

В. Н. Игумнов

Физические основы микроэлектроники

Учебное пособие



DirectMEDIA

В. Н. Игумнов

**Физические основы
микроэлектроники**

Учебное пособие



Москва-Берлин
2014

УДК 621.382:539.2

ББК 32.852

И 28

Рецензенты:

О. Ш. Даутов – зав. кафедрой, д-р техн. наук, профессор,
(кафедра конструирования, технологии и производства
электронно-вычислительной аппаратуры
Казанского государственного технического университета);
А. А. Косов – д-р физ.-мат. наук, профессор
(Марийский государственный университет)

Игумнов В. Н.

И 28 Физические основы микроэлектроники :
учебное пособие / В. Н. Игумнов. –
М.-Берлин: Директ-Медиа, 2014. – 358 стр.

ISBN 978-5-4475-3300-7

Представлены базовые понятия квантовой механики, статической физики, физики полупроводников и полупроводниковых приборов, контактные и поверхностные явления и другие фундаментальные положения, необходимые при изучении курса «Физические основы микроэлектроники» и близких ему курсов. Показаны перспективы развития новых направлений микроэлектроники.

Для студентов специальностей 210201.65, 210202.65 и направления 551100, а также студентов родственных специальностей.

УДК 621.382:539.2

ББК 32.852

ISBN 978-5-4475-3300-7

© Игумнов В. Н., текст, 2014

© Издательство «Директ-Медиа», оформление, 2014

Условные обозначения

- A – работа; константа
 a – постоянная кристаллической решетки
 B – индукция магнитного поля
 B_c – критическая индукция
 C – емкость
 C_v – теплоемкость
 c – скорость света
 D – коэффициент диффузии; коэффициент прозрачности барьера
 d – толщина потенциального барьера; толщина объемного заряда; толщина пленки
 E – энергия, напряженность электрического поля
 E_g – ширина запрещенной зоны
 E_a – энергия возбуждения акцепторов
 E_d – энергия возбуждения доноров
 E_v – потолок валентной зоны
 E_c – дно зоны проводимости
 E_f – энергия Ферми
 e – заряд электрона
 F – сила
 f – функция распределения; частота
 G – число состояний
 $g(E)$ – плотность состояний
 $g(I)$ – скорость генераций
 h – постоянная Планка
 I – сила тока; сила света
 i – плотность тока
 i_s – плотность тока насыщения
 i_c – плотность критического тока
 k_B – постоянная Больцмана; волновое число
 \vec{k} – волновой вектор
 L – линейный размер; диффузионная длина
 m – масса
 m^* – эффективная масса

N – число частиц, эффективное число состояний в зоне

N_a – число Авогадро

$N(E)$ – полная функция распределения по энергиям

N_a – концентрация акцепторных атомов

N_d – концентрация донорных атомов

n – концентрация электронов

n_i – равновесная концентрация электронов в собственном полупроводнике

n_n – концентрация основных носителей в n -полупроводнике

n_p – концентрация неосновных носителей в p -полупроводнике

P – мощность

p – импульс; давление; концентрация дырок

Q – количество тепла; заряд

R – электрическое сопротивление

R_x – постоянная Холла

S – энтропия, площадь

s – скорость рекомбинации

T – абсолютная температура

t – время

U – потенциальная энергия системы, разность потенциалов

u – смещение частицы

V – объем

\mathcal{G} – скорость

\mathcal{W} – термодинамическая вероятность

w – вероятность

β – квантовый выход

γ – коэффициент рекомбинации

ϵ – диэлектрическая проницаемость

ϵ_0 – диэлектрическая постоянная

λ – длина волны, длина свободного пробега

μ – химический потенциал; магнитная проницаемость; подвижность носителей

μ_0 – магнитная постоянная
 μ_B – магнетон Бора
 ν – частота; число столкновений
 ρ – удельное сопротивление
 σ – удельная проводимость
 τ – время релаксации; время жизни
 Φ – магнитный поток; световой поток
 $\varphi(x)$ – потенциальная энергия электрона
 φ_0 – высота равновесного потенциального барьера
 χ – работа выхода
 ψ – волновая функция микрочастицы
 ω – циклическая частота

Список сокращений

- 0Д, 1Д, 2Д – размерность структуры (0, 1, 2)
АЭУ – акустоэлектронные устройства
Б-Э – Бозе-Эйнштейна (функция распределения)
ВАХ – вольт-амперная характеристика
ВТСП – высокотемпературная сверхпроводимость
ВФХ – вольт-фарадная характеристика
ГКЦ – гранецентрированная кубическая ячейка
гр. – греческий
ГЦ (БЦ, ОЦ) – гранецентрированная (базоцентрированная, объемноцентрированная) ячейка кристалла
ЖК – жидкие кристаллы
ИМС (ИС) – интегральная микросхема
ИППЛ – инжекционный полупроводниковый лазер
КМОП – комплементарная МОП-структура
КНС – кремний на сапфире
КП – квантовый проводник
КТ – квантовая точка
КЯ – квантовая яма
лат. – латинский
М-Б – Максвелла-Больцмана (функция распределения)
МДМ – металл-диэлектрик-металл (структура)
МДП – металл-диэлектрик-полупроводник (структура)
МДС – металл-диэлектрик-сверхпроводник (структура)
МОП – металл-окисел-полупроводник (структура)
МЭА – микроэлектронная аппаратура
МЭУ – магнитоэлектронные устройства
НТ – нанотехнологии
НТСП – низкотемпературная сверхпроводимость
НЭ – наноэлектроника
ОПЗ – область пространственного заряда
ОЭУ – оптоэлектронные устройства

ПДП – полупроводник-диэлектрик-полупроводник
(структура)
ПЗС – прибор с зарядовой связью
p-i-n – дырочный-собственный-электронный переход (полупроводниковая структура)
p-n – дырочный-электронный переход (полупроводниковая структура)
РЭС – радиоэлектронные средства
СДС – сверхпроводник-диэлектрик-сверхпроводник
(структура)
СИД – светоизлучающий диод
СП – сверхпроводимость
СР – сверхрешетка
ТКЛР – температурный коэффициент линейного расширения
ТКС – температурный коэффициент сопротивления
ТОПЗ – токи, ограниченные пространственным зарядом
Ф-Д – Ферми-Дирака (функция распределения)
ФЭ – функциональная электроника
ЭВС – электронно-вычислительные средства
ЭДС – электродвижущая сила

Предисловие

Настоящее учебное пособие предназначено для изучения теоретической части курса «Физические основы микроэлектроники» и соответствует требованиям Государственного образовательного стандарта специальностей 210201.65, 210202.65 и направления 551100.

