

В. А. Смирнов, О. В. Шуваева

ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

Учебное пособие

Москва Вологда
«Инфра-Инженерия»
2021

УДК 621.3.049.77

ББК 32.844.1

С50

Рецензенты:

начальник сектора АО «ЦКБА»

кандидат технических наук *А. А. Чепурин*;

научный сотрудник ПАО «НПО „Стрела”»

кандидат технических наук *А. А. Парамонова*

Смирнов, В. А.

С50 Физические основы микроэлектроники : учебное пособие / В. А. Смирнов, О. В. Шуваева. – Москва ; Вологда : Инфра-Инженерия, 2021. – 232 с. : ил., табл.

ISBN 978-5-9729-0711-3

Рассматриваются физические основы функционирования современных полупроводниковых приборов. Даны общие сведения о полупроводниковых приборах группы диодов и биполярных транзисторах. Рассмотрены элементы кристаллографии, атомной и квантовой физики. Приведена статистика электронов и дырок в полупроводниках.

Для специалистов в области приборостроения. Издание может быть полезно студентам и аспирантам технических вузов.

УДК 621.3.049.77

ББК 32.844.1

ISBN 978-5-9729-0711-3

© Смирнов В. А., Шуваева О. В., 2021

© Издательство «Инфра-Инженерия», 2021

© Оформление. Издательство «Инфра-Инженерия», 2021

Оглавление

Принятые обозначения и сокращения.....	7
Введение	9
ГЛАВА 1. ЭЛЕМЕНТЫ КРИСТАЛЛОГРАФИИ	11
1.1. Кристаллические структуры материалов	11
1.2. Типы химической связи в кристаллических структурах	15
1.3. Дефекты кристаллического строения материалов.....	18
1.4. Полупроводниковые материалы.....	20
1.5. Модель Друде – Лоренца электропроводности металлов	22
Литература к главе 1	28
ГЛАВА 2. ЭЛЕМЕНТЫ АТОМНОЙ И КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ.....	29
2.1. Принцип неопределенности Гейзенберга, уравнение Шредингера	29
2.2. Прохождение частицы через потенциальный барьер	31
2.3. Частица в прямоугольной потенциальной яме	36
2.4. Квантовая теория атома водорода. Энергетические уровни. Квантовые числа.....	38
2.5. Магнитные свойства вещества. Ядерный и электронный магнитный резонанс	47
2.6. Расщепление энергетических уровней в кристалле. Понятие об энергетических зонах. Основные положения зонной теории твердого тела.....	51
2.7. Волновой вектор. Зависимость энергии электрона от волнового вектора. Зоны Бриллюэна. Структура энергетических зон.....	61
2.8. Понятие эффективной массы	65
2.9. Квантовый гармонический осциллятор, понятие фонона	66
Литература к главе 2	71
ГЛАВА 3. СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В ПОЛУПРОВОДНИКАХ	73
3.1. Функция распределения электронов по состояниям. Уровень Ферми	73

3.2. Концентрация электронов и дырок в собственном полупроводнике. Уровень Ферми в собственном полупроводнике	77
3.3. Концентрация электронов и дырок в примесных полупроводниках.....	78
3.4. Движение носителей заряда в полупроводниках.....	80
Литература к главе 3	84

ГЛАВА 4. КОНТАКТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В МЕТАЛЛАХ

И ПОЛУПРОВОДНИКАХ	85
4.1. Работа выхода. Контактная разность потенциалов	85
4.2. Переходы металл – полупроводник	88
4.3. Переходы между полупроводниками р-типа и n-типа	94
4.3.1. Виды р-n-переходов	94
4.3.2. Контактная разность потенциалов в р-n-переходе, характеристики потенциального барьера	94
4.3.3. Статическая вольт-амперная характеристика р-n-перехода.....	99
4.3.4. Пробой р-n-перехода.....	105
4.3.5. Динамические характеристики р-n-перехода. Барьерная и диффузионная емкость р-n-перехода	110
4.4. Переходы между полупроводниками с собственной и примесной проводимостью, между полупроводниками с одним типом проводимости и различной концентрацией примеси	114
4.5. Гетеропереходы.....	115
Литература к главе 4	118

ГЛАВА 5. ПОЛУПРОВОДНИКОВЫЕ ПРИБОРЫ ГРУППЫ ДИОДОВ

5.1. Общие сведения о приборах группы диодов	119
5.2. Выпрямительные диоды, импульсные диоды, диоды с накоплением заряда	119
5.3. Р-і-n-диоды.....	125
5.3.1. Структура и принцип действия р-і-n-диода	125
5.3.2. Ток рекомбинации р-і-n-диода.....	128
5.3.3. Ток р-і-n-диода в режиме низкого уровня инжекции.....	129
5.3.4. Ток р-і-n-диода в режиме высокого уровня инжекции	129
5.4. Стабилитроны, стабисторы, лавинные диоды, шумовые диоды	132
5.5. Туннельные и обращенные диоды	134

