андреев, А.Я. Вяткин, основоположник теплофизической школы ЛИТМО профессор Г.М. Кондратьев и его ученики доцент А.Ф. Бегункова и профессор Н.А. Ярышев. В настоящее время коллектив кафедры составляют выпускники нашего университета, Ленинградского Политехнического института, физического факультета Ленинградского государственного университета. На кафедре успешно работают 7 профессоров, докторов наук; 20 доцентов, кандидатов наук; 2 старших преподавателя, кандидата наук; 1 старший преподаватель и 4 ассистента.

С момента образования кафедры ее сотрудники уделяют большое внимание совершенствованию методики преподавания физики, как одной из базовых дисциплин подготовки будущих инженеров и формирующему интеллект предмету. Сотрудниками кафедры написано более тридцати учебных пособий для студентов по различным разделам инженерного курса физики, по проведению лабораторных работ, обработке результатов физического эксперимента и решению физических задач. В настоящее время проводится комплексная работа по совершенствованию всего учебного процесса, включая создание фронтальных компьютеризированных учебных лабораторий, банков контроля и проверки усвоения знаний, подготовку программно-методического обеспечения по дистанционному обучению студентов через компьютерные сети RUNNET и INTERNET. В тесном сотрудничестве с объединением «Росучприбор». Министерства Образования России ведется разработка лабораторных учебных стендов и практикумов.

Коллектив кафедры ведет активную научную работу. В 1957-1973 годах было сформировано научное направление по исследованию физики взаимодействия электронных пучков с веществом. С 1973 года получили развитие научные исследования в области теплофизики, в частности, нестационарной теплопроводности и теплотрии. С 1979 года стали систематически проводиться научные разработки в области спектроскопии разупорядоченных конденсированных систем, с 1987 года по физике волновых процессов, нелинейной оптике и радиофизике анизотропных сред, с 1994 года - по оптическому и рентгеновскому рассеянию надмолекулярными, в частности, фрактальными структурами, с 1999 года – по фотонным кристаллам. Научные разработки кафедры неоднократно удостоивались грантов Министерства образования, Российских и Международных научных фондов.

С 1993 года кафедра получила статус выпускающей по специальности 03.05.33 «Профессиональное обучение. Компьютерные технологии», а с 2003 года – по специальности 07.19.00 «Информационные системы и технологии». Значительно увеличился объем научно-методической и научно-исследовательской работы со студентами, бакалаврами и аспирантами. Десятки студентов и аспирантов, руководимые преподавателями кафедры, удостоивались стипендий Президента России, Правительства России, Администрации Санкт-Петербурга, Международных организаций (ISSEP, SPIE и др.).

Ольга Юрьевна Шевченко
Основы физики твердого тела
Учебное пособие

В авторской редакции
Верстка, дизайн

О.Ю.Шевченко

Редакционно-издательский отдел Санкт-Петербургского
государственного университета информационных технологий, механики
и оптики

Зав. РИО

Н.Ф. Гусарова

Лицензия ИД № 00408 от 05.11.09

Подписано к печати 16.03.10

Заказ №

Тираж

Отпечатано на ризографе

Редакционно-издательский отдел
Санкт-Петербургского государственного
университета информационных технологий,
механики и оптики
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., 49