Данный курс является синтезом сведений из различных, иногда, казалось бы, далеких друг от друга наук, что предполагает необходимость большого количества внутренних ссылок на предыдущий или последующий материал. Эта особенность курса объясняет и наличие в пособии довольно большого числа терминов, которые автор постарался расшифровать и систематизировать в алфавитно-предметном указателе. В работе над книгой также поможет достаточно подробный перечень условных обозначений и сокращений.

Предлагаемое издание включает в себя основы квантовой механики и статистической физики, дает представление о структуре твердого тела и процессах в электрических контактах твердых тел, а также на поверхности полупроводников. Здесь рассмотрены основы физики проводимости тонких пленок и фотопроводимости, физики сверхпроводимости и элементы нанoeлектроники. Теоретические вопросы проиллюстрированы примерами из современной микроэлектроники, криoeлектроники, оптоэлектроники и т.д.

Учебное пособие состоит из введения, десяти глав и заключения. Первая глава посвящена структуре различных твердых тел и их свойствам. Вторая и третья главы носят обслуживающий характер и позволяют лучше понять основной материал, квантовые и статистические особенности микромира. В четвертой и пятой главах изучаются электрические свойства твердых тел, в основном полупроводников. В шестой главе описываются поведение равновесных и неравновесных

носителей заряда, влияние электрического и магнитного полей, излучения на свойства полупроводников. Седьмая глава посвящена контактными явлениям и имеет большое значение для понимания работы ИС, содержащих контакты металл-полупроводник и $p-n$ – переходы. В восьмой главе описаны поверхностные явления в полупроводниках. Девятая глава посвящена описанию электрических свойств тонких пленок и тонкопленочных структур, которые имеют специфические характеристики. Последняя, десятая глава содержит описание основных, наиболее перспективных направлений функциональной электроники и нанoeлектроники.

В приложениях приведены сведения о свойствах полупроводников, физические константы. В конце каждой главы предложены вопросы и задания, которые позволят закрепить материал и проконтролировать степень его усвоения.

В процессе изучения курса «Физические основы микроэлектроники» студенты должны:

- изучить физические эффекты и явления в области физики твердого тела, физики контактов, физики тонких пленок и др., позволяющие осуществить заданные функции микроэлектронных устройств;
- научиться выбирать оптимальные решения в каждом конкретном случае;
- овладеть методиками расчета основных параметров элементов ИС.

Перед Вами второе издание учебного пособия, исправленное и переработанное автором после апробации его в процессе преподавания данной дисциплины в Марийском государственном техническом университете.

Не претендуя на исчерпывающе полное изложение материала по обозначенным проблемам, автор советует для более детального изучения отдельных вопросов

воспользоваться литературой, обширный список которой приведен в конце пособия.

Автор надеется, что приобрести и закрепить практические навыки обработки результатов измерений, исследования основных параметров полупроводников, контактов, МДП-структур и решения задач по различным разделам дисциплины студентам поможет подготовленный им и изданный в РИЦ МарГТУ одноименный практикум «Физические основы микроэлектроники» (Йошкар-Ола, 2008).

В заключение автор выражает глубокую признательность рецензентам – профессорам О.Ш. Даутову и А.А. Косову за ценные советы и рекомендации, а также тем, кто помогал ему в работе над учебным пособием, и прежде всего сотрудникам кафедры КиПР и радиотехнического факультета МарГТУ. Особая благодарность А.П. Большакову за труд по техническому оформлению рукописи.

Автор будет признателен всем, кто пожелает высказать критические замечания по совершенствованию книги, которые можно направить по адресу: 424000 Йошкар-Ола, пл. Ленина 3, Марийский государственный технический университет, кафедра конструирования и производства радиоаппаратуры.

Введение

Значение микроэлектроники в современной жизни трудно переоценить. Спектр ее применения простирается от фундаментальных исследований до прикладного использования в бытовой технике. Вычислительная техника, телевидение, сотовая связь, медицинская диагностика и многие другие области немыслимы сегодня без микроэлектроники. Появление ее было предопределено развитием требований, предъявляемых к электронной аппаратуре. Остановимся кратко на истории микроэлектроники.

Электроника – это область науки, техники и производства, включающая исследования и разработку электронных приборов и принципов их использования.

Началом развития электроники можно считать открытие в 1883 г. *Томасом Эдисоном* эффекта, впоследствии названного его именем. Эффект заключается в том, что после введения в вакуумную лампу накаливания металлического электрода и приложения к нему положительного потенциала между электродом и нитью накаливания протекает электрический ток. Это явление легло в основу устройства всех электронных ламп и различных электровакуумных приборов.

Начало следующего этапа развития электроники связано с созданием в 1948 г. полупроводникового транзистора *У. Шокли, У. Браттейном* и *Дж. Бердином*. Началось развитие полупроводниковой электроники, имеющей гораздо более высокие массогабаритные показатели.

Однако шло время, и к электронной аппаратуре жизнь предъявляла все более высокие требования: усложнение функций, повышение скорости операций, объемов запоминающих устройств, качества радиосигнала и т.д. Более высокие требования предъявлялись и к надежности аппаратуры.

Удовлетворение этих требований вело к росту числа элементов, т.е. к росту массогабаритных показателей, а значит и стоимости. Кроме того, в этом случае увеличивалось и число контактов, что отрицательно влияло на надежность электронных устройств.

Для решения возникающих проблем необходимо было уменьшить размеры элементов и сократить число контактов между ними.

Микроминиатюризация элементов и интеграция схем привели к созданию в 1959 г. *Килби* и *Нойсом* интегральной микросхемы. Началось бурное развитие важнейшего направления твердотельной электроники – интегральной электроники, или микроэлектроники.