5.6. Варикапы.....	140
5.7. Лавинно-пролетные диоды	141
5.8. Диоды Ганна	146
5.9. Фотодиоды	151
5.10. Светоизлучающие диоды	155
5.11. Фоторезисторы	161
Литература к главе 5	163
ГЛАВА 6. БИПОЛЯРНЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ.....	165
6.1. Структура и принцип действия биполярного транзистора.....	165
6.2. Математическая модель идеализированного транзистора	170
6.3. Понятие о схемах включения биполярного транзистора.....	173
6.4. Динамические характеристики биполярного транзистора.....	174
6.5. Параметры биполярного транзистора в режиме малого сигнала.....	176
6.6. Однопереходные транзисторы.....	181
Литература к главе 6	183
ГЛАВА 7. ПОЛЕВЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ.....	184
7.1. Общие сведения о полевых транзисторах.	
Виды полевых транзисторов	184
7.2. Полевые транзисторы с р-п-переходом	185
7.2.1. Структура и принцип действия полевых транзисторов с р-п-переходом	185
7.2.2. Динамические характеристики полевых транзисторов с р-п-переходом	190
7.3. Полевые транзисторы с изолированным затвором.....	191
7.3.1. Структура и характеристики МДП-конденсатора	191
7.3.2. Структура и принцип действия полевых транзисторов с изолированным затвором	201
7.4. Характеристики полевых транзисторов.....	203
7.5. Элементы памяти на основе полевых транзисторов	205
Литература к главе 7	207
ГЛАВА 8. ТИРИСТОРЫ	208
8.1. Общие сведения о тиристорах	208
8.2. Структура и принцип действия тиристора	209

8.3. Динамические характеристики тиристоров	217
Литература к главе 8	218
ГЛАВА 9. БИПОЛЯРНЫЕ ТРАНЗИСТОРЫ	
С ИЗОЛИРОВАННЫМ ЗАТВОРОМ.....	219
9.1. Общие сведения о биполярных транзисторах с изолированным затвором.....	219
9.2. Структура и принцип действия биполярных транзисторов с изолированным затвором.....	220
9.3. Характеристики биполярных транзисторов с изолированным затвором.....	225
Литература к главе 9	227

Принятые обозначения и сокращения

- A – постоянная Ричардсона;
- q_e – заряд электрона ($1,602 \cdot 10^{-19}$ Кл);
- ρ – удельное электрическое сопротивление;
- m_e – масса свободного электрона ($9,109 \cdot 10^{-31}$ кг);
- m_n^* – эффективная масса электрона;
- m_p^* – эффективная масса дырки;
- σ – удельная проводимость;
- μ – подвижность носителей заряда;
- μ_p – подвижность дырок;
- μ_n – подвижность электронов;
- χ_0 – истинная работа выхода;
- E_g – ширина запрещенной зоны;
- E_{gp} – ширина запрещенной зоны полупроводника p -типа;
- E_{gn} – ширина запрещенной зоны полупроводника n -типа;
- E_a – энергия активации примеси;
- E_{gd} – энергия активации донорной примеси;
- E_{ga} – энергия активации акцепторной примеси;
- E_c – энергия дна зоны проводимости;
- E_v – энергия потолка валентной зоны;
- E_F – энергия уровня Ферми;
- E_{F_M} – энергия уровня Ферми металла;
- E_{F_n} – энергия уровня Ферми полупроводника n -типа;
- E_{F_p} – энергия уровня Ферми полупроводника p -типа;
- \vec{E} – напряженность электрического поля;
- E_n – энергия электрона;
- E_p – энергия дырки;
- E_0 – энергия теплового равновесия, энергия электрона в вакууме;
- k_B – постоянная Больцмана ($1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К);
- $k_{ж}$ – коэффициент жесткости;
- \vec{k} – волновой вектор;

l_c – длина свободного пробега носителя заряда;
 L_n – диффузионная длина электронов;
 L_p – диффузионная длина дырок;
 τ_c – время свободного пробега носителя заряда (время релаксации);
 τ_n – время жизни электронов;
 τ_p – время жизни дырок;
 D_n – коэффициент диффузии электронов;
 D_p – коэффициент диффузии дырок;
 T – абсолютная температура, К;
 N_c – эффективная плотность состояний в зоне проводимости;
 N_v – эффективная плотность состояний в валентной зоне;
 N_a – концентрация акцепторной примеси;
 N_d – концентрация донорной примеси;
 \vec{j}_n – плотность электронного тока;
 \vec{j}_p – плотность дырочного тока;
 Φ – термодинамическая работа выхода;
 Φ_M – термодинамическая работа выхода металла;
 Φ_p – термодинамическая работа выхода полупроводника p -типа;
 Φ_n – термодинамическая работа выхода полупроводника n -типа;
 Φ_{kext} – внешняя контактная разность потенциалов;
 Φ_k – (внутренняя) контактная разность потенциалов;
 φ_T – тепловой потенциал;
 p – концентрация дырок;
 n – концентрация электронов;
 p_{n0} – равновесная концентрация дырок в n -области;
 n_{p0} – равновесная концентрация электронов в p -области;
 n_i – собственная концентрация носителей заряда (концентрация электронов в полупроводнике с собственной проводимостью, равная концентрации в нем дырок);
 h – постоянная Планка ($6,626075 \cdot 10^{-34}$ Дж · с);
 $\hbar = h / 2\pi$;
 ε_0 – электрическая постоянная ($8,854 \cdot 10^{-12}$ Ф/м).

