

Министерство образования Республики Беларусь  
Учреждение образования  
«Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники»  
Кафедра химии

И. В. БОДНАРЬ, А. А. ПОЗНЯК

***ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ  
МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ И ТЕХНОЛОГИИ***

**ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ  
ДЛЯ СТУДЕНТОВ СПЕЦИАЛЬНОСТЕЙ  
1-39 02 01 «МОДЕЛИРОВАНИЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ  
ПРОЕКТИРОВАНИЕ РЭС»  
и 1-39 02 02 «ПРОЕКТИРОВАНИЕ  
И ПРОИЗВОДСТВО РЭС»  
всех форм обучения**

Минск БГУИР 2011

УДК 621.3.049.77(076.5)

ББК 32.844.1я7

Б75

Рецензент:  
доцент кафедры микро- и нанoeлектроники  
учреждения образования  
«Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники»  
кандидат физико-математических наук С. А. Волчек

**Боднар, И. В.**

Б75

Физико-химические основы микроэлектроники и технологии : лаб. практикум для студ. спец. 1-39 02 01 «Моделирование и компьютерное проектирование РЭС» и 1-39 02 02 «Проектирование и производство РЭС» всех форм обуч. / И. В. Боднар, А. А. Позняк. – Минск : БГУИР, 2011. – 46 с. : ил.

ISBN 978-985-488-544-5.

Приводится основной теоретический материал для изучения тем, входящих в программу курса «Физико-химические основы микроэлектроники и технологии» специальностей «Моделирование и компьютерное проектирование РЭС» и «Проектирование и производство РЭС», подготовки и выполнения лабораторных работ по изучению тепловых свойств твердого тела «Определение температурного коэффициента линейного расширения», оптических явлений в полупроводниках «Изучение оптического поглощения полупроводников» и по основам рентгеноструктурного анализа «Изучение структуры кристаллов».

**УДК 621.3.049.77(076.5)**

**ББК 32.844.1я7**

**ISBN 978-985-488-544-5**

© Боднар И. В., Позняк А. А., 2011  
© УО «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», 2011

## СОДЕРЖАНИЕ

|  |    |
|--|----|
| <b>1. Лабораторная работа «ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЛИНЕЙНОГО РАСШИРЕНИЯ»</b> ..... | 4  |
| 1.1. Теоретические сведения .....  | 4  |
| 1.2. Задачи работы.....  | 9  |
| 1.3. Экспериментальная часть .....   | 9  |
| 1.3.1. Порядок выполнения работы.....  | 9  |
| 1.3.1.1. Устройство кварцевого дилатометра .....   | 9  |
| 1.3.1.2. Порядок измерений и расчетов.....   | 11 |
| 1.3.2. Содержание отчета .....   | 12 |
| Литература.....  | 13 |
| <b>2. Лабораторная работа «ИЗУЧЕНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ»</b> .....              | 14 |
| 2.1. Теоретические сведения к работе .....   | 14 |
| 2.1.1. Основы зонной теории кристаллов .....   | 14 |
| 2.1.2. Основные оптические характеристики полупроводников .....                                    | 18 |
| 2.1.3. Виды поглощения света в кристаллах .....  | 21 |
| 2.1.3.1. Собственное поглощение.....   | 21 |
| 2.1.3.2. Экситонное поглощение .....   | 23 |
| 2.1.3.3. Поглощение света свободными носителями заряда .....                                       | 25 |
| 2.1.3.4. Примесное поглощение .....  | 26 |
| 2.1.4. Фотопроводимость в полупроводниках .....  | 27 |
| 2.1.5. Эффект Франца – Келдыша .....   | 27 |
| 2.2. Экспериментальная часть .....   | 28 |
| 2.2.1. Порядок выполнения работы.....  | 28 |
| 2.2.2. Содержание отчета .....   | 30 |
| 2.3. Контрольные вопросы .....   | 31 |
| Литература.....  | 32 |
| <b>3. Лабораторная работа «ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ»</b> .....                                | 33 |
| 3.1. Теоретические сведения .....  | 33 |
| 3.1.1. Описание структуры кристаллов.....  | 33 |
| 3.1.2. Дефекты структуры кристалла .....   | 35 |
| 3.1.3. Обозначение узлов, направлений и плоскостей в кристалле .....                               | 38 |
| 3.1.4. Формула Вульфа – Брэггов .....  | 41 |
| 3.2. Экспериментальная часть .....   | 42 |
| 3.2.1. Индексирование дифрактограмм .....  | 42 |
| 3.2.2. Порядок выполнения работы.....  | 43 |
| 3.2.3. Содержание отчета .....   | 46 |
| 3.3. Контрольные вопросы .....   | 46 |
| Литература.....  | 47 |

# 1. ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА «ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕМПЕРАТУРНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ЛИНЕЙНОГО РАСШИРЕНИЯ»

**Цель работы:** определить температурный коэффициент линейного расширения (ТКЛР) материалов дилатометрическим методом, построить графическую зависимость удлинения материала от температуры и, используя полученный график, рассчитать ТКЛР.

## 1.1. Теоретические сведения

Тепловое расширение – одно из наиболее важных свойств различных материалов. Его необходимо учитывать при выращивании монокристаллов различных материалов, при пайке и сварке материалов и компонентов электронной техники, при герметизации приборов различного рода припоями, тепловой обработке различного рода многослойных структур и т. д.

Причиной теплового расширения твердых тел является несимметричный характер кривой зависимости энергии взаимодействия частиц от расстояния между ними. Результирующая сила ( $F_{рез}$ ) взаимодействия атомов твердого тела складывается из сил электростатического притяжения ( $F_{пр}$ ) и отталкивания ( $F_{от}$ ). Эти силы изменяются по-разному при изменении расстояния между взаимодействующими частицами (рис. 1.1, а) и их равнодействующая равна нулю при расстоянии между частицами, равном  $r_0$ .

Рассмотрим взаимодействие двух отдельных атомов, находящихся в состоянии равновесия – сила притяжения равна силе отталкивания. Пусть атом 1 жестко закреплен. Если атом 2 вывести из положения равновесия,

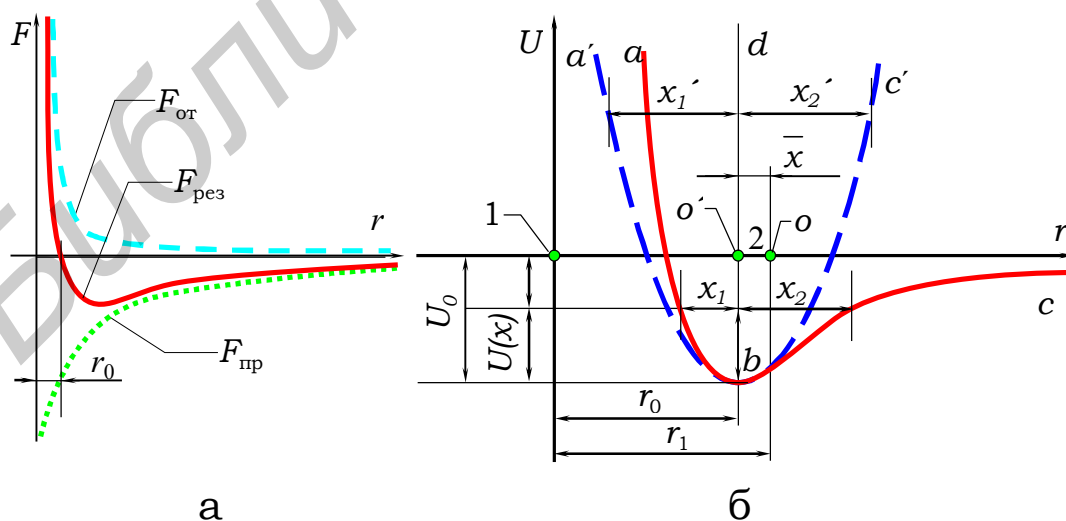


Рис. 1.1. Зависимость сил (а) и энергии (б) взаимодействия частиц от расстояния между ними

то он начнет колебаться относительно некоторого среднего положения. Если сила, возвращающая атом 2 в положение равновесия, пропорциональна смещению, то среднее положение этого атома не будет зависеть от амплитуды его колебаний. Если считать, что колебания атома возникают в результате нагревания, то отсюда следует, что средние размеры такой двухатомной модели тела от температуры не зависят. В этом случае потенциальная энергия таких атомов представляет собой равнобочную параболу, которая соответствует гармоническим колебаниям (пунктирная линия, рис. 1.1, б).

В действительности энергия взаимодействия двух атомов должна быть изображена резко асимметричной кривой (сплошная линия, рис. 1.1, б), которая обусловлена также результатом сложения двух разных кривых – кривой, которая соответствует энергии притяжения, и кривой, соответствующей энергии отталкивания атомов. Потенциальная энергия сил взаимодействия между атомами описывается с помощью потенциала Леннарда – Джонса:

$$U = -\frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n}, \quad (1.1)$$

где  $r$  – расстояние между взаимодействующими атомами,  $A$  и  $B$  – константы.

Во всех случаях  $n > m$ , и, чем больше кривая энергии взаимодействия отклоняется от параболы, тем больше это неравенство. Таким образом, для левой части кривой, изображающей потенциальную энергию взаимодействия двух атомов, основную роль играют силы отталкивания, для правой – силы притяжения,  $r_0$  – равновесное расстояние между атомами, соответствующее минимуму потенциальной энергии. Если бы частица 2 совершала чисто гармонические колебания около положения равновесия, то сила  $F$ , возникающая при отклонении ее на расстояние  $x$ , была бы пропорциональна  $x$ :

$$F(x) = -\beta x, \quad (1.2)$$

а изменение потенциальной энергии  $U(x)$  описывалось бы параболой:

$$U(x) = \beta x^2 / 2, \quad (1.3)$$

показанной на рис. 1.1, б кривой  $a'bc'$ . Видно, что эта кривая симметрична относительно прямой  $bd$ , параллельной оси ординат и отстоящей от нее на расстоянии  $r_0$  (положение частицы обозначено точкой  $o$ ).

В этом случае отклонение частицы 2 при колебаниях вправо и влево были бы одинаковыми ( $x_1 = x_2$ ) и нагревание не могло бы вызвать расширение твердого тела, так как с увеличением температуры происходило бы лишь увеличение амплитуды колебаний частиц, а среднее расстояние между ними оставалось бы неизменным.

В действительности же потенциальная кривая  $abc$  является несимметричной относительно прямой  $bd$  (рис. 1.1, б). Видно, что ее левая ветвь  $ba$  поднимается значительно круче правой ветви  $bc$ . Это свидетельствует о том, что колебания частиц в твердом теле являются ангармоническими. Для учета асимметрии потенциальной кривой в уравнение (1.2) необходимо ввести дополнительный член  $-gx^3/3$ , выражающий эту асимметрию ( $g$  – коэффициент пропорциональности). Тогда (1.2) и (1.3) запишутся в виде

$$F(x) = -\beta x + bx^2, \quad (1.4)$$

$$U(x) = \beta x^2/2 - gx^3/3. \quad (1.5)$$

При отклонении частицы 2 вправо ( $x > 0$ ) слагаемое  $gx^3/3$  вычитается из  $\beta x^2/2$  и ветвь  $bc$  идет более полого, чем ветвь  $bc'$ , при отклонении влево ( $x < 0$ ) слагаемое  $gx^3/3$  прибавляется к  $\beta x^2/2$  и ветвь  $ba$  идет круче ветви  $ba'$ .

Несимметричный характер кривой  $U(x)$  приводит к тому, что частица 2 отклоняется вправо на большее расстояние, чем влево ( $x_1 \neq x_2$ ), в результате чего среднее положение этой частицы  $o'$  смещается вправо (соответствует на рисунке положению, обозначенному как  $o$ ), что соответствует увеличению расстояния между частицами на величину  $\bar{x}$ . Это и вызывает расширение тела при нагревании.

Произведем количественную оценку коэффициента теплового расширения  $\alpha$ .

Среднее значение силы, возникающей при смещении частицы 2 от положения равновесия, равно

$$\bar{F} = -\beta \bar{x} + g\bar{x}^2. \quad (1.6)$$

При свободных колебаниях частицы 2 среднее значение силы

$\bar{F} = 0$ , поэтому

$$\beta \bar{x} = g \bar{x}^2, \quad (1.7)$$

при этом среднее значение смещения будет определяться как

$$\bar{x} = \frac{g \bar{x}^2}{\beta}. \quad (1.8)$$

В соответствии с (1.3) среднее значение потенциальной энергии колеблющейся частицы равно

$$\bar{U}(x) = \frac{\beta \bar{x}^2}{2}, \quad (1.9)$$

откуда находим

$$\bar{x}^2 = \frac{2\bar{U}(x)}{\beta}. \quad (1.10)$$

Подставляя (1.10) в (1.8), находим  $\bar{x}$ :

$$\bar{x} = \frac{2g\bar{U}(x)}{\beta^2}. \quad (1.11)$$

Колеблющаяся частица, кроме потенциальной энергии  $\bar{U}(x)$ , обладает также и кинетической энергией  $\bar{E}_k$ , причем  $\bar{U}(x) = \bar{E}_k$ . Полная энергия частицы будет равна

$$E = \bar{E}_k + \bar{U}(x) = 2\bar{U}(x). \quad (1.12)$$

Учитывая (1.12), выражение (1.11) запишем в следующем виде:

$$\bar{x} = \frac{g}{\beta^2} E. \quad (1.13)$$

Относительное линейное расширение есть отношение изменения среднего расстояния  $\bar{x}$  между частицами к нормальному расстоянию  $r_0$  между ними:

$$\frac{\bar{x}}{r_0} = \frac{g}{\beta^2 r_0} E, \quad (1.14)$$

а коэффициент линейного расширения  $\alpha$  равен относительному изменению  $\bar{x}$  при нагревании тела на 1 К, т. е.

$$\alpha = \frac{1}{r_0} \frac{d\bar{x}}{dT} = \frac{g}{r_0 \beta^2} \frac{dE}{dT} = x c_v, \quad (1.15)$$

где

$$x = \frac{g}{\beta^2 r_0}, \quad (1.16)$$

$c_v$  – теплоемкость, отнесенная к одной частице.

Таким образом, коэффициент линейного расширения оказывается пропорциональным теплоемкости твердого тела. В качестве примера на рис. 1.2 показана зависимость коэффициента линейного расширения и теплоемкости меди от температуры, подтверждающая наличие связи между  $\alpha$  и  $c_v$ .

В области высоких температур энергия колеблющихся частиц равна  $kT$ , а теплоемкость  $c_v$ , отнесенная к частице, равна  $k$ . Поэтому коэффициент расширения линейной цепочки атомов будет равен

$$\alpha = x c_v = \frac{gk}{\beta^2 r_0}. \quad (1.17)$$

Подстановка числовых значений  $g$ ,  $k$  и  $r_0$  для различных твердых тел дает для  $\alpha$  величину порядка  $10^{-4} - 10^{-5}$ , что удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными. Эксперимент подтверждает также, что в области высоких температур  $\alpha$  практически не зависит от температуры (рис. 1.2).

