

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

Кафедра микро- и наноэлектроники

С. А. Волчѣк, В. А. Петрович

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Лабораторный практикум

для студентов специальностей

1-41 01 02 «Микро- и наноэлектронные технологии и системы»,
1-41 01 03 «Квантовые информационные системы»
и 1-41 01 04 «Нанотехнологии и наноматериалы в электронике»
всех форм обучения

Минск БГУИР 2011

УДК 539(076.5)
ББК 22.37я73
В68

Рецензент:

профессор кафедры радиоэлектронных средств учреждения образования
«Белорусский государственный университет информатики
и радиоэлектроники», доктор технических наук В. В. Баранов

Волчѣк, С. А.

В68

Физика твердого тела : лаб. практикум для студ. спец. 1-41 01 02 «Микро- и нанoeлектронные технологии и системы», 1-41 01 03 «Квантовые информационные системы» и 1-41 01 04 «Нанотехнологии и наноматериалы в электронике» всех форм обуч. / С. А. Волчѣк, В. А. Петрович. – Минск : БГУИР, 2011. – 100 с. : ил.

ISBN 978-985-488-609-1.

Практикум состоит из четырех лабораторных работ, каждая из которых содержит теоретическую и экспериментальную части, а также контрольные вопросы.

Предназначен для студентов и магистрантов. Может быть полезен аспирантам и научным работникам, интересующимся вопросами изучения электрических и оптических свойств твердых тел.

**УДК 539(076.5)
ББК 22.37я73**

ISBN 978-985-488-609-1

© Волчѣк С. А., Петрович В. А., 2011
© УО «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники», 2011

СОДЕРЖАНИЕ

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №1. ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ДВИЖЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ	5
1.1. Теоретическая часть.....	5
1.1.1. Взаимосвязь между временем движения носителей заряда и током в полупроводниках.....	5
1.1.2. Диффузионная и дрейфовая скорости движения носителей заряда.....	8
1.1.3. Подвижность носителей заряда.....	9
1.1.3.1. Макроскопический смысл подвижности носителей заряда.....	9
1.1.3.2. Зависимость подвижности носителей заряда от напряженности электрического поля. Критическое поле.....	10
1.1.3.3. Общие особенности рассеяния носителей заряда в полупроводниках.....	11
1.1.3.4. Подвижность носителей заряда μ_f , обусловленная тепловыми колебаниями кристаллической решетки.....	14
1.1.3.5. Подвижность носителей заряда μ_i , обусловленная рассеянием на ионизованных примесях.....	15
1.1.3.6. Практические примеры и выводы.....	17
1.2. Порядок выполнения лабораторной работы.....	21
Контрольные вопросы.....	23
ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №2. ИЗУЧЕНИЕ ПРОФИЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ И КОНТАКТНОЙ РАЗНИЦЫ ПОТЕНЦИАЛОВ В <i>p-n</i>-ПЕРЕХОДАХ	24
2.1. Теоретическая часть. Базовые сведения о барьерной и диффузионной емкостях.....	24
2.1.1. Барьерная емкость.....	24
2.1.1.1. Зависимость барьерной емкости от напряжения.....	26
2.1.1.1.1. Резкий <i>p-n</i> -переход.....	26
2.1.1.1.2. Плавный <i>p-n</i> -переход.....	28
2.1.2. Диффузионная емкость.....	29
2.2. Теоретические основы вольт-фарадных (вольт-емкостных) измерений.....	29
2.3. Определение параметров полупроводников по результатам <i>C-V</i> -измерений.....	37
2.3.1. Концентрация носителей заряда.....	37
2.3.2. Контактная разность потенциалов.....	41
2.3.3. Концентрация и энергия ионизации глубоких примесных центров.....	41
2.3.3.1. Электростимулированная емкость.....	42
2.3.3.2. Термостимулированная емкость.....	44
2.3.3.3. Фотостимулированная емкость.....	46
2.4. Порядок выполнения лабораторной работы.....	48

Контрольные вопросы	49
ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3. ИЗУЧЕНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ ЯВЛЕНИЙ В ПЬЕЗОЭЛЕКТРИКАХ	50
3.1. Свойства пьезоэлектриков.....	50
3.1.1. Общие понятия о прямом и обратном пьезоэффектах.....	50
3.1.2. Прямой и обратный пьезоэлектрические эффекты	52
3.1.3. Тензор механического напряжения.....	54
3.1.4. Уравнение движения элементарного объема напряженного тела.....	56
3.1.5. Пьезоэлектрические модули; прямой и обратный пьезоэффекты.....	58
3.1.6. Резонансные колебания пьезоэлектрических элементов	61
3.1.7. Продольные колебания в пьезоэлектриках.....	62
3.2. Частотная характеристика пьезорезонатора.....	65
3.3. Резонансные и антирезонансные частоты: общий теоретический анализ дисперсии сопротивления пьезорезонатора	67
3.4. Эквивалентная схема пьезоэлектрического резонатора на основе LC-контуров	74
3.5. Резонансная и антирезонансная диэлектрические проницаемости.....	76
3.6. Порядок выполнения лабораторной работы.....	79
Контрольные вопросы	80
ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №4. ИЗУЧЕНИЕ СОБСТВЕННОГО ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ДИЭЛЕКТРИКАХ	81
4.1. Общие положения.....	81
4.2. Собственное поглощение	83
4.2.1. Прямозонные и непрямозонные полупроводники и диэлектрики	84
4.2.2. Разрешенные прямые переходы	84
4.2.3. Разрешенные не прямые переходы	87
4.2.4. Форма края собственного поглощения.....	89
4.2.4.1. Форма края собственного поглощения в прямозонных твердых телах без учета экситонного поглощения.....	90
4.2.4.2. Форма края собственного поглощения в прямозонных твердых телах с учетом экситонного поглощения	91
4.2.4.3. Форма края собственного поглощения в непрямозонных твердых телах без учета экситонного поглощения	94
4.2.4.4. Форма края собственного поглощения в непрямозонных твердых телах с учетом экситонного поглощения.....	96
4.3. Порядок выполнения лабораторной работы.....	99
Контрольные вопросы	100

ИЗУЧЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ДВИЖЕНИЯ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Цели работы:

- определение скорости направленного движения носителей заряда в полупроводниках (\bar{V}) при различных плотностях тока j ;
- определение дрейфовой ($V_{др}$) и диффузионной ($V_{диф}$) компонент скорости;
- определение максимально возможной скорости движения носителей заряда в полупроводниках (\bar{V}_{max}) и соответствующей этой скорости величины критической напряженности электрического поля ($E_{кр}$);
- определение температурной зависимости подвижности носителей заряда.

Задание к выполнению экспериментальной и расчетной частей лабораторной работы: на основе регистрации времени движения носителей заряда через образец известных геометрических размеров

- определить предельно достигнутую в эксперименте и достижимую теоретически (при $j \rightarrow \infty$) скорость движения носителей;
- определить численное значение критической напряженности электрического поля $E_{кр}$ для изучаемого материала и сравнить это значение с теоретически рассчитанным; расхождениям дать объяснение;
- проверить выполнимость соотношения Эйнштейна $\left(\mu = \frac{eD}{kT}\right)$ и объяснить причины возможно возникшего несоответствия;
- зарегистрировать и объяснить зависимость подвижности носителей заряда от температуры.

1.1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

1.1.1. Взаимосвязь между временем движения носителей заряда и током в полупроводниках

Для установления общих закономерностей движения носителей заряда в полупроводниках обратимся к рис. 1.1.

На рисунке введены следующие обозначения: ИН – источник напряжения; R_p – регулировочный элемент, позволяющий изменять величину тока через изучаемый образец $R_{из}$; A – измеритель тока; $R_{из}$ – изучаемый образец правильных геометрических размеров (длина образца – L , площадь поперечного сечения – S); ВК – включатель.

Пусть в какой-то момент времени t_0 ранее разомкнутый включатель ВК замыкается. При этом в цепи возникает ток I , не меняющийся в дальнейшем во времени.

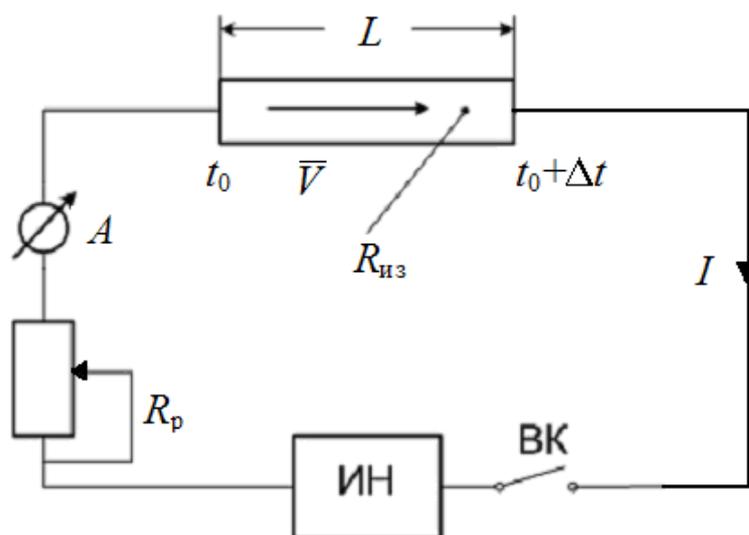


Рис. 1.1. Схема установки для определения времени движения носителей заряда через образец $R_{из}$

Для простоты будем полагать, что носителями заряда в образце $R_{из}$ являются только электроны. Тогда величина тока I может быть определена следующим образом:

$$I = en\bar{V}, \quad (1.1)$$

где e – заряд электрона ($e = -1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл); n – концентрация электронов, принимающих участие в переносе электрического заряда через $R_{из}$; \bar{V} – скорость направленного движения этих электронов.

По истечении отрезка времени Δt электроны, начавшие свое движение у одного конца элемента $R_{из}$, дойдут до его противоположного конца. Это произойдет в момент времени $t_0 + \Delta t$. Отрезок времени Δt является временем движения носителей заряда через твердое тело длиной L . Если концентрация электронов n постоянна, то при постоянной величине тока I будет постоянна и скорость направленного движения электронов \bar{V} :

$$\bar{V} = \frac{I}{en} = \text{const}. \quad (1.2)$$

В то же время величина \bar{V} может быть определена следующим образом:

$$\bar{V} = \frac{L}{\Delta t}. \quad (1.3)$$

Объединяя формулы (1.2) и (1.3), получим следующее:

$$\frac{I}{en} = \frac{L}{\Delta t}; \quad \Delta t = enL \cdot \left(\frac{1}{I}\right). \quad (1.4)$$

Таким образом, зависимость Δt от I обратно пропорциональная. В координатах $(\Delta t; 1/I)$ эта зависимость представляет собой прямую линию, выходящую из нуля (рис. 1.2).

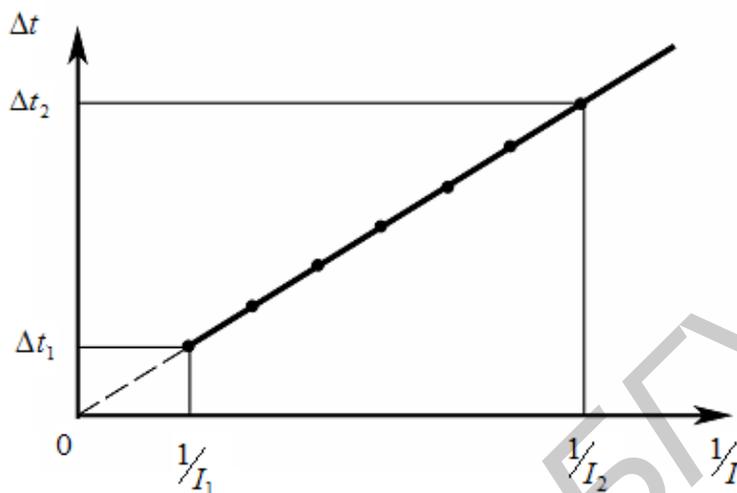


Рис. 1.2. Общая закономерность изменения времени движения носителей заряда при изменении тока

На этой зависимости отмечены два значения тока: I_1 и I_2 . Это те значения тока, в пределах которых экспериментально осуществляется регистрация соответствующей зависимости. Значения $1/I = 0$ недостижимы, поскольку при этом $I \rightarrow \infty$.

Рис. 1.2 и формула (1.4) были получены при допущении (по умолчанию), что на величину скорости направленного движения \bar{V} не распространяются ограничения. В случае вакуума ограничением на величину \bar{V} будет являться релятивистское ограничение $\bar{V} \ll c$, где c – скорость распространения света.

В случае твердых тел (металлов, проводников и диэлектриков) \bar{V} всегда на много порядков меньше c . Но и в этом случае \bar{V} имеет ограничения, связанные с механизмами движения носителей заряда в твердых телах, а также с понятием «*эффективная масса*» носителей заряда. Эти ограничения рассматриваются ниже. Следует отметить самое главное: для полупроводников зависимость согласно рис. 1.2 в целом сохраняется, но при $I \rightarrow \infty$ (т. е. $1/I \rightarrow 0$) получается *конечное* значение минимального времени движения носителей заряда (рис. 1.3).

При этом возможны два варианта.

Первый вариант (рис. 1.3, а) соответствует линейной во всем диапазоне токов $(1/I)$ зависимости. Экстраполяция линейного, полученного экспериментально, участка зависимости в область $1/I = 0$ даст достоверную информацию о величине Δt ($\Delta t = \Delta t_{10}$).

При этом, воспользовавшись формулой (1.3), легко определить достоверное значение максимальной скорости движения носителей заряда в твердом теле:

$$\bar{V}_{\max} = \frac{L}{\Delta t_{10}}. \quad (1.5)$$

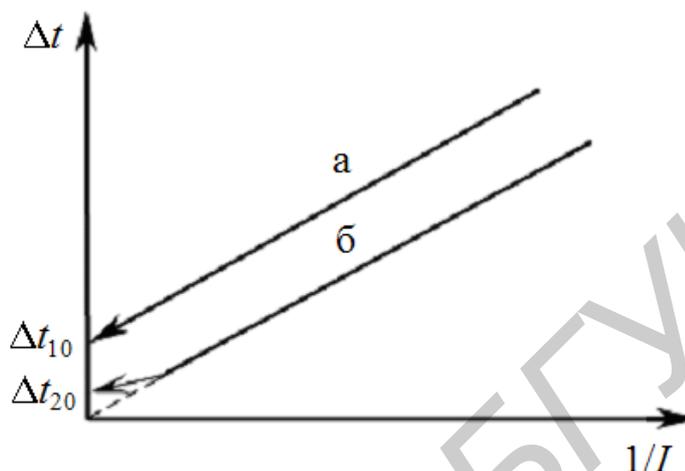


Рис. 1.3. Возможные экспериментально наблюдаемые зависимости Δt от $1/l$ для твердых тел

Для второго варианта (рис. 1.3, б) возможно отклонение характера зависимости ($\Delta t - 1/l$) от линейного. При этом экстраполяция в область $1/l \rightarrow 0$ затруднена и может дать ошибку в величине Δt_{20} , а следовательно, и в величине \bar{V}_{\max} .

Рассмотрим теперь причины, вызывающие отклонение характера зависимости ($\Delta t - 1/l$) от линейного, а также причины конечного значения \bar{V}_{\max} в полупроводниках (отличие от нуля времени Δt).

1.1.2. Диффузионная и дрейфовая скорости движения носителей заряда

Электрический ток обусловлен направленным движением носителей заряда.

Направленное движение носителей заряда может возникнуть в следующих основных случаях.

Во-первых, тогда, когда на носитель заряда (положительный или отрицательный) действует кулоновская сила. Иными словами, направленное движение носителей заряда стимулируется электрическим полем с напряженностью E . При этом величина дрейфовой плотности тока будет равна

$$j_{\text{др}} = \sum_i q_i n_i m_i E = \sum_i q_i n_i |\bar{V}_{\text{др}}|, \quad (1.6)$$

где q_i — численное значение заряда i -го вида; при этом знак заряда (положительный он или отрицательный) для определения величины $j_{\text{др}}$ учитывать не

надо; n_i и μ_i – концентрация и подвижность носителей заряда i -го вида.

О подвижности речь пойдет в подразд. 1.3 и 1.4. Здесь же отметим, что произведение $\mu_i E$ имеет размерность скорости и является дрейфовой скоростью движения, а соответствующий ток – дрейфовым током.

Во-вторых, если вдоль какого-либо направления в твердом теле существует градиент концентрации носителей заряда. В соответствии с законом Фика будет наблюдаться тенденция к исчезновению градиента концентрации носителей заряда. При этом начнется их движение из области с большей концентрацией в область с меньшей концентрацией. Это движение носителей заряда носит название диффузионного движения (или диффузионного потока). Переносимый при этом заряд обуславливает диффузионную компоненту электрического тока:

$$j_{\text{диф}} = \sum_i q_i D_i \frac{\partial n_i}{\partial x} = \sum_i q_i n_i \left(\frac{D_{ni}}{n_i} \frac{\partial n_i}{\partial x} \right) = \sum_i q_i n_i \bar{V}_{\text{диф}i}. \quad (1.7)$$

Величина, взятая в скобки, носит название диффузионной скорости i -го носителя заряда. В отличие от формулы (1.6) при суммировании диффузионных компонент тока необходимо учитывать знак как градиентов концентрации $\frac{\partial n_i}{\partial x}$, так и знак заряда i -х носителей. Эти величины могут быть как положительными, так и отрицательными. Так что в частном случае, даже если все компоненты формулы (1.7) будут отличны от нуля, сумма этих компонентов может оказаться равной нулю.

В микроэлектронике для обеспечения работы активных и пассивных элементов используются как дрейфовые, так и диффузионные токи носителей заряда.

В данной лабораторной работе акцент делается на изучении дрейфовых токов. Поэтому рассмотрим, что такое «подвижность носителей заряда», а также «критическая напряженность электрического поля».

1.1.3. Подвижность носителей заряда

Рассмотрение понятия «подвижность» проведем сначала макроскопически, а затем рассмотрим те микроскопические эффекты, которые определяют величину подвижности носителей заряда.

1.1.3.1. Макроскопический смысл подвижности носителей заряда

Для анализа обратимся к формуле (1.8), полученной из формулы (1.6) в предположении, что имеется только один вид носителей заряда:

$$j = \sigma_0 E = e \frac{en\tau}{m^*} E = en\mu E = en\bar{V}. \quad (1.8)$$

В этой формуле по-прежнему использовано общезначимое определение плотности тока: это количество электричества, пересекающее единицу площади за единицу времени.

Таким образом, макроскопический смысл подвижности носителей заряда соответствует следующей записи:

$$\mu = \frac{\bar{V}}{E}. \quad (1.9)$$

Подвижность – это скорость направленного движения носителей заряда под действием электрического поля единичной напряженности.

Используя формулу (9), получаем единицы измерения подвижности:

$$[\mu] = [\bar{V}] : [E] = \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}.$$

Скорость носителей, обусловленная действием внешнего электрического поля и численно равная μE , носит название дрейфовой скорости носителей заряда.

Примечание. При определении единиц измерения подвижности использованы единицы измерения длины – сантиметры (а не метры или не микрометры (микроны) и т. п.). Дело в том, что в микроэлектронике общепринято измерять подвижность с использованием именно сантиметров. Во всех справочниках, учебниках и технологической литературе численное значение подвижности приводится именно в этих единицах.

1.1.3.2. Зависимость подвижности носителей заряда

от напряженности электрического поля. Критическое поле

На рис. 1.4, а представлена экспериментально наблюдаемая зависимость подвижности носителей заряда μ от напряженности электрического поля E . Как видно из этого рисунка, зависимость имеет две характерные области.

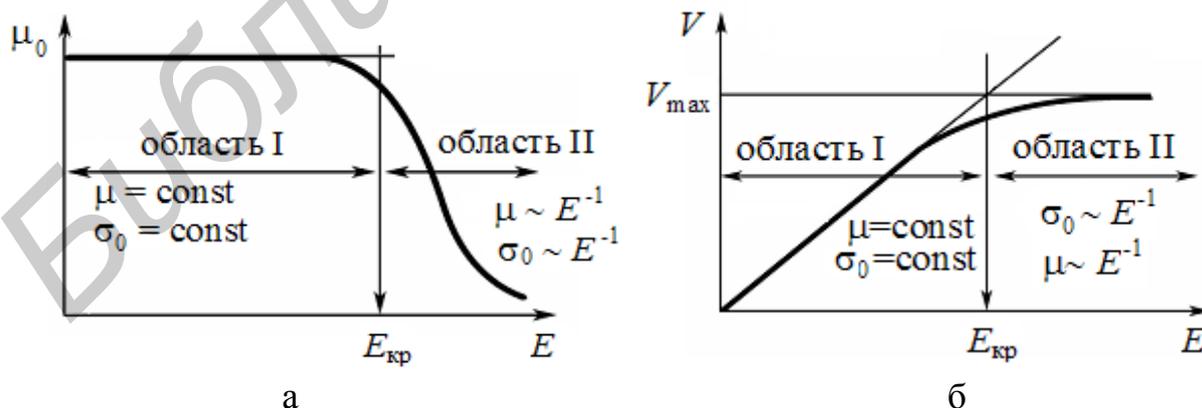


Рис. 1.4. Зависимость подвижности (а) и скорости движения носителей заряда (б) от напряженности электрического поля

Область I соответствует постоянству подвижности носителей заряда.

При этом если воспользоваться формулой (1.19), легко получить зависимость скорости движения носителей от величины E (рис. 1.4, б). Поскольку $\mu = \text{const}$, то $\bar{V} = \mu_0 E$, т. е. растет линейно с ростом E . Область I носит название либо области слабых полей, либо просто линейной области. В этой области постоянство подвижности в сочетании с постоянством концентрации носителей заряда (см. формулу (1.8)) обеспечивает постоянство проводимости (и удельного сопротивления) твердого тела. Здесь выполняется известный закон Ома.

Область II носит название либо области закритических полей, либо нелинейной области. Здесь (поскольку с ростом E сохраняется постоянное значение скорости движения носителей заряда) происходит уменьшение проводимости твердого тела (увеличение удельного сопротивления). При этом, как и в области I, концентрация носителей заряда остается неизменной. Закон Ома здесь не выполняется.

Напряженность поля, разделяющая эти две области, носит название *критической напряженности* электрического поля $E_{\text{кр}}$.

Следует подчеркнуть, что поле $E_{\text{кр}}$ не имеет ни малейшего отношения к электрической прочности твердых тел $E_{\text{проб}}$ ни качественно, ни количественно.