Введение

Создание современных приборов невозможно без использования достижений микроэлектроники. Сфера ее применения – это измерительные приборы, медицинская техника, системы управления, радиосвязи, навигации. Без развития микроэлектроники и создания цифровых микросхем высокой степени интеграции была бы невозможна информационная и технологическая революция.

Начало развитию электроники было положено открытием радиоволн Генрихом Герцем в 1886 г. и созданием первых радиоприемных и радиопередающих устройств Александром Поповым и Гульельмо Маркони в 1895 году. Потребность в системах радиосвязи привела к тому, что уже в 1920-х годах начались первые опыты по созданию и применению в радиоприемных устройствах полупроводниковых приборов. Однако только в 1940-х годах, когда получила развитие физика твердого тела и физика полупроводников, микроэлектроника стала развиваться стремительными темпами. Уже в пятидесятых годах были созданы первые интегральные схемы. Достижения в области физики полупроводников и потребность промышленности, прежде всего космической и оборонной, в компактных, экономичных и надежных системах управления, дали импульс к развитию технологий получения сверхчистых полупроводниковых материалов и создания полупроводниковых структур.

Исследования различных физических эффектов в полупроводниковых структурах привели к созданию на их основе большого количества разнообразных датчиков – приемников светового и теплового излучения, датчиков температуры, магнитного поля, химических сенсоров.

Развитие технологий микроэлектроники привело к появлению микромеханических приборов – миниатюрных приводов и механических чувствительных элементов. Использование единой технологии для создания на одном кристалле механической и управляющей подсистем произвело очередную революцию в миниатюризации приборов.

Первыми микромеханическими приборами, появившимися в 1970-х, были датчики давления. В начале 1980-х годов появились микромеханические расходомеры и акселерометры. В 1990-е годы появились микромеханические гироскопы, микрозонды, микровентили, системы химического анализа, головки струйных принтеров, микроприводы элементов проекционных дисплеев, торсионных зеркал, микромеханические схемы газовых хроматографических систем, устройств считывания накопителей большой ёмкости, и т. д.

В настоящее время размеры элементов интегральных микросхем составляют единицы нанометров, а число элементов на кристалле может достигать нескольких миллиардов. Сейчас уже освоены технологические процессы, обеспечивающие серийное производство интегральных схем с размерами элементов 14 нм, в перспективе – переход к размеру 10 нм. Для сравнения заметим, что длина волны фиолетового излучения превышает 380 нм, т. е. размер элементов современных микросхем почти в сорок раз меньше длины волны видимого света! В 2016 г. физики из Национальной лаборатории им. Лоуренса в Беркли (США) создали транзистор с длиной затвора 1 нм. Ранее считалось, что создать транзистор с длиной затвора менее 5 нм невозможно из-за квантово-механических ограничений.

Таким образом, современный специалист в области приборостроения должен знать основы физики полупроводников и физические основы работы основных полупроводниковых приборов, иметь представление об основах технологии полупроводников. Даже грамотное применение обычных полупроводниковых приборов требует хорошего понимания принципов их работы.

Глава 1. Элементы кристаллографии

1.1. Кристаллические структуры материалов

Твердые вещества могут находиться в аморфном, монокристаллическом и поликристаллическом состоянии.

Кристаллами называются твердые тела с упорядоченным внутренним строением на уровне атомов и молекул, т. е. тела, обладающие трехмерной периодической структурой. Причиной упорядоченного расположения атомов в кристалле является взаимодействие между ними. В результате при медленном застывании вещества (кристаллизации) атомы располагаются в кристалле так, чтобы энергия их взаимодействия была минимальной. Атомы в кристалле обладают так называемым дальним порядком. Поликристаллы состоят из множества мелких кристаллов. В аморфных твердых телах атомы расположены хаотично относительно друг друга, т. е. дальний порядок отсутствует.

Положение частиц в кристалле характеризуется кристаллической решеткой. Математически кристаллическая решетка задается тремя некопланарными (т. е. не лежащими в одной плоскости) векторами элементарных трансляций \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , которые также называются параметрами решетки. Смещение решетки на вектор *элементарной трансляции* является наименьшим перемещением, при котором она совпадает сама с собой. На рис. 1.1 показаны одномерные решетки. Решетка на рис. 1.1 а содержит в элементарной ячейке один атом. Такая ячейка называется *примитивной* или *простой*. Другими словами, внутри примитивной ячейки нет узлов. Элементарные ячейки решеток на рис. 1.1 б и в содержат несколько атомов. Такие решетки называются *сложными* [1, 5].

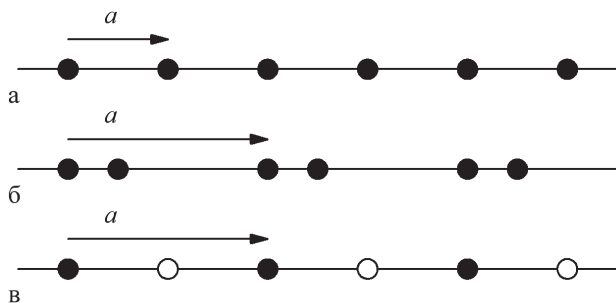


Рис. 1.1. Одномерные кристаллические решетки: а – примитивная; б – сложная из атомов одного типа; в – сложная из атомов разных типов

В двумерных и трехмерных решетках выбор базисных векторов и элементарной ячейки неоднозначен. На рис. 1.2 показаны три варианта выбора элементарных ячеек в двумерной решетке. Элементарные ячейки 1 и 2 содержат по одному атому. Элементарная ячейка 3 содержит три атома.