Микроэлектроника – раздел электроники, связанный с исследованием, разработкой и производством интегральных схем. Микроэлектроника основана на использовании современных конструкторских и схемотехнических методов проектирования и изготовления сложных надежных электронных систем с высокой степенью миниатюризации за счет исключения дискретных навесных электронных элементов: конденсаторов, резисторов, диодов и т.д. Вместо них используют *совокупность*, как правило, большого количества взаимосвязанных компонентов, изготовленную в едином технологическом цикле, на одной несущей конструкции-подложке – и выполняющую определенную функцию преобразования информации. Это и есть **интегральная микросхема (ИС)**.

На рисунке (с. 11) представлена концептуальная диаграмма [2], которая дает представление о направлениях микроэлектроники, а также о внутренних связях между ними. Анализ диаграммы позволяет сказать о большом объеме и сложности проблем, решаемых микроэлектроникой.

Прогресс микроэлектроники очевиден. За годы, прошедшие после создания первых ИС, размер транзистора уменьшился с 1 мм до 0,5 мкм, т.е. в 2000 раз, число транзисторов в ИС близко к 10^9 .

Фирма IBM опубликовала примерные характеристики современного КМОП транзистора:

длина затвора – 0,25 мкм;

толщина окисла – 600 нм;

напряжение питания – 1,2 В;

производительность – 10^{15} элемент Гц·см⁻²;

время переключения – 10 пс.

Для решения задач микроэлектроники широко используются последние достижения физики, химии, радиотехники, математики, биологии, приборостроения и других областей наук и технических направлений.

В настоящее время в микроэлектронике можно выделить следующие относительно самостоятельные, но тесно переплетающиеся между собой направления.

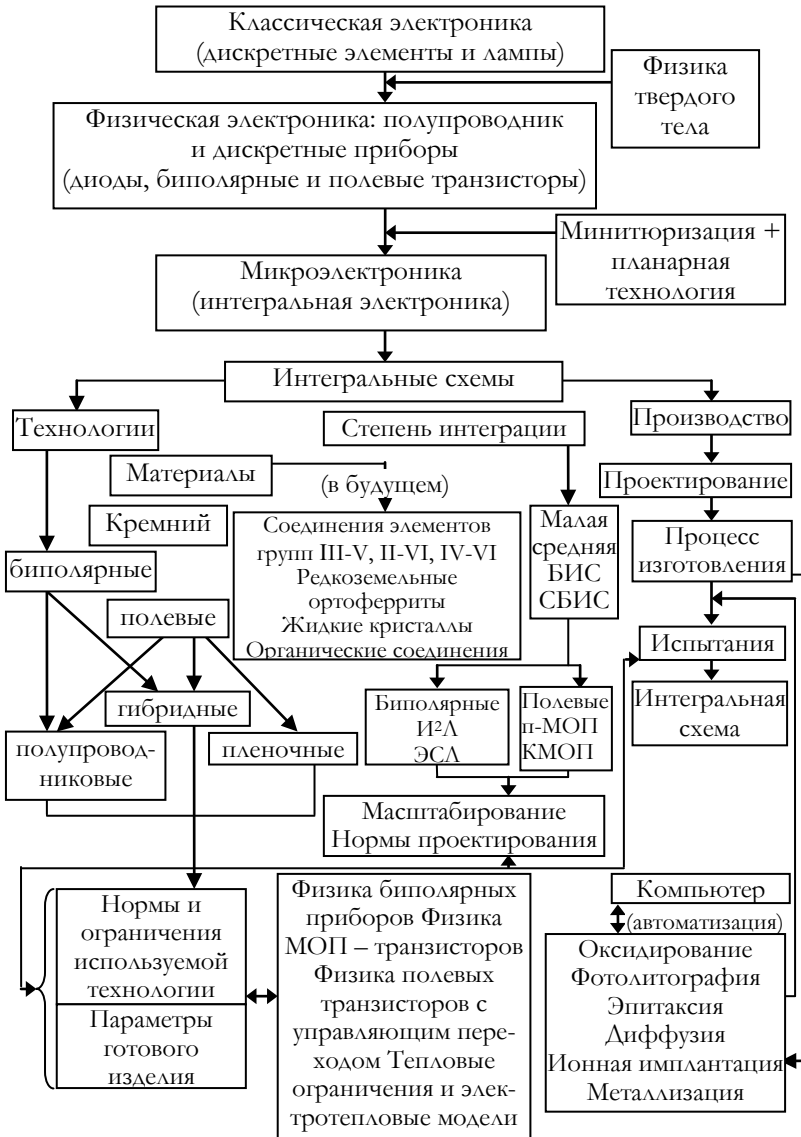
1. Направление, связанное с изучением физических явлений и эффектов, лежащих в основе принципов работы микроэлектронных устройств, или **физические основы микроэлектроники**.

Фундаментом данного направления являются основные положения квантовой механики, статистической физики, физики твердого тела, физики контактов, физики тонких пленок и другие разделы физики и физической химии.

2. Направление, связанное с разработкой методов расчета и конструирования микроэлектронных элементов, схем и устройств.

3. Направление, связанное с созданием физико-технологической базы производства микросхем и устройств, или **микроэлектронная технология**. Основой этого направления являются физика твердого тела, техника нанесения пленок, теория взаимодействия излучений с твердым телом.

Концептуальная диаграмма



4. Направление, связанное с созданием схемотехнической базы микроэлектроники, – **микроэлектронная схемотехника**.

5. Направление, связанное с созданием методов и средств проектирования микроэлектронных систем, – **микроэлектронная системотехника**.

Данное учебное пособие посвящено рассмотрению первого направления. Основной его целью является изучение физических эффектов и явлений, лежащих в основе принципов работы микроэлектронных устройств, отличающихся высокими показателями по выполняемым функциям и качеству, массогабаритным показателям и надежности, технологичности конструкций и эффективности производства.

Контрольные вопросы и задания

1. Дайте определение электроники.
2. Каковы основные требования к современной электронике?
3. Дайте определение микроэлектроники.
4. Пользуясь диаграммой, назовите основные разделы микроэлектроники.
5. Каковы основные направления микроэлектроники?
6. Как изменился размер микросхемы в процессе ее развития?

Глава 1.

Структура и свойства твердых тел

Современную микроэлектронику иногда называют твердотельной, подчеркивая тем самым, что ее изделия включают твердотельные элементы: проводники, полупроводники, диэлектрики, ферромагнетики и т.д.