Количественно $E_{\text{кр}} \ll E_{\text{проб}}$ (примерно на 1 – 2 порядка). $E_{\text{кр}}$ и $E_{\text{проб}}$ описывают совершенно различные физические процессы. При электрических полях $E \geq E_{\text{кр}}$ проводимость материала уменьшается, в то время как при $E \geq E_{\text{проб}}$ – возрастает.

Для оценки величины поля $E_{\text{кр}}$ можно пользоваться критерием равенства скорости броуновского движения носителей заряда и их дрейфовой скорости:

$$\mu E_{\text{кр}} = \sqrt{\frac{3kT}{m^*}} \Rightarrow E_{\text{кр}} = \frac{1}{\mu} \sqrt{\frac{3kT}{m^*}}. \quad (1.10)$$

При полях $E < E_{\text{кр}}$ внешнее электрическое поле не изменяет распределения носителей заряда по импульсу и энергии: скорость броуновского движения при этом остается намного больше скорости направленного движения, т. е. дрейфовой скорости (область I на рис. 1.4). При $E > E_{\text{кр}}$ ситуация обратная: дрейфовая скорость превышает броуновскую, тем самым изменяется распределение носителей заряда как по импульсу, так и по энергии.

Расчеты и практика показывают, что $E_{\text{кр}} \sim 10^4$ В/см, в то время как $E_{\text{проб}} \sim 10^6$ В/см.

1.1.3.3. Общие особенности рассеяния носителей заряда в полупроводниках

При изучении раздела «Электронная теория проводимости» была получена следующая формула для проводимости:

$$\sigma_0 = \frac{e^2 n \tau}{m_e}, \quad (1.11)$$

где e – заряд, n – концентрация, m_e – масса и τ – время релаксации свободных электронов. При этом электроны были единственным видом носителей заряда.

Формула (1.11) применима не только для металлов. Она обладает универсальностью и применима для любых твердых тел. Проводники, полупроводники и диэлектрики отличаются лишь численным значением микроскопических величин, стоящих в формуле (1.11) справа.

При этом получается различное численное значение проводимости σ_0 , позволяющее относить конкретный материал к классу проводников, полупроводников или диэлектриков.

В общем случае в качестве носителей заряда могут выступать не только свободные электроны (как это было в модели металлов Друде и Зоммерфельда), но и другие частицы. Эти частицы обладают индивидуальными значениями q_i , n_i , m_i и τ_i . Так, при изучении раздела «Физика диэлектриков» отмечалось, что проводимость диэлектриков обусловлена не только электронами и дырками, но и ионами различного вида.

С использованием принципа суперпозиции при описании движения частиц, формула (1.11) в общем случае для любого твердого тела может быть представлена следующим образом:

$$\sigma_0 = \sum_i \frac{q_i^2 n_i \tau_i}{m_i^*} = \sum_i q_i n_i \frac{q_i \tau_i}{m_i^*} = \sum_i q_i n_i \mu_i. \quad (1.12)$$

В этой формуле значок i означает рассмотрение конкретного вида носителей заряда: электронов, дырок, того или иного вида ионов; q_i – это величина заряда, переносимого частицей вида i ; n_i – концентрация, τ_i – время релаксации, m_i^* – эффективная масса носителей заряда. Величина μ_i , как уже отмечалось выше (см. формулу (1.6)) – это подвижность носителей заряда.

Проанализируем физический смысл подвижности более подробно.

Напомним, что в разделе «Электронная теория проводимости» время релаксации τ означало среднее время между двумя соударениями носителя заряда (электрона) с положительными неподвижными ионами. При этом уже первое столкновение заканчивалось полной потерей электроном скорости, возникшей под действием электрического поля E . Других столкновений, ограничивающих скорость движения электронов, не рассматривалось.

При детальном изучении процесса электропроводности твердых тел следует анализировать более сложную картину: *частичную* потерю скорости носителем заряда при отдельном столкновении.

Для полупроводников с ковалентным характером связей атомов кристаллической решетки (германий, кремний) существуют два основных меха-

низма столкновений, в процессе реализации которых электроны и дырки, теряя часть своей скорости, стремятся к равновесному распределению по скоростям (и энергиям).

Первый механизм – это рассеяние на тепловых колебаниях кристаллической решетки. Часто, рассматривая этот механизм, говорят о *рассеянии на акустических фононах* кристаллической решетки. Акустические фононы – это один из типов дефектов кристаллической решетки твердых тел.

Второй механизм – это *рассеяние на ионизованных примесях*, введенных в твердое тело с целью, например, изменения концентрации носителей заряда.

Для полупроводников с ионным характером связей атомов кристаллической решетки (GaAs) имеется еще один механизм рассеяния: *рассеяние на оптических фононах* кристаллической решетки.

Кроме этого, имеются специфические механизмы рассеяния, в некоторых случаях исключительно сильно влияющие на величину подвижности.

Прежде всего, это *внутридолинное рассеяние*, при котором носители заряда (электроны и дырки) рассеиваются внутри эллипсоида энергий и при этом взаимодействуют только с длинноволновыми фотонами.

Далее следует упомянуть *междолинное рассеяние*, когда носители заряда рассеиваются из одного минимума энергий внутри разрешенной зоны в другой и при этом взаимодействуют с фононами высокой энергии.

Важным принципом при расчетах различных физических величин является принцип суперпозиции. Применительно к подвижности он звучит следующим образом: каждый механизм рассеяния осуществляется независимо друг от друга. При этом результирующая подвижность определяется линейной комбинацией частных подвижностей, обусловленных конкретным механизмом рассеяния:

$$\mu^{-1} = \sum_k \mu_k^{-1} \quad \text{или} \quad \mu = \left(\sum_k \mu_k^{-1} \right)^{-1}. \quad (1.13)$$

Здесь индекс k нумерует конкретный механизм рассеяния.

Общие закономерности, определяющие большее или меньшее значение μ , видны из анализа формулы (1.8) или (1.12):

- с увеличением заряда, переносимого одним носителем (q_i), подвижность возрастает;
- с увеличением времени релаксации носителя заряда (τ_i) подвижность возрастает;
- с увеличением эффективной массы носителя заряда (m_i^*) его подвижность убывает.

Эти три закономерности очень важны для анализа характера движения носителей заряда в пределах разрешенных одно- или многодолинных зон, ко-

где m_i^* может меняться:

- от $+\infty$ до $-\infty$ скачком;
- от конкретного значения до $+\infty$ или $-\infty$ плавно;
- от одного квазиустойчивого значения до другого.

Еще одной специфической особенностью рассеяния носителей заряда в полупроводниках является то, что (в отличие от металлов) носители заряда в единичном акте рассеяния не полностью теряют свою скорость направленного движения. Для полной потери этой скорости носитель должен в общем случае несколько раз повторить акт рассеяния. Обозначим это число актов буквой N .

Если среднее расстояние между точками кристаллической решетки, в которых осуществляются отдельные акты рассеяния, обозначить буквой l , то путь, который пройдет носитель заряда до полной остановки, составит

$$L = lN = V\tau, \quad (1.14)$$

где V – средняя скорость движения носителя заряда, а τ – время его релаксации, т. е. то время, в течение которого носитель заряда полностью потеряет скорость \bar{V} . Расстояние L называется также средней транспортной длиной свободного пробега, а N^{-1} – эффективностью столкновений.

Вид формул, определяющих величину подвижности для невырожденного и вырожденного газа носителей заряда, практически идентичен:

$$\text{– для невырожденного газа} \quad \mu_i = \frac{q_i}{m_i^*} \cdot \frac{l_i N_i}{V_i}, \quad (1.15)$$

$$\text{– для вырожденного газа} \quad \mu_{if} = \frac{q_i}{m_i^*} \cdot \frac{l_{if} N_{if}}{V_{if}}. \quad (1.16)$$

В формуле (1.16) появился индекс f , который означает введение соответствующих фермиевских параметров.

Ниже проведен анализ зависимости подвижности носителей заряда от температуры и концентрации ионизованных примесей для двух важнейших механизмов рассеяния: рассеяния на тепловых колебаниях кристаллической решетки и рассеяния на ионизованных примесях.

1.1.3.4. Подвижность носителей заряда μ_f , обусловленная тепловыми колебаниями кристаллической решетки

Для ответа на вопрос о зависимости μ_f от температуры при рассеянии на акустических фононах рассмотрим зависимость от температуры параметров l , N и V , входящих в формулы (1.15) и (1.16).

Расстояние l для вырожденного и невырожденного газа носителей заряда должно быть одинаковым, поскольку оно определяется только концен-

трацией акустических фононов n_ϕ : $l \sim n_\phi^{-1}$, что очевидно.

Поскольку большинство изделий микроэлектроники функционирует при температурах больших, чем характеристическая температура Дебая, то $n_\phi \sim T$; при этом

$$l_\phi \sim T^{-1}. \quad (1.17)$$

Для оценки величин N_i и N_{if} учтем, что при температурах, больших температуры Дебая, импульс акустических фононов примерно равен импульсу носителей заряда. В соответствии с законами классической механики при столкновении двух частиц (в данном случае носителя заряда и фонона) одна из них уже при первом же столкновении может полностью потерять свой импульс:

$$N_i = N_{if} \sim 1. \quad (1.18)$$

Для невырожденного газа носителей заряда

$$V_i \sim \sqrt{T}, \quad (1.19)$$

а для вырожденного газа

$$V_{if} = \text{const} \quad (1.20)$$

и от температуры практически не зависит.

Объединяя в соответствии с формулами (1.15) и (1.16) соответствующие зависимости от температуры $l_\phi = F(T)$, $N_\phi = F(T)$, и $V_\phi = F(T)$, получаем для невырожденного газа носителей заряда следующую формулу:

$$\mu_\phi \sim T^{-3/2} \quad (1.21)$$

и для вырожденного газа:

$$\mu_{\phi f} \sim T^{-1}. \quad (1.22)$$

Конечно, проведенный в данном разделе упрощенный анализ не дает возможности точно рассчитать значение μ_ϕ . Однако он приводит к правильному качественному результату.

Более сложный и детальный анализ, учитывающий тепловые и другие свойства полупроводников, для случая невырожденного газа носителей заряда дает следующую формулу для μ_ϕ :

$$\mu_{\phi i} = \frac{\sqrt{8\pi} q_i h^4 C_{11}}{3 E_s m_i^{*5/2} (kT)^{3/2}} \sim m_i^{*-2,5} T^{-3/2}.$$

Этот закон носит название «закона трех вторых».

1.1.3.5. Подвижность носителей заряда μ_i , обусловленная рассеянием на ионизованных примесях

Основная причина, вызывающая рассеяние носителей заряда при рассматриваемом механизме, – это кулоновское взаимодействие носителей заряда и заряженного центра в кристаллической решетке полупроводника.

Вопросы рассеяния и торможения движущихся заряженных частиц другими, неподвижными частицами анализировал Э. Резерфорд (1871–1937) при разработке модели и теории рассеяния альфа-частиц ядрами элементов. Основные положения этой теории верны и для интересующего нас случая.

Так, количество столкновений, необходимых для полного рассеяния носителя заряда, определяется следующей формулой:

$$N_i = V_i^4 \left(\frac{\epsilon_r}{ze} \right)^2 m_i^*, \quad (1.23)$$

где ϵ_r – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника, а ze – величина заряда ионизованной примеси (центра рассеяния).

Для невырожденного газа носителей заряда скорость $V_i = \sqrt{\frac{3kT}{m_i^*}}$. Тогда

$$N_i \sim T^2 \text{ и } \mu_{if} \sim T^{3/2}. \quad (1.24)$$

Для вырожденного газа носителей заряда скорость $V_{if} = \text{const}$ и от температуры не зависит. При этом

$$\mu_{if} = \text{const} \quad (1.25)$$

и также от температуры не зависит.

Длина l_i и l_{if} от температуры в первом приближении не зависит и определяется в основном концентрацией ионизированной примеси (в области истощения последней).

Примечание. Случаи, когда l_i и l_{if} являются температурно-зависимыми величинами, а также случаи зависимости величины ze , входящей в формулу (1.23), предлагается проанализировать самостоятельно.

В области истощения примеси для практически важных случаев $N_d \approx N_d^+$; $N_a \approx N_a^+$. При этом $(ze)^2 = e^2$ и от температуры не зависит. В этом случае

$$l_i = l_{if} \sim \frac{1}{N_d} \left(\frac{1}{N_a} \right) \neq F(T). \quad (1.26)$$

Объединяя формулы (1.23), (1.24) и (1.26), а также (1.23), (1.25) и (1.26), получаем для невырожденного газа носителей заряда

$$\mu_{iI} \sim m_i^* T^{3/2} (N^*)^{-1}, \quad (1.27)$$

а для вырожденного газа

$$\mu_{iI} \sim m_i^* (N^*)^{-1}. \quad (1.28)$$

В этих формулах N^* означает концентрацию доноров N_d для случая n -полупроводников, концентрацию акцепторов N_a для p -полупроводников и $(N_d + N_a)$ для полупроводников, содержащих донорную и акцепторную примеси одновременно.

Закон (1.27) также носит название «закона трех вторых».

Квантово-механическое рассмотрение задачи рассеяния носителей заряда на ионизованных примесях дает следующий результат:

$$\mu_{iI} = \frac{8 \cdot \sqrt{2} \varepsilon_r^2 (kT)^{3/2}}{\pi^{3/2} e^3 m_i^* N_I} \left\{ \ln \left[1 + \left(\frac{3\varepsilon_r}{e^2} \right)^2 \frac{(kT)}{N_I^{2/3}} \right] \right\}^{-1}, \quad (1.29)$$

где N_I – концентрация ионизованной примеси. Эта формула хорошо описывает поведение μ_i в области, далекой от вырождения полупроводника (при N_d и N_a порядка 10^{15} см^{-3}). При бóльших концентрациях примеси формула (1.29) нуждается в коррекции.

1.1.3.6. Практические примеры и выводы

В соответствии с принципом суперпозиции (формула (1.13)) теперь можно записать для невырожденного газа носителей заряда:

$$\mu_k = \left(\frac{1}{\mu_{k\Phi}} + \frac{1}{\mu_{kI}} \right)^{-1}. \quad (1.30)$$

Подставляя сюда формулы для $\mu_{k\Phi}$ и μ_{kI} , можно получить соответствующие выражения для зависимости μ_k от температуры и концентрации примеси. Аналогичную операцию можно осуществить и для вырожденного газа.

Для инженерного анализа в формулу (1.30) подставляют упрощенные выражения для определения $\mu_{k\Phi}$ и μ_{kI} : (1.21) и (1.27) для невырожденного, (1.27) и (1.28) – для вырожденного газа. После этого строят графические зависимости $\mu = F(T)$ при различных температурах (см. рис. 1.5 и 1.6).

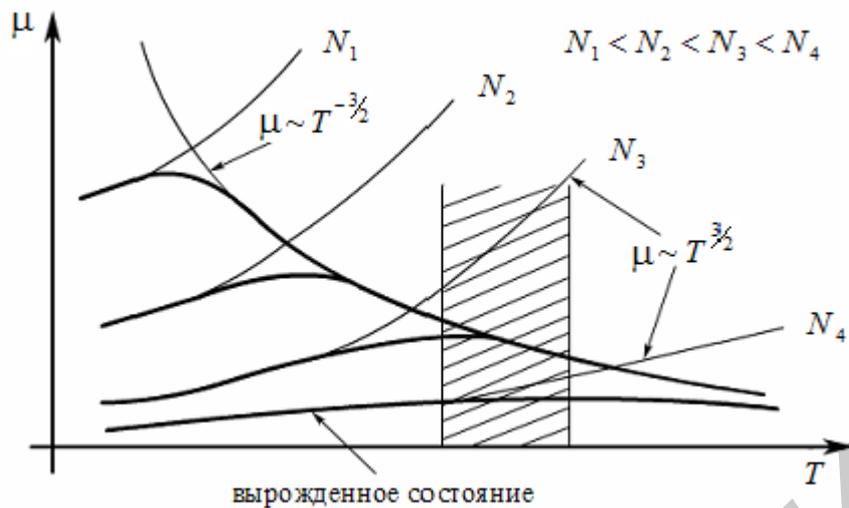


Рис. 1.5. Зависимость подвижности носителей заряда от температуры при различной концентрации примеси

Как видно из рис. 1.5, зависимость подвижности носителей заряда от температуры носит экстремальный характер. При этом с увеличением концентрации примеси численное значение μ уменьшается во всем диапазоне температур. Максимум в значении μ становится все меньше, вплоть до его полного исчезновения у сильнолегированного полупроводника. Положение максимума μ на оси температур с ростом N сдвигается в область более высоких температур. Чем больше концентрация примеси, тем меньше μ зависит от температуры.

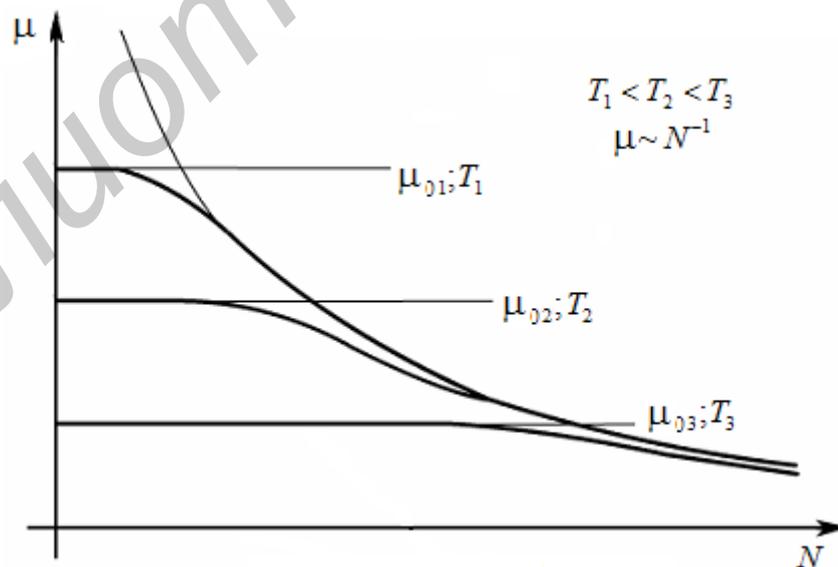


Рис. 1.6. Зависимость подвижности носителей заряда от концентрации примеси при различной температуре

На рис. 1.5 применительно к кремнию штриховкой отмечен диапазон

температур 300 ± 100 К, являющийся приблизительно рабочим диапазоном изделий микроэлектроники. Видно, что при увеличении температуры независимо от концентрации примеси величина подвижности носителей заряда уменьшается, оставаясь для вырожденного полупроводника практически неизменной.

Из анализа рис. 1.6 можно сделать следующие выводы.

Независимо от температуры при увеличении концентрации примеси подвижность носителей заряда уменьшается. При фиксированной концентрации примеси подвижность возрастает с уменьшением температуры. Все зависимости носят неэкстремальный характер.

В чистых полупроводниках ($N_I = 0$) подвижность имеет максимальное значение, поскольку рассеяние носителей заряда осуществляется не двумя, а одним механизмом: рассеянием на акустических фоновых.

На рис. 1.6 эти значения обозначены как μ_0 . В справочной литературе по электрофизическим свойствам твердых тел приводятся именно эти значения подвижности и, если не оговорено специально, то для температуры $T = 300$ К (табл. 1.1).

Таблица 1.1

Подвижность электронов и дырок в легированных германии, кремнии и арсениде галлия

Подвижность носителей заряда при 300 К, μ_0 , $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$	Ge	Si	GaAs
для электронов (μ_{0n})	3900	1500	8500
для дырок (μ_{0p})	1800	600	400

Удобными для практического использования являются графически представленные зависимости подвижности носителей заряда от концентрации примеси (рис. 1.7).

Примечание. При осуществлении точных количественных расчетов или постановке ответственных экспериментов следует учесть, что эффективность однозарядных доноров и акцепторов в отношении рассеяния носителей заряда несколько различна. Изменяется и численное значение N_I в формуле (1.29) с изменением концентрации примеси N_d и N_a (на рис. 1.7 – горизонтальная ось). При этом для n -полупроводника и для p -полупроводника подвижность электронов будет отличаться друг от друга.

В качестве примера приведем следующие данные. При 300 К подвижность электронов μ_n в n -германии при $N_d = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ составляет $3500 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, а в p -германии при $N_a = 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ $\mu_n = 2800 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, т. е. меньше в 1,25 раза.

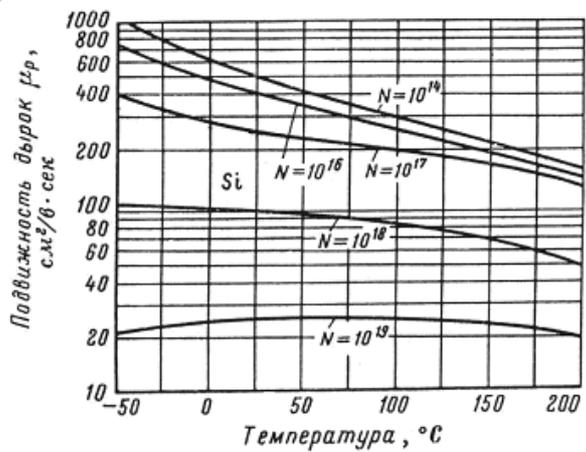
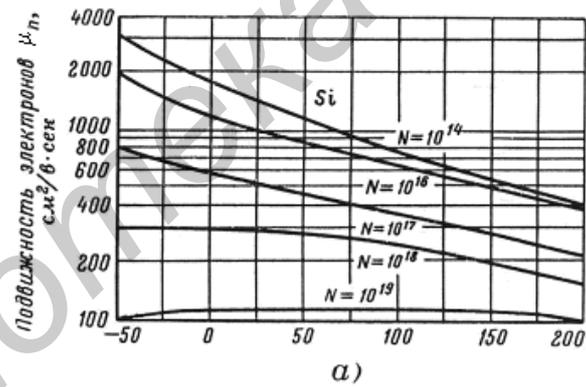
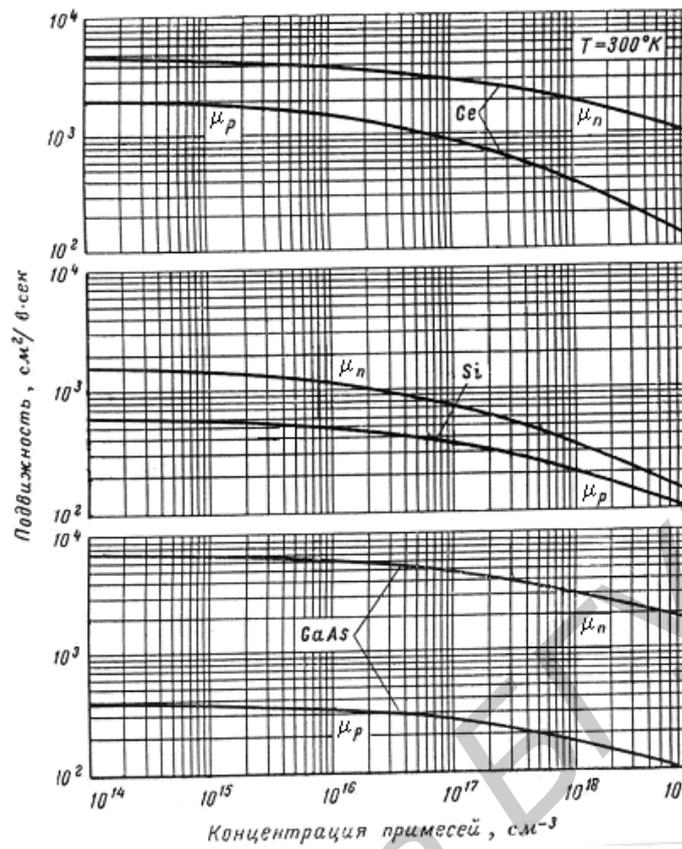


Рис. 1.7. Зависимость подвижностей электронов и дырок в кремнии, германии и арсениде галлия от температуры и концентрации примесей в слабых электрических полях (экспериментальные результаты)

1.2. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Перед проведением эксперимента необходимо узнать у преподавателя тип электропроводимости изучаемого материала. Это обусловлено тем, что в работе изучается скорость движения *неосновных* носителей заряда: электронов – в *p*-типе материала и дырок – в *n*-типе материала.