В области низких температур  $\alpha$  ведет себя подобно  $c_v$ : уменьшается с понижением температуры и при приближении к абсолютному нулю стремится к нулю.



Формула, подобная (1.17), впервые была предложена для металлов Грюнайзеном в следующем виде:

$$a = \frac{\gamma \eta}{3V} c_v, \quad (1.18)$$

где  $\eta$  – коэффициент сжимаемости металла;

$V$  – атомный объем;

$\gamma$  – постоянная Грюнайзена, которая для разных металлов изменяется от 1,5 до 2,5.

## 1.2. Задачи работы

1. Определить температурный коэффициент линейного расширения (ТКЛР) различных материалов дилатометрическим методом.

2. Построить графическую зависимость удлинения материала от температуры.

3. Используя графическую зависимость удлинения от температуры, рассчитать ТКЛР.

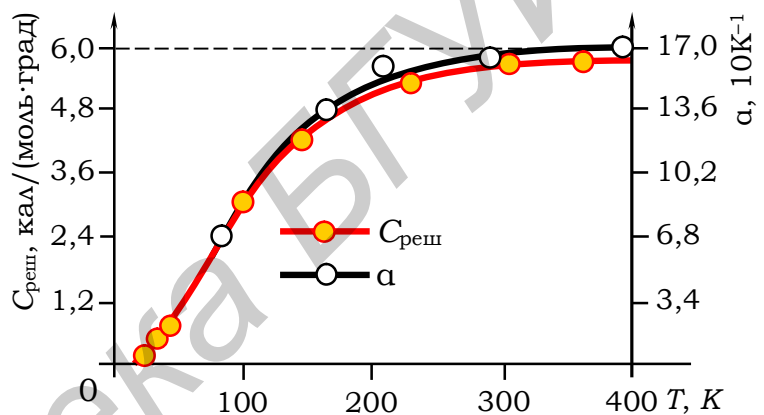


Рис. 1.2. Зависимость теплоемкости твердых тел и коэффициента теплового расширения (на примере меди) от температуры

## 1.3. Экспериментальная часть

### 1.3.1. Порядок выполнения работы

#### 1.3.1.1. Устройство кварцевого дилатометра

Тепловое расширение очень часто измеряют на кварцевом дилатометре. К кварцевым дилатометрам относится большая группа дилатометров, с помощью которых коэффициент теплового расширения веществ измеряется относительно теплового расширения плавленого кварца. Плавленый кварц был выбран в связи с тем, что он является удобным материалом, коэффициент расширения которого на порядок меньше коэффици-

циента расширения большинства веществ. Кварцевые dilatометры используются в широкой области температур – от 20 до 1200 К. Температурная область использования этих dilatометров ограничена свойствами плавленого кварца. Ниже 20 К коэффициент теплового расширения кварца становится сравним с коэффициентом теплового расширения большинства твердых тел, а выше 1200 К плавленый кварц размягчается.

На рис. 1.3 приведен эскиз лабораторной установки для определения коэффициента теплового расширения твердых тел. Кварцевый dilatометр состоит из кварцевой трубки 1, кварцевого стержня 2, индикаторной головки 3 и трубчатой печи 4. Температуру печи измеряют с помощью проградуированной хромель – алюмелевой термопары 5. Измеряемый образец 6 помещают в кварцевую трубку 1, запаянный конец которой сошлифован с внутренней стороны так, чтобы он плотно соприкасался с торцом образца. В кварцевой трубке 1 имеется окно 7, в которое подводят спай термопары 5. Через открытый конец трубки 1 вставляют кварцевый стержень 2 до упора в торец образца. Конец стержня отшлифован перпендикулярно его продольной оси с целью обеспечения плотно-

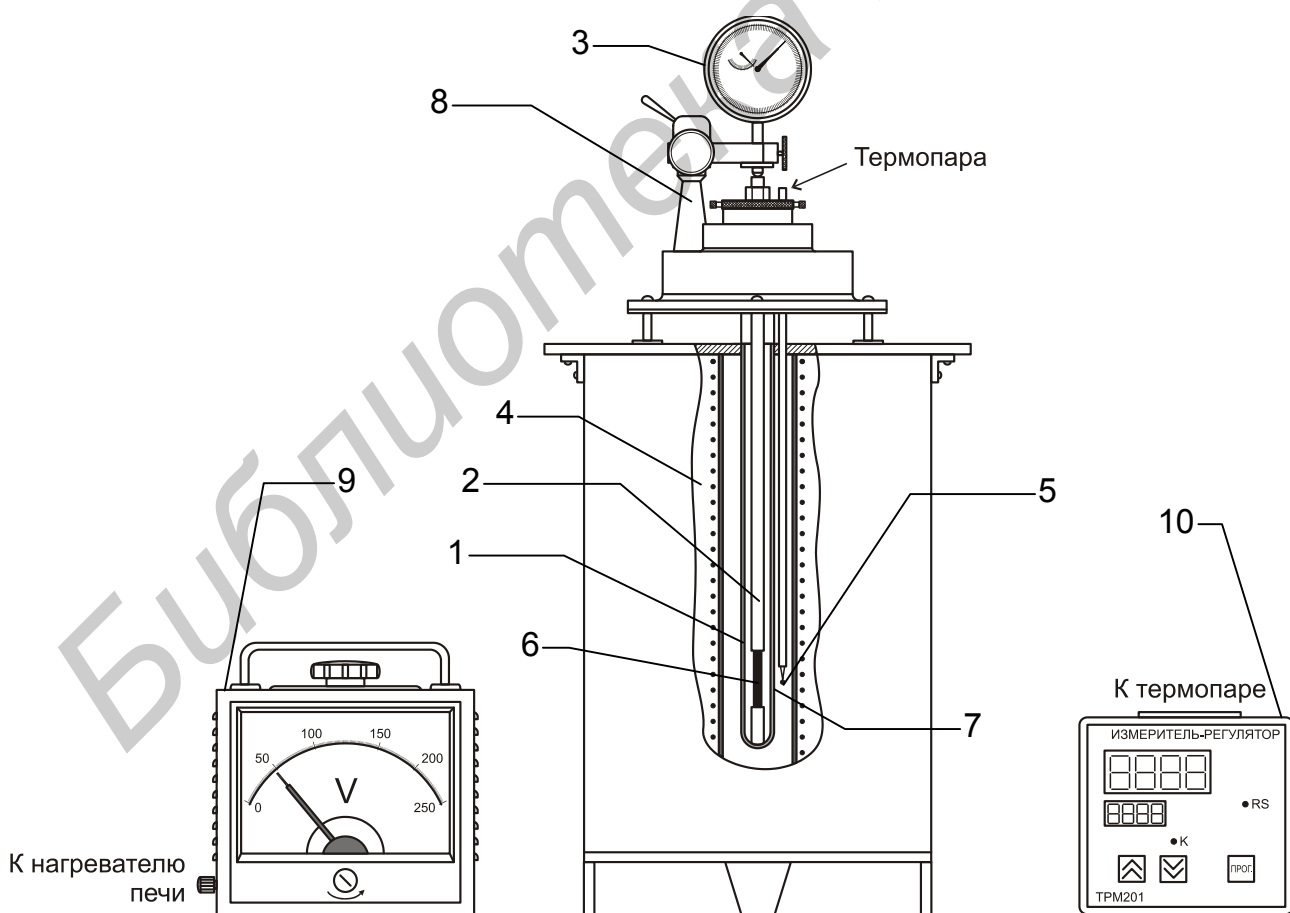


Рис. 1.3. Эскиз лабораторной установки для определения коэффициента теплового расширения

сти контакта с образцом 5. Другой конец кварцевого стержня соединяется со штоком индикаторной головки, которая укреплена на металлической стойке 8. Плотный контакт кварцевого стержня с образцом 6 обеспечивается при помощи пружины индикатора. При расширении образец 6 давит через кварцевый стержень 2 на индикатор 3. Расширение образца 6 и перемещение кварцевого стержня 2 фиксируется стрелкой индикатора 3. Скорость нагрева образцов составляет 3–5 К/мин. Для обеспечения электропитания трубчатой печи служит лабораторный автотрансформатор 9, а для удобства определения температуры термopара 5 соединена с аналого-цифровым преобразователем 10.

### 1.3.1.2. Порядок измерений и расчетов

Перед началом определения температурного коэффициента линейного расширения необходимо снять индикаторную головку 3, из кварцевой трубки достают кварцевый стержень. После этого образец исследуемого материала помещают в кварцевую трубку, прижимают кварцевым стержнем, а затем кварцевую трубку вставляют таким образом, чтобы создавался плотный контакт между кварцевым стержнем, образцом и штоком индикаторной головки. Давление индикаторной головки на кварцевый стержень считается достаточным, если стрелка индикатора поворачивается на 2–3 деления. Затем кварцевая трубка вставляется в печь так, чтобы образец оказался в середине, где при нагревании температура по длине образца остается постоянной.

Провести расчет среднего температурного коэффициента линейного расширения по формуле

$$a = \frac{nk}{(T - T_0)l_0} + \frac{a_{\text{кв}}}{(T - T_0)l_0}, \quad (1.19)$$

где  $a$  – температурный коэффициент линейного расширения,  $\text{K}^{-1}$ ;

$n$  – показания индикатора;

$k$  – цена деления индикатора;

$(T - T_0)$  – разность температур (конечной и начальной) для выбранного интервала;

$l_0$  – длина образца при начальной температуре (мм);

$a_{\text{кв}}$  – поправка на расширение кварца (табл. 1.1).

Опытные данные для разных температур заносят в табл. 1.2.

Таблица 1.1

Поправка на удлинение кварца  $\alpha_{\text{кв}}$ , мм

|               |     |     |     |      |      |      |      |      |      |      |
|---------------|-----|-----|-----|------|------|------|------|------|------|------|
| $T, \text{K}$ | 273 | 283 | 293 | 303  | 313  | 323  | 333  | 343  | 353  | 363  |
| 273           | 0,2 | 0,4 | 0,4 | 0,7  | 0,9  | 1,2  | 1,5  | 1,5  | 1,7  | 2,0  |
| 373           | 2,6 | 2,9 | 3,2 | 3,5  | 3,8  | 4,1  | 4,4  | 4,7  | 5,0  | 5,4  |
| 473           | 5,7 | 6,1 | 6,4 | 6,7  | 7,1  | 7,4  | 7,8  | 8,2  | 8,5  | 8,9  |
| 573           | 9,2 | 9,5 | 9,8 | 10,0 | 10,2 | 10,4 | 10,6 | 10,8 | 11,0 | 11,2 |

Построить графическую зависимость удлинения ( $l_T - l_0$ ) от температуры и рассчитать ТКЛР для других (заданных) интервалов температур.

Построить графическую зависимость  $\alpha$  от температуры.

По полученным значениям экспериментальной зависимости  $\alpha$  от  $T$  рассчитать температуру Дебая по выражению (1.20) и данные занести в табл. 1.2.

$$\Theta_D^\alpha = \frac{14,3}{\left(\alpha_L \bar{A} \bar{V}^{\frac{2}{3}}\right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (1.20)$$

где  $\alpha_L$  – коэффициент теплового расширения;

$\bar{A}$  – средняя атомная масса;

$\bar{V}$  – средний атомный объем.

Таблица 1.2

Значение экспериментальных значений ТКЛР кристаллов при нагревании

### 1.3.2. Содержание отчета

1. Цель работы.
2. Краткие теоретические сведения.
3. Краткое описание экспериментальной установки и хода работы.
4. Экспериментальные данные и результаты расчетов.
5. Анализ полученных результатов.
6. Выводы.

| Кристалл | Конечная температура, К | Начальная температура, К | Показания индикатора, $n$ | Цена деления, $k$ | Удлинение, ( $l_T - l_0$ ), мм | $\beta \cdot 10^{-6} \text{K}^{-1}$ |
|----------|-------------------------|--------------------------|---------------------------|-------------------|--------------------------------|-------------------------------------|
|          |                         |                          |                           |                   |                                |                                     |

## ЛИТЕРАТУРА

1. Гуревич, А. Г. Физика твердого тела / А. Г. Гуревич. – СПб., 2004.
2. Пасынков, В. В., Сорокин В. С. Материалы электронной техники / В. В. Пасынков, В. С. Сорокин. – СПб., 2004.

Библиотека БГУИР

## 2. ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА «ИЗУЧЕНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВ»

**Цель работы:** графическим методом определить ширину запрещенной зоны полупроводникового материала, определить его показатель преломления.

### 2.1. Теоретические сведения к работе

#### 2.1.1. Основы зонной теории кристаллов

Для идеальной кристаллической решетки, в узлах которой находятся ядра атомов, волновая функция  $\Phi$ , которая описывает состояние этой решетки, зависит от координат всех электронов  $\vec{r}_i$  и от координат всех ядер  $\vec{R}_j$ , т. е.

$$\Phi = \Phi(\vec{r}_1 \vec{r}_2 \vec{r}_3 \dots \vec{r}_i; \vec{R}_1 \vec{R}_2 \vec{R}_3 \dots \vec{R}_j). \quad (2.1)$$

Принимая во внимание (2.1), уравнение Шрёдингера для кристаллической решетки можно записать в следующем виде:

$$\sum_i \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \Phi + \sum_j \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_j^2 \Phi + (E - U) \Phi = 0 \quad (2.2)$$

где  $m$  – масса электрона,

$M$  – масса ядра атома,

$\nabla$  – оператор Лапласа,

$E$  – полная энергия системы,

$U$  – потенциальная энергия взаимодействия всех электронов и ядер,

$\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  – постоянная Планка.

Решить уравнение (2.2) в общем виде невозможно из-за огромного числа переменных  $\vec{r}_i$  и  $\vec{R}_j$ . Поэтому в зонной теории твердого тела используется ряд допущений, позволяющих упростить уравнение (2.2), это адиабатическое приближение, которое позволяет разделить переменные  $\vec{r}_i$  и  $\vec{R}_j$ : одно из которых относится только к электронам, другое – к ядрам.

В результате упрощений уравнение (2.2) для каждого электрона твердого тела запишется:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U(\vec{r}_i) \right] \psi(\vec{r}_i) = E_i \psi(\vec{r}_i), \quad (2.3)$$

где  $\psi(\vec{r}_i)$  – волновая функция электрона,

$E_i(\vec{r}_i)$  – полная энергия электрона,

$U(\vec{r}_i)$  – потенциальная энергия электрона.