Различные материалы имеют разные свойства: электрофизические (тип и величина проводимости, температурный коэффициент); теплофизические (теплоемкость, теплопроводность, температурный коэффициент расширения – ТКЛР); оптические (коэффициенты поглощения и преломления) и т.д. В зависимости от типа электронного устройства необходимо использовать и учитывать те или иные свойства. Очевидно, что, скажем, в электронном устройстве можно не учитывать оптические свойства материалов, зато в оптоэлектронном устройстве они становятся определяющими. Например, коэффициент поглощения материала световода между источником и приемником света определяет затухание сигнала и эффективность работы устройства. Обычно электропроводность этого световода не играет роли, тогда как электропроводность проводника (полупроводника) в электронной схеме является определяющим свойством.

Необходимо уметь находить степень значимости того или иного свойства, особенно при контактах различных материалов. Например, разрабатывая электрический контакт, следует учитывать работы выхода контактирующих проводников (полупроводников). Иначе существенное различие работ выхода приведет к появлению контактной разности потенциалов, влияющей на линейность контакта и искажающей проходящий сигнал (см. гл. 7). В данном случае этот параметр материала (работы выхода) является одним из основных.

На первый взгляд, для работы электронной схемы теплофизические характеристики не являются существенными. Однако необходимо учитывать, что электронные устройства работают в режиме перепада температур: день – ночь, включено – выключено и т.д. Если мы спроектируем контакт материала с различными ТКЛР, то возможно возникновение в них механических напряжений и разрушение. Например, пленка, нанесенная на подложку с иным ТКЛР, в результате термоциклирования может растрескаться или отслоиться. Оказывается, при проектировании контактов необходимо учитывать разность температур и разность ТКЛР материалов.

Так мы пришли к выводу, что **твердые тела имеют различные свойства (основные, существенные и несущественные) и при проектировании электронных устройств необходимо знать эти свойства и их зависимость от различных факторов.** Чем же определяются свойства твердого тела? Это один из вопросов, ответы на которые мы попытаемся дать в данной главе.

Известно, что тела, имеющие разные химические составы, имеют разные свойства: олово (Sn) – металл, проводник; кремний (Si) – полупроводник, «плохой» проводник; алмаз (C) – изолятор и т.д.

Однако при температуре $13,2^{\circ}\text{C}$ олово превращается в серый порошок; при добавлении к чистому кремнию мизерного количества примеси его проводимость возрастает на несколько порядков; нагретый до 930°C алмаз превращается в графит – проводник. Как следует из этих примеров, свойства твердого тела зависят не только от химического состава. В первом примере белое олово с тетрагональной структурой превратилось в серое олово, имеющее кубическую структуру. Во втором – чистый кремний приобрел примесные дефекты

структуры. В третьем примере тоже описан фазовый переход алмаза кубической структуры в графит, имеющий гексагональную структуру. Очевидно, что свойства твердых тел зависят от их структуры и наличия дефектов. Ниже мы рассмотрим возможные структуры твердых тел, их дефекты и влияние последних на свойства твердых тел.

1.1. Равновесное расположение частиц в кристалле

Известно, что все тела, включая твердые, состоят из атомов. Возникает вопрос: почему твердые тела являются твердыми, т.е. устойчивыми к внешним механическим воздействиям.

Ответ прост: между ними существуют **силы взаимодействия** (притяжения $F_{пр}$ и отталкивания $F_{оттл}$), причем они должны быть равными между собой ($F_{пр} = F_{оттл}$).

Характер сил отталкивания можно определить, зная энергию связи атомов в твердом теле. Она составляет единицы электрон-вольт. Из известных взаимодействий (сильное ядерное, слабое, гравитационное и электромагнитное), учитывая расстояние между атомами и величину энергии взаимодействия, можно выбрать **электрическое** взаимодействие. Таким образом, за отталкивание атомов отвечают знакомые нам кулоновские силы взаимодействия однополярных зарядов. Характер сил притяжения нам также знаком. Эти силы химической связи: ионная, ковалентная, металлическая, молекулярная.

Силы взаимодействия становятся существенными на достаточно малых расстояниях, близких к расстоянию между атомами в твердом теле.

Современная теория дает такую зависимость для силы притяжения:

$$F_{np}(r) = -b/r^{m+1}, \quad (1.1)$$

где b , m – постоянные, зависящие от вида химической связи. Например, в ионных и металлических кристаллах $m=1$.

Силы отталкивания приближенно могут быть описаны формулой

$$F_{omm} = c/r^{n+1}, \quad (1.2)$$

где c и n – постоянные, зависящие от природы атомов. Силы притяжения и отталкивания обуславливают потенциальную энергию взаимодействия атомов. Поскольку $F = -\frac{\partial U}{\partial r}$, составляющие потенциальной

энергии взаимодействия атомов будут иметь вид:

$$U_{np} = -B/r^m, \quad (1.3)$$

$$U_{omm} = -C/r^n, \quad (1.4)$$

где $B=b/m$; $C=c/n$.

На рис. 1.1 показаны графики составляющих потенциальной энергии, а также полной энергии взаимодействия атомов.

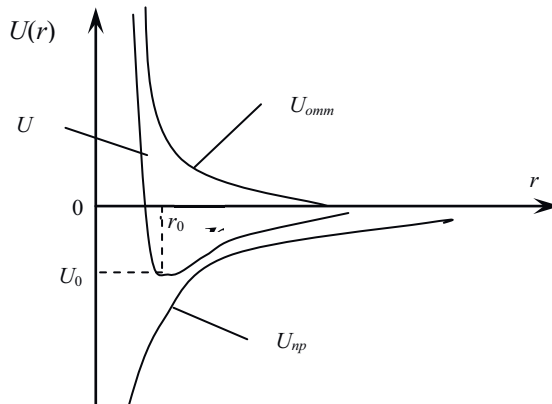


Рис. 1.1. Графики составляющих и полной потенциальной энергии

Как видно на рисунке, точка (r_0, U_0) соответствует **равновесному состоянию атомов**, когда $F_{пр.} = F_{отт.}$ а функция $U(r)$ имеет минимум. Состояние с минимальной энергией является равновесным, т.е. **устойчивым**, а $r_0 = a$ – расстоянию между атомами в твердом теле. При малом отклонении от равновесия система возвращается в исходное состояние.