Путем нажатия клавиши на лицевой панели установки выбирается тип изучаемого материала. При этом к исследуемому образцу осуществляется правильное (по полярности) подключение всех приборов, входящих в состав лабораторной установки.

Рассмотрим, как определить величину времени Δt .

1. Подключив исследуемый образец к клеммам «объект», нужно с помощью ручек регулировки тока \bar{I}_Ω «грубо», «плавно» и «точно» установить нужную величину этого тока. Затем установить требуемую величину напряжения U_K .

Осуществляя плавное изменение величин номиналов элементов R_x и C_x , добиваются минимальных показаний индикатора баланса (ИБ). В том случае, если это не удастся, осуществляют дискретное изменение величины номинала резистора R_K путем соответствующих коммутаций переключателем «Диапазон», после чего опять пытаются осуществить балансировку моста.

Величину номинала элемента R_K определяют по таблице, прилагаемой к лабораторной установке. Величина номинала элемента R_x определяется путем подключения к разъему «Изм. R_x » внешнего измерительного прибора *после отключения исследуемого образца* от установки.

Регулирующий элемент конденсатора C_x отградуирован в градусах. Сняв соответствующий отсчет в градусах, по калибровочной кривой (придается к лабораторной установке) определяется величина C'_x . Прибавив к этим значениям 80 пФ, получают то значение C_x , которое и используется в расчетах величины Δt по формуле (1.31).

Как следует из рис. 1.2, полученное значение времени Δt будет отвечать только одной из точек графика $\Delta t = F(1/\bar{I}_\Omega)$. Для получения полного графика необходимо установить несколько значений тока \bar{I}_Ω и при этом определить соответствующие величины Δt . Следует помнить, что значения (частные) $1/\bar{I}_\Omega$ должны отстоять друг от друга на примерно равные отрезки (шаг аргумента). Это облегчит последующую экстраполяцию графика в область $1/\bar{I}_\Omega = 0$, а также оценку в определении погрешности величин Δt_0 (рис. 1.3), \bar{V}_{\max} формула (1.5), достоверности последующих расчетов и заключений.

Таблица экспериментальных результатов

1	\bar{I}_Ω , мкА	\bar{I}_{\min}					\bar{I}_{\max}
2	$1/\bar{I}_\Omega$, мкА ⁻¹	↓	↑	↑	↑	↑	↓
3	R_K , Ом						
4	C_x , дел						
5	C_x , пФ						
6	C_x , пФ						
7	$\Delta t'$, с						
8	Δt , с						
9	V , м/с						

2. Для систематизации результатов измерений и расчетов целесообразно использовать табл. 1.2:

Для каждого из исследуемых образцов нужно выбрать тот диапазон тока \bar{I}_Ω , в пределах которого нужно будет осуществлять экспериментальные исследования: $\bar{I}_{\min} - \bar{I}_{\max}$. Эти крайние значения тока записаны условно в первой строке табл. 1.2.

3. Поскольку требуется построить график, аналогичный рис. 1.2, то на горизонтальной оси графика нужно будет откладывать величины, обратные току \bar{I}_Ω . Для записи этих значений аргумента служит вторая строка табл. 1.2. Крайние значения $1/\bar{I}_\Omega$ получаются на основе уже выбранных крайних значений тока \bar{I}_{\min} и \bar{I}_{\max} , что указано в таблице стрелками, направленными сверху вниз между первой и второй строками. Затем осуществляется разбиение интервала $(1/\bar{I}_{\min} - 1/\bar{I}_{\max})$ на 8 – 10 интервалов с учетом замечаний настоящего раздела. Затем осуществляют расчет токов $\bar{I}_2, \bar{I}_3, \bar{I}_4$, что обозначено в таблице стрелками, направленными по вертикали от второй строки к первой.

Полученные таким образом токи \bar{I}_Ω и нужно в дальнейшем использовать для проведения экспериментальных исследований.

4. Установив заданное преподавателем значение U_K , начинают заполнять столбцы табл. 1.2 по вертикали сверху вниз. Данные седьмой строки табл. 1.2 получатся путем умножения данных третьей строки на данные шестой строки. Переход от седьмой строки к восьмой осуществляется по формуле

$$\Delta t_0 = \Delta t' + \kappa R_K, \quad (1.31)$$

где величина $\kappa = 3,65 \cdot 10^{-11}$ с/Ом, а значение R_{κ} берется из третьей строки табл. 1.2.

После заполнения восьмой строки таблицы, используя формулу (1.3), можно определить величины соответствующих скоростей \bar{V} . Для этого нужно у преподавателя получить информацию о величине L .

5. Экспериментальная часть работы считается выполненной после того, как на основе данных таблицы экспериментальных данных (вторая и восьмая строки табл. 1.2) будет получен график, аналогичный рис. 1.3. Точки графика, «выскочившие» за пределы построенной прямой, подлежат перепроверке путем повторения эксперимента при соответствующем токе \bar{I}_{Σ} .

6. Дальнейшее выполнение задания к лабораторной работе можно осуществить вне лаборатории «Физика твердого тела». При этом необходимо ознакомиться с теоретической частью работы (разд. 2). При необходимости следует самостоятельно и углубленно изучить вопросы, изложенные в настоящем методическом пособии конспективно, с использованием дополнительной литературы.

Поиск формул, необходимых для расчетов критической напряженности поля $E_{\text{кр}}$, условия применимости соотношения Эйнштейна, теоретического определения максимальной скорости движения носителей заряда осуществляется самостоятельно.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Каков физический смысл понятий: дрейфовая и диффузионная скорости движения носителей заряда?

2. Каковы макроскопический и микроскопический смыслы понятия подвижность носителей заряда?

3. В чем заключается сущность принципа суперпозиции при определении подвижности носителей заряда?

4. Почему скорость движения носителей заряда в твердых телах – величина ограниченная?

5. По каким причинам при больших электрических полях подвижность носителей заряда уменьшается?

6. Как определяется величина критической напряженности электрического поля?

7. При каких условиях выполняется соотношение Эйнштейна $\mu = \frac{eD}{kT}$?

8. Как выглядит теоретическая зависимость подвижности носителей заряда от температуры?

ИЗУЧЕНИЕ ПРОФИЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСИ И КОНТАКТНОЙ РАЗНИЦЫ ПОТЕНЦИАЛОВ В *p-n*-ПЕРЕХОДАХ

Цели работы:

- ознакомление с методами регистрации вольт-емкостных характеристик *p-n*-переходов и контактов «металл-полупроводник»;
- определение профиля распределения мелких и глубоких примесных центров в низколегированных областях резких *p-n*-переходов и контактов «металл-полупроводник»;
- определение контактной разности потенциала в резких *p-n*-переходах и контактах «металл – полупроводник»;
- освоение методик графического и аналитического вариантов определения контактной разности потенциалов.

Задание к выполнению экспериментальной и расчетной частей лабораторной работы: на основе регистрации вольт-емкостных характеристик предложенной структуры

- определить, имеются ли в изучаемой структуре глубокие примесные уровни;
- установить характер распределения примесных мелких уровней в полупроводнике;
- определить профиль распределения концентрации мелких примесных уровней в полупроводнике;
- определить графически и аналитически величину контактной разности потенциалов в предложенной структуре.

2.1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ БАЗОВЫЕ СВЕДЕНИЯ О БАРЬЕРНОЙ И ДИФфуЗИОННОЙ ЕМКОСТЯХ

2.1.1. Барьерная емкость

Электрический переход между двумя областями полупроводника, одна из которых имеет электропроводность *n*-типа, а другая – *p*-типа, называется электронно-дырочным переходом (или *p-n*-переходом) (рис. 2.1,а). В *p-n*-переходе на границе раздела *p*- и *n*-областей существует градиент концентрации носителей заряда. В *n*-области электронов значительно больше, чем в *p*-области, и, наоборот, в *p*-области дырок больше, чем в *n*-области. Вследствие наличия градиентов концентрации электроны и дырки диффундируют в *p*- и *n*-области соответственно. Область перехода при этом обедняется основными носителями заряда (рис. 2.1, б). При уходе электронов из *n*-области в ней остается некомпенсированный положительный заряд ионов донорной примеси, а при уходе дырок из *p*-области в ней образуется некомпенсирован-

ный отрицательный заряд ионов акцепторной примеси (рис. 2.1, в). Вследствие появления uncompensated volume charges in the p - n transition region, an internal electric field is formed, under the action of which drift flows of electrons and holes, in the opposite direction to the diffusion flows, arise. In equilibrium, the diffusion and drift flows of charge carriers balance each other and the total current through the p - n transition is zero.

При подаче на n -область положительного, а на p -область отрицательного напряжения (так называемое обратное смещение перехода) основные носители в обеих областях будут оттягиваться электрическим полем от границы раздела, создавая тем самым дополнительные uncompensated charges of impurity ions due to the expansion of depletion regions by the main charge carriers (рис. 2.1, в).

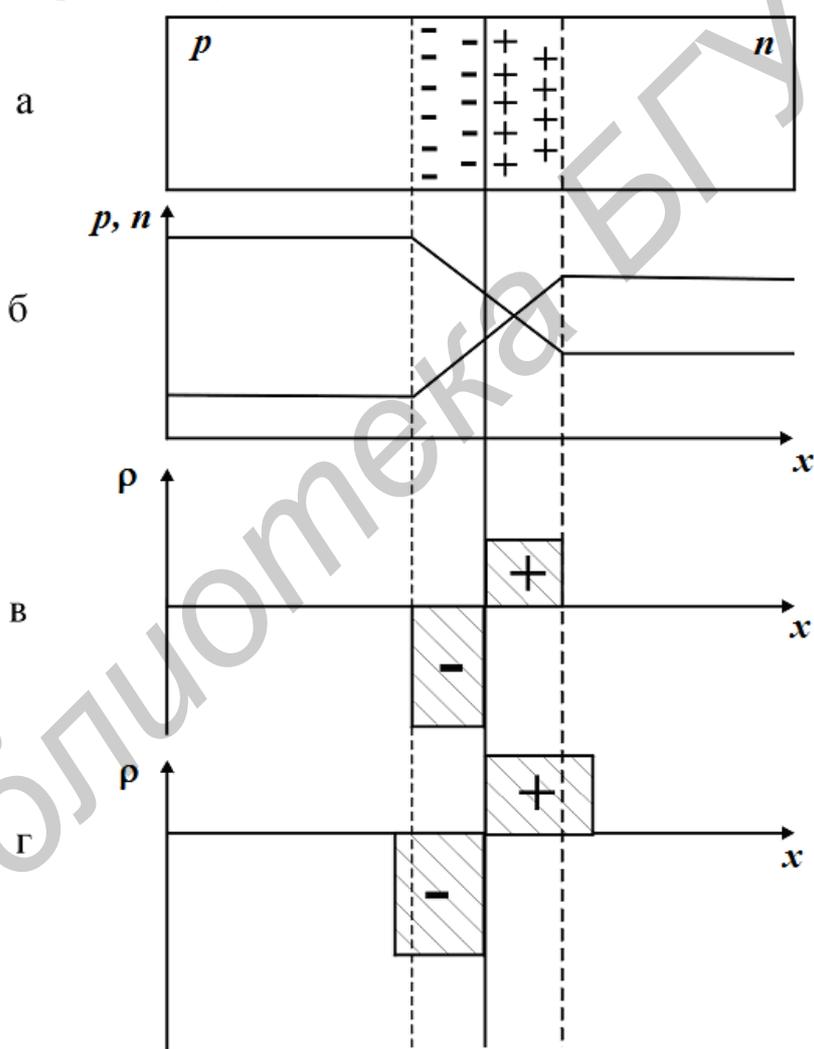


Рис. 2.1. Распределение свободных и связанных зарядов в p - n -переходе: а – p - n -переход; б – распределение концентраций свободных носителей заряда; в – распределение плотности объемного заряда; г – распределение плотности объемного заряда при подаче обратного смещения

Таким образом, приложенное к p - n -переходу напряжение в обратном направлении приводит к накоплению дополнительных неподвижных зарядов вблизи границы раздела p - и n -областей. Поэтому обратно смещенный переход обладает электрической емкостью. Далее будет показано (подраздел 2.2), что величины зарядов некомпенсированных примесей вблизи p - n -перехода зависят от напряжения нелинейно.

По этой причине обратно смещенный p - n -переход нельзя охарактеризовать единой численной величиной емкости

$$C = \frac{Q}{U},$$

как это возможно для обычных конденсаторов. В этой связи вводится понятие дифференциальной емкости:

$$C_6 = \frac{dQ}{dU}. \quad (2.1)$$

Дифференциальная емкость характеризует изменение заряда области пространственного заряда с изменением напряжения при каждой фиксированной величине обратного смещения. Емкость, связанная с накоплением зарядов некомпенсированных примесей (доноров и акцепторов) вблизи p - n -перехода, носит название барьерной. Термин «барьерная» отражает тот факт, что указанные заряды обуславливают наличие энергетического барьера между p - и n -областями перехода при обратном смещении.

2.1.1.1. Зависимость барьерной емкости от напряжения

Для вывода аналитического выражения зависимости C_6 от величины приложенного напряжения и концентрации примесей получим сначала распределение электрического потенциала φ в области p - n -перехода. Распределение потенциала находим из уравнения Пуассона:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{\rho}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \frac{1}{2}. \quad (2.2)$$

Получить в общем виде соотношение, дающее связь между указанными величинами, весьма сложно. Поэтому рассмотрим два частных случая.

2.1.1.1.1. Резкий p - n -переход

Резким p - n -переходом (часто его называют ступенчатым) называется p - n -переход, для которого толщина области изменения концентрации примеси значительно меньше области пространственного заряда. Уравнение Пуассона (2.2) при этом принимает вид

$$\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} = -\frac{qN_d}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \quad \text{при } x_n > x > 0 ; \quad (2.3)$$

$$\frac{d^2\varphi_2}{dx^2} = -\frac{qN_a}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \quad \text{при } 0 > x > -x_p . \quad (2.4)$$

Граничные условия в соответствии с рис. 2.1 записываются следующим образом:

$$\varphi_1 = 0 \quad \text{и} \quad \frac{d\varphi_1}{dx} = 0 \quad \text{при } x = x_n ; \quad (2.5)$$

$$\varphi = \varphi_k \quad \text{и} \quad \frac{d\varphi_2}{dx} = 0 \quad \text{при } x = x_p . \quad (2.6)$$

Решаем уравнение (2.3) и (2.4) совместно с граничными условиями (2.5) и (2.6), получаем

$$\varphi_k = \left(\frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \right) \left(\frac{N_a N_d}{N_a + N_d} \right) d^2 , \quad (2.7a)$$

откуда

$$d = \left[\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r}{q} \left(\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right) \varphi_k \right]^{1/2} . \quad (2.8a)$$

При приложении внешнего напряжения в обратном направлении знак внешней ЭДС совпадает со знаком φ_k и потенциальный барьер увеличивается. Следовательно,

$$U + \varphi_k = \left(\frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \right) \left(\frac{N_a N_d}{N_a + N_d} \right) d^2 , \quad (2.7b)$$

$$d = \left[\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r}{q} \left(\frac{N_a + N_d}{N_a N_d} \right) (\varphi_k + U) \right]^{1/2} . \quad (2.8b)$$

Изменение величин некомпенсированных зарядов примесей в p - и n -областях p - n -перехода происходит вследствие изменения толщины областей пространственного заряда. Это означает, что дифференциальная емкость обратно смещенного p - n -перехода $C_6 = dQ/dU$ равна полной емкости конденсатора с расстоянием между обкладками, соответствующим величине $d = x_n + x_p$ при данном смещении U .

Таким образом, барьерная емкость p - n -перехода

$$C_{\bar{\sigma}} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r S}{d}, \quad (2.9)$$

где d имеет вид (2.8).

Если $N_a \gg N_d$, то из (2.7, а) и (2.8, а) следует

$$C_{\bar{\sigma}} = S \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{2} \cdot \frac{qN_d}{\varphi_k + U} \right)^{1/2} \quad (2.10)$$

или

$$C_{\bar{\sigma}} = C_{\bar{\sigma}0} \left(1 + \frac{U}{\varphi_k} \right)^{-1/2}, \quad (2.11)$$

где

$$C_{\bar{\sigma}0} = S \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{2} \cdot \frac{qN_d}{\varphi_k} \right)^{1/2} \quad (2.12)$$

и соответствует барьерной емкости при нулевом смещении.

2.1.1.1.2. Плавный p - n -переход

Плавным (или линейным) p - n -переходом называется переход, для которого толщина области изменения концентрации примеси сравнима с толщиной ООЗ. Концентрация примеси от p - к n -области изменяется линейно по закону $N_d(x) - N_a(x) = ax$, где a – градиент концентрации примесей. Уравнение Пуассона (2.2) принимает вид

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = - \frac{qax}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}. \quad (2.13)$$

Дальнейшие расчеты ведутся аналогично случаю резкого p - n -перехода и ширина ООЗ получается равной

$$d = \left(\frac{12 \varepsilon_0 \varepsilon_r}{qa} \varphi_k \right)^{1/3}, \quad (2.14)$$

а при приложении внешнего напряжения (в обратном направлении)

$$d = \left(\frac{12 \varepsilon_0 \varepsilon_r}{qa} (\varphi_k + U) \right)^{1/3}. \quad (2.15)$$

Барьерная емкость для плавного p - n -перехода в этом случае имеет вид

$$C_{\bar{\sigma}} = S \left(\frac{(\varepsilon_0 \varepsilon_r)^2 qa}{12(\varphi_k + U)} \right)^{1/3} \quad (2.16)$$

или, обозначая

$$C_{60} = S \left(\frac{(\varepsilon_0 \varepsilon_r)^2 qa}{12\varphi_k} \right)^{1/3}, \quad C_6 = C_{60} \left(1 + \frac{U}{\varphi_k} \right)^{-1/3}. \quad (2.17)$$

В общем случае можно записать, что

$$C_6 = C_{60} \left(1 + \frac{U}{\varphi_k} \right)^n, \quad (2.18)$$

где C_6 – емкость при напряжении U ; C_{60} – емкость при нулевом напряжении; U – напряжение на p - n -переходе (положительное в случае обратного смещения перехода); φ_k – контактная разность потенциалов (берется со знаком плюс); n – показатель степени, зависящий от типа перехода ($n = -1/2$ для резкого, ступенчатого перехода; $n = -1/3$ для плавного, линейного перехода).

2.1.2. Диффузионная емкость

Если изменять приложенное к p - n -переходу прямое напряжение, то заряд в обеих областях перехода тоже будет существенно меняться. При увеличении прямого напряжения увеличивается взаимная диффузия основных носителей через переход, изменяется заряд. Это изменение заряда, вызванное изменением напряжения, можно рассматривать как действие некоторой емкости. Эта емкость называется диффузионной, так как появляется за счет изменения диффузионной компоненты тока через переход:

$$C_d = \frac{dQ}{dU}. \quad (2.19)$$

Полная емкость перехода складывается из диффузионной и барьерной емкостей:

$$C = C_6 + C_d. \quad (2.20)$$

При обратных напряжениях, превышающих несколько десятых долей вольта, диффузионная компонента емкости будет практически равна нулю. Поэтому для закрытого p - n -перехода следует учитывать только барьерную емкость. А при прямых напряжениях диффузионная емкость преобладает над барьерной. При этом барьерной емкостью можно пренебречь.

2.2. Теоретические основы вольт-фарадных (вольт-емкостных) измерений

Проведение вольт-фарадных измерений подразумевает изучение зависимости емкости структуры «металл – полупроводник» от напряжения, иначе говоря, изучение процессов, протекающих в ООЗ полупроводника.

Распределение поля в слое объемного заряда связано с плотностью объемного заряда уравнением Пуассона:

$$\frac{d^2U}{dx^2} = \text{div}E = \frac{\rho}{\varepsilon_0\varepsilon_r}, \quad (2.21)$$

где ε_0 и ε_r – абсолютная диэлектрическая проницаемость вакуума и относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника соответственно; E – напряженность электрического поля. Плотность объемного заряда ρ определяется концентрациями ионизированных донорных и акцепторных примесей с мелкими N_{ds} , N_{as} и глубокими N_{dt} , N_{at} уровнями, а также концентрациями подвижных электронов и дырок n и p :

$$\rho = q \left[(N_{ds}^+ - N_{as}^-) + (N_{dt}^+ - N_{at}^-) + (p - n) \right]. \quad (2.22)$$

Все составляющие плотности объемного заряда можно выразить через концентрацию собственных носителей заряда n_i , разность в положениях уровней Ферми в собственном полупроводнике E_i и в объеме примесного материала E_F , а также через концентрации глубоких примесных центров N_{dt} и N_{at} . Помимо этого, величины N_{dt}^+ и N_{at}^- связаны с энергиями ионизации соответствующих центров E_{dt} и E_{at} квазиуровнями Ферми E_{Fn} и E_{Fp} :

$$N_{dt}^+ = \frac{N_{dt} [1 - \exp(-t/\tau_d)]}{1 + 2 \exp \left[\frac{(-q\phi_s - E_{Fn} + E_{dt})}{kT} \right]}; \quad (2.23)$$

$$N_{at}^- = \frac{N_{at} [1 - \exp(-t/\tau_a)]}{1 + 2 \exp \left[\frac{(q\phi_s + E_{Fp} - E_{at})}{kT} \right]};$$

$$N_d^+ = n_i \exp \frac{q\phi_B}{kT}; \quad N_a^- = n_i \exp \left(-\frac{q\phi_B}{kT} \right); \quad (2.24)$$

$$n = n_i \exp \frac{q\phi_s}{kT}; \quad p = n_i \exp \left(-\frac{q\phi_s}{kT} \right). \quad (2.25)$$

В формулах (2.23) – (2.25) использованы обозначения $q\phi_B = (E_F - E_i)_B$ и $q\phi_s = (E_F - E_i)_S$ (индексы B и S относятся к объему и поверхности полупроводника соответственно (рис. 2.2)). Как следует из общего вида формул (2.23), концентрация изолированных глубоких примесных центров (ГПЦ) изменяется во времени экспоненциально с некоторой постоянной времени релаксации τ (τ_d или τ_a).