Для свободного электрона уравнение (2.3) запишется

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi. \quad (2.4)$$

Общим решением уравнения (2.4) является волновая функция следующего вида

$$\psi(x, y, z) = \exp i(k_x x + k_y y + k_z z). \quad (2.5)$$

Возьмем первую и вторую производные выражения (2.5):

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = i k_x \exp i(k_x x + k_y y + k_z z), \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi, \quad (2.7)$$

где  $k^2 = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ .

Подставляя (2.7) в (2.4), получим

$$-k^2 \psi = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi \quad \text{или} \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \psi. \quad (2.8)$$

Из (2.8) найдем энергию:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.9)$$

Для раскрытия физического смысла величины  $k$  выразим энергию электрона через импульс:

$$E = \frac{mv^2}{2} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.10)$$

Сравнивая (2.9) и (2.10), получим

$$p^2 = \hbar^2 k^2 \quad \text{или} \quad p = \hbar k. \quad (2.11)$$

Длина волны де Бройля  $\lambda$  определяется из выражения

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{h}{p}. \quad (2.12)$$

$$p = \frac{h}{\lambda}. \quad (2.13)$$

Из (2.11) и (2.13) будем иметь

$$\frac{h}{\lambda} = \hbar k = \frac{h}{2\pi} k, \quad (2.14)$$

тогда

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}. \quad (2.15)$$

Из (2.15) следует, что  $k$  есть число длин волн, укладывающихся на длине  $2\pi$ , которое называется волновым вектором.

Из (2.9) следует, что энергия свободного электрона пропорциональна квадрату волнового вектора и есть уравнение равнобочной параболы. Отсюда следует, что энергия электрона в отсутствие потенциального поля параболически зависит от волнового вектора (рис. 2.1).

В периодическом силовом поле потенциальная энергия  $U(x, y, z)$  является периодической функцией координат, поэтому волновая функция электрона должна удовлетворять следующему уравнению:



$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(x, y, z)] \psi = 0. \quad (2.16)$$

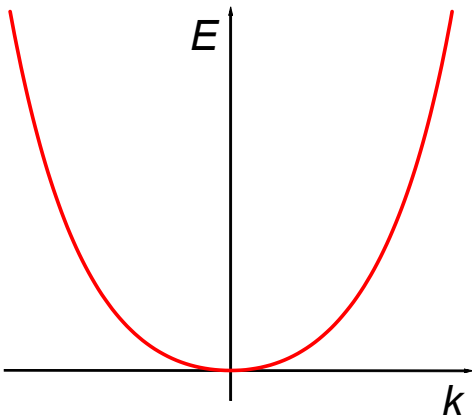


Рис. 2.1. Зависимость энергии  $E$  свободной частицы от волнового вектора  $k$

Для решения уравнения (2.16) теория вводит три приближения.

1. Кристаллическая решетка твердого тела идеальна: силовое поле является строго периодическим.

2. Электроны не взаимодействуют друг с другом, а взаимодействуют только с кристаллической решеткой (одноэлектронное приближение).

3. По сравнению с электронами атомные остовы совершают колебательные движения очень медленно и их движением можно пренебречь (адиабатическое приближение).

Решением (2.16) при указанных допущениях является волновая функция следующего вида:

$$\psi(x, y, z) = \exp i(k_x x + k_y y + k_z z) \varphi_k(x, y, z). \quad (2.17)$$

В выражении (2.17) первый множитель такой же, как и для свободного электрона в (2.5), второй же множитель (функция Блоха) зависит не только от координат, но и от волнового вектора  $k$ .

По физическому смыслу (2.17) есть плоская волна длиной  $\lambda = 2\pi/k$ , которая распространяется в направлении волнового вектора и модулируется периодичностью кристаллической решетки.

Из выражения (2.17) следует, что в твердом теле имеются только вполне определенные значения энергии  $E$ , для которых волновой вектор  $k$  принимает вещественные значения. Для других же значений энергии  $k$  есть мнимая величина. Значит, в пространстве волнового вектора энергии электронов не могут быть непрерывной функцией  $k$ , существуют запрещенные энергии. Схематически выражение (2.17) представлено на рис. 2.2.

Следовательно, в твердом теле существуют зоны разрешенных энергий, отделенные друг от друга запрещенными полосами. Это значит,

что электроны не могут обладать энергией, отвечающей уровню внутри полосы между разрешенными зонами.

### 2.1.2. Основные оптические характеристики полупроводников

Для описания оптических явлений в полупроводниках достаточно использовать две характеристики: показатель преломления  $n$  и показатель поглощения  $k$ .

Показатель преломления  $n$  определяется как отношение скорости распространения световой волны в вакууме  $c$  к ее скорости в среде (кристалле)  $v$ :

$$n = \frac{c}{v}. \quad (2.18)$$

Показатель поглощения или коэффициент экстинкции  $k$  определяется через линейный коэффициент поглощения  $\alpha$  и длину волны падающего света  $\lambda$ :

$$k = \frac{1}{4\pi} \alpha \lambda. \quad (2.19)$$

Величина  $n$  характеризует преломление световой волны в кристалле с учетом ее частичного поглощения. Поэтому  $n$  является комплексной величиной:

$$n = n^0 - ik, \quad (2.20)$$

где  $n^0$  – показатель преломления в отсутствие поглощения.

Справедливость выражения (2.20) можно доказать, используя выражение, которое описывает изменение волнового вектора световой волны, которая распространяется по кристаллу:

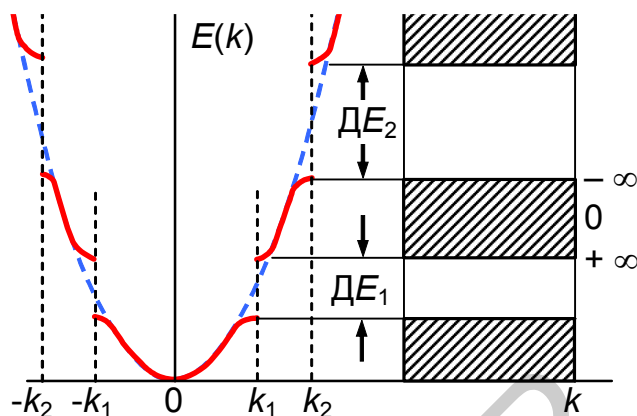


Рис. 2.2. Значения энергий электрона, находящегося в поле кристалла

$$\vec{E}(x, t) = \vec{E}_0 \exp \left[ i\omega \left( \frac{t-x}{v} \right) \right], \quad (2.21)$$

где  $\vec{E}_0$  – амплитуда волны, прошедшей в образец,

$\omega$  – ее круговая (циклическая) частота.

Из (2.18) и (2.20) найдем  $1/v$  и, подставив в (2.21), получим

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \exp \left( -\frac{\omega k x}{c} \right) \exp i\omega \left( t - \frac{n^0 x}{c} \right). \quad (2.22)$$

При  $k = 0$ , т. е. в отсутствие поглощения волна, описываемая формулой (2.22), переходит в плоскую волну, которая распространяется с постоянной амплитудой и фазовой скоростью  $\frac{c}{n}$ , что имеет место для не поглощающих сред.

Обозначим (рис. 2.3) через  $I_0$  интенсивность света падающего на поверхность кристалла полупроводника, через  $I_T$  интенсивность света прошедшего через кристалл. Измеряемая на опыте величина, называемая коэффициентом пропускания, определяется как отношение этих интенсивностей:

$$T = \frac{I_T}{I_0}. \quad (2.23)$$

Коэффициент пропускания  $T$  связан с поглощением света, которое в полупроводниках характеризуется законом Бугера – Ламберта – Бера:

$$I_T = I_0 e^{-\alpha d}, \quad (2.24)$$

где  $d$  – толщина полупроводника.

Выражение (2.23) описывает пропускание света без учета отражения от поверхности кристалла. Если же имеет место частичное отражение светового потока, то вместо  $I_0$  в (2.23) будет входить величина  $(1-R)I_0$ , где  $R$  – коэффициент однократного отражения света, равный отношению интенсивности отраженной световой волны  $I_R$  к интенсивности падающей  $I_0$  волны:

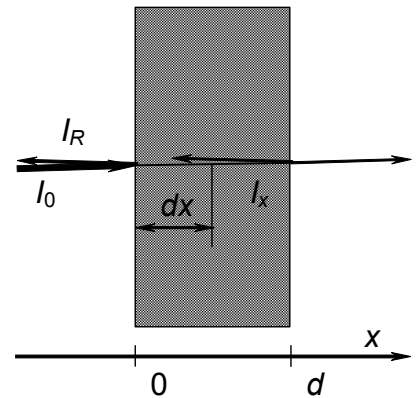


Рис. 2.3. К выводу закона Бугера – Ламберта – Бера

$$R = \frac{I_R}{I_0}. \quad (2.25)$$

Таким образом,  $(1 - R)$  характеризует долю интенсивности световой волны, вошедшую через освещаемую поверхность внутрь кристалла. В реальных кристаллах конечной толщины свет отражается не только от освещаемой поверхности, но и от противоположной ей, другой поверхности плоского образца. В результате в толще образца свет испытывает внутреннее многократное отражение.

На рис. 2.4 показаны световые потоки в образце при многократном отражении. После каждого акта отражения интенсивность прошедшего света уменьшается и в конечном счете значение  $I_T$  определяем как сумму убывающей геометрической прогрессии:

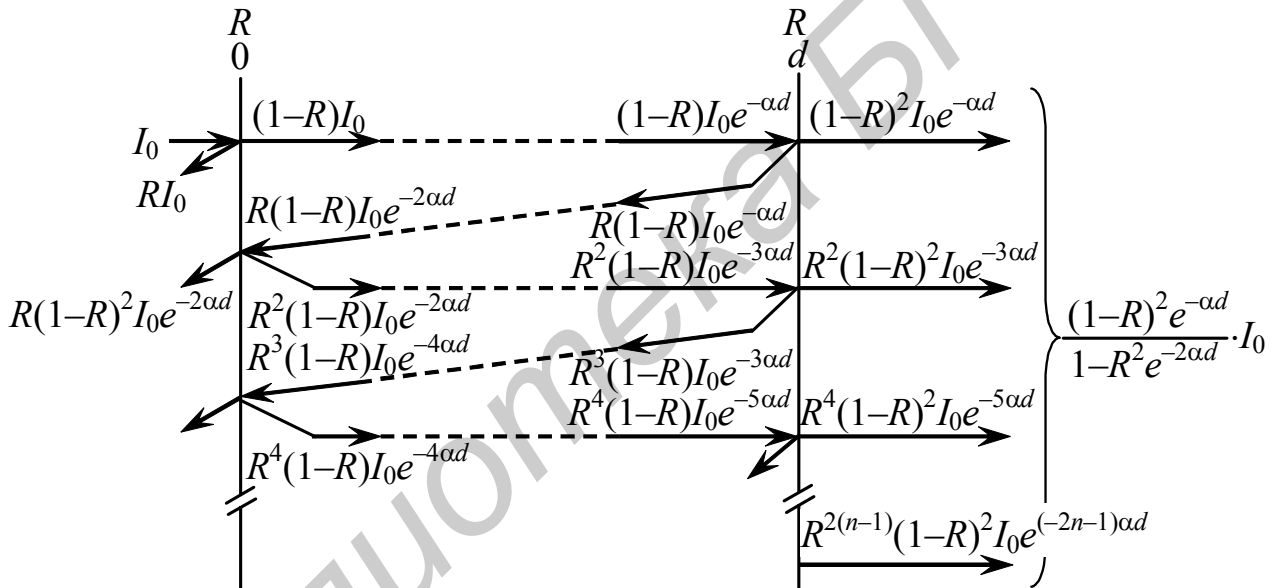


Рис. 2.4. Световые потоки в образце при многократном отражении

$$I_T = I_0 (1 - R)^2 e^{-\alpha d} \sum_{k=1}^{\infty} R^{2(k-1)} e^{2(k-1)\alpha d} e^{-2(k-1)\alpha d}. \quad (2.26)$$

После суммирования получим

$$I_T = I_0 \frac{(1 - R)^2 e^{-\alpha d}}{1 - R^2 e^{-2\alpha d}}. \quad (2.27)$$

### 2.1.3. Виды поглощения света в кристаллах

Механизмы взаимодействия света с полупроводником в зависимости от энергии падающего излучения  $E$  и соответственно от длины волны  $\lambda$  можно разделить на несколько групп (рис. 2.5). При воздействии света на кристалл в нем происходит взаимодействие квантов света с двумя подсистемами – атомной и электронной, из которых состоит кристалл. В области фотонов высоких энергий (наиболее короткие длины волн) особенности спектров поглощения обусловлены возбуждением электронов из валентной и более глубоко лежащих зон в зону проводимости. При несколько меньшей энергии света поглощение сопровождается переходами электронов из валентной зоны в зону проводимости. При дальнейшем увеличении  $\lambda$  энергия электромагнитного излучения  $E$  уменьшается, и поглощение света в кристалле происходит за счет нескольких механизмов, в том числе с участием примесных уровней и путем взаимодействия квантов света со свободными носителями заряда. Таким образом, взаимодействие квантов света с электронной подсистемой весьма многообразно: собственное, экситонное, примесное и поглощение свободными носителями заряда.

В области наиболее длинных волн происходит взаимодействие света с атомами кристаллической решетки – свет поглощается на оптических колебаниях кристаллической решетки, что приводит к превращению квантов света в энергию фононов; т. е. при поглощении фотона в кристалле появляются один (однофононное) или несколько фононов (многофононное поглощение). Такой тип взаимодействия получил название решеточного поглощения. Рассмотрим далее более подробно некоторые виды поглощения электромагнитного излучения кристаллическими телами.

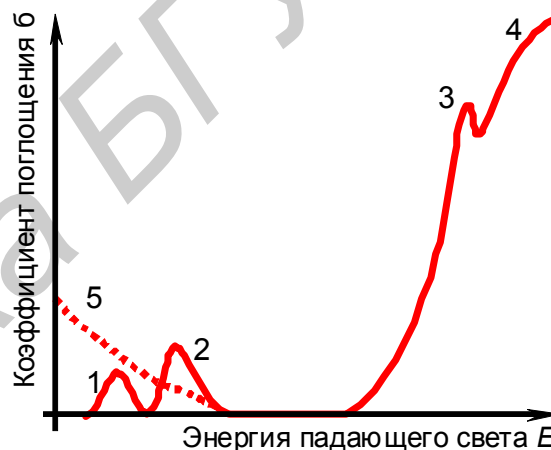


Рис. 2.5. Спектральная зависимость коэффициента поглощения:

- 1 – поглощение на оптических колебаниях решетки;
- 2 – ионизация примесных атомов;
- 3 – экситонное поглощение;
- 4 – собственное поглощение;
- 5 – поглощение свободными носителями

#### 2.1.3.1. Собственное поглощение

Если при поглощении полупроводником кванта света электроны валентной зоны, приобретая дополнительную энергию, превышающую или равную ширине запрещенной зоны ( $E_g$ ), т. е.  $\hbar\omega \geq E_g$ , переходят

дят в зону проводимости, то такое поглощение называется *собственным*, или *фундаментальным*.