В реальных условиях картина оказывается более сложной, поскольку атом в кристаллической решетке испытывает влияние окружающих атомов и задача превращается в задачу многих тел. Однако, несмотря на это, качественная картина равновесного, устойчивого состояния атомов в кристаллической решетке остается той же.

В реальных кристаллических решетках атомы никогда не находятся в статическом положении устойчивого равновесия, но совершают **колебательные движения** вокруг него. Природа этих колебаний может быть различной, например, механической, однако всегда существуют тепловые колебания, амплитуда которых возрастает с повышением температуры. При повышении температуры возможен случай, когда энергия теплового колебательного движения превысит энергию связи частиц. В этом случае частица не возвратится в равновесное состояние и химическая связь будет разорвана. Возможно испарение частицы с поверхности или миграция ее внутри твердого тела. Многие элементы и химические соединения в силу сложной структуры электронных оболочек и кристаллической решетки могут иметь не один, а два или более минимумов энергии. Каждый минимум соответствует определенному виду кристаллической решетки. В этом случае элемент или соединение кристаллизуется в такой решетке, которая соответствует наиболее глубокому минимуму энергии для данных условий. При изменении условий (температура, давление) может произойти перестройка

кристаллической структуры, сопровождающаяся переходом в другой минимум потенциальной энергии. Такое явление получило название **фазового перехода**. Примером таких переходов могут служить уже рассмотренные переходы белое олово – серое олово, алмаз – графит, а также обратные переходы.

1.2. Идеальные кристаллы. Решетки Бравэ

Выше были описаны условия образования равновесной кристаллической решетки. Она представляет собой модель кристалла, описывающую расположение атомов (ионов, молекул) в пространстве. Различают **решетки Бравэ** и **решетки с базисом**. В кристаллографии используют и другие системы классификации кристаллов [4].

В этом разделе мы будем рассматривать **идеальные кристаллы** – совершенные структуры, обладающие строгой периодичностью расположения атомов. Уже само название говорит о том, что таких кристаллов в природе нет, есть более или менее совершенные структуры, однако понятие «идеальный кристалл» позволяет более наглядно представить структуры реальные. **Решетки Бравэ**, или трансляционные решетки, создаются с помощью операции **параллельного перемещения** (трансляции) частиц (атомов, ионов). Вектор трансляции $\vec{P} = \vec{a}m + \vec{b}n + \vec{c}q$, где m, n, q – целые числа. В кристаллографии для аналитического описания кристалла используют трехмерную систему координат, которую выбирают в соответствии с *симметрией* кристалла. Декартова система в этом случае неудобна, поскольку она прямоугольна и имеет неравномерные оси координат. Такая система не позволяет достаточно полно и наглядно отразить основные свойства кристаллов, их симметрию и анизотропию. Оси кристаллографической системы координат, как правило,

совпадают с векторами, на которых построена *элементарная ячейка* (рис. 1.2). Под элементарной ячейкой понимают минимальный объем кристалла, который еще сохраняет его структуру.

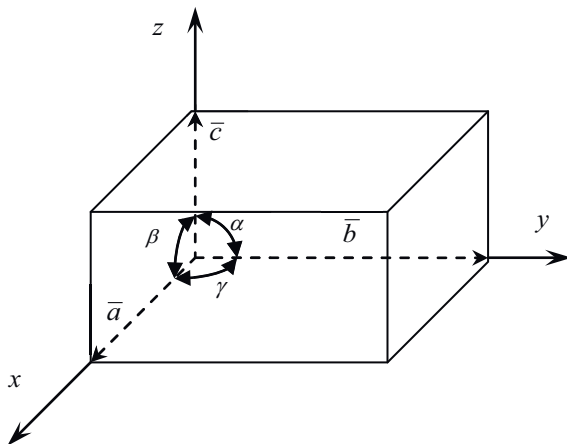


Рис. 1.2. Элементарная ячейка:

$\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \alpha, \beta, \gamma$ – параметры ячейки кристалла

Все элементарные ячейки кристалла имеют одинаковую структуру и объем. Во всех вершинах ячеек располагаются атомы или группы атомов. Их называют **узлами** решетки. В зависимости от соотношения параметров ячейки различают семь типов симметрий, или **сингоний** Бравэ (табл. 1.1).

Различают четыре типа структуры элементарных ячеек. **Примитивная ячейка (ПР)** содержит частицы только в вершинах. С учетом соседних ячеек, на такую ячейку приходится один атом.

Базоцентрированная (БЦ) ячейка кроме частиц в узлах имеет частицы в центрах верхней и нижней граней.

Если добавить частицы в центры остальных граней, получим **гранецентрированную (ГЦ)** элементарную ячейку с четырьмя частицами.

Таблица 1.1

Решетки Бравэ

Сингония	Параметры ячейки		Возможная структура ячейки
	углы	ребра	
триклинная	$a \neq b \neq c \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	ПР
моноклинная	$a = c = 90^\circ,$ $b \neq 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	ПР, БЦ
ромбическая	$a = b = c = 90^\circ$	$a \neq b \neq c$	ПР, БЦ, ГЦ, ОЦ
тетрагональная	$a = b = c = 90^\circ$	$a = b \neq c$	ПР, ОЦ
тригональная (ромбоэдрическая)	$a = b = c \neq 90^\circ$	$a = b = c$	ПР
гексагональная	$a = b = 90^\circ,$ $c = 120^\circ$	$a = b \neq c$	ПР
кубическая	$a = b = c = 90^\circ$	$a = b = c$	ПР, ОЦ, ГЦ

Объемноцентрированная (ОЦ) ячейка отличается от примитивной тем, что содержит в центре еще одну частицу.

Очевидно, что существует 14 различных решеток Бравэ (четвертый столбец таблицы). Можно строго доказать, что это действительно так.

Однако существуют кристаллические решетки, структура которых не совпадает ни с одной из решеток Бравэ. Такую решетку можно представить в виде двух вставленных друг в друга решеток Бравэ, их расстояние друг относительно друга описывается дополнительным вектором a , называемым **базисным**.

Такую решетку называют **решеткой с базисом**. Ее можно построить с помощью тех же трансляций, что и каждую из составляющих решеток Бравэ, но при этом нужно транслировать не один, а несколько узлов – базис. Например, решетку типа алмаза можно образовать двумя вставленными друг в друга ГЦК решетками, смещенными на $\frac{1}{4}$ диагонали ячейки.