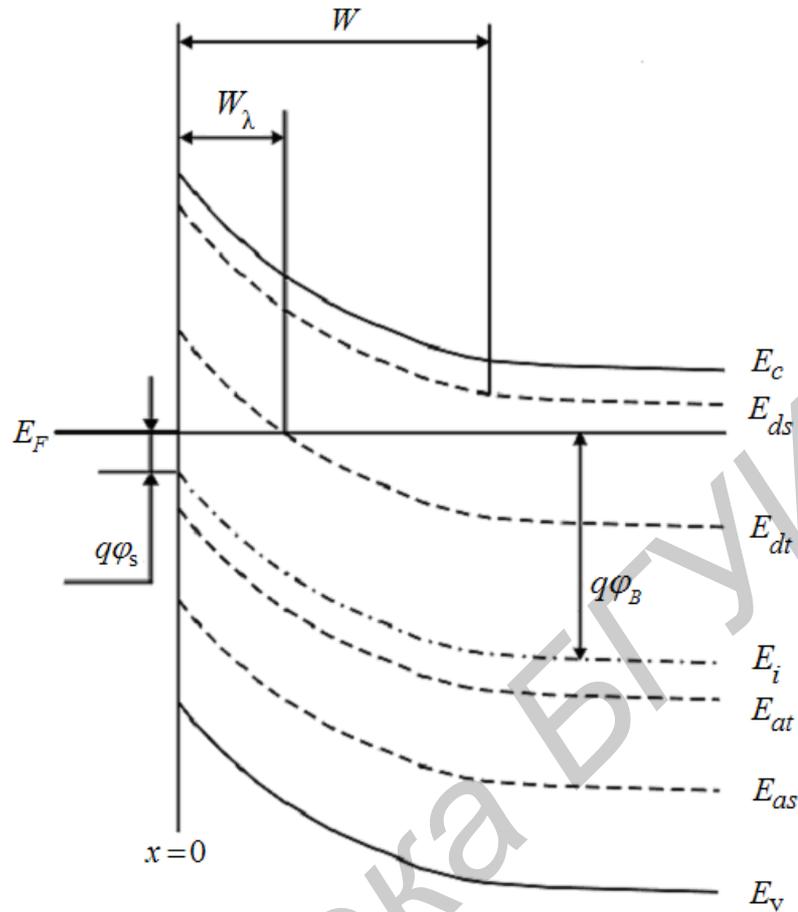


Рис. 2.2. Энергетическая диаграмма контакта «металл – полупроводник»

Величина τ определяется скоростями термической e^+ и оптической e^o эмиссий электронов и дырок при данной температуре T :

$$\tau^{-1} = e_p^o + \varepsilon_p^t + e_n^t + e_n^o \quad (2.26)$$

Скорости эмиссии зависят от условий, в которых находится контакт. Скорость термической эмиссии (например электронов) экспоненциально зависит от температуры:

$$e_n^t = \sqrt{96\pi^3} m_n^* \sigma_n \frac{k^2}{h^3} T^2 \exp\left(-\frac{E_c - E_{dt}}{kT}\right) = a_n T^2 \exp\left(-\frac{E_c - E_{dt}}{kT}\right) \quad (2.27)$$

Здесь m_n^* – эффективная масса электронов; h – постоянная Планка; k – постоянная Больцмана; E_c – энергетический уровень дна зоны проводимости полупроводника.

Скорость оптической эмиссии e^o проявляет более слабую зависимость от энергии падающего на образец света $h\nu$ и имеет участок насыщения:

$$e_n^o = \text{const} \sqrt{E_{dt} (h\nu - E_{dt})} \cdot (h\nu)^{-3} \quad (2.28)$$

Следует отметить, что решение уравнения Пуассона в общем виде – сложная задача. Поэтому обычно используют несколько упрощающих предположений, основными из которых являются:

- мелкие примесные центры (МПЦ) полностью ионизированы;
- полупроводник невырожден, и к газу носителей заряда можно применить статистику Максвелла – Больцмана;
- ООЗ имеет резкие границы; за его пределами напряженность электрического поля равна нулю;
- барьер Шоттки (или p - n -переход) считают одномерным.

Подставляя формулы (2.23) – (2.25) в (2.22), получаем формулу для плотности объемного заряда:

$$\rho = 2qn_i \left(sh \frac{q\phi_B}{kT} - sh \frac{qU}{kT} \right) + \frac{qN_{dt} (1 - e^{-t/\tau_d})}{1 + 2 \exp \left(\frac{E_{dt} - E_{Fn} - qU}{kT} \right)} - \frac{qN_{at} (1 - e^{-t/\tau_a})}{1 + 2 \exp \left(\frac{E_{Fp} - E_{at} + qU}{kT} \right)}, \quad (2.29)$$

где U – приложенное извне напряжение.

Введем дебаевские длины ионизации мелких (L_s) и глубоких L_{dt} , L_{at} примесей:

$$L_s = \sqrt{\frac{kT \varepsilon_0 \varepsilon_r}{2q^2 n_i}}, \quad (2.30)$$

$$L_{dt} = \sqrt{\frac{kT \varepsilon_0 \varepsilon_r}{q^2 N_{dt} [1 - \exp(-t/\tau_d)]}}, \quad (2.31)$$

$$L_{at} = \sqrt{\frac{kT \varepsilon_0 \varepsilon_r}{q^2 N_{at} [1 - \exp(-t/\tau_a)]}}. \quad (2.32)$$

Выразим для упрощения и последующих записей величину $\frac{qU}{kT}$ через безразмерный потенциал Ψ :

$$\Psi = \frac{qU}{kT}. \quad (2.33)$$

Запишем теперь уравнение Пуассона с учетом введенных обозначений:

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{sh\Psi - sh\Psi_B}{L_s^2} - \left[L_{dt}^2 \left(1 + 2e^{-\frac{E_{Fn}-E_{dt}}{kT}} e^{-\Psi} \right) \right]^{-1} + \left[L_{at}^2 \left(1 + 2e^{-\frac{E_{Fp}-E_{at}}{kT}} e^{\Psi} \right) \right]^{-1}. \quad (2.34)$$

Граничные условия определяются следующим образом:

– для мелких примесных центров

$$x=0, \quad \Psi = \Psi_s; \quad x=W, \quad \Psi = \Psi_B; \quad (2.35)$$

– для примесных центров с глубокими уровнями (например донорными)

$$x=0; \quad \Psi = \Psi_{dt} = \frac{(E_{dt} - E_F)_s}{kT}; \quad x=W; \quad \Psi = 0. \quad (2.36)$$

Интегрирование (2.34) с учетом соответствующих граничных условий (2.36) дает формулу

$$\frac{d\Psi}{dx} = 2L_s^{-2} \left[(\Psi_B - \Psi_s) sh\Psi_B - (ch\Psi_B - ch\Psi_s) \right] + 2L_{dt}^{-2} \left[-\Psi_{dt} - \ln \frac{1 + 2e^{-2\Psi_{dt}}}{3} \right] + 2L_{at}^{-2} \left[\Psi_{at} + \ln \frac{1 + 2e^{-2\Psi_{at}}}{3} \right], \quad (2.37)$$

или

$$\frac{d\Psi}{dx} = \pm \sqrt{2(G_s L_s^{-2} + G_{dt} L_{dt}^{-2} + G_{at} L_{at}^{-2})}, \quad (2.38)$$

где

$$G_s = (\Psi_B - \Psi_s) sh\Psi_B - (ch\Psi_B - ch\Psi_s); \quad (2.39)$$

$$G_{dt} = -\Psi_{dt} - \frac{\ln(1 + 2e^{-2\Psi_{dt}})}{3};$$

$$G_{at} = \Psi_{at} + \frac{\ln(1 + 2e^{-2\Psi_{at}})}{3}.$$

Величины G_s , G_{dt} и G_{at} – безразмерные составляющие напряженности электрического поля для ионизированных мелких и глубоких доноров и акцепторов соответственно.

Зная напряженность электрического поля, можно определить объемный заряд в полупроводнике как

$$Q_{sc} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{kT}{q} \left(\frac{d\Psi}{dx} \right)_s = \pm \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{kT}{q} G. \quad (2.40)$$

Используя формулу (2.40), легко получаем соотношение для емкости ООЗ:

$$C_{sc} = \left| \frac{dQ_{sc}}{dU} \right|_s = \varepsilon_0 \varepsilon_r \left(\frac{kT}{q} \right)^2 \cdot \left(\frac{d^2 \Psi}{dx^2} \right)_s. \quad (2.41)$$

Как правило, в различных практических случаях имеем дело с полупроводниками, в которых выполняется одно из условий:

$$N_{dt} \gg N_{at}; \quad N_{dt} \langle N_d^+; \quad N_{dt} \langle N_a^-; \quad (2.42a)$$

$$N_{at} \gg N_{dt}; \quad N_{at} \langle N_a^-; \quad N_{at} \langle N_d^+ \quad (2.42б)$$

или

$$N_{dt} \approx N_{at} \approx 0; \quad N_{dt} \approx N_{at} \ll N_d^+; \quad N_{dt} \approx N_{at} \ll N_a^-. \quad (2.42в)$$

Условия (2.42,а) означают, что в полупроводнике *n*- или *p*-типа присутствуют глубокие доноры, а концентрация глубоких акцепторов незначительна. Если в полупроводнике *n*- или *p*-типа концентрация глубоких доноров незначительна, а глубоких акцепторов – большая, то в контакте реализуются условия (2.42,б). Наконец, когда полупроводник легирован только примесями с мелкими уровнями, то это соответствует случаю (2.42,в).

Если в формуле (2.38) принять составляющие электрического поля по глубоким уровням равными нулю, то

$$G = \frac{\sqrt{2G_s}}{L_s} = \pm \left(\frac{F}{L_s} \right)_s, \quad (2.43)$$

где *F* – функция, зависящая от изгиба зон и концентрации примесей в объеме полупроводника.

Рассмотрим, как преобразуются при соблюдении условий (2.42, а – в) полученные ранее формулы. Рассмотрим полупроводник *n*-типа. Для него

$$\left(\frac{d\Psi}{dx} \right)_s = \pm \left(\frac{F}{L_s} \right), \quad (2.44)$$

а поскольку $n_B = N_d^+$, то

$$F = \sqrt{2 \left((\Psi_B - \Psi_S - 1) + 2e^{-\Psi_B} ch \Psi_S \right)}. \quad (2.45)$$

Введем безразмерную величину поверхностного изгиба зон:

$$\Psi_s - \Psi_B = \Psi = \frac{q}{kT} (\varphi_s - \varphi_B). \quad (2.46)$$

Тогда формула (2.45) принимает вид

$$F(\Psi_B, \Psi_s) = \sqrt{2 \left(-\Psi - 1 + e^{\Psi_s} + e^{-\Psi_s - 2\Psi_B} \right)}. \quad (2.47)$$

Теперь можно записать, что

$$Q_{sc} = \pm q n_B L F(\Psi_B, \Psi_s), \quad (2.48)$$

где

$$L = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r kT}{q^2 n_B}}. \quad (2.49)$$

Емкость ООЗ полупроводника

$$\begin{aligned} C_{sc} &= \left. \frac{dQ_{sc}}{dU} \right|_s = \frac{q}{kT} \left. \frac{dQ_{sc}}{d\Psi} \right|_s = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{L} \left. \frac{dF(\Psi_B, \Psi)}{d\Psi} \right|_s = \\ &= \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{L} \frac{|e^{\Psi_s} - 1 - e^{-\Psi_s - 2\Psi_B}|}{\sqrt{2(-\Psi_s - 1 + e^{\Psi_s} + e^{-\Psi_s - 2\Psi_B})}}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Введем обозначение

$$R(\Psi_B, \Psi_s) = \frac{|e^{\Psi_s} - 1 - e^{-\Psi_s - 2\Psi_B}|}{F(\Psi_B, \Psi_s)}. \quad (2.51)$$

В окончательном виде получаем следующую формулу для емкости ООЗ:

$$C_{sc} = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r q^2 n_B}{kT}} R(\Psi_B, \Psi_s). \quad (2.52)$$

Таким образом, емкость ООЗ C_{sc} является сложной функцией изгиба зон и уровня легирования полупроводника. Рассмотрим некоторые частные случаи.

Пусть изгиб зон полупроводника незначителен. При этом можно считать, что $e^{-2\Psi_{dt}} \approx 1$ и $e^{-2\Psi_{at}} \approx 1$. Тогда сумму составляющих $G_{dt} L_{dt}^{-2} + G_{at} L_{at}^{-2}$ в уравнении (2.38) можно записать в следующем виде:

$$\frac{q^2}{kT \varepsilon_0 \varepsilon_r} \left[(E_F - E_{dt})_s N_{dt} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_d}} \right) + (E_{at} - E_F)_s N_{at} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_a}} \right) \right]. \quad (2.53)$$

Если за начало отсчета времени $t = 0$ выбрать момент контактирования металла с полупроводником, то сумма составляющих в формуле (2.53) превращается в ноль: глубокие уровни не дают вклада в емкость ООЗ в первый момент времени после образования контакта. Тот же вывод можно сделать для случая, когда время релаксации ГПЦ велико, т. е. $t \ll \tau_{a,d}$.

Если в полупроводнике n -типа имеются только глубокие доноры, а глубокие акцепторы отсутствуют, то функцию $d\Psi/dx$ можно записать так:

$$G = \frac{d\Psi}{dx} = \sqrt{2\left[(\Psi_B - \Psi_s - 1) + e^{\Psi - \Psi_B}\right]L_s^{-2} + 2\left[\ln 3 - \ln(1 + 2e^{-2\Psi_{dt}}) - L_{dt}^{-2}\right]}. \quad (2.54)$$

Подставив $\Psi = \Psi_s - \Psi_B$, получим

$$G = \sqrt{\frac{2}{L_s^2} \sqrt{(-\Psi - 1) + e^{-\Psi - 2\Psi_B} + e^{-\Psi} + \left(\frac{L_s}{L_{dt}}\right)^2 \left[\ln 3 - \ln(1 + 2e^{-2\Psi_{dt}}) - \Psi_{dt}\right]}}. \quad (2.55)$$

Поскольку для примесного полупроводника

$$\sqrt{\frac{2}{L_s^2}} = \sqrt{\frac{2q^2 n_B}{\varepsilon_0 \varepsilon_r kT}}, \quad (2.56)$$

то с учетом площади контакта S

$$C_{sc} = \varepsilon_0 \varepsilon_r S \left(\frac{dG}{d\Psi} \right)_s, \quad (2.57)$$

$$C_{sc} = \frac{\sqrt{\frac{q^2 \varepsilon_0 \varepsilon_r n_B S^2}{2kT} (-1 - e^{-\Psi_s} - e^{-\Psi_s - 2\Psi_B})}}{\sqrt{-\Psi_s - 1 - e^{-\Psi_s} + e^{-\Psi_s - 2\Psi_B} + \frac{N_{dt}}{n_i} \left(1 - e^{\frac{-t}{\tau_d}}\right) \left[\ln 3 - \ln(1 + 2e^{-2\Psi_{dt}}) - \Psi_{dt}\right]}}. \quad (2.58)$$

Формула (2.58) дает точную зависимость величины ООЗ от поверхностного изгиба зон и положения уровня Ферми, иначе говоря, от степени легирования полупроводника и приложенного напряжения смещения.

Во многих практических случаях методические и инструментальные погрешности измерений таковы, что нет смысла оперировать такими сложными и громоздкими формулами, как (2.58).

Если, например, считать, что для реального образца выполняется условие

$$2 \exp\left(-\frac{q\varphi_s + E_{Fn} - E_{dt}}{kT}\right) \ll 1 \quad (2.59)$$

и подвижных носителей заряда в ООЗ нет, то формула (2.22) приобретает следующий вид:

$$\rho = q \left[n_B + N_{dt} \left(1 - e^{\frac{-t}{\tau_d}}\right) \right]. \quad (2.60)$$

Двойное интегрирование уравнения Пуассона от 0 до W для составляющей n_B и от 0 до W_λ для составляющей N_{dt} дает

$$\varphi_B - \varphi = -\frac{q}{2\varepsilon_0\varepsilon_r} \left[n_B W^2 + N_{dt} W_\lambda^2 \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_d}} \right) \right]. \quad (2.61)$$

В формуле (2.40) считается, что в пределах ООЗ примеси распределены равномерно, т. е.

$$n_B(x) = \text{const}, N_{dt}(x) = \text{const}. \quad (2.62)$$

Заменив глубины ионизации W и W_λ на соответствующие им емкости C и C_λ , получим вольт-фарадную зависимость:

$$\varphi_B - \varphi = -\frac{q\varepsilon_0\varepsilon_r}{2} \left[n_B C^{-2} + N_{dt} C_\lambda^{-2} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_d}} \right) \right]. \quad (2.63)$$

Формулу (2.63) можно использовать для определения параметров донорных примесей с глубокими уровнями в полупроводнике n -типа. Аналогичные соотношения можно получить для других случаев, охарактеризованных условиями (2.42).

2.3. Определение параметров полупроводников по результатам C - V -измерений

К основным электрофизическим параметрам полупроводников относятся концентрация носителей заряда и ее распределение по толщине образца, а также энергия ионизации и концентрация глубоких примесных центров (ГПЦ). Ниже пойдет речь о практическом определении этих, а также некоторых других параметров полупроводников.

2.3.1. Концентрация носителей заряда

Исходным уравнением для определения концентрации носителей заряда, обусловленных ионизацией МПЦ и ГПЦ, является полученная ранее формула (2.63), которая с учетом площади барьера приобретает вид

$$\varphi_B - \varphi = -\frac{q\varepsilon_0\varepsilon_r S^2}{2} \left[n_B C^{-2} + N_{dt} C_\lambda^{-2} \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_d}} \right) \right]. \quad (2.64)$$

Если концентрация ГПЦ мала ($N_{dt} \ll n_B$) или выполняется условие $t \ll \tau_d$, то формулу (3.1) можно записать так:

$$n_B = -\frac{2}{q\varepsilon_0\varepsilon_r S^2} (\varphi_B - \varphi) C^2. \quad (2.65)$$

Формула (2.64) широко используется для определения концентрации носителей заряда n_B по вольт-фарадной характеристике $C(\varphi)$ контакта «металл-полупроводник».

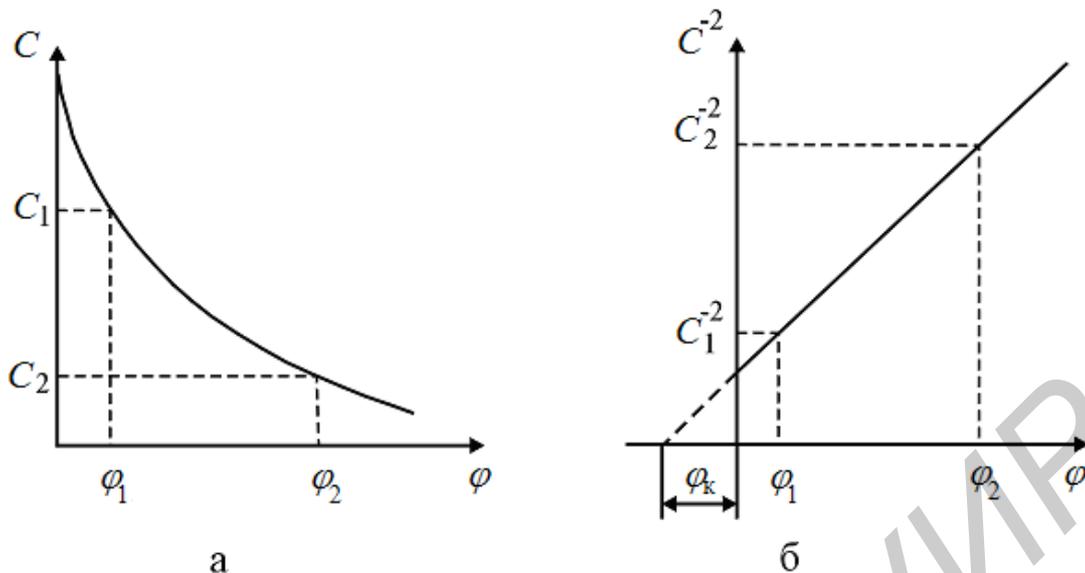


Рис. 2.3. Зависимости $C(\varphi)$ (а) и $C^{-2}(\varphi)$ (б) для контакта «металл – полупроводник»

Чтобы исключить из расчетов диффузионный потенциал φ_B , формулу (2.65) используют в дифференциальном виде

$$n_B = -\frac{2}{q\varepsilon_0\varepsilon_r x S^2} \frac{d\varphi}{d(C^{-2})}. \quad (2.66)$$

Концентрацию n_B определяют по наклону линии $C^{-2}(\varphi)$ (рис. 2.3, б), перестроенной с зависимости $C(\varphi)$ (рис. 2.3, а). Величина n_B определяется на глубине от $x_1 = \frac{\varepsilon_0\varepsilon_r S}{C_1}$ до $x_2 = \frac{\varepsilon_0\varepsilon_r S}{C_2}$.

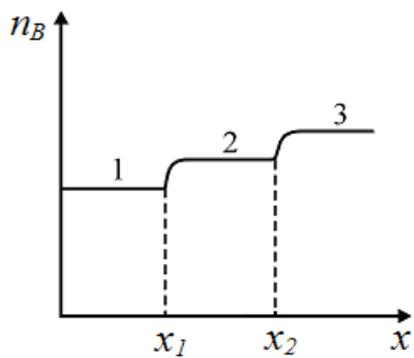
Для случая равномерного легирования полупроводника, когда $n_B = \text{const}$, зависимость $C^{-2}(\varphi)$ имеет вид прямой линии (рис. 2.3, б).