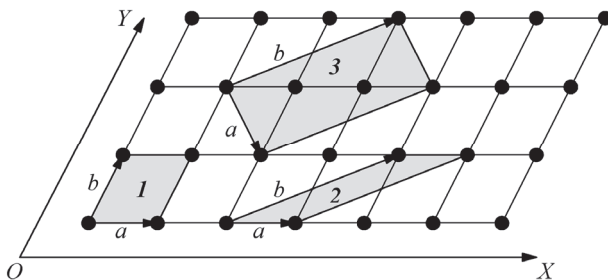


Рис. 1.2. Двумерная кристаллическая решетка

Трехмерная элементарная ячейка представляет собой параллелепипед, построенный на векторах элементарной трансляции (рис. 1.3). Кристалл можно представить как многократное повторение его элементарных ячеек.

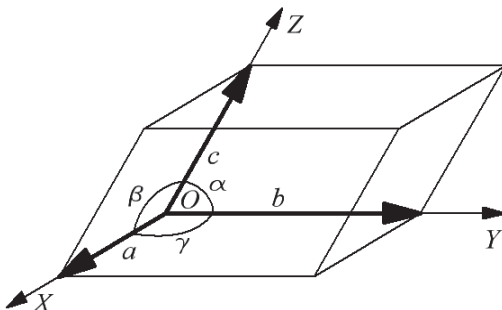


Рис. 1.3. Элементарная ячейка кристаллической решетки:
 a, b, c – элементарные трансляции по осям X, Y, Z ; α, β, γ – углы

Если один из узлов решетки выбрать за начало координат, то положение любого другого узла определяется радиус-вектором $\vec{R} = m\vec{a} + n\vec{b} + p\vec{c}$, где m, n, p – целые числа, называемые индексами узла.

Направление прямой в кристалле определяется началом координат и индексом первого узла, через который она проходит. Символ заданного таким образом направления записывается, как $[m n p]$, а соответствующая тройка чисел

называется *индексами Миллера*. Например, оси координат OX , OY , OZ определяются, соответственно, как $[100]$, $[010]$ и $[001]$.

В аналитической геометрии плоскость задается тремя отрезками $m\vec{a}$, $n\vec{b}$, $p\vec{c}$, которые она отсекает на осях координат. Положение плоскости в кристалле задается тройкой чисел (hkl) называемых *индексом плоскости*. Это наименьшие целые числа, удовлетворяющие соотношению:

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = h : k : l.$$

Примеры кристаллических решеток показаны на рис. 1.4.

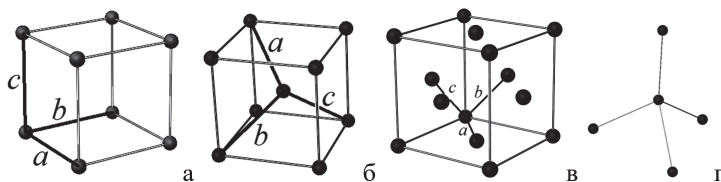


Рис. 1.4. Примеры кристаллических решеток: а – простая кубическая (кубическая P); б – кубическая объемно-центрированная (кубическая I); в – кубическая гранецентрированная (кубическая F); г – гексагональная (решетка типа алмаза)

Другой способ построения кристаллической решетки связан с введением ячейки Вигнера – Зейтца, которая образуется путем построения ограничивающих ячейку плоскостей на серединах векторов, соединяющих узел решетки со всеми соседними. Пример построения ячейки Вигнера – Зейтца показан на рис. 1.5.

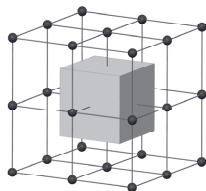


Рис. 1.5. Построение ячейки Вигнера – Зейтца

В 1848 г. французский кристаллограф Огюст Браве предложил следующие условия выбора элементарной ячейки:















1) симметрия элементарной ячейки должна соответствовать симметрии пространственной решетки;

- 2) число равных ребер и равных углов между ребрами должно быть максимальным;
- 3) число прямых углов между ребрами должно быть максимальным;
- 4) объем элементарной ячейки должен быть минимальным.

Браве показал, что при соблюдении указанных условий выбора элементарной ячейки существует всего 14 типов кристаллических решеток. В зависимости от соотношения единичных векторов элементарной ячейки их можно разделить на три категории – низшую ($\vec{a} \neq \vec{b} \neq \vec{c}$), среднюю ($\vec{a} \neq \vec{b} = \vec{c}$) и высшую ($\vec{a} = \vec{b} = \vec{c}$), и на семь систем (сингоний), различающихся по категории и соотношению углов α, β, γ . В табл. 1.1 показаны все 14 типов решеток Браве. Характеристики сингоний показаны в табл. 1.2.