При взаимодействии электрона с электромагнитным полем излучения должны выполняться два закона – закон сохранения энергии и закон сохранения квазиимпульса или волнового вектора:

$$E_n = E_p + \hbar\omega, \quad (2.28)$$

$$\vec{p}_n = \vec{p}_p + \vec{p}_{\text{фот}}, \quad (2.29)$$

где  $\vec{p}_n = \hbar k_n$  – импульс электрона, переброшенного в зону проводимости,  $\vec{p}_p = \hbar k_p$  – импульс дырки, образовавшейся в валентной зоне,  $\vec{p}_{\text{фот}}$  – импульс фотона.

Импульс фотона примерно на три порядка меньше импульса электрона, поэтому в выражении (2.29) им можно пренебречь и тогда (2.29) можно записать в следующем виде:

$$\hbar k_n \approx \hbar k_p \quad \text{или} \quad k_n \approx k_p. \quad (2.30)$$

Соотношения (2.30) называют правилами отбора для электронных переходов; они показывают, что в процессе взаимодействия электрона с полем излучения возможны только такие переходы, при которых волновой

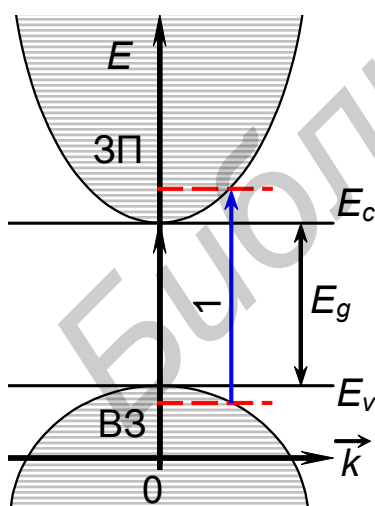


Рис. 2.6. Оптические переходы при собственном поглощении в прямозонных полупроводниках

вектор электрона сохраняется. Эти переходы получили название вертикальных или прямых межзонных переходов (переход 1 на рис. 2.6). Они характерны для прямозонных полупроводников, у которых минимум зоны проводимости и максимум валентной зоны находятся при одном и том же значении волнового вектора. Такими полупроводниками, в частности, являются  $ZnSe$ ,  $CdS$ ,  $GaAs$ ,  $AgIn_5S_8$ .

У непрямозонных полупроводников ( $Si$ ,  $Ge$ ,  $GaP$ ,  $CdP_2$ ,  $In_2S_3$ ) экстремумы зоны проводимости и валентной зоны находятся при различных значениях волнового вектора  $k$ , а такие переходы называют непрямыми межзонными переходами (переход 2 на рис. 2.7). Такие переходы происходят с участием третьей квазичастицы – фонона, представляющего

собой квант тепловых колебаний кристаллической решетки. В этом случае законы сохранения энергии и импульса будут иметь вид

$$E_n = E_p + \hbar\omega \pm E_{\text{фон}}, \quad (2.31)$$

$$p_n = p_p + p_{\text{фот}} \pm p_{\text{фон}}. \quad (2.32)$$

Знак «плюс» относится к процессам, протекающим с поглощением фонона, «минус» – с испусканием. В то же время в случае достижения энергией фотона значения  $\hbar\omega \geq E_{g_0}$  в таких полупроводниках возможны и прямые межзонные переходы (переход 1 на рис. 2.7).

### 2.1.3.2. Экситонное поглощение

При поглощении света полупроводником возможно и такое возбуждение электрона валентной зоны, при котором он не переходит в зону проводимости, а образует с дыркой связанную систему. Такая система получила название экситон. Если размеры экситона велики по сравнению с постоянной кристаллической решетки, то взаимодействие электрона и дырки можно представить как кулоновское взаимодействие двух точечных зарядов, ослабленное в  $\epsilon\epsilon_0$  раз, где  $\epsilon$  – относительная диэлектрическая проницаемость кристалла,  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная. Экситон сходен с возбужденным атомом водорода. В обоих случаях около единичного положительного заряда движется электрон, и энергетический спектр является дискретным (рис. 2.8). Экситонные уровни располагаются в запрещенной зоне у дна зоны проводимости.

Экситон может перемещаться по кристаллу. Однако это не движение данной пары электрон-дырка, а перемещение возбужденного состояния атома кристалла, которое передается от атома к атому посредством квантово-механического резонанса: когда электрон, находящийся в возбужденном состоянии, при взаимодействии с фотоном или фононом возвращается в нормальное состояние, а освободившаяся при этом энергия передается электрону соседнего атома, который переходит на тот же уровень. Так как экситон об-

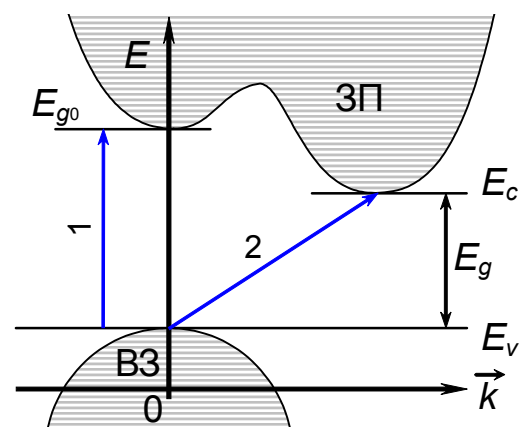


Рис. 2.7. Оптические переходы при собственном поглощении в непрямозонных полупроводниках

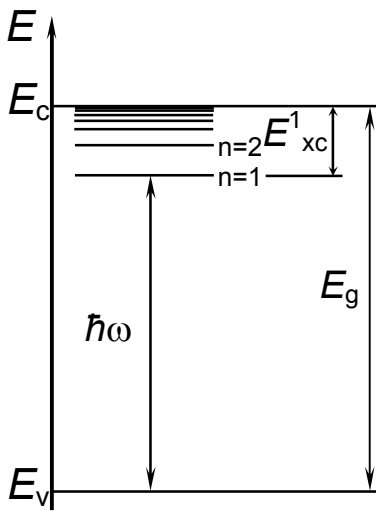


Рис. 2.8. Энергетический спектр экситонных состояний

разован парой электрон-дырка, то движение экситонов не создает электрического тока.

Поскольку, как уже было сказано, экситоны являются электрически нейтральными системами, постольку их возникновение в полупроводниках не приводит к появлению дополнительных носителей заряда и поглощение света не сопровождается увеличением проводимости полупроводников. При столкновении же с фононами, примесными атомами и другими дефектами кристаллической решетки полупроводника экситоны или рекомбинируют, или «диссоциируют». В первом случае возбужденный электрон переходит в валентную зону, а энергия возбуждения передается кристаллической решетке или излучается в виде квантов света. Во втором случае образуется пара носителей заряда – электрон и дырка, которые обуславливают повышение электропроводности полупроводников.

Если оптический переход прямой и осуществляется при  $k = 0$ , экситон будет характеризоваться водородоподобной серией линий поглощения, которые удовлетворяют соотношению

Если оптический переход прямой и осуществляется при  $k = 0$ , экситон будет характеризоваться водородоподобной серией линий поглощения, которые удовлетворяют соотношению

$$\hbar\omega = \hbar\omega_\infty - \frac{E_{xc}}{n^2}, \quad (2.33)$$

где  $n$  – главное квантовое число,  
 $\hbar\omega_\infty$  совпадает с  $E_g$  при  $k = 0$ .

Поэтому (2.33) можно переписать в виде

$$\hbar\omega = E_g - \frac{E_{xc}}{n^2}, \quad (2.34)$$

где  $E_{xc}$  – энергия связи экситона, которая, в свою очередь, определяется по формуле

$$E_{xc} = \frac{e^4 m_r}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon^2 \varepsilon_0^2}, \quad (2.35)$$



где  $m_r = \frac{m_n m_p}{m_n + m_p}$  приведенная эффективная масса экситона.

В прямозонных полупроводниках экситонному поглощению соответствует узкий пик на краю собственного поглощения (рис. 2.9, а), который уширяется с увеличением температуры.

В случае непрямых переходов экситоны образуются с поглощением или с испусканием фононов. Соответственно в непрямозонных полупроводниках образование экситона проявляется в возникновении на краю полосы собственного поглощения ступеньки (рис. 2.9, б).

#### Образование

экситонов и, следовательно, экситонное поглощение наблюдается при низких температурах; при более высоких температурах связь между электроном и дыркой разрывается и образуется пара свободных носителей.

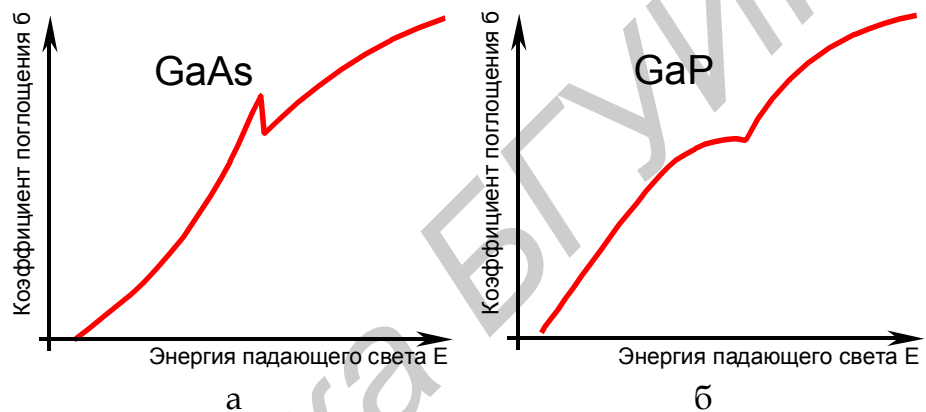


Рис. 2.9. Экситонное поглощение в прямо- (а) и непрямозонных (б) полупроводниках

Диссоциация экситонов с образованием свободных электронов и дырок может также происходить при их взаимодействии с фотонами, обладающими достаточной энергией.

#### 2.1.3.3. Поглощение света свободными носителями заряда

При освещении полупроводника светом определенной длины волны электроны зоны проводимости и электроны не полностью заполненной валентной зоны могут осуществлять переходы внутри зоны с одного уровня на другой (рис. 2.10, а).

Такие внутрizonные переходы происходят с изменением волнового вектора  $\vec{k}$  и нарушением правил отбора. В силу закона сохранения импульса они осуществляются только тогда, когда наряду с поглощением фотона происходит поглощение или испускание фонона (т. е. происходит взаимодействия с решеткой или с ионами примесей).

Поглощение свободными носителями заряда происходит следующим образом. Носители заряда ускоряются в электрическом поле световой вол-

ны и, рассеиваясь на дефектах кристаллической решетки, передают им свою энергию, т. е. энергия световой волны переходит в теплоту вследствие эффекта Джоуля – Ленца. Это поглощение пропорционально концентрации свободных носителей заряда  $n$ , квадрату длины волны падающего света  $\lambda$  и обратно пропорционально дрейфовой подвижности  $\mu$ :

$$a = \frac{n\lambda^2}{\mu}. \quad (2.36)$$

Если энергетические зоны у полупроводника сложны (*Ge, Si, GaP, AlAs*), то на поглощение свободными носителями заряда накладывается поглощение, обусловленное переходами между отдельными подзонами зоны проводимости (рис. 2.10, б) и валентной зоны (рис. 2.10, в).

#### 2.1.3.4. Примесное поглощение

В примесных полупроводниках под действием света может происходить переброс электронов с примесных уровней в зону проводимости (рис. 2.11) и из валентной зоны на примесные уровни, расположенные в запрещенной зоне (см. рис. 2.11). Могут также наблюдаться непрямые переходы примесного уровня – зона с поглощением или испусканием фонона. Поглощение, обусловленное ионизацией или возбуждением примесных центров в кристалле, называется примесным. Граница этого перехода сдвинута в длинноволновую область тем сильнее, чем меньше энергия соответствующего перехода. Следует отметить, что если примесные атомы уже ионизированы, то указанное поглощение наблюдаться не будет. Так как температура истощения примеси падает с уменьшением энергии ее ионизации, то для наблюдения длинноволнового поглощения необходимо охлаждение полупроводника до низких температур. Например, спектр примесного поглощения германия легированного золотом (энергия ионизации примеси  $E_{Au} = 0,08$  эВ, граница поглощения  $\lambda = 9$  мкм) наблюдается при 77 К, а при

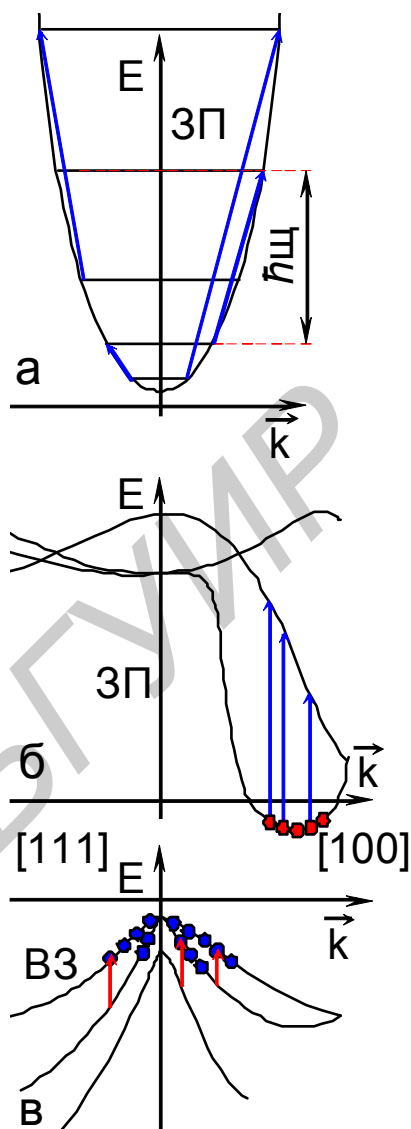


Рис. 2.10. Оптические переходы при поглощении света свободными носителями заряда

легировании сурьмой ( $E_{Sb} = 0,01$  эВ,  $\lambda = 135$  мкм) примесное поглощение наблюдается при 4 К.

Коэффициент примесного поглощения  $\alpha_{пр}$  при  $\lambda < \lambda_{max}$  зависит от  $\lambda$  и пропорционален концентрации примеси  $E_{пр}$ . Поэтому примесное поглощение удобно характеризовать сечением поглощения  $\sigma_{пр}$ :

$$\sigma_{пр} = \frac{\alpha_{пр}(\lambda)}{N_{пр}}. \quad (2.37)$$

Максимального значения  $\sigma_{пр}$  достигает вблизи края примесного поглощения. В максимуме  $\sigma_{пр} \approx 10^{-16} - 10^{-15}$  см<sup>2</sup> и  $\alpha_{пр} \approx 1 - 10$  см<sup>-1</sup> при  $N_{пр} = 10^{16}$  см<sup>-3</sup>. Получить большие значение  $\alpha_{пр}$  не удастся из-за низких растворимостей примесей в полупроводниках. Например, предел растворимости золота в германии составляет  $\sim 10^{16}$  см<sup>-3</sup>.