Если профиль $n_B(x)$ имеет вид нарастающих ступенек (рис. 2.4, а), то зависимость $C^{-2}(\varphi)$ имеет изломы при потенциалах φ_1 и φ_2 , соответствующих глубинам x_1 и x_2 (рис. 2.4, в). Наклон изменяется в противоположную сторону, если профиль имеет ступенчато-убывающий характер (рис. 2.4, г).

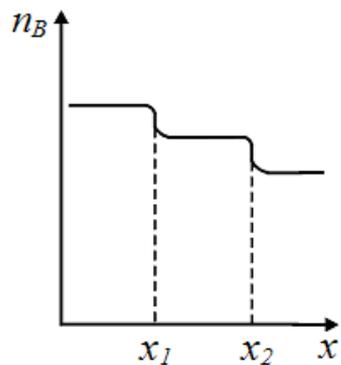
При наличии прямого (рис. 2.5, зависимость 1) или обратного (рис. 2.5, зависимость 2) градиента концентрации примесей зависимость $C^{-2}(\varphi)$ отклоняется от прямой линии (рис. 2.6).

Для определения концентрации n_B можно обойтись без графического построения зависимости $C^{-2}(\varphi)$, если использовать формулу (2.66) в виде

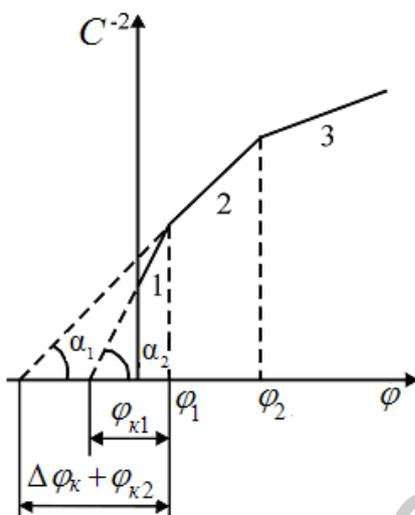
$$n_B = \frac{2}{q\varepsilon_0\varepsilon_r S^2} \cdot \frac{C^3}{dC/d\varphi}. \quad (2.67)$$



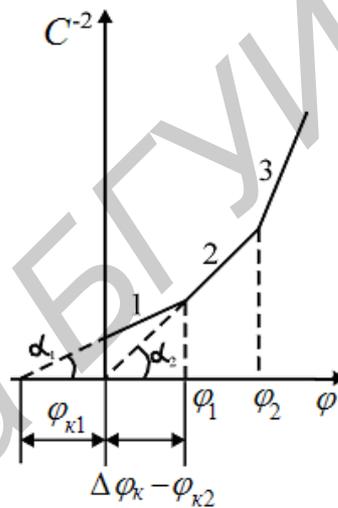
а



б



в



г

Рис. 2.4. Ступенчато-нарастающий (а) и ступенчато-убывающий (б) профили концентрации и соответствующие им зависимости $C^{-2}(\varphi)$ (в, г)

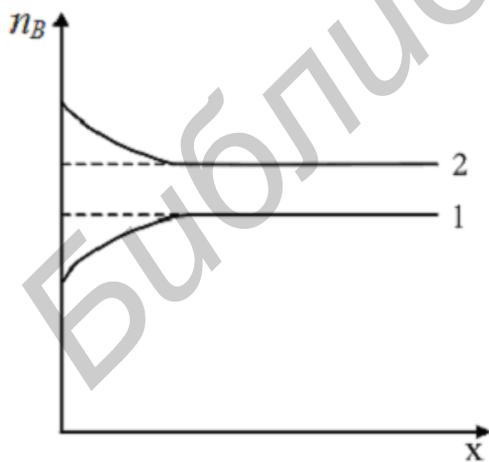


Рис. 2.5. Профили концентрации носителей заряда с прямым 1 и обратным 2 градиентами концентрации

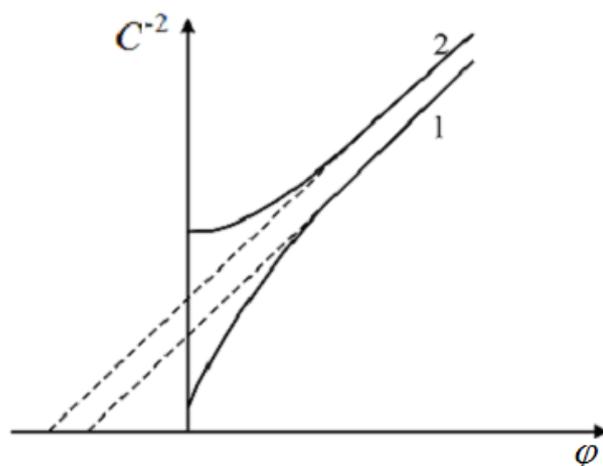


Рис. 2.6. Зависимости $C^{-2}(\varphi)$ с прямым 1 и обратным 2 градиентами концентрации

Концентрация определяется непосредственным дифференцированием кривой $C(\varphi)$ (см. рис. 2.3, а) и тем точнее, чем меньше выбираются интервалы $\Delta C = C_1 - C_2$.

Широкое распространение при определении концентрации получил метод частотного анализа тестового высокочастотного (ВЧ) сигнала, проходящего через барьер. Поскольку заряд при этом изменяется на величину

$$\Delta Q = qn_B(x)\Delta x, \quad (2.68)$$

то падение ВЧ-напряжения на образце равно

$$\Delta\varphi_{\text{вч}} \cong x\Delta E + \frac{\Delta x}{2}\Delta E = \frac{x\Delta Q}{\varepsilon_0\varepsilon_r} + \frac{\Delta Q^2}{2q\varepsilon_0\varepsilon_r n_B}. \quad (2.69)$$

Если изменение заряда ΔQ обусловлено переменным током $J\sin\omega t$, то

$$\Delta Q = J \cos\omega t / \omega S. \quad (2.70)$$

Тогда формула (2.69) преобразуется к виду

$$\Delta\varphi_{\text{вч}} = \frac{J \cos\omega t}{\varepsilon_0\varepsilon_r\omega S}x + \frac{J^2 [\cos 2\omega t + 1]}{4\omega^2 q\varepsilon_0\varepsilon_r S^2} \cdot \frac{1}{n_B}. \quad (2.71)$$

Анализируя формулу (2.71), видим, что для определения концентрации n_B нужно выделить напряжение второй гармоники, а для определения глубины x – напряжение первой гармоники. Следовательно, в данном методе вольт-фарадная характеристика образца для определения концентрации n_B как таковая не используется. Роль напряжения смещения постоянного тока также сводится лишь к образованию той или иной степени обеднения ООЗ, т. е. к управлению емкостью барьера.

Если полупроводник легирован примесями с энергией ионизации, близкой к тепловой, то для более точного определения профиля ионизированных примесей желательно учитывать процессы термической ионизации или нейтрализации примесей, а также зависимость диффузионного потенциала от приложенного напряжения смещения. Это приводит к следующей формуле:

$$\frac{1}{n_B} = q\varepsilon_0\varepsilon_r S^2 \cdot \frac{dC}{d\varphi} \left[1 - \left(\frac{d\varphi_B}{d\varphi} - \frac{\frac{d^2\varphi_B}{d\varphi^2}}{\frac{dC}{d\varphi}} \right) \right], \quad (2.72)$$

в которой запись в прямоугольной скобке заменяет обычную составляющую C^{-3} в формуле (2.67).

Если диффузионный потенциал φ_B зависит от приложенного напряжения φ , то емкость ООЗ равна

$$C = \frac{\varepsilon_0\varepsilon_r S}{x} \left(1 - \frac{d\varphi_B}{d\varphi} \right). \quad (2.73)$$

2.3.2. Контактная разность потенциалов

На рис. 2.3, б и из формулы (2.65) видно, что при интерполяции зависимости $C^2(\varphi)$ к точке $C^2=0$ получаем равенство $\varphi = \varphi_B$. Величина φ_B для случая равномерного легирования полупроводника и при отсутствии подвижных носителей в ООЗ равна контактной разности потенциалов «металл – полупроводник». Если же мы имеем дело с неоднородно легированным полупроводником, то величина диффузионного потенциала φ_B (называемого еще и напряжением отсечки) не совпадает с контактной разностью потенциалов.

Обратимся к определению величины контактной разности потенциалов для рассмотренных на рис. 2.4 – 2.6 примеров.

При ступенчато-нарастающем профиле концентрации (см. рис. 2.4, в) прямая, проведенная в продолжение участка 1, отсекает участок $\varphi_{\kappa 1}$, а проведенная в продолжение участка 2 – $(\Delta\varphi_{\kappa} + \varphi_{\kappa 2})$. Величина разности $\Delta\varphi_{\kappa}$ находится из формулы

$$\Delta\varphi_{\kappa} = (\varphi_1 + \varphi_{\kappa 1}) \left(\frac{n_{B2}}{n_{B1}} - 1 \right). \quad (2.74)$$

Для ступенчато-убывающего профиля (см. рис. 2.4, г) экстраполяция участка 1 дает величину $\varphi_{\kappa 1}$, а участка 2 – $(\Delta\varphi_{\kappa} + \varphi_{\kappa 2})$. Тогда

$$\Delta\varphi_{\kappa} = (\varphi_1 - \varphi_{\kappa 1}) \left(1 - \frac{n_{B2}}{n_{B1}} \right). \quad (2.75)$$

2.3.3. Концентрация и энергия ионизации глубоких примесных центров

Нахождение концентрации ГПЦ обычно осложнено тем, что на фоне большой концентрации мелких примесных центров необходимо определить малую концентрацию ГПЦ. Это затруднение легче всего удастся преодолеть при помощи измерений под действием дополнительного внешнего возмущения, приводящего к дополнительной ионизации ГПЦ. Таким возмущением может быть электрическое поле, тепловое или оптическое излучения. Поэтому различные методы измерения можно разбить на следующие группы в соответствии с типом дополнительного внешнего возмущения:

- электростимулированная емкость (ЭСЕ);
- термостимулированная емкость (ТСЕ);
- фотостимулированная емкость (ФСЕ).

Рассмотрим кратко каждый из этих методов. Общим для них является то, что образец может находиться в двух состояниях: 1) при прямом смещении, когда через контакт протекает прямой ток и происходит захват носителей заряда глубокими примесными центрами; 2) при обратном смещении, когда контакт характеризуется наличием ООЗ, обедненного подвижными носителями заряда; при этом неподвижный заряд этой области представляет со-

бой сумму полностью ионизированных МПЦ и частично ионизированных ГПЦ.

После установления при заданном обратном смещении равновесного состояния емкость ООЗ изменяют дополнительным внешним воздействием путем изменения напряжения смещения, освещенности или температуры образца.

2.3.3.1. Электростимулированная емкость

Пусть измерения проводятся при комнатной температуре без освещения образца. Тогда (с учетом принятых ранее предположений) плотность объемного заряда в некоторый момент времени t после подачи обратного смещения на барьер будет равна

$$\rho(x) = \begin{cases} qn_B(x) + qN_{dt}(x) \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_d}\right) \right] & \text{для } 0 \leq x \leq W_\lambda; \\ qn_B(x) & \text{для } W_\lambda \leq x \leq W; \\ 0 & \text{для } x > W. \end{cases} \quad (2.76)$$

С учетом граничных условий интегрирование уравнения Пуассона дает формулу

$$(\varphi_B - \varphi) C^2(W) = \frac{q\varepsilon_0\varepsilon_r S^2}{2} \times \left[n_B(W) + \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_d}} \right) \left(1 - \lambda(\omega) \frac{C(W)}{\varepsilon_0\varepsilon_r S} \right)^2 N_{dt}(W_\lambda) \right]. \quad (2.77)$$

Анализ формулы (2.77) показывает, что одна из составляющих правой части зависит от времени.

Поэтому различают два варианта измерений:

- метод постоянного напряжения, когда напряжение смещения поддерживают постоянным, а измеряют временную релаксацию емкости;
- метод постоянной емкости, когда емкость барьера поддерживают постоянной, а измеряют изменение во времени напряжение смещения.

Метод постоянного напряжения (при релаксации емкости) реализуется подачей на образец импульса напряжения обратного смещения. При этом мгновенно ионизируются МПЦ и увеличивается ширина ООЗ, а ГПЦ ионизируются в области $0 \leq x \leq W_\lambda$ с некоторой постоянной времени τ_d . Чтобы напряжение смещения на барьере оставалось постоянным, должно произойти изменение ширины W ООЗ, что проявляется внешне через изменение во времени емкости барьера. По окончании переходного процесса устанавливается значение $W_k = W(t \rightarrow \infty)$, отличающееся от начального значения $W_n = W(t \rightarrow 0)$.

В данном случае величины $C(W)$, W_λ , λ , $n_B(W)$ и $N_{dt}(W_\lambda)$ зависят от времени, что затрудняет измерение параметров ГПЦ в случае неоднородного распределения n_B и N_{dt} в полупроводнике.

Если концентрация равномерно распределенных ГПЦ N_{dtp} мала, то полное изменение емкости во времени незначительно и ее абсолютное значение при данном напряжении можно считать равным некоторому постоянно-му значению C_n . Тогда из формулы (2.77) получаем

$$\Delta C[W(t)] = C[W(\infty)] - C[W(t)] = C_{cp} \exp(-t/\tau_d), \quad (2.78)$$

где

$$C_{cp} = \frac{qS}{4} \left(\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r x S}{C_n} - 2\lambda \right) \frac{N_{dtp}}{\varphi - \varphi_B}. \quad (2.79)$$

При измеренной релаксации емкости с помощью формулы (2.78) определяется постоянная времени релаксации τ_d , а по наклону зависимости $C_{cp}(\varphi_B - \varphi) = f(C_n^{-1})$ вычисляется концентрация ГПЦ N_{dt} .

Если МПЦ и ГПЦ неравномерно распределены по образцу, т. е. концентрации ионизированных примесей зависят от приложенного напряжения, то измеряемые концентрационные профили ГПЦ не соответствуют истинным.

Этого недостатка лишен метод постоянной емкости, в котором следящая система автоматически компенсирует изменение емкости, происходящее из-за ионизации ГПЦ, путем подачи на образец малых компенсирующих приращений напряжения смещения. Тем самым при ионизации ГПЦ регистрируется изменение во времени не емкости барьера, а напряжения смещения. С учетом соотношения для концентрации n_B , получаемого из формулы (2.77) при $t = 0^+$ (т. е. в первый момент времени после подачи импульса напряжения) формула (2.77) принимает вид

$$N_{dt}(W_\lambda) e^{\frac{-t}{\tau_d}} = \frac{2C^2(W)}{q\varepsilon_0\varepsilon_r S^2 \left[1 - \lambda(W) \frac{C(W)}{\varepsilon_0\varepsilon_r S} \right]^2} \Delta\varphi(t). \quad (2.80)$$

Зависимость $\ln\Delta\varphi(t) = \ln[\varphi(t) - \varphi(\infty)] = f(t)$ является прямой линией. По наклону этой линии можно определить время релаксации τ_d . Пересечение линий с осью напряжений при $t = 0$ дает концентрацию ГПЦ $N_{dt}(W_\lambda)$. Профиль ГПЦ определяется по формуле (2.80) из измерений разности $\Delta\varphi(t)$ при различных начальных напряжениях смещения.

Для применения описанной выше методики определения концентрации ГПЦ необходимо знать величину λ . При не очень больших концентрациях ГПЦ λ определяется следующим образом:

$$\lambda(W) = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_r(E_F - E_{dt})}{q^2 n_B(W)}}. \quad (2.81)$$

Величина $\frac{1}{q}(E_F - E_{dt})$ находится как сумма диффузионного потенциала барьера минимального напряжения смещения, при котором ГПЦ начинают проявлять себя как часть объемного заряда, т. е. происходит релаксация емкости ООЗ во времени. Это позволяет чисто экспериментально определить энергетическое положение ГПЦ относительно уровня Ферми. Если положение последнего неизвестно, то, поскольку скорость термической эмиссии электронов гораздо выше, чем у дырок, можно записать формулу

$$\tau_d^{-1} = \sigma_n v_6 N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{dt}}{kT}\right). \quad (2.82)$$

Здесь σ_n – сечение захвата электронов; v_6 – тепловая скорость электронов; N_c – эффективная плотность состояний в зоне проводимости.

С помощью формулы (2.82) и определяется энергия ионизации ГПЦ.

2.3.3.2. Термостимулированная емкость

Метод термостимулированной емкости (ТСЕ) заключается в измерении емкости ООЗ при непрерывном нагреве образца в отсутствие оптической эмиссии носителей заряда, т. е. в темноте. Рассмотрим вариант метода ТСЕ, называемый методом релаксационной спектроскопии ГПЦ.

При переключении напряжения смещения от прямого к обратному концентрация ионизированных ГПЦ изменяется по закону

$$N_{dt}^+ = N_{dt} \exp(-e_n^t t). \quad (2.83)$$

При концентрации ГПЦ, меньшей концентрации МПЦ, можно записать формулу для емкости барьера в некоторый момент времени в следующем виде:

$$C(t) = C_o \left\{ 1 + \frac{N_{dt}}{2n_B} [1 - \exp(-e_n^t t)] \right\}, \quad (2.84)$$

где C_o определяется из формулы (2.65).

Рассмотрим изменение емкости ΔC между двумя моментами времени t_1 и t_2 :

$$\frac{\Delta C}{C_o} = \frac{C(t_2) - C(t_1)}{C_o} = \frac{N_{dt}}{2n_B} [\exp(-e_n^t t_1) - \exp(-e_n^t t_2)]. \quad (2.85)$$

Дробь $\Delta C/C_o$ будет слабо зависеть от времени при некоторой низкой температуре, когда скорость тепловой эмиссии мала, а также при некоторой высокой температуре, когда e_n^t велика. Однако существует такая температу-

ра T_m , при которой дробь $\Delta C/C_o$ максимальна (рис. 2.7), т. е. будет выполняться условие

$$\frac{d(\Delta C/C_o)}{dT} = 0; \quad \frac{\Delta C/C_o}{T_m} = \max. \quad (2.86)$$

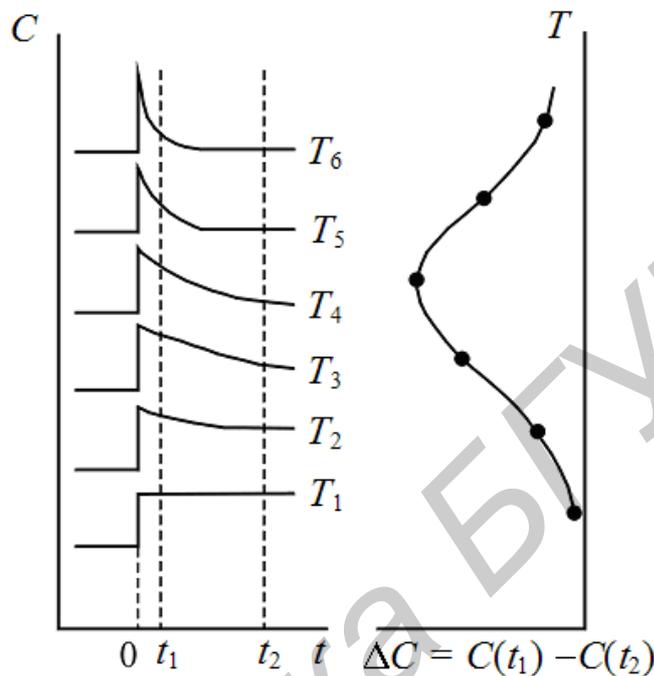


Рис. 2.7. Временная релаксация емкости при изменении температуры образца

При этом

$$\tau = t_1 \frac{(t_2/t_1 - 1)}{\ln(t_2/t_1)}. \quad (2.87)$$

Введем обозначение $t_2/t_1 = r$. При этом формула для скорости эмиссии будет иметь следующий вид:

$$\frac{E dt}{kT_m} = \ln a_n + \ln \left[T_m^2 \frac{t_1(r-1)}{\ln r} \right]. \quad (2.88)$$

Из формулы $a_n = \sqrt{96\pi^3} \sigma_n m_n^* k^2 / h^3$ можно определить сечение захвата электронов σ_n , а формула (2.85) дает возможность определить концентрацию ГПЦ:

$$N_{dt} = 2n_B (\Delta C/C_o) \left[\exp\left(-\frac{\ln r}{r-1}\right) - \exp\left(-\frac{r \ln r}{r-1}\right) \right] \quad (2.89)$$

при условии, что ГПЦ в исследуемой области распределены равномерно.

2.3.3.3. Фотостимулированная емкость

При исследовании ФСЕ образец освещается сначала светом с энергией, большей ширины запрещенной зоны, а затем импульсами света с энергией порядка глубины залегания ГПЦ. Опыты проводятся при низкой температуре, когда скорости термической эмиссии носителей заряда незначительны и преобладающей является оптическая эмиссия.

Рассмотрим связь между изменением емкости ООЗ и изменением плотности захваченных на ГПЦ электронов. Пусть N^+ и N^- – плотности фиксированных зарядов на n - и p -сторонах ООЗ соответственно, $q\Delta n(x)$ – изменение плотности заряда ООЗ, обусловленное увеличением количества захваченных на ГПЦ электронов $n(x)$. Изменение ширины ООЗ при изменении заселенности ГПЦ на n - и p -сторонах обозначим соответственно через ΔW^+ и ΔW^- . Условие электронейтральности позволяет записать следующие две формулы:

$$N^+ \Delta W^+ = \Delta n \Delta x W (1 - x); \quad (2.90)$$

$$N^+ \Delta W^+ - N^- \Delta W^- = W \Delta n \Delta x. \quad (2.91)$$

Учитывая, что $\Delta C/C = -\Delta W/W$, получаем, что

$$\Delta C/C = \Delta n \Delta x \left(\frac{x}{N^-} + \frac{1-x}{N^+} \right). \quad (2.92)$$

В более общем виде, заменив сумму интегралом, запишем формулу в следующем виде:

$$\Delta C/C = \int_0^1 \Delta n(x) \left[\frac{x}{N^-} + \frac{1-x}{N^+} \right] dx, \quad (2.93)$$

где координата x меняется от нуля (на n -стороне) до единицы (на p -стороне перехода). Таким же образом можно получить и формулы для изменения емкости, обусловленного перезарядкой ГПЦ.

Важным параметром ГПЦ является сечение захвата электронов, связанное со скоростью захвата C_n формулой

$$\sigma_n = C_n / (v_\sigma n). \quad (2.94)$$

Сечение захвата электронов может служить характеристикой уровня с той точки зрения, что при малом сечении более вероятно испускание электронов; при большом сечении более вероятен захват. Скорость захвата C_n больше нуля и поддается измерению при прямом смещении контакта «металл – полупроводник» или p - n -перехода, когда происходит заполнение уровней с постоянной времени $\tau^{-1} = C_n$.