Таблица 1.1

Типы решеток Браве

Сингония	Тип решетки			
	Примитивная	Базо-центрированная	Объемно-центрированная	Гране-центрированная
Триклинная	 P			
Моноклинная	 P	 C		
Ромбическая	 P	 C	 I	 F
Тригональная	 R			
Тетрагональная	 P		 I	
Гексагональная	 P			
Кубическая	 P		 I	 F

Характеристики сингоний и кристаллографических категорий

Категория	Угловые соотношения координатных систем	Сингония
Низшая ($\bar{a} \neq \bar{b} \neq \bar{c}$)	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Триклинная
	$\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	Моноклинная
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Ромбическая
Средняя ($\bar{a} = \bar{b} \neq \bar{c}$)	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Тригональная
	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Тетрагональная
	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Гексагональная
Высшая ($\bar{a} = \bar{b} = \bar{c}$)	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Кубическая

В общем случае узел кристаллической решетки не обязательно отождествляется с атомом, ионом или иной частицей. Конкретное расположение частиц в пространстве описывает кристаллическая структура.

1.2. Типы химической связи в кристаллических структурах

Ван-дер-ваальсова связь обусловлена слабым электростатическим взаимодействием между электрически нейтральными, но обладающими поляризацией молекулами. Например, в структуре графита связи в слое являются ковалентными, а связи между слоями – ван-дер-ваальсовы. В общем случае ван-дер-ваальсова связь включает в себя *дисперсионное, ориентационное и индукционное* взаимодействия.

Дисперсионное взаимодействие рассмотрим на примере взаимодействия двух атомов гелия. Распределение электронной плотности атома гелия обладает сферической симметрией и *средний* электрический момент равен нулю. Однако в каждый отдельный момент времени электроны расположены в определенных точках пространства, создавая мгновенные диполи. При сближении двух атомов гелия движение их электронов становится согласованным, что приводит к появлению притяжения между атомами, как показано на рис. 1.6.

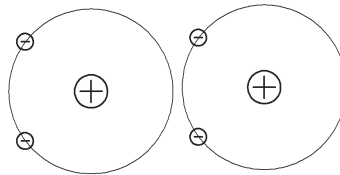


Рис. 1.6. К объяснению дисперсионного взаимодействия

Если молекулы обладают собственным дипольным моментом, то между ними возникает электростатическое взаимодействие, стремящееся уменьшить энергию системы. При этом молекулы выстраиваются в строгом порядке, как показано на рис. 1.7. Ориентация молекул нарушается хаотическим тепловым движением, поэтому энергия ориентации сильно зависит от температуры. Такой вид взаимодействия называется *ориентационным*.

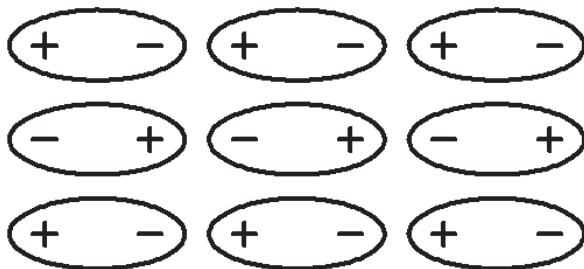


Рис. 1.7. К объяснению ориентационного взаимодействия

Индукционное взаимодействие свойственно полярным молекулам, обладающим высокой поляризуемостью. В этом случае под действием поля постоянных диполей соседних молекул может возникнуть наведенный (индуцированный) момент (на рис. 1.8 пунктиром показаны индуцированные диполи). Энергия взаимного притяжения, возникающая вследствие взаимодействия между жестким диполем первой молекулы и индуцированным диполем второй молекулы, как показал Дебай, не зависит от температуры.

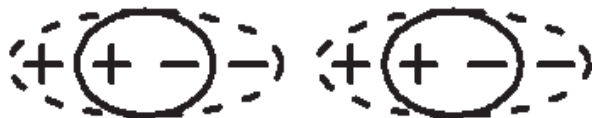


Рис. 1.8. К объяснению индукционного взаимодействия

В общем случае при сближении двух молекул могут возникать все три вида связи, и энергия взаимодействия определяется их суммой. В табл. 1.3 приведена относительная доля (%) каждой из этих составляющих для некоторых веществ [3].

Относительный вклад различных видов взаимодействия

Вещество	Вид взаимодействия		
	Дисперсионное	Ориентационное	Индукционное
Вода	19	77	4
Аммиак	50	45	5
Хлористый водород	81	15	4
Окись углерода	100	–	–

Из табл. 1.3 видно, что индукционное взаимодействие для всех веществ мало.

Ионная или полярная связь обусловлена силами электростатического взаимодействия между положительными и отрицательными ионами, образующимися в результате перемещения валентных электронов от атома одного вещества к атому другого. Такой вид связи характерен для соединений щелочных металлов и галогенов. У щелочных металлов на внешней оболочке всего один электрон, который слабо связан с ядром. У галогенов для полного заполнения внешней оболочки недостает одного электрона, поэтому они стремятся присоединить дополнительный электрон. При взаимодействии щелочного металла и галогена электрон от атома металла переходит к атому галогена. При этом атом металла заряжается положительно, а атом галогена – отрицательно. Под действием силы Кулона ионы притягиваются друг к другу.