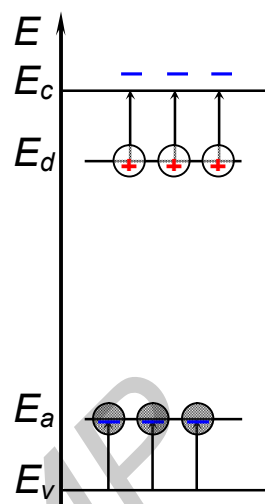


Рис. 2.11. Переходы при примесном поглощении

#### 2.1.4. Фотопроводимость в полупроводниках

*Фотопроводимость* – это эффект увеличения электропроводности образца под действием падающего излучения. Величина электропроводности определяется концентрацией носителей заряда  $n$  и их подвижностью  $\mu$ :

$$y = q \cdot n \cdot \mu,$$

где  $q$  – заряд электрона.

В процессе поглощения света происходит рост концентрации свободных носителей заряда и проводимость полупроводника возрастает. Из всех рассмотренных механизмов поглощения только три сопровождаются увеличением числа носителей – собственное поглощение, примесное и экситонное (в случае диссоциации экситона). Поглощение света свободными носителями так же, как и поглощение на оптических колебаниях кристаллической решетки, сопровождаются увеличением тепловых колебаний кристаллической решетки. В результате процессы рассеяния носителей заряда усиливаются, их подвижность падает, и проводимость полупроводника уменьшается.

#### 2.1.5. Эффект Франца – Келдыша

Эффект заключается в изменении местоположения края полосы собственного поглощения при действии на образец внешнего поля. Во

внешнем поле энергетические уровни полупроводника приобретают наклон, пропорциональный его напряженности  $E$  (рис. 2.12).

При этом становится возможным туннельное просачивание электронов из точки  $x_2$  в  $x_3$  и из точки  $x_3$  в  $x_1$ . Поэтому в точке  $x_3$  электрон может перейти из состояния  $E_p$  в состояние  $E_n$  под действием энергии кванта света с меньшей величиной, чем  $E_g$ .

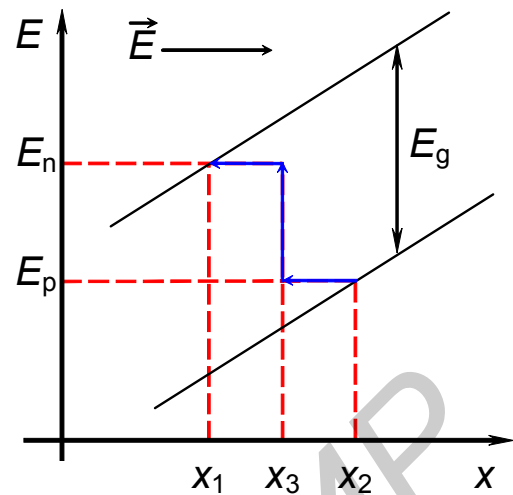


Рис. 2.12. К объяснению эффекта Франца – Келдыша

## 2.2. Экспериментальная часть

### 2.2.1. Порядок выполнения работы

1. Изучить основные механизмы поглощения света кристаллом, изложенные выше.
2. У преподавателя получить данные спектральной зависимости пропускания ( $T$ , %) от длины волны ( $\lambda$ , нм).
3. Построить графическую зависимость пропускания ( $T$ , %) от длины волны ( $\lambda$ , нм).
4. По выражению (2.38) с использованием программы *MS Excel* произвести расчет коэффициента поглощения  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \left[ \frac{(1-R)^2}{2T} + \sqrt{\left( \frac{(1-R)^2}{2T} \right)^2 + R^2} \right], \quad (2.38)$$

где  $d$  – толщина образца,  
 $T$  – пропускание (относительные единицы),  
 $R$  – коэффициент отражения.

5. Полученные данные занести в табл. 2.1.
6. Определить энергию падающего фотона, используя расчетную формулу:

Таблица 2.1

Экспериментальные и расчетные данные к лабораторной работе  
«Изучение оптического поглощения полупроводников»

| $\lambda$ , нм | $T$ , % | $\lambda$ , мкм | $T$ , отн. ед. | $\alpha$ , см <sup>-1</sup> | $\hbar\omega$ , эВ | $(\alpha \hbar\omega)^{1/2}$ , см <sup>-2</sup> | $(\alpha \hbar\omega)^2$ , см <sup>-1</sup> |
|----------------|---------|-----------------|----------------|-----------------------------|--------------------|---|---|
|                |         |                 |                |                             |                    |   |   |

$$\hbar\omega = \frac{1,24}{\lambda}, \quad (2.39)$$

где  $\lambda$  – длина волны падающего света в мкм.

7. Провести расчет значений  $(\alpha \cdot \hbar\omega)^{\frac{1}{2}}$  и  $(\alpha \cdot \hbar\omega)^2$  и занести в табл. 2.1.

8. Построить графические зависимости  $(\alpha \cdot \hbar\omega)^{\frac{1}{2}}$  и  $(\alpha \cdot \hbar\omega)^2$  от энергии фотона ( $\hbar\omega$ ), экстраполяцией прямолинейных участков этих зависимостей до пересечения с осью энергий определить ширину запрещенной зоны ( $E_g$ ) для непрямых и прямых межзонных переходов.

9. Произвести расчет коэффициента преломления материала. Для этого воспользоваться графиком зависимости  $T(\lambda)$ .

На данном графике строим две касательные таким образом, как показано на рис. 2.13. Далее из каждого максимума ( $T_{max}^1$ ) и минимума ( $T_{min}^2$ ) проводим перпендикуляры к касательным, как показано на рис. 2.13. Полученные результаты вносим в табл. 2.2. Далее по формулам (2.40) и (2.41) рассчитываем коэффициенты преломления  $n$  для полученного материала:

$$n = \left[ N + (N^2 - s^2)^{1/2} \right]^{1/2}, \quad (2.40)$$

$$N = 2s \frac{T_{max} - T_{min}}{T_{max} T_{min}} + \frac{s^2 + 1}{2}, \quad (2.41)$$

где  $s$  – коэффициент преломления подложки (в качестве подложки использовали стекло, поэтому коэффициент преломления  $s = 1,5$ ),

$T_{\max}$  – значение максимума,

$T_{\min}$  – значение минимума.

**Замечание:** Каждому максимуму соответствует свой минимум (для  $T_{\max}^1$  соответствует  $T_{\min}^1$ ) и каждому минимуму соответствует свой максимум.

Данные для расчета коэффициента преломления

| № П/П | $\lambda$ , нм | $T_{\max}^n$ , % | $T_{\min}^n$ , % | $n$ |
|-------|----------------|------------------|------------------|-----|
| 1     |                |                  |                  |     |
| 2     |                |                  |                  |     |
| ...   |                |                  |                  |     |
| n     |                |                  |                  |     |

10. Полученные данные занести в табл. 2.2.

11. По полученным данным построить график зависимости коэффициента преломления  $n$  от длины волны  $\lambda$ , нм.

12. Используя полученные данные, пересчитать коэффициент преломления  $R$  по формуле

$$R = \frac{(n_{\text{ср}} - 1)^2}{(n_{\text{ср}} + 1)^2}, \quad (2.42)$$

где  $n_{\text{ср}}$  – среднее значение коэффициента преломления.

### 2.2.2. Содержание отчета

1. Цель работы.
2. Краткие теоретические сведения.
3. Краткое описание хода работы.
4. Расчеты и графические зависимости.
5. Анализ полученных результатов.
6. Выводы.

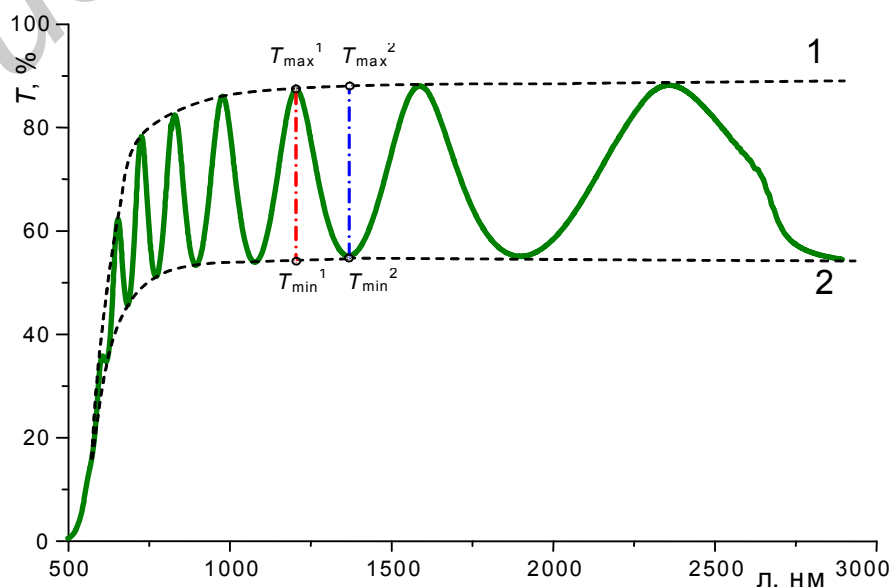


Рис. 2.13. К расчету коэффициента преломления

### 2.3. Контрольные вопросы

1. Механизмы взаимодействия света с кристаллическими телами.
2. Дать определение ширины запрещенной зоны.
3. Что такое правила отбора для прямых и непрямых межзонных переходов?
4. Природа экситонного и примесного поглощения в полупроводниках.
5. При температуре  $T = 300$  К для монохроматического излучение длиной волны  $1$  мкм коэффициент поглощения кремния  $\alpha = 10^4$  м<sup>-1</sup>, а коэффициент отражения излучения  $R = 0,3$ . Определить, какая доля потока излучения  $I(x)$  пройдет через пластинку кремния толщиной  $d = 300$  мкм при нормальном падении света.
6. Объяснить механизм поглощения свободными носителями заряда. На что расходуется энергия фотонов при поглощении?

## ЛИТЕРАТУРА

1. Уханов, Ю. И. Оптические свойства полупроводников / Ю. И. Уханов. – М., 1977.
2. Стильбанс, Л. С. Физика полупроводников / Л. С. Стильбанс. – М., 1967.
3. Мосс, Т. Полупроводниковая оптоэлектроника / Т. Мосс, Г. Варрел, Б. Эллис. – М., 1976.
4. Рембеза, С. И. Методы измерений основных параметров полупроводников / С. И. Рембеза. – Воронеж, ВРУ, 1989.
5. Панков, Ж. Оптические процессы в полупроводниках / Ж. Панков. – М., 1973.
6. Шалимова, К. В. Физика полупроводников / К. В. Шалимова. – М., 1985.
7. Гуревич, А. Г. Физика твердого тела / А. Г. Гуревич. – СПб., 2004.
8. Пасынков, В. В. Материалы электронной техники / В. В. Пасынков, В. С. Соколин. – СПб., 2004.

Библиотека БГУИР



### 3. ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА «ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛОВ»

**Цель работы:** по дифрактограмме кристаллического образца рассчитать значения межплоскостных расстояний, параметры элементарной ячейки и рентгеновскую плотность вещества.

#### 3.1. Теоретические сведения

В твердых телах атомы, молекулы или ионы располагаются либо в строгом порядке (рис. 3.1, а), либо разупорядоченно (рис. 3.1, б). Вещества с закономерным упорядоченным расположением частиц в пространстве, получаемые в условиях термодинамического равновесия, называют *кристаллическими*. В условиях, отличных от равновесия, эти же вещества могут быть получены в *аморфном* (неупорядоченном) состоянии.

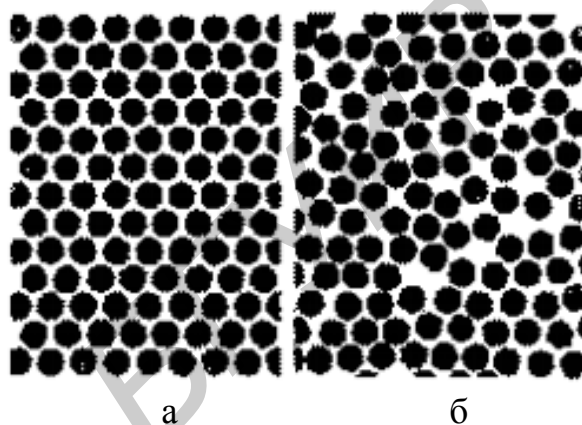


Рис. 3.1. Расположение атомов в кристаллическом (а) и аморфном (б) состояниях

##### 3.1.1. Описание структуры кристаллов

Внутреннее строение кристаллов характеризуется трехмерным закономерным расположением их структурных элементов (ионов, атомов, молекул), которые расположены строго периодически, образуя геометрически закономерную периодическую *кристаллическую решетку*. При этом каждое вещество характеризуется своим взаимным расположением атомов, ионов или молекул и расстоянием между ними, т. е. своей специфической атомно-кристаллической структурой.

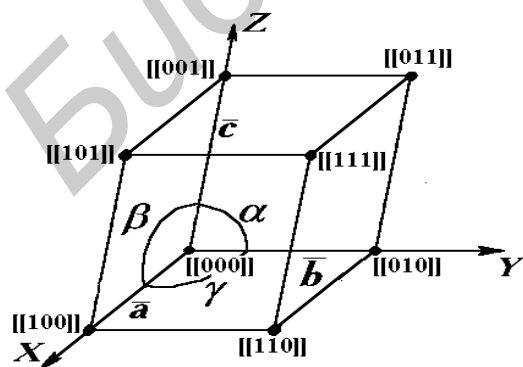


Рис. 3.2. Пример косоугольной элементарной ячейки

Периодичность кристаллической решетки позволяет описывать ее с помощью периодически повторяющегося в пространстве элементарного параллелепипеда – *элементарной ячейки*, построенного на трех некопланарных *единичных векторах трансляции a, b, c* (рис. 3.2). Символы в квадратных скобках обозначают координаты узлов ячейки.

Длины векторов трансляции (ребер ячейки)  $a$ ,  $b$ ,  $c$  определяют ее размер и называются *параметрами элементарной ячейки*. В случае простой кубической решетки все ребра ячейки (длины векторов трансляции)

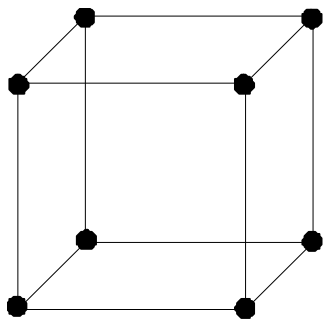


Рис. 3.4. Кубическая элементарная ячейка

Число атомов, приходящееся на одну ячейку, называют *базисом*.