Энергию ионизации ГПЦ можно определить на спектре ФСЕ по величине изменения емкости. Но положение усложняется, если в запрещенной

зоне полупроводника содержится ряд энергетических состояний с близкими значениями N_i и τ_i . При этом емкость ООЗ некоторое время после подачи обратного смещения равна

$$C^2(t) = \frac{q\varepsilon_r\varepsilon_0 S}{2(\varphi_B - \varphi)} \cdot \left\{ n_B \sum_{i=1}^m \left[N_{dti} (1 - f_{dti}) \left(1 - e^{-\frac{t}{\tau_i}} \right) \right] - \sum_{i=1}^m \left[N_{dti} \left(f_{ati} + (1 - f_{dti}) \right) e^{-\frac{t}{\tau_{di}}} \right] \right\}, \quad (2.95)$$

где f_{dti} и f_{ati} – функции заселенности ГПЦ. В этом случае можно воспользоваться тем, что энергия ионизации ГПЦ входит в формулу для сечения фотоионизации:

$$\sigma_{\Phi}^o(h\nu) = \text{const} \frac{(h\nu - E_{dt})}{(h\nu)^3} \sqrt{E_{dt}}. \quad (2.96)$$

Из этой формулы видно, что энергию E_{dt} можно определить по зависимости $\sigma_{\Phi}^o(h\nu)$ в точке $\sigma_{\Phi}^o = 0$.

В последнее время получает распространение метод дифференциальных спектров ФСЕ, в котором положение ГПЦ определяется точнее, чем в обычных спектрах ФСЕ. Однако непосредственно дифференцировать спектры ФСЕ трудно, так как сигналы производной при плавном изменении емкости незначительны из-за сравнительно малых скоростей оптической эмиссии. Поэтому был предложен способ двух источников света, из которых один служит зондом, как в обычном методе ФСЕ, а второй – подсветкой для ускорения переходов. При этом постоянные времени, равные минутам и десяткам секунд, удастся сократить (создавая соответствующую заселенность уровней подсветкой) до секунд или долей секунд. Так как сигнал емкости пропорционален плотности объемного заряда ($C^2 \sim N^+$), то

$$\frac{dC}{C} \sim \frac{\Delta N^+}{N^+} = \frac{\partial(\Delta f_i)}{\partial e^o} \cdot \frac{N_i}{2N^+} de^o \quad (2.97)$$

и процессы эмиссии дырок или электронов можно различить по знаку изменения емкости. Изменение емкости dC можно выразить через сечение захвата

$$dC \sim N_i(E_i) \sigma_{\Phi i}^o(h\nu). \quad (2.98)$$

Если имеется несколько видов ловушек, то сигнал производной

$$\frac{dC}{d(h\nu)} \sim \int \frac{dN_i}{dE}(E_i) \frac{d[\sigma_{\Phi i}^o(h\nu)]}{d(h\nu)}. \quad (2.99)$$

В первом приближении $\sigma_{\Phi i}^o(h\nu)$ представить в виде ступенчатой функции

$$d\sigma_{\Phi i}^o \sim \delta(h\nu - E); \quad (2.100)$$

$$\frac{dC}{d(h\nu)} \sim \frac{dN_i(h\nu)}{dE}. \quad (2.101)$$

В этом случае дифференциальный энергетический спектр емкости отобразит концентрационное распределение ловушек по энергиям.

Количественно концентрацию ГПЦ можно оценить по интегралу площади отдельных экстремумов. Спектральный сигнал производной равен

$$p' = \tau_d \cdot \frac{dC}{dt}, \quad (2.102)$$

где τ_d – постоянная времени дифференцирующего устройства. Кроме этого,

$$\frac{1}{C} \frac{dC}{dt} = \frac{N_i}{2N^+} \cdot \frac{df_i}{dt} = \frac{N_i}{2N^+} \cdot \frac{df_i}{de^o} \cdot \frac{de^o}{dt}. \quad (2.103)$$

При этом

$$\int p' dt = \tau_d C \frac{N_i}{2N^+} \cdot \frac{df_i}{de^o} \Delta e^o, \quad (2.104)$$

где Δe^o соответствует максимальному сечению захвата носителей заряда на ГПЦ. Тогда

$$N_i = \frac{2N^+}{\tau_d C} \left[\frac{\left(1 + \frac{e_n^o}{e_p^o} \right)}{\frac{e_n^o}{e_p^o}} \right] \frac{e_n^o}{\Delta e^o} \int p' dt. \quad (2.105)$$

Сравнивая метод фотостимулированной емкости с другими методами (электростимулированной и термостимулированной), отметим, что наиболее достоверную и однозначную информацию о состоянии глубоких примесных центров дает именно метод ФСЕ, особенно при использовании методики снятия дифференциальных спектров ФСЕ с подсветкой. Наименьшие затраты времени обеспечиваются при использовании для измерений метода ТСЕ, а наиболее простым с экспериментальной точки зрения является метод ЭСЕ.

2.4. Порядок выполнения лабораторной работы

1. Подключив к лабораторной установке исследуемый образец (*p-n*-переход или диод Шотки), установить область потенциалов, которая соответствует *обратному* включению контакта. При правильном установлении этой области потенциалов регистр тока фиксировать его не должен.

2. Изменяя величину обратного смещения в пределах, указанных преподавателем (от 0 до 100 вольт по умолчанию), зарегистрировать зависимость барьерной емкости от величины напряжения, приложенного к контакту.

3. Путем построения графика $C_b(U)$ в различных координатах (см. подразд. 2.3 и соответствующие рисунки) убедиться в абсурдности «аномальных» точек на полученных графиках. В случае наличия таковых эксперимент следует повторить.

4. Экспериментально определить монтажную емкость изучаемого образца и откорректировать при этом первичный экспериментальный график.

5. Графически и аналитически определить контактную разность потенциалов, проведя рекомендуемые в подразд. 2.3 построения и расчеты.

6. Путем расчетов определить профиль распределения примеси в полупроводнике.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. В чем сущность понятия «барьерная емкость» и почему она является дифференциальной по своей сути?

2. В чем сущность понятия «диффузионная емкость»? В чем ее отличие от барьерной емкости?

3. Как качественно зависит величина барьерной емкости от величины приложенного напряжения?

4. Какие варианты определения профиля распределения мелких примесных центров вы знаете? Поясните сущность .

5. Какие варианты определения величины контактной разности потенциалов вы знаете? Поясните их сущность.

6. В чем отличие мелких и глубоких примесных центров и как они влияют на характер вольт-емкостных характеристик?

7. В чем заключается сущность метода электростимулированной емкости при определении концентрации и глубины залегания глубоких примесных центров?

8. В чем заключается сущность метода термостимулированной емкости?

9. В чем заключается сущность метода фотостимулированной емкости?

ИЗУЧЕНИЕ РЕЗОНАНСНЫХ ЯВЛЕНИЙ В ПЬЕЗОЭЛЕКТРИКАХ

Цель работы:

- расширение и углубление знаний по теме «Физика диэлектриков»;
- ознакомление с вариантами схем и получение практических навыков регистрации амплитудно-частотных характеристик пьезоэлектрических резонаторов;
- приобретение навыков в определении резонансных и антирезонансных диэлектрических проницаемостей пьезоэлектриков;
- изучение особенностей пьезоэлектрических резонаторов, принципиально отличающих их от радиотехнических LC-резонаторов.

Задание к выполнению экспериментальной и расчетной частей лабораторной работы:

- зарегистрировать амплитудно-частотную характеристику (АЧХ) предложенного резонатора с использованием последовательной и (или) параллельной схемы измерений;
- выявить общую закономерность в поведении АЧХ; определить нерезонансную диэлектрическую проницаемость пьезоэлектрика (с использованием обеих схем измерения);
- выявить резонансные и антирезонансные фрагменты АЧХ; проверить их; проверить выполнение закона «кратности»;
- в области первой (f_0), второй ($3f_0$) и третьей ($5f_0$) резонансных частот определить величины резонансных и антирезонансных диэлектрических проницаемостей; сравнить полученные значения со значением нерезонансной диэлектрической проницаемости;
- на частоте (f_0) определить добротность пьезоэлектрического резонатора и сравнить ее значение с добротностью (сотни единиц) LC-резонаторов.

3.1. Свойства пьезоэлектриков

3.1.1. Общие понятия о прямом и обратном пьезоэффектах

При реализации упругих и релаксационных видов поляризации происходит изменение размеров диэлектрика. Это имеет место во всех без исключения диэлектриках. Относительное удлинение пропорционально квадрату напряженности поля: $\Delta L/L \sim E^2$. Обратного эффекта не существует – если диэлектрик растягивать, электрическое поле в нем не возникает. Такой электромеханический эффект называется **электрострикцией** (лат. strictio – сжатие, натягивание). В обычных твердых диэлектриках электрострикция очень мала и не имеет практического значения. Значительная электрострикция наблюдается у некоторых жидких и газообразных диэлектриков. В твердотельных сегнето-

электрических материалах электрострикция велика за счет переориентации доменов.

В некоторых кристаллических диэлектриках имеет место и другой эффект: на поверхности кристаллов под влиянием механических деформаций появляется электрический заряд. Этот эффект поляризации диэлектрика под влиянием механических напряжений получил название пьезоэлектрического эффекта, или **пьезоэлектричества** (лат. *piezo* – давить). Сами диэлектрики, в которых это явление наблюдается, называются пьезоэлектриками. Пьезоэлектриком называется диэлектрик, поляризованность которого возникает и может меняться при механическом воздействии на него.

Электрические свойства кристаллов связаны с их симметрией. Пьезоэлектрический эффект наблюдается у тех кристаллов, у которых нет центра симметрии, но которые имеют поляризационную ось. Как известно, существует 32 кристаллографических класса. Кристаллы 20 классов не имеют центра симметрии, причем из них кристаллы 10 классов имеют полярную ось.

На рис. 3.1 изображены модели двумерных решеток.

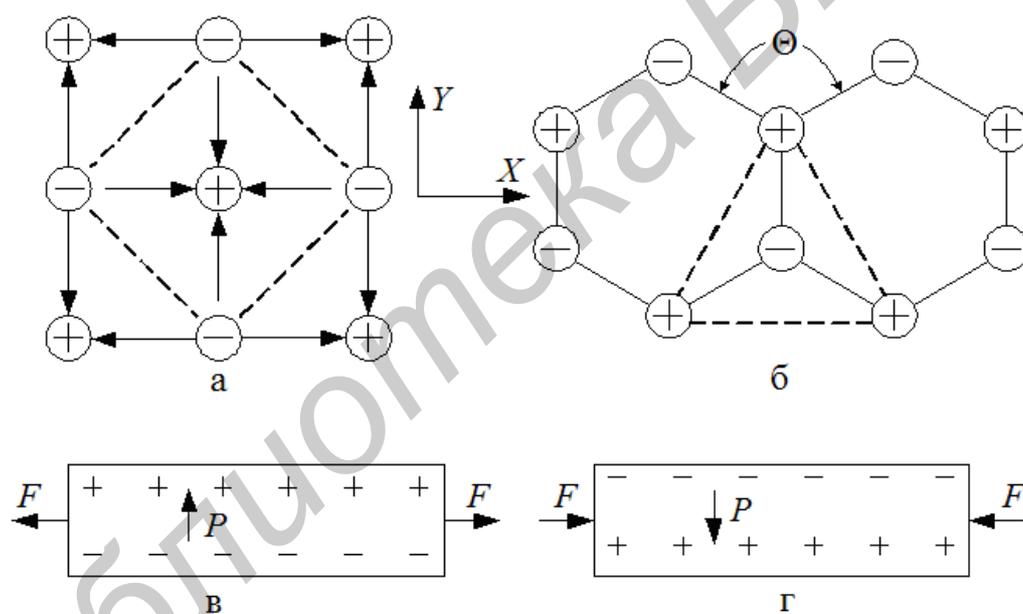


Рис. 3.1. Модели двумерных решеток:

а – решетка кристалла, в котором наблюдается только электрострикция; б – решетка кристалла, в котором наблюдаются электрострикция и пьезоэлектрический эффект; в, г – пьезоэлектрические заряды и взаимная ориентация векторов силы и поляризованности

Решетка на рис. 3.1, а имеет форму квадрата. Пунктирный квадрат представляет основную ячейку с центром симметрии. В кристалле такого типа наблюдается только электрострикция. Механическая деформация такой решетки не приводит к появлению зарядов на поверхности кристалла (т. е. к поляризации), так как все ионы смещаются одинаково.

На рис. 3.1, б изображена решетка кристалла, который является пьезоэлектриком. Пунктирным треугольником показана элементарная ячейка, которая не имеет центра симметрии, но имеет полярную ось R.

Если растягивать кристалл вдоль оси «х», то угол Θ будет возрастать и это приведет к появлению отрицательных зарядов на нижней поверхности и положительных – на верхней (рис. 3.1, в). Если, наоборот, кристалл сжимать вдоль оси «х» (рис. 3.1, г), угол Θ будет уменьшаться. При этом на нижней поверхности появится положительный заряд, а на верхней – отрицательный.

В табл. 3.1 приведены названия и химические формулы характерных монокристаллических пьезоэлектриков.

Таблица 3.1

Пьезоэлектрические материалы

Материал	Химическая формула	Относительная величина эффекта
γ -кварц	SiO_2	Слабый
Сегнетова соль	$\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	Очень сильный
Фосфат аммония	$\text{NH}_4\text{H}_2\text{PO}_4$	Сильный
Фосфат калия	KH_2PO_4	Умеренный
Турмалин	$(\text{Fe, Cr, Na, K, Li})_4\text{Mg}_{12}\text{B}_6\text{Al}_{16}\text{H}_8 \cdot \text{Si}_{12}\text{O}_{69}$	Слабый

Из табл. 3.1 видно, что пьезоэлектрический эффект наблюдается в некоторых несегнетоэлектрических кристаллах (γ -кварц и турмалин), в сегнетоэлектриках (сегнетова соль, фосфат калия) и в антисегнетоэлектриках (фосфат аммония).

В настоящее время используются не только пластинки, вырезанные из монокристаллов, но и поликристаллические материалы – заполяризованная сегнетоэлектрическая керамика.

3.1.2. Прямой и обратный пьезоэлектрические эффекты

Эффект поляризации пьезоэлектрического кристалла под влиянием механических напряжений называется прямым пьезоэлектрическим эффектом. Прямой пьезоэлектрический эффект может быть продольным и поперечным.

На рис. 3.2 эти названия пояснены. На рис. 3.2, а отображена иллюстрация прямого продольного и прямого поперечного (рис. 3.2, б) пьезоэлектрических эффектов.

Существует и обратный пьезоэлектрический эффект. Он заключается в том, что при приложении электрического поля кристалл растягивается или сжимается в зависимости от направления поля.

Из анализа рис. 3.2, б можно заключить, что если поле направлено вдоль полярной оси, то кристалл сожмется; если поле направлено в противо-

положительную сторону полярной оси, то кристалл растянется. Обратный пьезоэлектрический эффект в некоторой степени аналогичен электрострикции, но изменение размеров кристалла пропорционально напряженности электрического поля в первой степени: $\Delta L \sim E$.

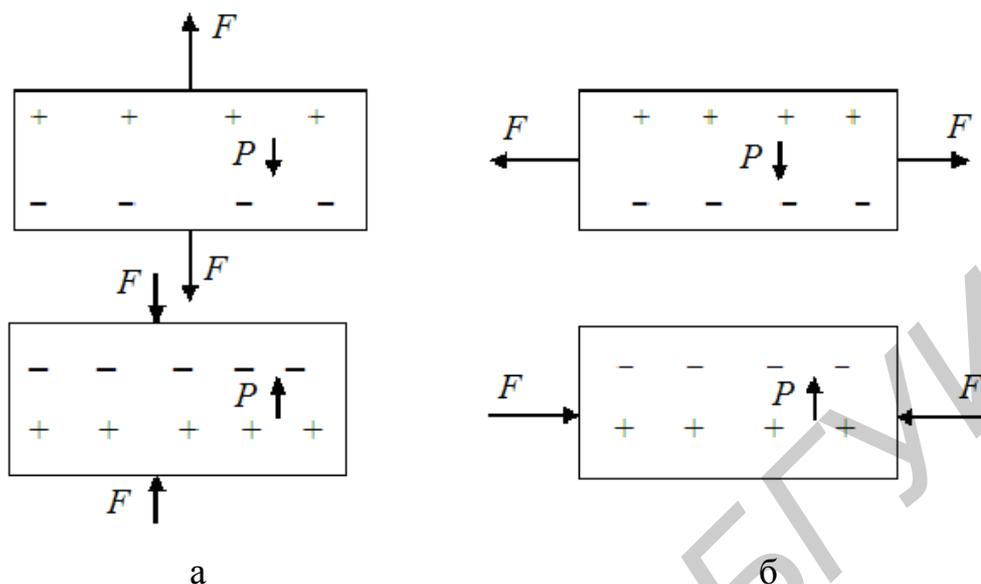


Рис. 3.2. Продольный (а) и поперечный (б) пьезоэлектрический эффект

Следует напомнить, что в пьезоэлектриках под влиянием электрического поля будут иметь место оба электромеханических эффекта – и электрострикция, при которой $\Delta L \sim E^2$, и пьезоэффект, при котором $\Delta L \sim E$.

Графически это различие выглядит так, как показано на рис. 3.3.

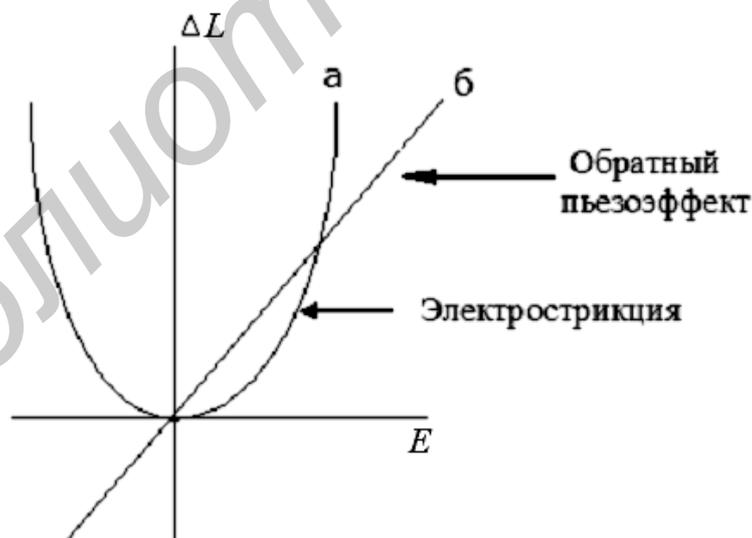


Рис. 3.3. Объяснение эффекта электрострикции (а) и обратного пьезоэффекта (б)

На рис. 3.3 изображена зависимость удлинения кристалла от влияния поля в случае электрострикции и пьезоэффекта.

При электрострикции деформация всегда положительна, при обрат-

ном пьезоэффекте деформация зависит от знака электрического поля и может быть как положительной, так и отрицательной. В слабых полях всегда преобладает изменение размеров образца за счет обратного пьезоэффекта, но при большой напряженности поля изменение размеров за счет пьезоэффекта и электрострикции могут быть сравнимы. Для кварцевого преобразователя это имеет место при $E = 30$ кВ/см. Это приводит к появлению нелинейных искажений (кристалл будет колебаться с удвоенной частотой).

3.1.3. Тензор механического напряжения

Если кристалл растягивают или сжимают, он приходит в напряженное состояние. Сила F , действующая на единицу площади S , называется механическим напряжением σ :

$$\frac{F}{S} = \sigma \left[\frac{\text{единица силы}}{\text{единица площади}}; \frac{\text{кг}}{\text{см}^2} \right]. \quad (3.1)$$

Механическое напряженное состояние описывается тензором напряжений второго ранга.

Представим себе единичный куб, вырезанный из кристалла (рис. 3.4).

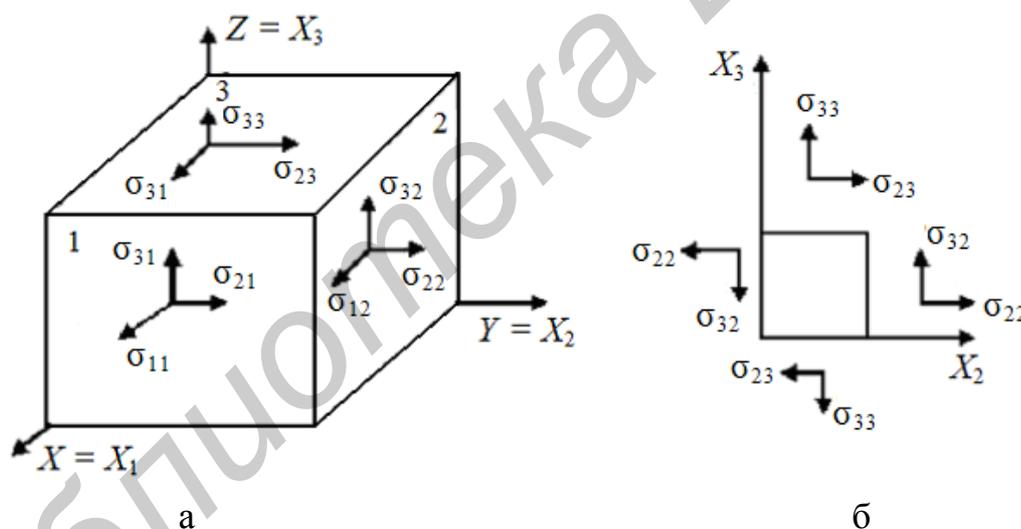


Рис. 3.4. Механические напряжения, действующие в объеме твердого тела

На рис. 3.4 изображены механические напряжения, действующие на элемент объема (см. рис. 3.4, а), и проекция элемента объема на плоскость « X_2-X_3 » (см. рис. 3.4, б) (цифры 1, 2, 3 обозначают видимые на рис. 3.4, а грани).

Напряжения, направленные нормально к граням (σ_{11} , σ_{22} , σ_{33}), называются нормальными напряжениями. На рис. 3.4, а эти напряжения растягивают кристалл. Напряжения, действующие на невидимые на рис. 3.4, а грани, не показаны. В обозначении напряжений первое число указывает направление по оси координат, второе – номер грани.