Представим себе трехмерную кристаллическую структуру любой сингонии. Перемещаясь по тесной

структуре в различных направлениях, мы на единицу длины встретим различное число частиц, т.е. «линейная плотность» кристалла зависит от направления. Очевидно, это одна из причин анизотропии свойств кристалла. Следовательно, в кристалл необходимо ввести некие правила ориентации. Такими «координатами» являются **индексы Миллера** для узлов, направлений и плоскостей.

Индексы узлов. Положение любого узла кристаллической решетки относительно выбранного начала координат определяется заданием трех координат (рис. 1.3, а) – x, y, z , которые можно выразить так:

$$x=ma, \quad y=nb, \quad z=qc,$$

где a, b, c – параметры решетки,

m, n, q – целые числа.

Если за единицы измерения длины принять параметры решетки, то координатами узла будут числа m, n, q . Они называются индексами Миллера для узла и записываются в двойных квадратных скобках – $[[m \ n \ q]]$.

Индексы направлений. Для описания направления в кристалле выбирается вектор, проходящий через начало координат и через первый на его пути узел $[[m \ n \ q]]$. Поэтому индексы этого узла определяют индексы направлений – $[m \ n \ q]$ (рис. 1.3, б).

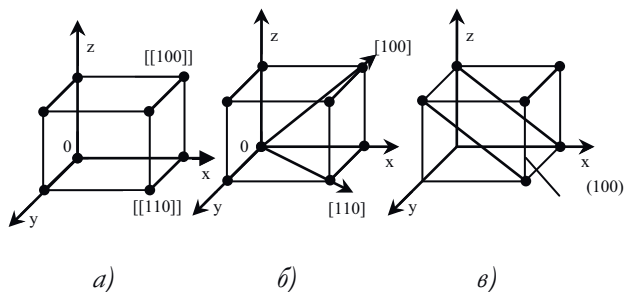


Рис. 1.3. Индексы Миллера: а – индексы узлов; б – индексы направлений; в – индексы плоскостей

Индексы плоскостей. Для нахождения индексов плоскости можно определить отрезки, отсекаемые ею на осях координат M , N , Q . Затем находят обратные величины $1/m$, $1/n$, $1/q$ и полученные дроби приводят к общему знаменателю D , $m=D/M$, $n=D/N$, $q=D/Q$. Полученные целые числа и есть индексы плоскостей (m, n, q) .

Можно найти индексы плоскостей и другим способом, учитывая, что плоскость и перпендикулярное ее направление имеют одинаковые индексы (рис. 1.3, \bar{b} , \bar{v}).

1.3. Нормальные колебания решетки. Фононы

Атомы, как известно, совершают тепловые колебания вокруг равновесных положений. Они существенно влияют на характер электрических, тепловых, оптических и других процессов в твердых телах.

Поскольку атомы твердого тела влияют друг на друга, аналитическое описание этого движения является крайне сложным, обычно рассматривают упрощенную модель колебаний. Вместо изучения колебательного движения отдельных атомов рассматривают **коллективные колебания** всего **ансамбля атомов**. Поскольку кристаллическая решетка обладает симметрией, а силы взаимодействия являются упругими, коллективные колебания рассматривают как упругие волны, распространяющиеся во всех направлениях по кристаллу. Эти волны отличаются длиной волны, фазой и поляризацией. Границы спектра упругих колебаний легко определить, пользуясь моделью кристаллической решетки, размеры которой – L , а параметр решетки – a , тогда $\lambda_{\min} = 2a$, $\lambda_{\max} = 2L$.

В теории колебаний волновой процесс принято характеризовать **волновым вектором** k , **круговой частотой** ω , **фазовой** \mathcal{G}_f и **групповой** \mathcal{G}_g скоростями

распространения волны. Можно записать величину волнового вектора

$$k=2\pi/\lambda, \quad (1.5)$$

фазовую скорость монохроматической волны

$$g_{\phi}=\omega/k \quad (1.6)$$

и групповую скорость

$$g_{gp}=\partial\omega/\partial k. \quad (1.7)$$

Напомним, что фазовая скорость представляет собой скорость перемещения в пространстве точки с заданной фазой, а групповая скорость – скорость набора волн, так называемого **волнового пакета**.

Решение основного уравнения динамики для колеблющегося атома можно записать в виде уравнения бегущих волн

$$u_i = A_i \sin(\omega_i t - k_i x_n), \quad (1.8)$$

где u_i – смещение i -го атома,

и уравнения

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{f}{m}} \sin \frac{ak}{2}, \quad (1.9)$$

где m – масса атома,

f – коэффициент упругости.

Подставив последнее выражение в (1.6) и (1.7), получим

$$g_{\phi} = \frac{2}{k} \sqrt{\frac{f}{m}} \sin \frac{ak}{2}, \quad (1.10)$$

$$g_{gp} = a \sqrt{\frac{f}{m}} \cos \frac{ak}{2}. \quad (1.11)$$

На рис. 1.4 показаны графики полученных зависимостей.

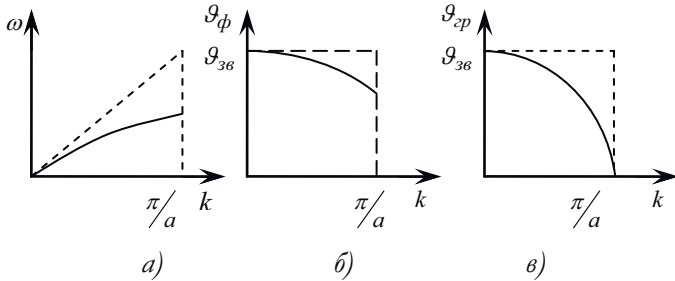


Рис. 1.4. Зависимость частоты колебаний (а), фазовой (б) и групповой (в) скоростей от волнового вектора

Анализ последних выражений показывает, что в случае длинных волн ($\kappa \rightarrow 0$) фазовая и групповая скорости обращаются в постоянную величину

$$v_{\phi} = v_{gp} = a \sqrt{\frac{f}{m}} = v_{zv}, \quad (1.12)$$

т.е. скорость звука в кристалле.

Для самых коротких волн $k = \pi/a$ и групповая скорость стремится к нулю, а фазовая скорость — к величине $\frac{2a}{\pi} \sqrt{\frac{f}{m}}$.