С уменьшением расстояния между ионами сила взаимодействия стремится к бесконечности, однако неограниченному сближению препятствуют силы отталкивания между одинаково заряженными электронными оболочками. Силы отталкивания действуют только на малом расстоянии и при уменьшении расстояния растут значительно быстрее сил притяжения.

Ионная связь является малонаправленной. Большинство ионных кристаллов являются диэлектриками.

Ионные кристаллы прозрачны для электромагнитных волн в широкой области частот до граничной частоты, соответствующей частоте собственных колебаний ионов в решетке.

Ковалентная связь характерна для взаимодействия атомов одного вещества и осуществляется посредством спаренных (обобществленных) электронов: два валентных электрона с противоположно направленными спинами принадлежат одновременно двум атомам. В случае ковалентной связи вероятность нахождения обобществленных электронов в пространстве между атомами увеличивается. Ковалентная связь образуется в том направлении, в котором расположена наибольшая часть электронного облака обобществленных электронов.

Такой тип связи является строго *направленным* и характерен для полупроводниковых кристаллов. Еще одной особенностью ковалентной связи является ее насыщенность – каждый атом способен образовывать ковалентную связь лишь с определенным числом соседних атомов.

Металлическая связь осуществляется взаимодействием электронного газа в кристалле и положительно заряженных ионов кристаллической решетки. В этом отношении металлическая связь имеет сходство с ковалентной. Поскольку все атомы металла равноправны, металлическая связь, в отличие от ковалентной, является ненаправленной. Свободное перемещение валентных электронов по кристаллу обеспечивает высокую электропроводность и непрозрачность металлов для электромагнитных волн с относительно большими длинами волн (радиоволн и видимого света). Однако для электромагнитных волн дальнего ультрафиолетового спектра и более коротких металлы становятся прозрачными.

Большинство металлов образуют кристаллические структуры типа меди (кубическая гранецентрированная решетка), магния (гексагональная решетка) или вольфрама (кубическая объемно-центрированная решетка).

1.3. Дефекты кристаллического строения материалов

По геометрическим признакам дефекты кристаллического строения можно разделить на следующие виды:

- а) точечные (нульмерные) – вакансии, междоузельные атомы, примесные атомы;
- б) линейные (одномерные) – дислокации, цепочки вакансий и междоузельных атомов;
- в) поверхностные (двумерные) – границы зерен, дефекты упаковки;
- г) объемные (трехмерные) – поры, трещины, царапины.

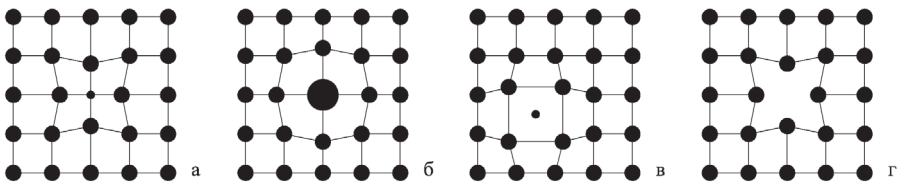


Рис. 1.9. Точечные дефекты кристаллической решетки: а, б – дефекты при замещении атома решетки атомом примеси; в – междоузельный атом (дефект внедрения); г – вакансия

Наиболее распространенными дефектами решетки являются примеси. В зависимости от природы примеси она может либо внедряться в промежутки между атомами кристаллической решетки, либо замещать собой ее атомы. Соответственно различают твердые растворы внедрения и замещения. Поскольку размер атомов примеси отличается от размеров атомов решетки, наличие примеси вызывает искажение кристаллической решетки, как показано на рис. 1.9.

К наиболее распространенным линейным дислокациям относятся краевые дислокации, дислокации сдвига, винтовые дислокации. Краевая дислокация показана на рис. 1.10.

Распределение энергии между атомами твердого тела является неравномерным. При любой температуре в кристалле имеются атомы, энергия которых во много раз больше или во много раз меньше среднего значения, соответствующего тепловому равновесию. Атом, обладающий в данный момент времени достаточной энергией, может преодолеть потенциальный барьер, созданный соседними атомами, и покинуть свое место в кристаллической решетке. Этот процесс сопровождается возникновением двух дефектов – вакансии и атома в междоузлии. Такого рода дефекты решетки называются *дефектами по Френкелю*.

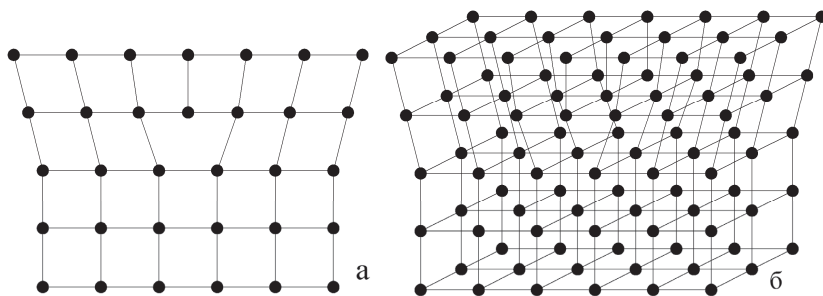


Рис. 1.10. Краевая дислокация: а – вид «в профиль»; б – трехмерная схема простой кубической кристаллической решетки с дислокацией

Если свое место в кристаллической решетке покидает атом, находящийся на поверхности кристалла, в поверхностном слое кристалла образуется вакансия. При замещении вакансии атомом из более глубоких слоев кристаллической решетки она втягивается внутрь кристалла и может перемещаться по его объему. Такой вакансии уже нельзя сопоставить дислоцированный атом, так как ее образование не сопровождается одновременным внедрением атома в междоузлие. Такого рода вакансии называют *дефектами по Шоттки*.