Так, σ_{11} означает нормальное напряжение, действующее вдоль оси $X=X_1$ на переднюю (на рис. 3.4, а – первую) грань. Соответственно σ_{22} – нормальное напряжение, действующее вдоль оси $Y=X_2$ на правую грань куба и т. д. Механические напряжения, направленные вдоль граней (σ_{12} , σ_{21} , σ_{13} , σ_{31} , σ_{23} , и σ_{32}), называются тангенциальными, или касательными, напряжениями. Они вызывают в кристалле деформации сдвига. Механические напряжения не являются векторными величинами, такими, как, например, напряженность электрического поля. Если электрическое поле кристалла направлено снизу вверх, то на нижней грани вектор электрического поля направлен к элементарному объему, а на верхней грани – от него, т. е. на обеих гранях объема вектор электрического поля имеет одно и то же направление. Механические напряжения на противоположных гранях элементарного объема направлены противоположно друг другу.

Напряженность электрического поля – вектор. Вектор полностью определяется заданием значений трех его компонент вдоль координатных осей $E = (E_1, E_2, E_3)$. Векторы являются также тензорами первого ранга ($3^1 = 3$). Механически напряженное состояние кристалла описывается заданием девяти компонент напряжений, т. е. тензором второго ранга ($3^2 = 9$), который записывается следующим образом:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}.$$

По диагонали этой таблицы стоят нормальные напряжения, все остальные напряжения – тангенциальные.

На рис. 3.4, б представлена двухмерная модель кристалла, расположенного в плоскости «Y-Z».

Как следует из рис. 3.4, б, напряжения σ_{23} создают пару сил, которая стремится повернуть объем по часовой стрелке. Напряжения σ_{32} создают пару сил, стремящуюся повернуть кристалл против часовой стрелки. Поскольку элемент находится в равновесии, обе пары сил равны по величине; поэтому

$$\sigma_{23} = \sigma_{32}.$$

Аналогично можно показать, что $\sigma_{12} = \sigma_{21}$ и $\sigma_{13} = \sigma_{31}$. Таким образом, механически напряженное состояние кристалла можно описать меньшим числом компонент, в данном случае – шестью компонентами вместо девяти. В связи с этим производят замену обозначений у напряжений. Новые обозначения называют матричными обозначениями.

Таким образом, получается, что $\sigma_{11} = \sigma_1$; $\sigma_{22} = \sigma_2$; $\sigma_{33} = \sigma_3$; $\sigma_{23} = \sigma_{32} = \sigma_4$; $\sigma_{14} = \sigma_{31} = \sigma_5$; $\sigma_{12} = \sigma_{21} = \sigma_6$.

При решении конкретных задач механически напряженное состояние кристалла описывается тензором второго ранга либо матрицей, которые изображены ниже.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$

Тензор второго ранга

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{pmatrix}$$

Матрица

Отмеченное выше равенство компонент σ_{ij} и σ_{ji} в тензоре механических напряжений остается справедливым и в том случае, если механические напряжения неоднородны. Твердое тело при этом не находится в статическом равновесии. Не приводя доказательства этого положения, получим уравнение движения элементарного объема тела, внутри которого действуют неоднородные напряжения.

3.1.4. Уравнение движения элементарного объема напряженного тела

Оставим в силе прежнее определение компонент напряжения, но будем учитывать то, что теперь уже напряжения изменяются от точки к точке внутри тела. Дадим определение понятию «напряжение в точке».

Присвоим это наименование пределу отношения силы, действующей на некоторую поверхность, к площади этой поверхности, когда последняя стремится к нулю. Так, составляющая силы, действующей в направлении оси X_1 на элемент поверхности площадью dS , перпендикулярной этой оси, определится следующим образом:

$$dF = (\sigma_{11} + \sigma_{21} + \sigma_{31}) dS \text{ при } dS \rightarrow 0.$$

При этом сила считается положительной, если она действует вдоль положительного направления оси X_1 и создается действием частей тела с $-X_1$ -стороны элемента поверхности на части тела, находящиеся со $+X_1$ -стороны этого элемента. При этом полагается, что начало координат находится в центре этого элемента.

Рассмотрим теперь находящийся внутри напряженного тела элементарный прямоугольный параллелепипед с центром в начале координат и ребрами длиной dX_1 , dX_2 и dX_3 , параллельными осям координат (рис. 3.5). Здесь изображены напряжения, действующие вдоль оси X_1 на элементарный параллелепипед в неоднородно напряженном теле.

Пусть σ_{ik} – напряжения в начале координат ($X_1 = 0$; $X_2 = 0$). Найдем уравнение движения этого параллелепипеда в направлении X_1 .

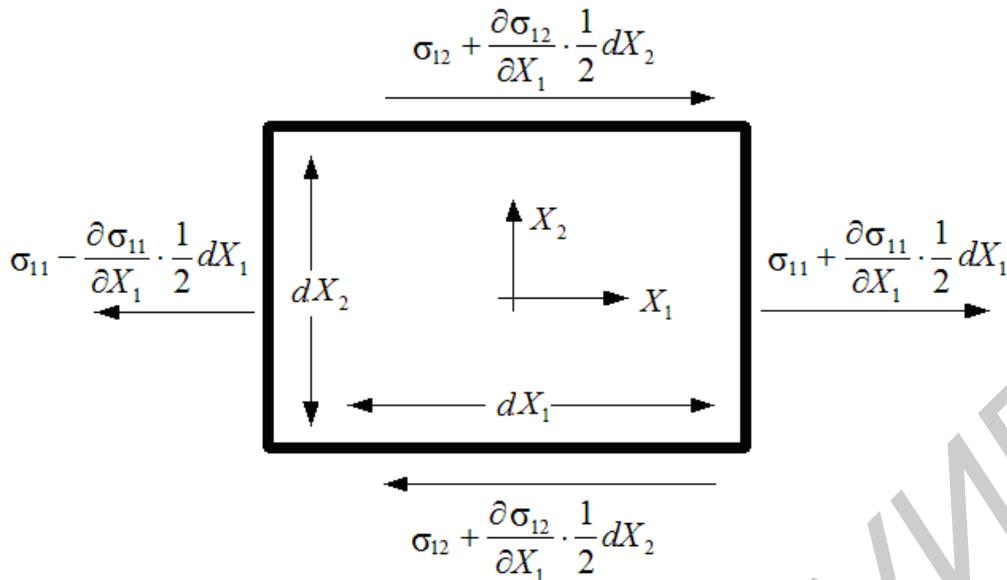


Рис. 3.5. Проекции механических напряжений в пьезоэлектрике

Средние значения компоненты σ_{11} для каждой из двух граней, перпендикулярных оси X_1 , в соответствии с рис. 3.5 равны $\sigma_{11} - \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial X_1} \cdot \frac{1}{2} dX_1$ и $\sigma_{11} + dX_1 \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial X_1} \cdot \frac{1}{2} dX_1$. Отсюда силы F_1 и F_2 , действующие в направлении X_1 на эти грани, определяются следующим образом:

$$F_1 = - \left(\sigma_{11} - \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial X_1} \cdot \frac{1}{2} dX_1 \right) dX_2 dX_3;$$

$$F_2 = \left(\sigma_{11} + \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial X_1} \cdot \frac{1}{2} dX_1 \right) dX_2 dX_3.$$

Результирующая сила при этом $F = F_1 + F_2$ равна $\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial X_1} dX_1 dX_2 dX_3$.

Силы, действующие в направлении оси X_2 на две грани, перпендикулярные оси X_2 , по аналогии записываются следующим образом: $-\left(\sigma_{12} - \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial X_2} \cdot \frac{1}{2} dX_2 \right) dX_3 dX_1$ и $\left(\sigma_{12} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial X_2} \cdot \frac{1}{2} dX_2 \right) dX_3 dX_1$, а их результирующая как $\frac{\partial \sigma_{12}}{\partial X_2} dX_1 dX_2 dX_3$.

Результирующая сила, действующая на грани, перпендикулярные оси X_3 , равна $\frac{\partial \sigma_{13}}{\partial X_3} dX_1 dX_2 dX_3$.

Находя равнодействующую силу для трех пар граней и применяя второй закон Ньютона ($F = m \frac{\partial^2 X_1}{\partial t^2}$), получим следующее уравнение для направления X_1 :

$$\frac{\partial \sigma_{11}}{\partial X_1} + \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial X_2} + \frac{\partial \sigma_{13}}{\partial X_3} = \rho \frac{\partial^2 X_1}{\partial t^2}. \quad (3.2)$$

В этом уравнении ρ – это плотность (удельный вес) твердого тела.

Рассматривая силы, действующие в направлениях X_2 и X_3 , получим два аналогичных уравнения:

$$\frac{\partial \sigma_{21}}{\partial X_1} + \frac{\partial \sigma_{22}}{\partial X_2} + \frac{\partial \sigma_{23}}{\partial X_3} = \rho \frac{\partial^2 X_2}{\partial t^2}; \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial y_{31}}{\partial X_1} + \frac{\partial y_{32}}{\partial X_2} + \frac{\partial y_{33}}{\partial X_3} = c \frac{\partial^2 X_3}{\partial t^2}. \quad (3.4)$$

Уравнения (3.2), (3.3) и (3.4) связывают пространственные изменения напряжений в твердом теле с ускорениями его элементов. Эти уравнения являются базовыми при описании распространения упругих колебаний в пьезоэлектриках.

3.1.5. Пьезоэлектрические модули; прямой и обратный пьезоэффекты

Поляризованность P пропорциональна механическому напряжению σ : $P = d\sigma$, где d – константа, называемая пьезоэлектрическим модулем. Из этого уравнения следует, что замена напряжения растяжения напряжением сжатия приводит к изменению направления поляризованности на обратное.

Пьезомодуль d – величина, численно равная плотности связанного заряда, появляющегося на поверхности пьезоэлектрика при единичном напряжении. В СИ размерность этой величины – Кл/м². Следует обратить внимание на то, что в теории упругости буквой σ обозначают механическое напряжение, а в электротехнике этой буквой обозначают несколько электрических величин и, в частности, поверхностную плотность электрического заряда. Это надо помнить и называть величину в соответствии с ее физическим смыслом.

Поляризованность задается тремя взаимно перпендикулярными компонентами $P = (P_1, P_2, P_3)$, где P_1 – поляризованность объема в направлении оси X_1 ; P_2 – поляризованность объема в направлении оси X_2 ; P_3 – поляризованность объема в направлении оси X_3 .

Каждая компонента поляризованности P_1 линейно связана со всеми компонентами напряжения σ_{jk} через компоненты пьезомодулей d_{ijk} . Для P_1 уравнение записывается так:

$$P_1 = d_{111}\sigma_{11} + d_{112}\sigma_{12} + d_{113}\sigma_{13} + d_{121}\sigma_{21} + d_{122}\sigma_{22} + d_{123}\sigma_{23} + \\ + d_{131}\sigma_{31} + d_{132}\sigma_{32} + d_{133}\sigma_{33}.$$

Для P_2 и P_3 можно записать аналогичные уравнения:

$$P_2 = d_{211} \sigma_{11} + d_{212} \sigma_{12} + d_{213} \sigma_{13} + d_{221} \sigma_{21} + d_{222} \sigma_{22} + d_{223} \sigma_{23} + d_{231} \sigma_{31} + d_{232} \sigma_{32} + d_{233} \sigma_{33};$$

$$P_3 = d_{311} \sigma_{11} + d_{312} \sigma_{12} + d_{313} \sigma_{13} + d_{321} \sigma_{21} + d_{322} \sigma_{22} + d_{323} \sigma_{23} + d_{331} \sigma_{31} + d_{332} \sigma_{32} + d_{333} \sigma_{33}.$$

Таким образом, поляризованность пьезоэлектрика описывается двадцатью семью компонентами пьезомодуля. При этом пьезомодуль – тензор третьего ранга ($3^3 = 27$). Его компоненты можно переписать в виде таблицы, в которой для удобства изменен порядок следования индексов тензора механических напряжений:

	σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{23}	σ_{32}	σ_{31}	σ_{13}	σ_{12}	σ_{21}
P_1	d_{111}	d_{122}	d_{133}	d_{123}	d_{132}	d_{131}	d_{113}	d_{112}	d_{121}
P_2	d_{211}	d_{222}	d_{233}	d_{223}	d_{232}	d_{231}	d_{213}	d_{212}	d_{221}
P_3	d_{311}	d_{322}	d_{333}	d_{323}	d_{332}	d_{331}	d_{313}	d_{312}	d_{321}

В сокращенном виде система уравнений для P_1 , P_2 и P_3 выглядит следующим образом:

$$P_i = d_{ijk} \sigma_{jk}; \quad i, j, k = 1, 2, 3.$$

Поскольку $\sigma_{12} = \sigma_{21}$, $\sigma_{13} = \sigma_{31}$ и $\sigma_{23} = \sigma_{32}$, постольку предполагают, что касательные напряжения σ_{12} и σ_{21} вносят одинаковый вклад в P_1 , а поэтому без доказательств принимают, что

$$d_{112} = d_{121}; \quad d_{113} = d_{131}; \quad d_{123} = d_{132}.$$

Иными словами, предполагают, что тензор d_{ijk} симметричен по индексам j и k , т. е.

$$d_{ijk} = d_{ikj}.$$

Это обстоятельство дает возможность исключить из рассмотрения часть пьезоэлектрических коэффициентов и использовать более короткие матричные обозначения. Перепишем пьезомодули, учитывая симметричность по индексам $d_{ijk} = d_{ikj}$ и упрощенное уже обозначение индексов у напряжений:

$$\sigma_{11} = \sigma_1; \quad \sigma_{22} = \sigma_2; \quad \sigma_{33} = \sigma_3; \quad \sigma_{23} = \sigma_4; \quad \sigma_{13} = \sigma_5; \quad \sigma_{12} = \sigma_6;$$

$$d_{111} = d_{11}; \quad d_{211} = d_{21}; \quad d_{311} = d_{31}; \quad d_{123} = \frac{1}{2}d_{14}; \quad d_{213} = \frac{1}{2}d_{25}.$$

Таким образом, при замене двух одинаковых индексов у пьезомодулей их величина не изменяется, а при замене двух разных индексов – удваивает-

ся, т. е. вводится множитель $\frac{1}{2}$. Это делается для того, чтобы в уравнении для P при суммировании одинаковых членов избежать появления множителя 2.

Запишем уравнение для P_1 в матричной форме:

$$P_1 = d_{11}\sigma_1 + \frac{1}{2} d_{16}\sigma_6 + \frac{1}{2} d_{15} \sigma_5 + \frac{1}{2} d_{16} \sigma_6 + \\ + d_{12} \sigma_2 + \frac{1}{2} d_{14} \sigma_4 + \frac{1}{2} d_{15} \sigma_5 + \frac{1}{2} d_{14} \sigma_4 + d_{13} \sigma_3 .$$

Сложим подобные члены и, расположив члены в порядке возрастания индекса при пьезомодуле, получим

$$P_1 = d_{11}\sigma_1 + d_{12}\sigma_2 + d_{13} \sigma_3 + d_{14} \sigma_4 + d_{15} \sigma_5 + d_{16} \sigma_6 .$$

Аналогичные выражения получаются для P_2 и P_3 :

$$P_2 = d_{21}\sigma_1 + d_{22}\sigma_2 + d_{23} \sigma_3 + d_{24} \sigma_4 + d_{25} \sigma_5 + d_{26} \sigma_6; \\ P_3 = d_{31}\sigma_1 + d_{32}\sigma_2 + d_{33} \sigma_3 + d_{34} \sigma_4 + d_{35} \sigma_5 + d_{36} \sigma_6 .$$

Теперь матрица пьезомодулей примет следующий вид:

	σ_{11}	σ_{22}	σ_{33}	σ_{23}	σ_{32}	σ_{31}	σ_{13}	σ_{12}
P_1	d_{111}	d_{122}	d_{133}	d_{123}	d_{132}	d_{131}	d_{113}	d_{112}
P_2	d_{211}	d_{222}	d_{233}	d_{223}	d_{232}	d_{231}	d_{213}	d_{212}
P_3	d_{311}	d_{322}	d_{333}	d_{323}	d_{332}	d_{331}	d_{313}	d_{312}

При рассмотрении кристаллов различных кристаллографических классов можно увидеть, что при действии простых напряжений (сжатия или растяжения) часть пьезомодулей обращается в нуль, так как не во всех кристаллографических направлениях при деформации на поверхности появляется нескомпенсированный заряд. Иными словами, для каких-либо кристаллографических направлений структура кристалла будет симметричной. Так, для кристалла γ -кварца (группа симметрии 3:2) матрица пьезомодулей прямого пьезоэффекта выглядит таким образом:

	σ_1	σ_2	σ_3	σ_4	σ_5	σ_6		σ_1	σ_2	σ_3	σ_4	σ_5	σ_6
Ось $X_1 = X$ P_1	d_{11}	$-d_{11}$	0	d_{14}	0	0	= P_1	d_{11}	$-d_{11}$	0	d_{14}	0	0
$X_2 = Y$ P_2	0	0	0	0	$-d_{14}$	$-2d_{14}$	P_2	0	0	0	0	d_{25}	d_{26}
$X_3 = Z$ P_3	0	0	0	0	0	0	P_3	0	0	0	0	0	0

Для обратного пьезоэффекта матрица модулей выглядит следующим образом:

	E_1	E_2	E_3
r_1	d_{11}	0	0
r_2	$-d_{11}$	0	0
r_3	0	0	0
r_4	d_{14}	0	0
r_5	0	$-d_{14}$	0
r_5	0	$-2d_{14}$	0

Из анализа матрицы видно, что деформация в направлении оси Z (ее называют оптической осью) не приводит к поляризации – все пьезомодули равны нулю. При деформации в направлении осей X и Y часть пьезомодулей тоже обращается в нуль. Матрица пьезомодулей указывает, в каких направлениях надо вырезать пластинки из монокристалла, чтобы получить наибольший пьезоэлектрический эффект.

Деформацию при обратном пьезоэлектрическом эффекте выражают через те же пьезоэлектрические модули, что и при прямом пьезоэффекте. Так, если к кристаллу приложено электрическое поле E (E_1, E_2, E_3), то в кристалле возникают деформации, которые описываются следующими уравнениями:

$$\begin{aligned} l_{11} &= d_{111} E_1 + d_{211} E_2 + d_{311} E_3; \\ l_{12} &= d_{112} E_1 + d_{212} E_2 + d_{312} E_3; \\ l_{23} &= d_{123} E_1 + d_{223} E_2 + d_{323} E_3. \end{aligned}$$

В общем виде эти уравнения записываются таким образом: $l_{jk} = d_{ijk} E_i$.

Мы не будем далее углубляться в математическую сторону описания прямого и обратного пьезоэффекта, так как нам важно было понять физическую сущность рассматриваемых явлений.

3.1.6. Резонансные колебания пьезоэлектрических элементов

Пьезоэлектрическим резонатором называется устройство, состоящее из определенным образом обработанного пьезоэлектрического кристалла и приспособления, предназначенного для закрепления и соединения его с внешней электрической цепью.

Электрическое поле, подведенное к пьезоэлектрическому элементу такого резонатора, будет вызывать его механические деформации. Если это поле меняется со временем по гармоническому закону, то возникающие деформации будут знакопеременными и, таким образом, в кристалле будут существовать механические колебания.

Однако, как всякая механическая система, при некоторой частоте вынужденных колебаний кристаллический элемент войдет в состояние резонанса.

В этом состоянии вследствие прямого пьезоэффекта он будет оказывать активное обратное воздействие на внешнюю электрическую цепь. Такое воздействие можно использовать как для стабилизации частоты колебаний в упомянутой цепи, так и для выделения сигнала, частота которого совпадает с

собственной частотой резонатора.

В пьезоматериалах могут быть реализованы следующие виды колебаний (деформаций):

- продольные (колебания сжатия – растяжения по длине);
- по толщине;
- контурные;
- изгибные.

В настоящей лабораторной работе анализируются только продольные колебания пьезоэлектрических материалов.

3.1.7. Продольные колебания в пьезоэлектриках

Рассмотрим стержень, вырезанный из пьезоэлектрического материала таким образом, что его длина l намного больше ширины b и толщины h (рис. 3.6). При этом будем считать, что в декартовых координатах длина стержня лежит параллельно оси X_2 (конкретно для γ -кварца – вдоль кристаллографической оси Y), а толщина и ширина параллельны осям X_1 и X_3 соответственно. На рис. 3.6 изображена конфигурация стержня из пьезоэлектрического материала с нанесенными на него идеальными электродами.

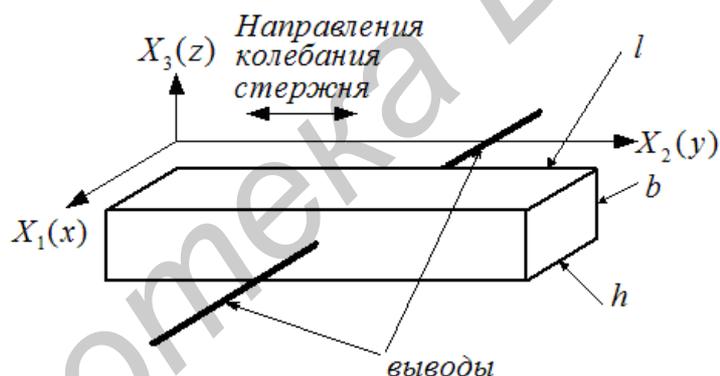


Рис. 3.6. Схема устройства резонатора на основе пьезоэлектрика

Как видно из рис. 3.6, плоскости электродов для приложения к стержню электрического сигнала расположены перпендикулярно оси координат X_1 и параллельно плоскости, образованной осями X_2 и X_3 . Следовательно, отличной от нуля будет лишь плотность поверхностного заряда σ_1 (не путать с механическим напряжением, также обозначаемым значком σ). Это связано с тем, что электрическое поле прикладывается извне только вдоль оси X_1 . Вдоль осей X_2 и X_3 электроды образуют эквипотенциальные поверхности, а поэтому соответствующие поля отсутствуют: $E_2 = E_3 = 0$. При этом

$$\frac{\partial E_1}{\partial X_2} = \frac{\partial E_1}{\partial X_3} = 0.$$

Поскольку полагается, что толщина стержня h мала, то градиент напряжения можно считать постоянным по всей толщине.

На поверхностях граней, перпендикулярных толщине h (поверхности с электродами), механические напряжения отсутствуют. Толщина стержня мала, поэтому можно считать, что и внутри него эти напряжения малы, так что

$$\sigma_{11} = \sigma_{12} = \sigma_{13} = 0.$$

Для того чтобы это легко воспринималось, нужно опять обратиться к рис. 3.4, а и соответствующему тексту.

Точно так же, поскольку ширина стержня мала,

$$\sigma_{33} = \sigma_{32} = \sigma_{31} = 0.$$

По направлению длины стержня напряжения на поверхностях равны σ_{22} , σ_{23} и σ_{21} . Однако $\sigma_{23} = \sigma_{21} = 0$. Следовательно, конечной величиной является только σ_{22} .