В области длинных волн кристалл можно рассматривать как непрерывную среду. Если бы это положение сохранялось во всем спектре, то зависимость $\omega(k)$ представляла бы прямую линию, а $v_{\phi}(k)$ и $v_{gp}(k)$ были бы постоянными, как показывают пунктирные линии на рис. 1.4. Следовательно, в области коротких волн кристалл уже нельзя рассматривать как непрерывную, упругую среду.

До сих пор мы рассматривали колебания в кристаллах, состоящих из одинаковых атомов. В кристаллах, состоящих из двух видов атомов, имеющих различные массы, а также в сложных решетках наблюдаются две ветви у графиков зависимости $\omega(k)$. На рис. 1.5, а представлены такие графики.

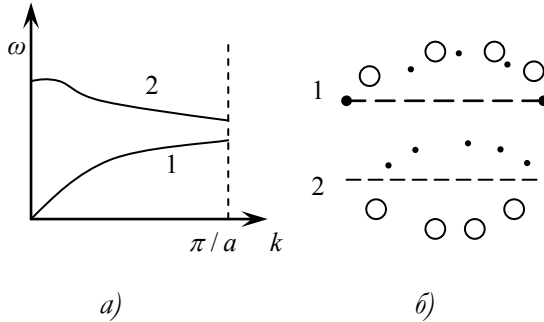


Рис. 1.5. Акустические (1) и оптические (2) колебания решетки: *a* – графики зависимостей; *б* – колебания двухатомной цепочки

Колебания, отраженные кривой 1, называют **акустическими**, отраженные кривой 2 – **оптическими**. Случай акустических и оптических колебаний одномерной цепочки проиллюстрирован на рис. 1.5, *б*. Очевидно, что для цепочки атомов во втором случае (оптические колебания) тяжелые и легкие атомы колеблются в противофазе, что приводит к более высокой частоте колебаний легких атомов. Существует другая модель для описания тепловых колебаний кристаллической решетки. Она заключается в том, что энергию колебаний представляют в виде энергии квантовых гармонических осцилляторов (п. 2.7)

$$E = (n + 1/2)h\nu, \quad (1.13)$$

где $n = 0, 1, 2, \dots$,

h – постоянная Планка,

ν – частота колебаний.

Как известно, энергия квантового осциллятора квантована и квант энергии – $h\nu$. Аналогично фотонам, имеющим такую же энергию, **квант колебаний** кристаллической решетки называют **фононом**. Поле упругих колебаний решетки можно рассматривать как совокупность фононов. Необходимо отметить,

что фотон входит в группу так называемых **квазичастиц**, к которой относятся **магноны** – кванты спиновых волн, **дырки** – кванты положительного заряда. Квазичастицы ведут себя так же, как частицы: имеют энергию и импульс (квазиимпульс), однако отдельно от системы не существуют. С помощью этой модели можно наглядно описывать многие процессы: теплопроводность, электропроводность и т.д.

Однако вернемся к тепловым колебаниям кристаллической решетки и попытаемся объяснить природу **теплового расширения** твердых тел. Для этого обратимся к рис. 1.1 и изобразим экстремум графика в увеличенном масштабе (рис. 1.6).

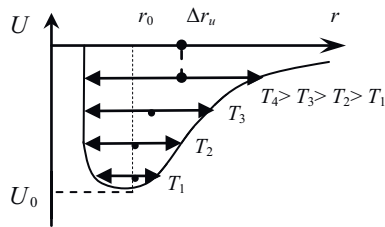


Рис. 1.6. Тепловые колебания атома при различных температурах

На рисунке показаны тепловые колебания атома вокруг равновесного состояния. С ростом температуры амплитуда колебаний растет. Однако, в силу несимметричности функции $U(r)$ относительно координаты r_0 и гармоничности тепловых колебаний, положение равновесия смещается на $\Delta r_1, \Delta r_2, \dots, \Delta r_n$ при повышении температуры. Таким образом, равновесное расстояние между частицами кристалла с температурой возрастает, что и приводит к тепловому расширению кристалла по известному закону

$$L=L_0(1+at), \quad (1.14)$$

где a – температурный коэффициент расширения,

t – температура,
 L_0 – длина тела при 0°C .

1.4. Структура реальных кристаллов

Напомним, что идеальные кристаллы являются лишь моделью твердого тела. В реальных телах существуют отклонения от периодичности расположения частиц, называемые **дефектами структуры**. Любопытно, что свойства, рассчитанные исходя из модели идеального кристалла, сильно (до двух порядков) отличаются от свойств реальных тел. Например, предел прочности и электропроводность идеальных кристаллов были бы в сто и более раз выше!

В природе существует великое множество дефектов структуры, однако чаще всего их классифицируют по мерности.

Нульмерные, или **точечные**, **дефекты** можно представить в виде следующей схемы (рис. 1.7):

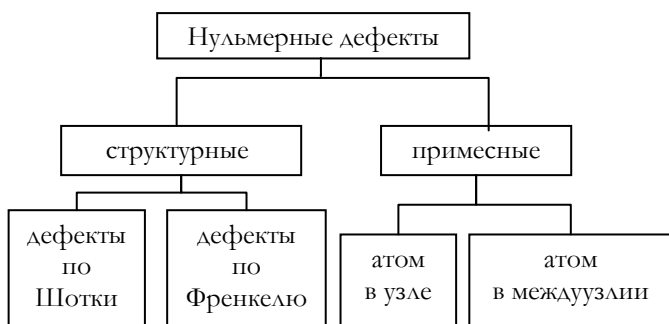


Рис. 1.7. Классификация точечных дефектов

Точечные дефекты представляют собой атомные нарушения в отдельных точках решетки.

Дефект по Шоттки – решеточная вакансия, или отсутствие узла кристаллической решетки (рис. 1.8, *a*). Дефект может образоваться в процессе роста кристалла, в результате механического или иного воздействия,

однако основной причиной образования генерации структурных дефектов является тепловое движение. Концентрацию дефектов по Шоттки $n_{ш}$ можно определить из выражения

$$n_{ш} = N_y \exp\left(-\frac{\Delta E_{ш}}{kT}\right), \quad (1.15)$$

где N_y – концентрация узлов,
 $\Delta E_{ш}$ – энергия дефектообразования.