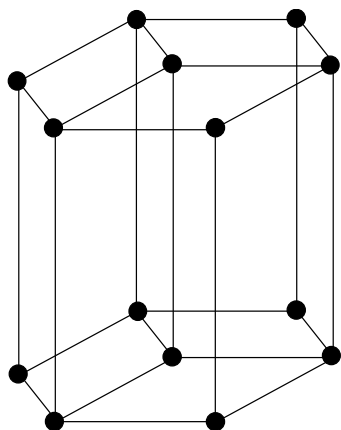


Рис. 3.6. Гексагональная элементарная ячейка

одинаковы (рис. 3.3).

Как видно из рис. 3.2 и 3.3, в вершинах элементарной ячейки находятся структурные элементы решетки (ионы, атомы, молекулы). При этом, в элементарной кристаллической ячейке обычно содержится наименьшее число атомов, хотя и не всегда. Иногда атомы могут находиться и внутри ячейки.

базисом.

Для характеристики элементарной ячейки необходимо задать 6 величин: три ребра ячейки:  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и три угла между ними:  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ . По форме различают семь типов элементарных ячеек: кубическую (рис. 3.4), тетрагональную (рис. 3.5), гексагональную (рис. 3.6), ромбоэдрическую (рис. 3.7), ромбическую (рис. 3.10), моноклинную (рис. 3.8) и триклинную (рис. 3.11).

Указанным семи формам элементарных ячеек соответствует семь кристаллографических систем координат и семь систем (сингоний), с помощью которых описывают кристаллы:

- |                    |                   |  |
|--------------------|-------------------|--|
| 1) кубическая      | $a = b = c$       | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ;                 |
| 2) тетрагональная  | $a = b \neq c$    | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ;                 |
| 3) гексагональная  | $a = b \neq c$    | $\alpha = \beta = 90^\circ$ ; $\gamma = 120^\circ$ ;   |
| 4) ромбическая     | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ ;                 |
| 5) ромбоэдрическая | $a = b = c$       | $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ ;              |
| 6) моноклинная     | $a \neq b \neq c$ | $\alpha = \gamma = 90^\circ$ ; $\beta \neq 90^\circ$ ; |
| 7) триклинная      | $a \neq b \neq c$ | $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ .        |

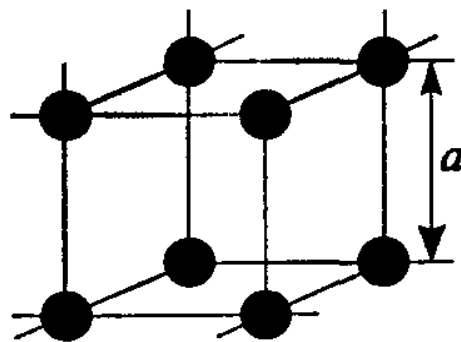


Рис. 3.3. Задание параметра простой кубической решетки

При этом, в элементарной кристаллической ячейке обычно со-

держится наименьшее число атомов, хотя и не всегда. Иногда атомы могут находиться и внутри ячейки.

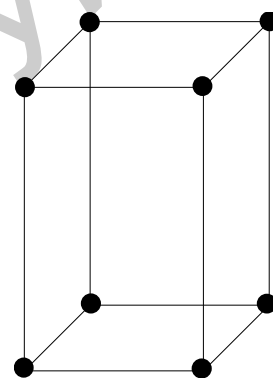


Рис. 3.5. Тетрагональная элементарная ячейка

В зависимости от соотношения величины, взаимной ориентации ребер элементарной ячейки и расположения в ней частиц вещества может существовать 14 типов кристаллических решеток (решетки Бравэ) (табл. 3.1).

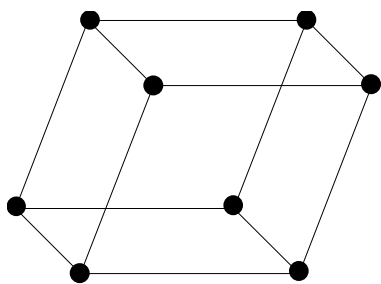


Рис. 3.7.  
Ромбоэдрическая элементарная ячейка

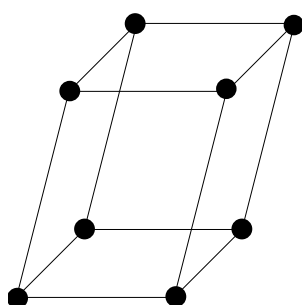


Рис. 3.8.  
Моноклинная элементарная ячейка

Различают *примитивные (простые), базоцентрированные и гранецентрированные* решетки Бравэ. Если узлы кристаллической решетки расположены только в вершинах параллелепипеда, представляющего собой элементарную ячейку, то такая решетка называется *примитивной* или *простой* (рис. 3.9, а), если, кроме того, имеются узлы в центре оснований параллелепипеда, то решетку называют *базоцентрированной* (рис. 3.9, г), если узлы имеются в месте пересечения пространственных диагоналей, решетка называется *объемно-*

*центрированной* (рис. 3.9, б), а если узлы расположены в центре всех боковых граней – *гранецентрированной* (рис. 3.9, в).

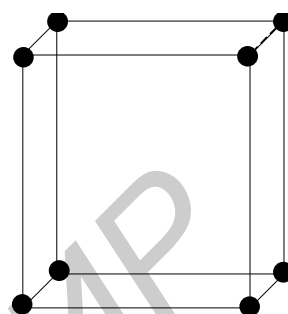


Рис. 3.10.  
Ромбическая элементарная ячейка

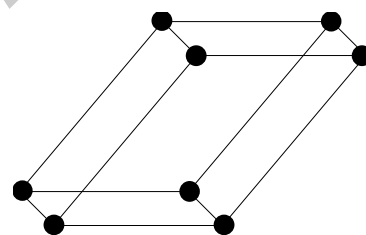


Рис. 3.11. Триклинная элементарная ячейка

### 3.1.2. Дефекты структуры кристалла

Идеальных кристаллов с идеальной решеткой не существует. В реальных кристаллах имеются различные дефекты, нарушающие периодич

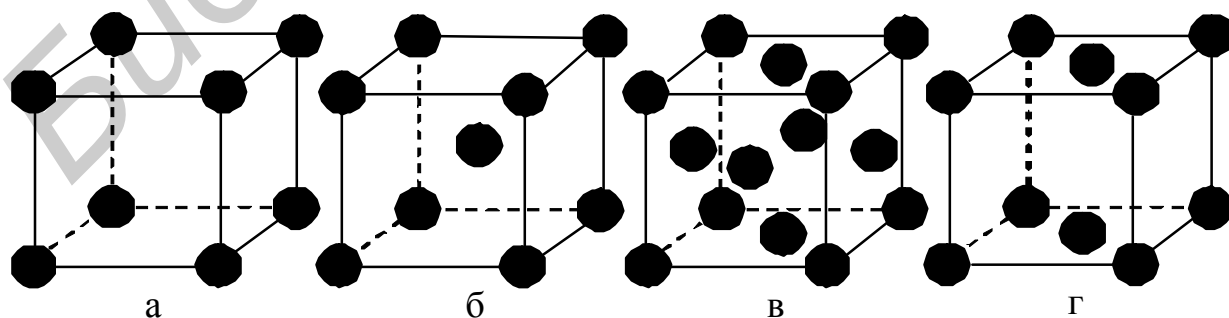
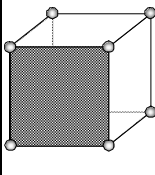
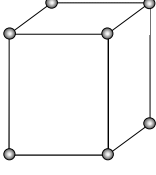
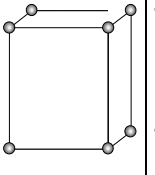
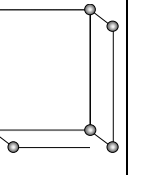
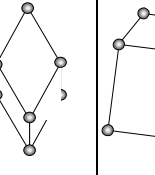
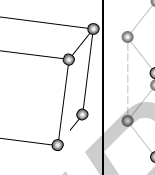
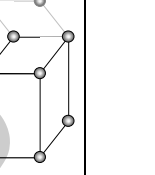
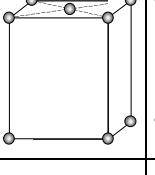
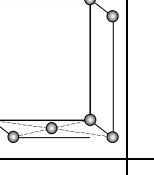
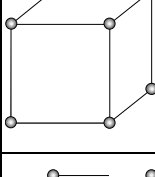
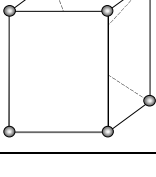
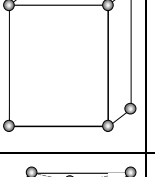
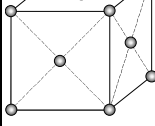
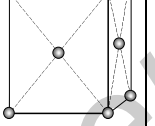


Рис. 3.9. Элементарные ячейки кристаллов:  
а – простая решетка; б – объемно-центрированная;  
в – гранецентрированная; г – базоцентрированная

Элементарные ячейки решеток Браве

| Типы решеток          | Сингонии  |   |   |   |   |   |   |
|-----------------------|---|---|---|---|---|---|---|
|                       | кубическая  | тетрагональная  | ромбическая   | моноклинная   | ромбоэдрическая   | триклинная  | гексагональная  |
| Простые (примитивные) |    |  |    |  |  |  |  |
| Базоцентрированные    |   |   |    |  |   |   |   |
| Объемноцентрированные |    |  |    |   |   |   |   |
| Гранецентрированные   |  |   |  |   |   |   |   |

ность в расположении атомов. Дефекты в кристаллах можно определить как устойчивые нарушения правильного расположения атомов или ионов в узлах кристаллической решетки, соответствующего минимуму потенциальной энергии кристалла. Структурные дефекты в кристаллах подразделяют на *нульмерные, одномерные, двумерные и трехмерные*.

*Нульмерные* – точечные дефекты, делятся на *энергетические, электронные и атомные*. К энергетическим дефектам относятся временные изменения регулярности решетки кристалла – фононы, вызванные тепловым колебанием атомов решетки. *Электронные* дефекты представляют собой избыточные электроны, отсутствие электронов в валентных связях между атомами – дырки и экситоны – пары электрон-дырка, связанные между собой кулоновскими силами. *Атомные* дефекты подразделяются на *собственные (тепловые)* и *примесные*. *Тепловые* дефекты имеются в кристаллах при любых температурах, отличных от абсолютного нуля, и проявляются либо в виде незанятых узлов – *вакансий (дефекты по Шоттки)*, либо как образования, состоящие из вакансии и атома, смещенного в междоузлие (*дефекты по*

Френкелю). Примеси посторонних атомов в зависимости от своих размеров могут располагаться в узлах решетки или в междоузлиях. В зависимости от этого они образуют соответственно либо *примеси замещения*, либо *примеси внедрения*.

Примеры атомных точечных дефектов кристаллической структуры простых веществ и бинарных соединений приведены на рис. 3.12 и 3.13 соответственно.

*Одномерные – линейные дефекты (краевые и винтовые дислокации)* образуются в кристаллах, подвергнутых внешним деформациям. При краевом сдвиге верхний слой атомов кристалла перемещается относительно нижнего, в результате чего одна из атомных плоскостей внутри кристалла обрывается. Граница атомной полуплоскости называется *краевой дислокацией*. Она представляет собой линию, лежащую в плоскости скольжения и отделяющую область кристалла, претерпевшую сдвиг, от несдвинутой (рис. 3.14, а).

В случае *винтовой дислокации* одна часть кристалла смещена относительно другой в направлении, параллельном линии дислокации, образуя слой атомов, поднимающийся над плоскостью кристалла в виде ступени. При этом весь кристалл как бы состоит из одной атомной плоскости, закрученной по винтовой линии вокруг дислокации (рис. 3.14, б).

Наиболее простым методом выявления дислокаций является метод химического травления поверхности кристалла специально подобранным травителем. Поскольку дислокации ослабляют силы связи между частицами в кристалле, то в местах выхода дислокаций на поверхность скорость травления будет значительно выше. В результате в местах выхода дислокаций на поверхности образуются ямки, форма ко-

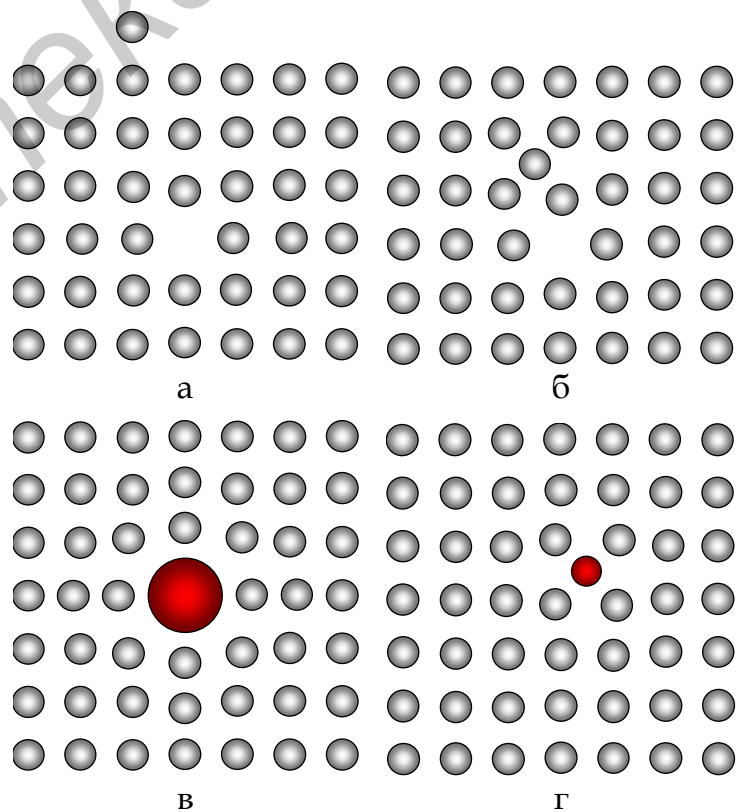


Рис. 3.12. Точечные атомные дефекты: собственные: а – по Шоттки; б – по Френкелю; примесные: в – замещения; г – внедрения