Дефекты по Френкелю и по Шоттки оказывают большое влияние на многие процессы в кристаллах. Они являются центрами рассеяния носителей заряда, понижающими их подвижность. Дефекты могут служить источником носителей заряда, т. е. действовать подобно донорам и акцепторам (обычно дефекты проявляют акцепторное действие); могут оказывать сильное влияние на оптические, магнитные, механические и термодинамические свойства кристаллов, особенно на свойства тонких полупроводниковых пленок и мелкокристаллических образцов.

1.4. Полупроводниковые материалы

Полупроводниковые материалы можно классифицировать по различным признакам – числу и виду входящих в состав полупроводника химических элементов, по ширине запрещенной зоны, и т. д. Чаще всего полупроводники классифицируют по химической структуре.

Элементарные полупроводники. Наиболее известным полупроводником является кремний (Si). Такую же кристаллическую структуру имеют германий (Ge), алмаз и α -олово (называемое также «серым» оловом). В такой структуре каждый атом связан с четырьмя соседними, и пространственная структура образует тетраэдр (говорят, что каждый атом имеет четырехкратную координацию). Такие полупроводники до последнего времени составляли основу современной электронной промышленности.

Бинарные соединения $A^{III}B^V$. Свойства соединений, образуемых элементами III и V групп таблицы Менделеева, похожи на свойства элементарных полупроводников группы IV. Сходство характеристик обусловлено тем, что такие соединения, как и элементарные полупроводники четвертой группы, в среднем имеют четыре валентных электрона. В отличие от элементарных полупроводников группы IV, в которых связи между атомами являются ковалентными, в соединениях III–V связи становятся частично ионными вследствие переноса электронного заряда от атома группы III к атому группы V. Ионность химических связей усиливает кулоновское взаимодействие между атомами и приводит к увеличению ширины запрещенной зоны. К соединениям данного типа относятся $GaAs$, $InAs$, InP , $AlAs$, GaP , AlP , $InSb$, BN , AlN , $GaSb$, GaN . Эти соединения, имеющие запрещенную зону с прямой структурой и большой шириной, применяются для создания быстродействующих полупроводниковых приборов, светодиодов и полупроводниковых лазеров.

Бинарные соединения $A^{II}B^{VI}$. Ионность еще более возрастает в соединениях элементов второй и шестой групп, таких, как CdS , ZnS , $CdTe$, $CdSe$. В результа-

те у большинства полупроводниковых соединений группы II–VI ширина запрещенной зоны больше 1 эВ. Исключение составляют соединения, содержащие ртуть (*Hg*). Теллурид ртути (*HgTe*) является полупроводником с практически нулевой шириной запрещенной зоны (или полуметаллом), подобно серому олову. Полупроводниковые соединения группы $A^{II}B^{VI}$ с узкой запрещенной зоной применяются для изготовления приемников инфракрасного излучения.

Тройные соединения. Составные полупроводники, относящиеся к одной группе ($A^{III}B^V$ или $A^{II}B^{VI}$) способны образовывать между собой твердые растворы. Это свойство позволяет получать тройные соединения. Примерами широко применяемых тройных соединений являются $Al_xGa_{1-x}As$, $Al_xIn_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}As$, $GaIn_xP_{1-x}$, где $0 \leq x \leq 1$.

Бинарные соединения $A^{IV}B^{VI}$. Двойные соединения, образующиеся из элементов четвертой и шестой групп, такие как сульфид свинца (*PbS*), теллурид свинца (*PbTe*) и сульфид олова (*SnS*) тоже являются полупроводниками. Несмотря на большую ионность, соединения группы IV–VI имеют очень узкие запрещенные зоны и применяются для изготовления приемников инфракрасного излучения.

Бинарные соединения $A^{IV}B^{IV}$. Наиболее применяемым полупроводником данной группы является карбид кремния *SiC*. Поскольку оба составляющих его элемента имеют одинаковый тип кристаллической решетки, они хорошо сочетаются. Ширина запрещенной зоны *SiC* составляет 2,9 эВ, что близко к среднему значению между шириной запрещенной зоны алмаза (5,4 эВ) и кремния (1,2 эВ).

Оксиды. Несмотря на то, что большинство оксидов являются диэлектриками, *CuO* и *Cu₂O* широко известные полупроводники. Процессы роста окисных полупроводников не вполне понятны, поэтому в настоящее время их применение ограничено. Единственным исключением является оксид цинка (*ZnO*), часто используемый в качестве люминофора. Его также можно отнести к группе II–VI.