Дефект по Френкелю представляет собой вакансию и атом в междоузлии (рис. 1.8, б).

Концентрация таких дефектов описывается выражением

$$n_{\phi} = \sqrt{N_y N_M} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\phi}}{kT}\right), \quad (1.16)$$

где N_M – концентрация междоузлий,
 ΔE_{ϕ} – энергия дефектообразования.

В обоих случаях энергия дефектообразования связана с высотой потенциального барьера, окружающего атом, и зависит от температуры. В первом приближении эта зависимость линейная. Как уже отмечалось, концентрация структурных дефектов сильно зависит от температуры, при повышении которой преобладает **генерация** дефектов, при понижении – их **рекомбинация**.

Например, атом из междоузлия занимает вакансию, и дефект по Френкелю, исчезает.

Эти процессы принято характеризовать скоростью генерации G_i и скоростью рекомбинации R . Очевидно, что при постоянной температуре эти скорости равны, а при снижении температуры образуется неравновесная, избыточная концентрация дефектов Δn , которая убывает со временем по закону релаксации

$$\Delta n = \Delta n_0 \exp(-t/\tau), \quad (1.17)$$

где Δn – концентрация при $t=0$,
 τ – время релаксации.

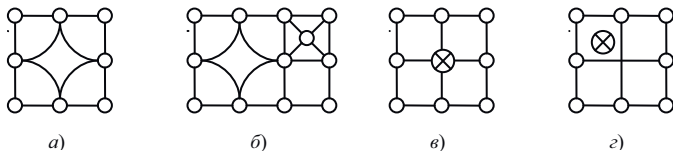


Рис. 1.8. Точечные дефекты: a – дефект по Шоттки;
 $б$ – дефект по Френкелю; $в$ – атом в узле;
 $з$ – атом в междуузлии. \otimes – примесный атом

Примесные дефекты. Эти точечные дефекты часто встречаются в кристаллах. Они могут создавать источники подвижных носителей, центры захвата и центры рекомбинации носителей заряда. Свойства примесных центров обуславливаются их электронной структурой и расположением их в кристаллической решетке. Кристаллы, примесные атомы которых находятся в узлах решетки (рис. 1.8, $в$), получили название твердых *растворов замещения*, а кристаллы, примесные атомы которых находятся в междуузлиях (рис. 1.8, $з$), называют *растворами внедрения*. Примесные дефекты особенно важны для полупроводников. Донорные и акцепторные примеси, введенные в кристалл полупроводника, на несколько порядков изменяют концентрацию носителей и электропроводность полупроводников (п. 4.6).

Отметим несколько особенностей точечных дефектов.

Точечные дефекты только называются нульмерными, а на самом деле занимают несколько межатомных расстояний, где искажается кристаллическая решетка.

Точечные дефекты (как, впрочем, и некоторые другие) обладают способностью к перемещению по кристаллу. Эта способность увеличивается при повышении температуры или механических напряжениях.

Одномерные дефекты. К наиболее часто встречающимся дефектам кристаллической структуры относятся *краевые* и *винтовые дислокации*. Возникновение

дислокаций может быть вызвано действием внешней силы на кристалл и его деформацией при растяжении, сжатии или сдвиге. В этом случае атомные плоскости сдвигаются относительно друг друга. Экспериментальные исследования показали, что наиболее легко осуществляется сдвиг по кристаллографическим плоскостям, имеющим наиболее плотную упаковку атомов. На рис. 1.9 представлены краевая и винтовая дислокации. Стрелками показаны механические напряжения при их образовании.

Дислокационная линия краевой дислокации D перпендикулярна плоскости рисунка, D винтовой дислокации перпендикулярна верхней плоскости параллелепипеда. Важным свойством дислокаций является их способность к перемещению под действием внешних сил. Краевая дислокация очень подвижна в собственной плоскости скольжения. Винтовая дислокация движется также в направлении, перпендикулярном дислокационной линии.

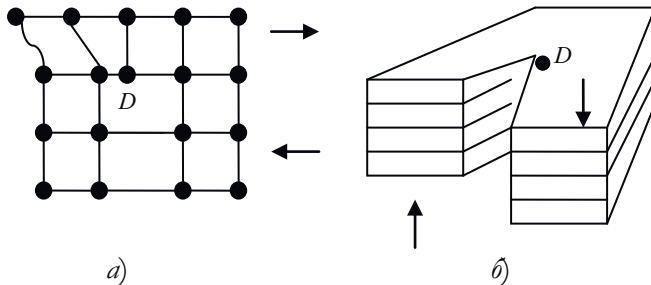


Рис. 1.9. Краевая (а) и винтовая (б) дислокации

В отличие от точечных дефектов, которые являются термически равновесными и принципиально не могут быть удалены из кристалла при конечной температуре, дислокации могут быть полностью удалены. В промышленных условиях, при предельно малых

температурных градиентах, изготавливаются малодислокационные кристаллы с плотностью дислокаций менее 10^2 см^{-3} .

Поверхностные дефекты. Двумерные, или поверхностные, дефекты бывают двух видов: внешние и внутренние. Главным внешним дефектом является сама поверхность, ведь на поверхности состояния атомов отличаются тем, что у них оборваны связи и эти атомы испытывают стягивающее воздействие со стороны кристалла. К внешним дефектам относятся также различные пленки: оксидные, боридные и т.д. Внутренние поверхностные дефекты – это границы: границы областей другой фазы, другой кристаллической ориентации, границы включений, пустот и т.д.

К **объемным, трехмерным** дефектам относятся уже упомянутые включения другой фазы, иной ориентации, пустоты и т.д.

Вышеперечисленные дефекты влияют на различные процессы в твердых телах, определяют их свойства, поэтому одной из основных задач микроэлектроники является создание материалов (особенно полупроводников) с заданной структурой.

1.5. Структурозависимые свойства

Итак, дефекты искажают структуру кристалла. Они могут влиять или не влиять на его свойства. В этом случае необходимо выделить два класса свойств: структурозависимые и структуронезависимые. По определению, ко второй группе можно отнести плотность, теплоемкость и некоторые другие свойства. Необходимо отметить, что влияние дефектов и в этом случае есть, но оно невелико. Так, наличие вакансий или пустот снижает плотность тела, но пока тело можно считать кристаллом данной структуры, этими изменениями можно пренебречь.