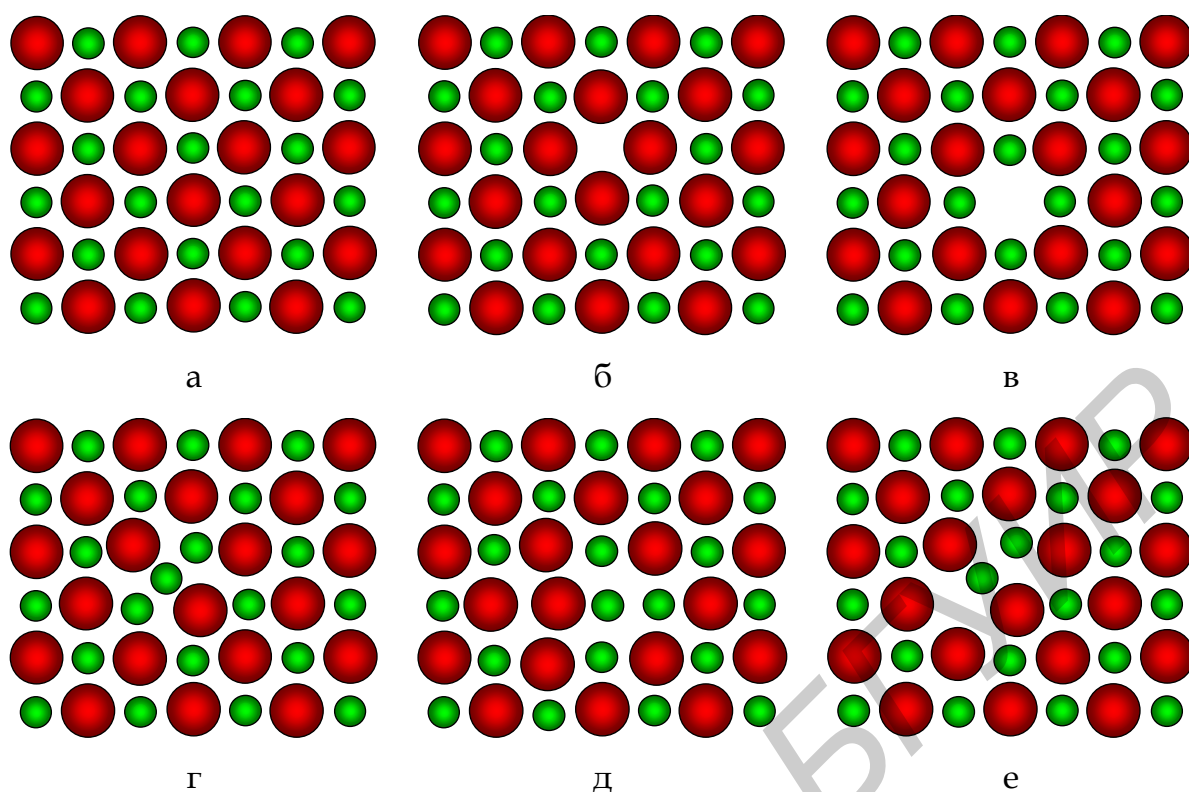


Рис. 3.13. Точечные атомные дефекты в реальном кристалле бинарного соединения АВ:

а – идеальный кристалл; б – вакансия в подрешетке компонента В;  
 в – вакансия в подрешетке компонента А; г – сверхстехиометрический атом В в междоузлии; д – антиструктурное разупорядочение; е – дефект по Френкелю



торых определяется ориентацией плоскости, где проводится травление. За количественную характеристику числа дислокаций принимают плотность дислокаций, проходящих через единицу поверхности в  $1 \text{ см}^2$ . Для качественных кристаллов полупроводниковых соединений плотность дислокаций составляет порядка  $10^2 - 10^3 \text{ см}^{-2}$ , в то время как в сильно деформированных –  $10^{11} - 10^{12} \text{ см}^{-2}$ .

*Двухмерные (поверхностные дефекты)* – поверхности монокристалла, границы зерен поликристаллов, плоскости двойникования (одна часть кристаллической решетки в процессе роста занимает зеркальное положение относительно другой).

*Трехмерные (объемные дефекты)* – трещины, полости, включения другой фазы и т. д.

### 3.1.3. Обозначение узлов, направлений и плоскостей в кристалле

В кристаллографии принято плоскости и прямые проводить через узлы пространственной решетки. Положение любого узла кристаллической

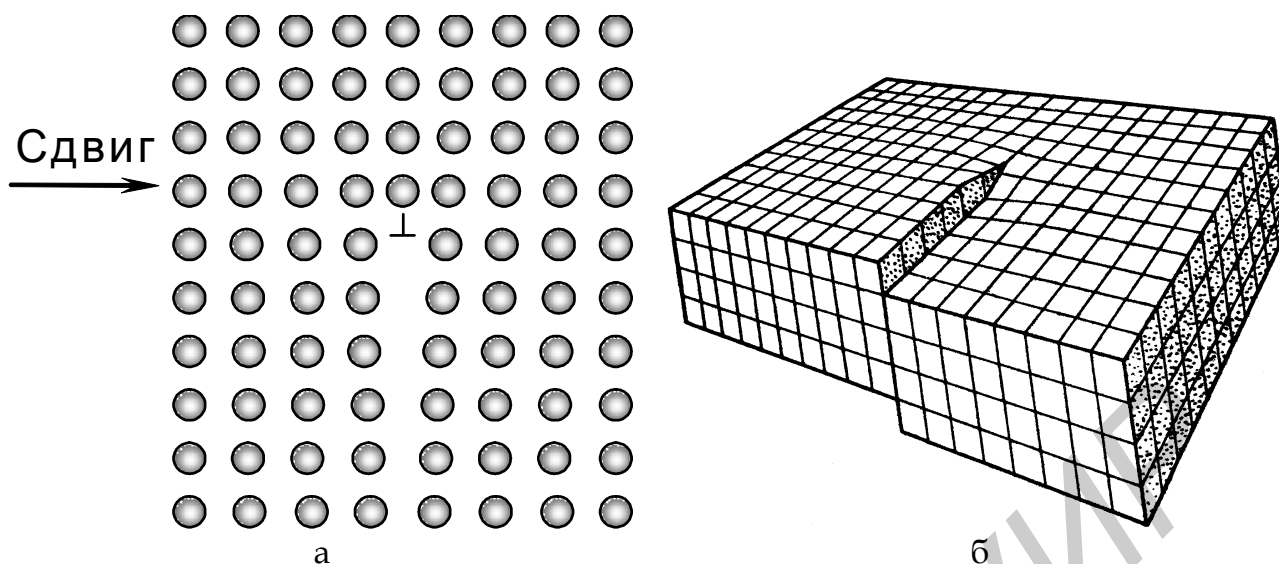


Рис. 3.14. Линейные дефекты:

дислокации: а – краевая; б – винтовая

решетки определяется заданием трех координат –  $x, y, z$ . Для простой решетки эти координаты можно выразить следующим образом:

$$x = ma, \quad y = nb, \quad z = pc, \quad (3.1)$$

где  $a, b, c$  – параметры решетки;  
 $m, n, p$  – целые числа.

Если за единицы измерения длин приняты параметры решетки, то координатами узла будут числа  $m, n, p$ . Эти числа называют индексами узла и записывают следующим образом:  $[[m \ n \ p]]$ .

Для описания направления в кристалле выбирают прямую, проходящую через начало координат. Ее направление однозначно определяется индексами  $[[m \ n \ p]]$  первого узла, через который он проходит. Поэтому индексы узла одновременно являются и индексами направления. Индексы направления обозначают  $[m \ n \ p]$ .

Для обозначения кристаллографических плоскостей обычно используется система *индексов Миллера*.

Выберем систему координат, оси которых совпадают с тремя ребрами элементарной ячейки, а начало координат находится в одном из узлов решетки (рис. 3.15). В указанном узле пересекаются эти ребра, а осевые единицы соответствуют длине ребер элементарной ячейки, т. е. масштаб по оси  $x$  будет  $a$ , по оси  $y$  –  $b$  и по оси  $z$  –  $c$ . Пусть узловая плоскость  $S$  пересекает оси координат в точках  $A, B, C$  (рис. 3.15) и отсекает

отрезки  $m$ ,  $n$ ,  $p$ , выраженные в соответствующих единицах ( $m = \frac{OA}{a}$ ,  $n = \frac{OB}{b}$ ,  $p = \frac{OC}{c}$ ). Числа  $m$ ,  $n$ ,  $p$  определяют положение плоскости  $S$ . Составим отношение обратных величин осевых отрезков  $\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p}$  и выразим его через отношение трех наименьших чисел  $h$ ,  $k$ ,  $l$ , которые и будут индексами Миллера плоскости  $S$ . Следовательно,

$$h : k : l = \frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p}. \quad (3.2)$$

Для нахождения индексов  $h$ ,  $k$ ,  $l$  необходимо отношение  $\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p}$  привести к общему знаменателю и отбросить его. Например,  $m = 4$ ,  $n = 2$ ,  $p = 3$ . Составим соотношение

$$\frac{1}{m} : \frac{1}{n} : \frac{1}{p} = \frac{1}{4} : \frac{1}{2} : \frac{1}{3} = \frac{3}{12} : \frac{6}{12} : \frac{4}{12} = 3 : 6 : 4. \quad (3.3)$$

Значит, индексами Миллера будут  $h = 3$ ,  $k = 6$ ,  $l = 4$ .

Индексы плоскостей заключаются в круглые скобки –  $(h k l)$ . В нашем случае плоскость  $S$  символически обозначается  $(3 6 4)$ , если плоскость отсекает по осям отрицательные отрезки, то это отмечается знаком минус над соответствующим индексом. Например:  $h = -2$ ,  $k = 1$ ,  $l = 0$ , тогда плоскость обозначается как  $(\bar{2} 1 0)$ .

Если плоскость параллельна какой-либо координатной оси, то соответствующий индекс будет равен нулю. Поэтому плоскостям, пересекающим грани куба по диагонали, соответствуют обозначения  $(1 1 0)$ ,  $(1 0 1)$ ,

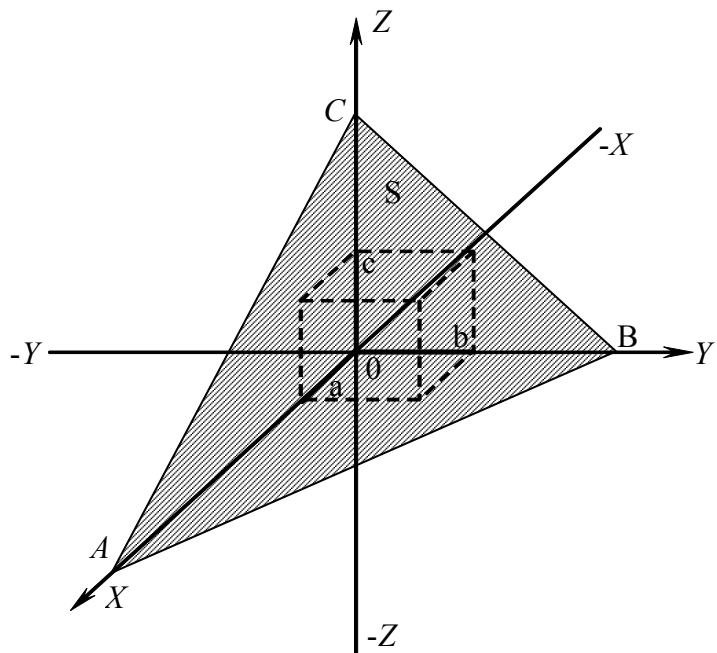


Рис. 3.15. К определению индексов Миллера



(0 1 1), а плоскости граней куба обозначаются (1 0 0), (0 1 0), (0 0 1). Чем больше величина какого-либо индекса Миллера плоскости, тем ближе к началу координат расположено место ее пересечения с соответствующей осью. На рис. 3.16 показаны примеры обозначения некоторых плоскостей

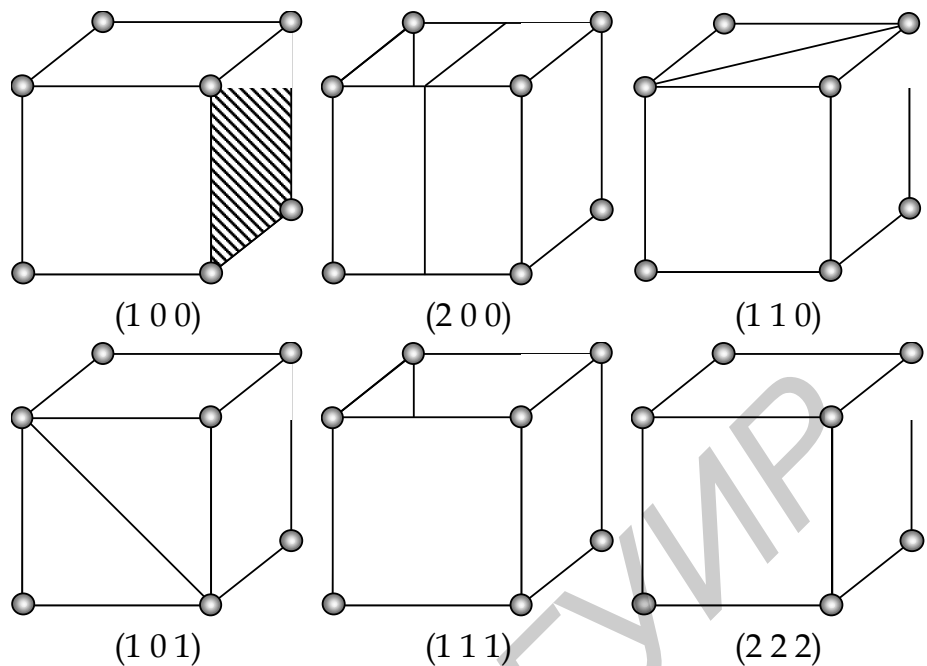


Рис. 3.16. Обозначения главных плоскостей в кубической решетке и их индексы Миллера

в кубическом кристалле. Семейство эквивалентных плоскостей обозначается фигурными скобками. Символом  $\{1 0 0\}$  обозначается все семейство граней куба (1 0 0), (0 1 0), (0 0 1),  $(\bar{1} 0 0)$  и т. д.

### 3.1.4. Формула Вульфа – Брэггов

Рентгеновские лучи представляют собой электромагнитные волны длиной порядка  $10^{-8}$  см. Ввиду значительной проникающей способности рентгеновского излучения значительная часть этого излучения проходит через кристалл. В то же время некоторая его часть отражается от плоскостей, на которых расположены атомы (рис. 3.17). При этом угол падения равен углу отражения. Отраженные лучи интерферируют друг с другом, в результате чего происходит их взаимное усиление или погашение. Результат интерференции зависит от разности хода  $D$  лучей, отраженных от параллельных плоскостей. Усиление будет происходить в том случае, если отраженные лучи будут в одной фазе, т. е., когда разность хода лучей равно целому числу длин волн:

$$D = n\lambda. \quad (3.4)$$

Из рис. 3.17 видно, что луч, отраженный от верхней плоскости атомов, проходит меньший путь, чем луч, отраженный от нижней плоскости. Разность этих путей  $D$  равна сумме длин отрезков  $AB$  и  $BC$ , тогда

$$D = AB + BC = 2AB = 2d \sin\theta. \quad (3.5)$$

Подставляя (3.5) в (3.4), будем иметь

$$2d \cdot \sin\theta = n\lambda, \quad (3.6)$$

где  $d$  – расстояние между плоскостями отражения,  
 $n$  – целое число, называемое порядком отражения.