Слоистые полупроводники. Полупроводниковые соединения, такие как иодид свинца (*PbI₂*), дисульфид молибдена (*MoS₂*) и селенид галлия (*GaSe*), характеризуются слоистой кристаллической структурой. Внутри слоев они обычно имеют ковалентные связи, значительно более сильные, чем связи Ван-дер-Ваальса между слоями. Слоистые полупроводники представляют интерес, поскольку поведение электронов в слоях является квазидвумерным.

Органические полупроводники. Многие органические соединения, такие как полиацетилен [$(CH)_n$] и полидиацетилен, являются полупроводниками. Несмотря на то, что органические полупроводники пока используются весьма

ограниченно, они весьма перспективны с точки зрения будущих применений. Преимущество органических полупроводников над неорганическими состоит в том, что их легко получать с заданными свойствами. Например, соединения, имеющие сопряженные связи, такие как $-C=C-C=$, характеризуются большой оптической нелинейностью и поэтому могут найти важные применения в оптоэлектронике. Запрещенные зоны этих соединений изменять легче, чем у неорганических полупроводников. Полупроводниками являются и многие новые формы углерода, например, фуллерены (C_{60}) и углеродные нанотрубки. Полупроводниками являются и нанотрубки из нитрида бора (BN).

1.5. Модель Друде – Лоренца электропроводности металлов

По электрофизическим свойствам твердые вещества могут быть разделены на три класса: металлы, полупроводники и диэлектрики.

У металлов удельное электрическое сопротивление находится в пределах $\rho = 10^{-8} \dots 10^{-6}$ Ом·м. Например, для серебра при комнатной температуре $\rho = 1,58 \times 10^{-8}$ Ом·м, для сплава «нихром» $\rho = 1,06 \times 10^{-6}$ Ом·м [7].

Вещества с удельным сопротивлением $\rho = 10^{-6} \dots 10^8$ Ом·м были отнесены к полупроводникам. Например, удельное сопротивление сернистого кадмия при комнатной температуре в зависимости от технологии изготовления лежит в пределах $10^{-5} \dots 10^{10}$ Ом·м, германия – $10^{-6} \dots 10^{-1}$ Ом·м, а кремния – $10^{-6} \dots 10^3$ Ом·м [7].

Вещества с удельным сопротивлением более 10^7 Ом·м считаются диэлектриками. Например, при 20°C для слюды в зависимости от ее состава $\rho = 10^{11} \dots 10^{14}$ Ом·м, для стекла $\rho = 10^7 \dots 10^{14}$ Ом·м [7]. Из приведенных примеров следует, что значения удельного сопротивления для разных классов веществ перекрываются. Поэтому значение удельного сопротивления не может служить в качестве однозначного критерия для классификации веществ. Как следует из рис. 1.11, металлы и полупроводники имеют различный характер температурной зависимости удельного сопротивления. Для металлов в широком диапазоне температур удельное сопротивление ρ увеличивается пропорционально температуре T :

$$\rho(T) = \rho_0(1 + \alpha_0 T), \quad (1.1)$$

где ρ_0 – удельное сопротивление металла при 0°C ;

$\alpha_0 > 0$ – температурный коэффициент сопротивления;

T – температура, $^\circ\text{C}$.

Для металлов (рис. 1.11 а) характерно увеличение удельного электрического сопротивления с ростом температуры по закону, близкому к линейному. Однако при сверхнизких температурах (порядка единиц градусов Кельвина) зависимость удельного сопротивления металлов от температуры становится нелинейной, и характер этой зависимости может быть различным для разных металлов.

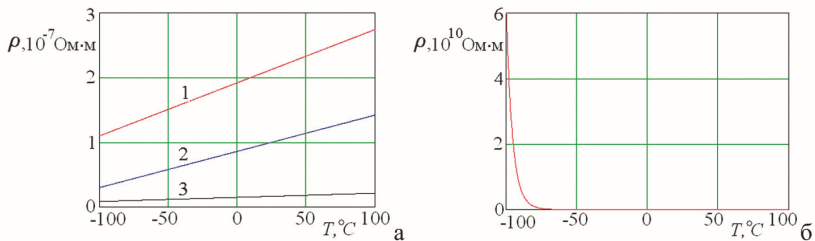


Рис. 1.11. Зависимость удельного сопротивления металлов и полупроводников от температуры: а – металлов (1 – свинец, 2 – железо, 3 – серебро); б – кремния

У полупроводников при уменьшении температуры удельное сопротивление резко возрастает (рис. 1.11 б). При этом зависимость сопротивления от температуры близка к экспоненциальной:

$$\rho = \rho_0 e^{\beta/T}, \quad (1.2)$$

где ρ_0 , $\beta > 0$ – некоторые постоянные, характерные для данного полупроводника.

Теория электропроводности и теплопроводности металлов была создана Паулем Друде в 1900 г. и получила дальнейшее развитие в работах Друде и Лоренца. Благодаря своей простоте и наглядности данная модель используется и в настоящее время [2, 6].

Рассматривая электропроводность металлов, Друде и Лоренц исходили из следующих основных положений:

1. Металл состоит из кристаллической решетки, в узлах которой, совершая тепловые колебания относительно положения равновесия, находятся