Выражение (3.3) есть формула Вульфа – Брэггов и представляет собой условие возникновения дифракционных максимумов. Дифракционный максимум образуется суммированием отражений от атомов всех параллельных плоскостей данного семейства  $(h k l)$ , поскольку условие Вульфа – Брэггов выполняется для любых двух плоскостей. Порядок отражения  $n$  при этом остается неизменным.

### 3.2. Экспериментальная часть

#### 3.2.1. Индексирование дифрактограмм

Для определения параметров элементарной ячейки исследуемого вещества необходимо помимо межплоскостных расстояний  $d$  установить индексы каждой интерференционной линии на дифрактограмме.

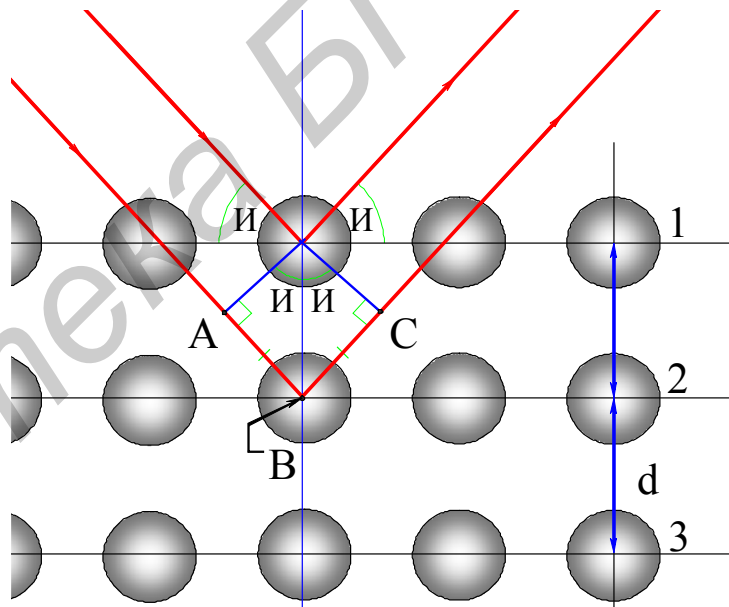


Рис. 3.17. К выводу формулы Вульфа – Брэггов

Для индексирования дифрактограмм кристаллов кубической сингонии пользуются соотношением

$$\sin\theta = \frac{\lambda}{2a} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}, \quad (3.7)$$

где  $a$  – параметр элементарной ячейки,  
 $\lambda$  – длина волны рентгеновского излучения.

Из (3.7) следует, что отношение значений квадратов синусов углов падения для двух плоскостей с разными индексами будет равно

$$\frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_j} = \frac{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2}{h_j^2 + k_j^2 + l_j^2}, \quad (3.8)$$

где  $i$  и  $j$  – номера линий на дифрактограмме.

Поэтому, если ряд отношений квадратов синусов углов, соответствующих обнаруженным рефлексам, к квадрату первого угла, в результате чего получим ряд отношений суммы квадратов индексов. Этот ряд состоит из строго определенных чисел, принадлежащих различным типам решеток (табл. 3.2). Найдя ряд отношений  $\sin^2$  и, определим тип элементарной ячейки и каждой линии, начиная с первой, приписываем соответствующие ей индексы  $h k l$  по табл. 3.3.

Определив индексы Миллера для каждой линии дифрактограммы, можно определить параметр элементарной ячейки кристаллической решетки. Для кубической сингонии пользуются формулой

$$a = d\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}. \quad (3.9)$$

Наиболее точно параметр элементарной ячейки кристалла  $a$  можно определить по линиям для больших углов отражения  $\theta$ . Вычислив  $a$  для нескольких линий, находим его среднее значение.

### 3.2.2. Порядок выполнения работы

1. Ознакомиться с описанием лабораторной работы.
2. Получить у преподавателя дифрактограмму кристалла.
3. Определить точные значения углов отражения  $2\theta$  на полученной дифрактограмме. Для этого необходимо:
  - а) провести нумерацию всех линий, начиная с первой линии дифрактограммы по направлению увеличения значений  $\theta$ ;

Таблица 3.2

Ряд отношений суммы квадратов индексов Миллера

| Тип кубической решетки | $q = \frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_1}$                  |
|------------------------|--|
| Примитивная            | 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10; 11; 12; 13; 14; 15; 16 и т. д.  |
| ГЦК                    | 1; 1,33; 2,66; 3,67; 4; 5,33; 6,33; 6,67; 8; 9 и т. д.         |
| ОЦК                    | 1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8; 9; 10 и т. д.                          |
| Тип алмаза             | 1; 2,66; 3,67; 4; 5,33; 6,33; 6,67; 8; 9; 10,67; 11,67 и т. д. |

б) после запуска программы *ORIGIN* открыть файл с дифрактограммой вещества, выданный преподавателем;

в) на линейке задач найти *Screen Reader*, запустить и определить значения всех углов  $2\theta$ , для чего курсор мыши устанавливаете на максимумах измеряемой линии и нажимаете левую клавишу. Красным крестиком обозначен максимум, а его положение отмечено в окне *Data Display*.

Данные по определению положений максимумов на дифрактограмме занести в табл. 3.4.

4. Определив значение  $2\theta$ , необходимо найти  $\theta$ ,  $\sin\theta$ ,  $\sin^2\theta$ , а затем, используя формулу Вульфа – Брэггов (3.6), рассчитать значения межплоскостных расстояний  $d_{\text{эксп}}$  для каждой линии.

5. Для нахождения индексов Миллера сначала необходимо определить отношение  $\frac{\sin^2 \theta_i}{\sin^2 \theta_1}$  и полученные данные занести в табл. 3.4. Полученный ряд значений умножить на 3 и занести в табл. 3.4 (колонка «приблизленно»), а затем округлить полученные значения, которые также занести в табл. 3.4 (колонка «точно»).

6. Определив индексы Миллера для каждой линии дифрактограммы, рассчитать параметр элементарной ячейки  $a$ , используя выражение (3.9).

7. По вычисленному параметру  $a$  рассчитать рентгеновскую плотность исследуемого вещества по следующему выражению:

$$\rho = \frac{M}{V_{\text{мол}}}, \quad (3.10)$$

где  $M$  – молярная масса,

$V_{\text{мол}}$  – молярный объем для кубической элементарной ячейки  $V_{\text{мол}} = a^3$ .

Если  $z$  – число атомов в элементарной ячейке кристалла, то объем, приходящийся на один атом вещества, будет равен

$$V_{\text{ат}} = \frac{V_{\text{мол}}}{z}. \quad (3.11)$$

Поскольку молярный объем  $V_{\text{мол}} = N_A \cdot V_{\text{ат}}$ , где  $N_A$  – число Авогадро, то

$$\rho = \frac{z \cdot M}{N_A \cdot V_{\text{мол}}}. \quad (3.12)$$

Квадратичные формы для кристаллов кубической сингонии

| № п/п | Ячейки      |                   |                        |                   |                     |                   |
|-------|-------------|-------------------|------------------------|-------------------|---------------------|-------------------|
|       | примитивная |                   | объемно-центрированная |                   | гранецентрированная |                   |
|       | $hkl$       | $h^2 + k^2 + l^2$ | $hkl$                  | $h^2 + k^2 + l^2$ | $hkl$               | $h^2 + k^2 + l^2$ |
| 1     | 100         | 1                 | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 2     | 110         | 2                 | 110                    | 2                 | -                   | -                 |
| 3     | 111         | 3                 | -                      | -                 | 111                 | 3                 |
| 4     | 200         | 4                 | 200                    | 4                 | 200                 | 4                 |
| 5     | 210         | 5                 | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 6     | 211         | 6                 | 211                    | 6                 | -                   | -                 |
| 7     | 220         | 8                 | 220                    | 8                 | 220                 | 8                 |
| 8     | 221, 300    | 9                 | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 9     | 310         | 10                | 310                    | 10                | -                   | -                 |
| 10    | 311         | 11                | -                      | -                 | 311                 | 11                |
| 11    | 222         | 12                | 222                    | 12                | 222                 | 12                |
| 12    | 320         | 13                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 13    | 321         | 14                | 321                    | 14                | -                   | -                 |
| 14    | 400         | 16                | 400                    | 16                | 400                 | 16                |
| 15    | 410, 322    | 17                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 16    | 330, 411    | 18                | 330                    | 18                | -                   | -                 |
| 17    | 331         | 19                | -                      | -                 | 331                 | 19                |
| 18    | 420         | 20                | 420                    | 20                | 420                 | 20                |
| 19    | 421         | 21                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 20    | 332         | 22                | 332                    | 22                | -                   | -                 |
| 21    | 422         | 24                | 422                    | 24                | 422                 | 24                |
| 22    | 430, 500    | 25                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 23    | 431, 510    | 26                | 431                    | 26                | -                   | -                 |
| 24    | 333, 511    | 27                | -                      | -                 | 333                 | 27                |
| 25    | 432, 520    | 29                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 26    | 521         | 30                | 521                    | 30                | -                   | -                 |
| 27    | 440         | 32                | 440                    | 32                | 440                 | 32                |
| 28    | 441, 522    | 33                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 29    | 433, 530    | 34                | 433                    | 34                | -                   | -                 |
| 30    | 531         | 35                | -                      | -                 | 531                 | 35                |
| 31    | 600, 442    | 36                | 600                    | 36                | 600                 | 36                |
| 32    | 610         | 37                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 33    | 611, 532    | 38                | 611                    | 38                | -                   | -                 |
| 34    | 620         | 40                | 620                    | 40                | 620                 | 40                |
| 35    | 621, 443    | 41                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 36    | 541         | 42                | 541                    | 42                | 541                 | 42                |
| 37    | 533         | 43                | -                      | -                 | -                   | -                 |
| 38    | 622         | 44                | 622                    | 44                | -                   | -                 |

Учитывая, что  $V_{\text{мол}} = N_A \cdot V_{\text{ат}}$ , получим

$$z = \frac{\rho \cdot a^3 \cdot N_A}{M}. \quad (3.13)$$

### 3.2.3. Содержание отчета

1. Цель работы.
2. Краткие теоретические сведения о строении кристаллов и особенностях их структуры.
3. Формулы, по которым производились расчеты.
4. Результаты расчетов в виде таблицы.
5. Выводы.

### 3.3. Контрольные вопросы

1. Дайте определение элементарной ячейки кристалла.
2. Как обозначаются символы узлов, плоскостей, направлений, семейства плоскостей и семейства направлений?
3. Плотность кристалла  $NaCl$  составляет  $2,18 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>. Определить параметр элементарной ячейки указанного кристалла.
4. Определить число атомов в элементарной ячейке кристалла кремния, имеющего структуру алмаза. Параметр элементарной ячейки кремния  $a = 5,4307 \text{ \AA}$ , плотность кремния  $\rho = 2,33 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>.
5. Почему для исследования структуры кристаллов используется рентгеновское излучение?
6. Сколько атомов меди содержится в 1 м<sup>3</sup>? Плотность меди  $\rho = 8,96 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>, решетка меди ГЦК.

Таблица 3.4

Экспериментальные и расчетные данные к лабораторной работе  
«Изучение структуры кристаллов»

| № п/п | $2\theta$ ,<br>град | $\theta$ ,<br>град | $\sin \theta$ | $d, \text{ \AA}$ | $\sin^2 \theta$ | $q = \frac{\sin^2 \alpha_i}{\sin^2 \alpha_1}$ | $h^2 + k^2 + l^2$ |       | $h k l$ | $a, \text{ \AA}$ |
|-------|---------------------|--------------------|---------------|------------------|-----------------|---|-------------------|-------|---------|------------------|
|       |                     |                    |               |                  |                 |   | прибли-<br>женно  | точно |         |                  |
|       |                     |                    |               |                  |                 |   |                   |       |         |                  |

## ЛИТЕРАТУРА

1. Бокий, Г. Б. Курс рентгеноструктурного анализа. Т. 1 / Г. Б. Бокий, М. А. Порай-Кошиц. – М., 1964.
2. Медведев, С. А. Введение в технологию полупроводниковых материалов / С. А. Медведев. – М. : Высш. шк. 1970.
3. Вайнштейн, Б. К. Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии / Б. К. Вайнштейн. – М., 1979.
4. Блейкмор, Дж. Физика твердого тела / Дж. Блейкмор. – М., 1988.
5. Иверонова, В. И. Теория рассеяния рентгеновских лучей / В. И. Иверонова, Г. П. Рекевич. – М., 1978.
6. Стильбанс, Л. С. Физика полупроводников / Л. С. Стильбанс. – М., 1967.
7. Уманский, Я. С. Рентгенография металлов и полупроводников / Я. С. Уманский. – М., 1969.
8. Хейкер, Д. М. Рентгеновская дифрактометрия монокристаллов / Д. М. Хейкер – Л., 1973.
9. Орлов, А. Н. Дефекты // Физическая энциклопедия / А. Н. Орлов – М., 1988. – Т. 1. – С. 595–597.
10. Дефекты упаковки // Физическая энциклопедия / С. А. Семилетов. – М., 1988. – Т. 1. – С. 597.
11. Болдырев, В. В. Дефекты // Химическая энциклопедия / В. В. Болдырев. – М., 1990. – Т. 2. – С. 29 – 31.
12. Гуревич, А. Г. Физика твердого тела / А. Г. Гуревич. – СПб., 2004.
13. Пасынков, В. В. Материалы электронной техники / В. В. Пасынков, В. С. Сорокин. – СПб., 2004.

*Учебное издание*

**БОДНАРЬ Иван Васильевич**  
**ПОЗНЯК Александр Анатольевич**

## **ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ И ТЕХНОЛОГИИ**

**ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ**  
**для студентов специальностей**  
**1-39 02 01 «Моделирование и компьютерное**  
**проектирование РЭС»**  
**и 1-39 02 02 «Проектирование**  
**и производство РЭС»**  
**всех форм обучения**

Редактор **Е. Н. Батурчик**  
Корректор **А. В. Тюхай**

---

Подписано в печать 31.05.2011.  
Гарнитура «Букман».  
Уч.-изд. л. 2,3.

Формат 60x84 1/16.  
Отпечатано на ризографе.  
Тираж 150 экз.

Бумага офсетная.  
Усл. печ. л. 2,91.  
Заказ 744.

---

Издатель и полиграфическое исполнение: учреждение образования  
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»  
ЛИ №02330/0494371 от 16.03.2009. ЛП №02330/0494175 от 03.04.2009.  
220013, Минск, П. Бровки, 6