Обратимся теперь к формулам (3.1-3.3). Эти уравнения используем теперь для описания поведения стержня, изображенного на рис. 3.6.

Пусть на такой стержень воздействует внешнее электрическое поле. Вследствие обратного пьезоэффекта внутри стержня появятся механические напряжения. Эти напряжения вызовут смещения отдельных его элементов. Обозначим здесь и далее смещения указанных элементов в направлении осей X_1 , X_2 и X_3 через U_1 , U_2 и U_3 соответственно. Тогда система уравнений, состоящая из формул (3.2), (3.3) и (3.4), может быть записана в следующем виде:

$$\rho \frac{\partial^2 U_k}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_{kl}}{\partial X_{kl}}; \quad k, l = 1, 2, 3. \quad (3.5)$$

Для стержня, длина которого совпадает по направлению с осью X_2 , а ширина и толщина пренебрежимо малы, единственной конечной компонентой напряжения, как уже отмечалось выше, является компонента σ_{22} . Поэтому система уравнений (3.5) сводится к одному уравнению, которое запишем в матричных обозначениях:

$$\rho \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = \frac{\partial \sigma_2}{\partial X_2}. \quad (3.6)$$

Преобразуем эту формулу. Учитывая, что $E_2 = E_3 = 0$ и $\sigma_1 = \sigma_3 = \sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 = 0$, из уравнения $r_2 = r_{22} = S_{21}\sigma_{11} + S_{22}\sigma_{22} + S_{23}\sigma_{33} + S_{24}\sigma_{24} + S_{25}\sigma_{31} + S_{26}\sigma_{12} + d_{12}E_1 + d_{22}E_2 + d_{32}E_3$ получим

$$r_2 = S_{22}\sigma_{22} + d_{12}E_1 = S_{22}\sigma_2 + d_{12}E_1. \quad (3.7)$$

В этих формулах r_{22} – относительное удлинение стержня вдоль оси X_2 ; S_{ij} – константы гибкости, входящие в закон Гука ($r = S\sigma$).

В правой части формулы (3.7) слагаемое $S_{22}\sigma_{22}$ определяет деформацию, обусловленную чисто механическим напряжением. Слагаемое $d_{12}E_1$ описывает деформацию, обусловленную обратным пьезоэффектом.

С учетом всего вышесказанного из формулы (3.7) легко определить величину σ_{22} :

$$\sigma_{22} = \frac{r_2}{S_{22}} - \frac{d_{12}}{S_{22}} E_1. \quad (3.8)$$

Поскольку r_2 есть относительное удлинение $\partial U_2 / \sigma X_2$ вдоль оси X_2 , уравнение движения (3.6) примет следующий вид:

$$\rho \frac{\partial^2 U_2}{\partial t^2} = \frac{1}{S_{22}} \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2} + \frac{d_{12}}{S_{22}} \frac{\partial E_1}{\partial X_2}. \quad (3.9)$$

Как уже отмечалось выше, величина E_1 от координаты X_2 не зависит. Поэтому $\frac{\partial E_1}{\partial X_2}$ в формуле (3.9) обращается в нуль:

$$\rho \frac{\partial^2 U_2}{\partial t^2} = \frac{1}{S_{22}} \frac{\partial^2 U_2}{\partial X_2^2}. \quad (3.10)$$

Итак, получено хорошо известное дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных. Его решение может быть легко найдено, если ввести практически оправданное допущение о том, что U_2 изменяется со временем по гармоническому закону:

$$U_2 = U_0 e^{j\omega t}. \quad (3.11)$$

Тогда формула (3.10) после подстановки в нее (3.11) примет следующий вид:

$$\frac{d^2 U_0}{dX_2^2} + \omega^2 \rho S_{22} U_0 = \frac{d^2 U_0}{dX_2^2} + \frac{\omega^2}{V^2} U_0 = 0. \quad (3.12)$$

В формуле (3.12) введено следующее обозначение:

$$V = \sqrt{\frac{1}{\rho S_{22}}}. \quad (3.13)$$

Как известно из механики упругих сред, V – это скорость распространения упругой волны в материале.

Решение уравнения (3.12) при произвольных граничных условиях имеет следующий вид:

$$U_0 = A \cos \frac{\omega X_2}{V} + B \sin \frac{\omega X_2}{V}. \quad (3.14)$$

Для определения постоянных A и B используем также формулу (3.7). Продифференцировав формулу (3.14) по X_2 , получим

$$\frac{dU_0}{dX_2} = r_2 = \frac{\omega}{V} (-A \sin \frac{\omega X_2}{V} + B \cos \frac{\omega X_2}{V}) = S_{22} \sigma_{22} + d_{12} E_1. \quad (3.15)$$

Когда $X_2 = 0$ или $X_2 = l$ (l – длина стержня), то для свободного, не зажатого на концах пьезоэлемента напряжение $\sigma_{22} = 0$. При этом, если $X_2 = 0$, то

$$\frac{\omega}{V} B = d_{12} E_1, \quad (3.16)$$

а когда $X_2 = l$, то

$$\frac{\omega}{V} (-A \sin \frac{\omega l}{V} + B \cos \frac{\omega l}{V}) = d_{12} E_1. \quad (3.17)$$

Определим отсюда постоянные A и B и подставим их в формулу (3.17). При этом получим следующее:

$$r_2 = d_{12}E_1 \left(\cos \frac{\omega X_2}{V} + \frac{1 - \cos \frac{\omega l}{V}}{\sin \frac{\omega l}{V}} \sin \frac{\omega X_2}{V} \right) = \frac{d_{12}E_1}{\sin \frac{\omega l}{V}} \left(\sin \frac{\omega(l - X_2)}{V} + \sin \frac{\omega X_2}{V} \right). \quad (3.18)$$

Последняя формула позволяет определить амплитуду деформации в каждой точке X_2 стержня, совершающего гармонические колебания сжатия – растяжения по длине (см. рис. 3.6).

3.2. Частотная характеристика пьезорезонатора

Под влиянием возникших деформаций в пьезоэлектрике возникает эффект его поляризации, т. е. будет наблюдаться «индуцированный» прямой пьезоэффект. Численное значение вектора поляризованности P равно плотности поверхностного сопутствующего заряда $\sigma_{\text{зар}}$. В соответствии с рис. 3.6 и сделанными при его обсуждении замечаниями будет существовать только одна компонента вектора P , компонента, направленная параллельно оси X_1 , т. е. P_1 . Соответственно этому отличной от нуля будет и величина плотности поверхностного заряда $\sigma_{1\text{зар}}$. Определим величину $\sigma_{1\text{зар}}$.

Для этого воспользуемся следующими известными соотношениями:

$$D_1 = \varepsilon_0 E_1 + P_1 = \varepsilon_0 E_1 + \sigma_{1\text{зар}}; \quad (3.19)$$

$$D_1 = d_{11}\sigma_{11} + d_{12}\sigma_{22} + d_{13}\sigma_{33} + d_{14}\sigma_{23} + d_{15}\sigma_{31} + d_{16}\sigma_{12} + \varepsilon_0 \varepsilon_1 E_1 + \varepsilon_0 \varepsilon_2 E_2 + \varepsilon_0 \varepsilon_3 E_3 = d_{12}\sigma_{22} + \varepsilon_0 \varepsilon_1 E_1. \quad (3.20)$$

Во второй формуле для D_1 подчеркнуты те компоненты, которые отличны от нуля. Остальные компоненты равны нулю по причинам, обсуждавшимся в начале подразд. 3.1.7.

Приравняем правые части этих двух формул:

$$\varepsilon_0 E_1 + \sigma_{1\text{зар}} = d_{12}\sigma_{22} + \varepsilon_0 \varepsilon_1 E_1.$$

Формула для определения $\sigma_{1\text{зар}}$ при этом будет выглядеть следующим образом:

$$\sigma_{1\text{зар}} = d_{12}\sigma_{22} + \varepsilon_0 (\varepsilon_1 - 1)E_1. \quad (3.21)$$

Ранее было получено значение σ_{22} в явном виде (см. формулу (3.8)). Подставим это значение σ_{22} в формулу (21). При этом получим следующее:

$$\begin{aligned} \sigma_{1\text{зар}} &= \left(\frac{r_2}{S_{22}} - \frac{d_{12}}{S_{22}} E_1 \right) d_{12} + \varepsilon_0 (\varepsilon_1 - 1)E_1 = \frac{r_2 d_{12}}{S_{22}} + \left[\varepsilon_0 (\varepsilon_1 - 1) - \frac{d_{12}^2}{S_{22}} \right] E_1 = \\ &= \frac{r_2 d_{12}}{S_{22}} + \varepsilon_0 (\varepsilon_1^1 - 1)E_1; \end{aligned} \quad (3.22)$$

$$\varepsilon_1^1 = \varepsilon_1 - \frac{d_{12}^2}{\varepsilon_0 S_{22}}. \quad (3.23)$$

Определим теперь ток через пьезоэлектрический резонатор, конструкция которого изображена на рис. 3.6:

$$i = j\omega \int \sigma_{13ap} dS = j\omega b \int \sigma_1 dX_2 = j\omega b \int \left[\frac{r_2 d_{12}}{S_{22}} + \varepsilon_0 (\varepsilon_1^1 - 1) E_1 \right] dX_2. \quad (3.24)$$

Ранее нами было получена формула для r_2 (см. формулу (3.18)). Осуществим подстановку r_2 в формулу (3.24):

$$i = j\omega b \left[\int \frac{d_{12}^2 E_1}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \sin \frac{\omega(l - X_2)}{V} dX_2 + \int \frac{d_{12}^2 E_1}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \sin \frac{\omega X_2}{V} dX_2 + \int \varepsilon^0 E_1 dX_2 \right]. \quad (3.25)$$

В формуле (3.25) введено следующее обозначение: $\varepsilon^0 = (\varepsilon_1^1 - 1)$.

Интегрирование правой части формулы (3.25) осуществим поэтапно, после чего результаты просуммируем:

$$A = \int \frac{d_{12}^2 E_1}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \sin \frac{\omega(l - X_2)}{V} dX_2 = \frac{d_{12}^2 E_1}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \left[-\cos \frac{\omega(l - X_2)}{V} \cdot \left(-\frac{V}{\omega}\right) \right] =$$

$$= \frac{d_{12}^2 E_1}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \cdot \frac{V}{\omega} \left(1 - \cos \frac{\omega l}{V}\right) l;$$

$$B = \int \frac{d_{12}^2 E_1}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \sin \frac{\omega X_2}{V} dX_2 = \frac{d_{12}^2 E_1}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \left(-\cos \frac{\omega X_2}{V} \right) \cdot \frac{V}{\omega} =$$

$$= \frac{d_{12}^2 E_1}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \cdot \frac{V}{\omega} \left(1 - \cos \frac{\omega l}{V}\right) l;$$

$$C = \int \varepsilon^0 E_1 dX_2 = \varepsilon^0 E_1 X_2 = \varepsilon^0 E_1 l.$$

$$i = j\omega b (A+B+C) = j\omega b l \left[\frac{d_{12}^2}{S_{22} \sin \frac{\omega l}{V}} \cdot \frac{1 - \cos \frac{\omega l}{V}}{\frac{\omega l}{V}} + \varepsilon^0 \right] E_1 =$$

$$= j\omega b l \left[\frac{d_{12}^2}{S_{22}} \cdot \frac{1 - \cos \frac{\omega l}{V}}{\sin \frac{\omega l}{V}} \cdot \frac{1}{\frac{\omega l}{2V}} + \varepsilon^0 \right] E_1 = j\omega b l \frac{d_{12}^2}{S_{22}} \cdot \frac{\text{tg} \frac{\omega l}{2V}}{\frac{\omega l}{2V}} + \varepsilon^0 E_1.$$

Сопротивление резонатора, представленного на рис. 3.6, определяется в соответствии с законом Ома: $Z = \frac{U}{i} = \frac{E_1 h}{i}$, где h – толщина образца, а U – приложенное напряжение. Осуществим сюда подстановку только что полученной формулы для тока i :

$$Z = \frac{E_1 h}{j\omega b l E_1} \cdot \frac{1}{\frac{\varepsilon^0 d_{12}^2 \operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V}}{\varepsilon^0 S_{22} \cdot \frac{\omega l}{2V}} + \varepsilon^0} = \frac{h}{j\omega b l \varepsilon^0 \left(1 + \frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}} \cdot \frac{\operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V}}{\frac{\omega l}{2V}}\right)}. \quad (3.26)$$

Полученное выражение позволяет построить амплитудно-частотную характеристику пьезоэлектрического резонатора, а также найти частоты, при которых сопротивление резонатора имеет максимумы ($Z \rightarrow 0$ на резонансных частотах) и минимумы ($Z \rightarrow \infty$ на антирезонансных частотах).

3.3. Резонансные и антирезонансные частоты: общий теоретический анализ дисперсии сопротивления пьезорезонатора

Обратимся к формуле (3.26) и проанализируем при этом зависимость от $|Z|$ частоты. Для этого осуществим группировку сомножителей следующим образом:

$$Z = \frac{1}{j\omega} \cdot \frac{h}{b l \varepsilon^0} \cdot \frac{1}{1 + \frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}} \cdot \frac{\operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V}}{\frac{\omega l}{2V}}}. \quad (3.27)$$

Обратившись к рис. 3.6, легко увидеть, что произведение bl – это площадь электродов, нанесенных на образец. Поэтому второй сомножитель – это некая эквивалентная частотно-независимая емкость C_0 .

$$C_0 = \frac{\varepsilon^0 b l}{h}. \quad (3.28)$$

При этом значение ε^0 определяется в соответствии с формулами (3.23) и (3.26):

$$\begin{aligned} \varepsilon^0 &= \varepsilon_0 (\varepsilon_1^1 - 1); \quad \varepsilon_1^1 = \varepsilon_1 - \frac{d_{12}^2}{\varepsilon_0 S_{22}}; \\ \varepsilon_0 &= 8,85 \times 10^{-12} \frac{\Phi}{\text{м}}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Учитывая эти замечания, формулу (3.27) можно переписать следующим образом:

$$|Z| = \frac{1}{j\omega C_0} \times \left(1 + \frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}} \times \frac{\operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V}}{\frac{\omega l}{2V}}\right)^{-1}. \quad (3.30)$$

Если исследуемое твердое тело не является пьезоэлектриком, то его пьезомодули (в частности d_{12}) равны нулю. При этом

$$C_0 = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1 b l}{h}, \quad (3.31)$$

а ε_1 – относительная диэлектрическая проницаемость твердого тела в направлении оси X_1 (см. рис. 3.6).

Зависимость $|Z|$ для обычного конденсатора, а также величины ε от частоты хорошо известна и представлена на рис. 3.7.

Примечание. В лабораторной работе рассматривается простейший случай: относительная диэлектрическая проницаемость твердого тела от частоты не зависит. Такой случай имеет место для чистого кварца (SiO_2), у которого реализуются только упругие механизмы поляризации: электронный и ионный с временем релаксации $10^{-13} - 10^{-14}$ с. В общем случае в формуле (3.31) является частотно-зависимой величиной, что намного усложняет анализ и поэтому здесь не рассматривается.

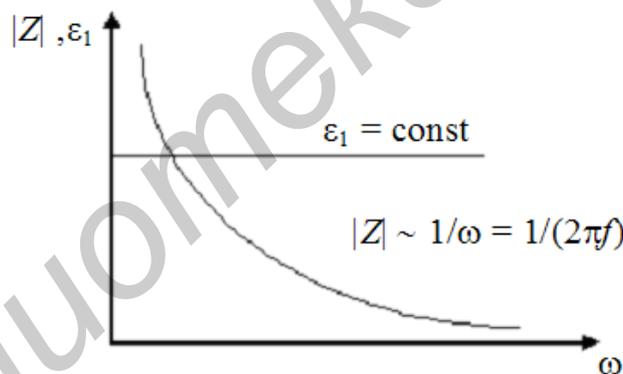


Рис. 3.7. Частотная дисперсия модуля комплексного сопротивления конденсатора без потерь и соответствующей величины диэлектрической проницаемости

В том случае, когда исследуемое твердое тело является пьезоэлектриком, величина ε_2^0 в формуле (3.28) отлична от величины ε_1 в формуле (3.31) на величину $\frac{d_{12}^2}{\varepsilon_0 S_{22}}$ (см. формулу (3.29)). Если предположить, что d_{12} и S_{22} – частотно-независимые величины, то частотная зависимость первого множителя в формуле (3.30) качественно будет такой же, как и у $|Z|$ на рис. 3.7. На рис. 3.7 представлена частотная зависимость относительной диэлектрической прони-

цаемости и модуля электрического сопротивления пьезоэлектрика.

Рассмотрим теперь, как видоизменяется зависимость $|Z|$ от частоты за счет второго множителя в формуле (3.30). Для этого запишем этот множитель отдельно, обозначив его буквой M^{-1} :

$$M^{-1} = \frac{1}{1 + \frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}} x \frac{\operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V}}{\frac{\omega l}{2V}}}; \quad |M| = 1 + \frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}} x \frac{\operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V}}{\frac{\omega l}{2V}}. \quad (3.32)$$

Численное значение $|M|$ имеет экстремальные точки в связи с тем, что $\operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V}$ имеет экстремумы $\pm \infty$ при значениях

$$\frac{\omega_p l}{2V} = \frac{\pi}{2} (2n+1), \quad (3.33)$$

где $n = 0; 1; 2 \dots$ – целые числа.

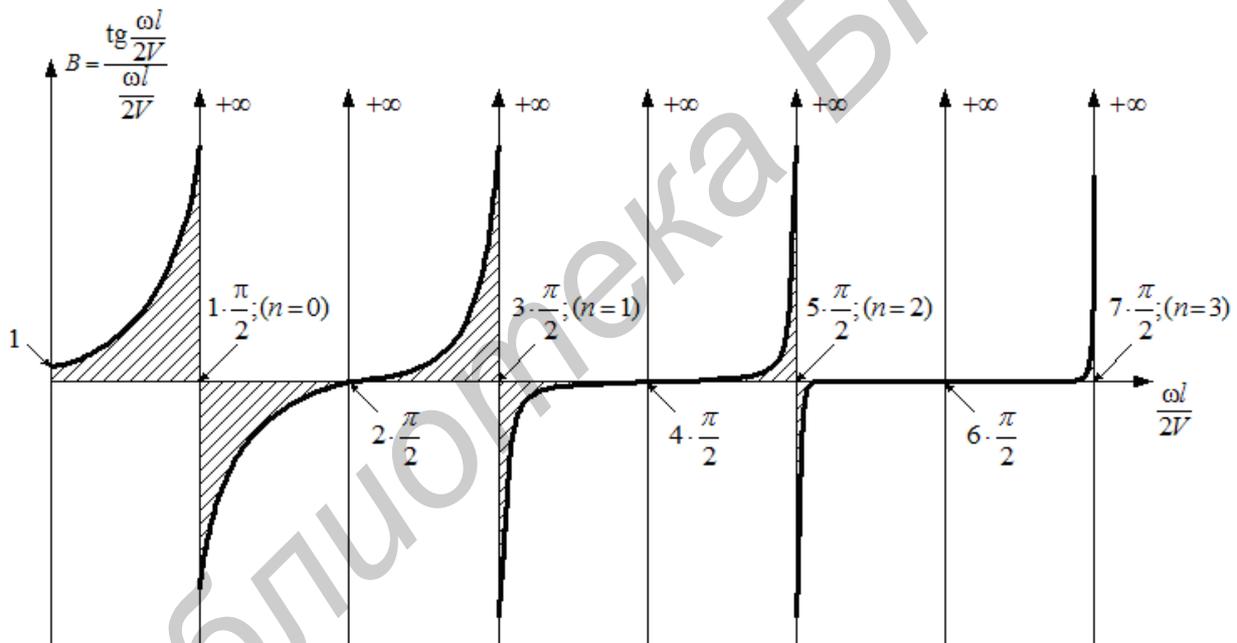


Рис. 3.8. Частотная дисперсия параметра B , входящего в формулу (3.32)

При этом характерно, что при увеличении частоты численное значение $\operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V}$ вначале проходит положительный максимум $+\infty$, а затем $-\infty$.

Аналогичным образом ведет себя и величина $B = \operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V} / \frac{\omega l}{2V}$, как это показано на рис. 3.8.

Условию $n = 0$ в формуле (3.33) отвечает наименьшая частота

$$f_{p1} = \frac{\omega_{p1}}{2\pi} = \frac{2V\pi}{2l \cdot 2\pi} = \frac{V}{2l} = f_0, \quad (3.34)$$

которая носит название первой (или основной) резонансной частоты пьезоэлектрического резонатора.

Условию $n = 1$ в формуле (3.33) отвечает вторая резонансная частота:

$$f_{p2} = \frac{\omega_{p3}}{2\pi} = 3 \frac{V}{2l}. \quad (3.35)$$

При $n = 2$ получаем третью резонансную частоту $f_{p3} = \frac{\omega_{p3}}{2\pi} = 5 \frac{V}{2l}$ и так далее:

$$f_{p1} = f_0; f_{p2} = 3f_0; f_{p3} = 5f_0; f_{p4} = 7f_0 \dots \quad (3.36)$$

Таким образом, пьезоэлектрический резонатор обладает набором резонансных частот. Это принципиальное отличие электромеханического пьезоэлектрического резонатора от чисто механического или чисто электрического, которые имеют единственную резонансную частоту.

Так, для простейших механических колебательных систем резонансная частота $f_{p.мех} = \sqrt{\frac{k}{m^*}}$, где k – коэффициент упругих сил, действующих в системе, а m^* – приведенная масса системы. Для простейших электрических колебательных систем $f_{p.эл} \sim \frac{1}{\sqrt{LC}}$, где L и C – значения индуктивности и емкости соответственно.

На всех резонансных частотах $|Z| = 0$, что соответствует короткому замыканию в цепи с пьезорезонатором.

Условию

$$\frac{\omega l}{2V} = \frac{\pi}{2} \cdot 2n, \quad (3.37)$$

но при $n = 1; 2; 3 \dots$ отвечает равенство нулю величины B (см. рис. 3.8). При этом $|M| = 1$, а $|Z|$ пьезорезонатора рассчитывается по формуле

$$|Z| = \frac{1}{\omega C_0}, \quad (3.38)$$

где C_0 отвечает формуле (3.28).

Случаю, когда $|M|=0$, отвечают так называемые **антирезонансные частоты** ω_{ai} :

$$1 + \frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}} \times \frac{\operatorname{tg} \frac{\omega_a l}{2V}}{\frac{\omega_a l}{2V}} = 0. \quad (3.39)$$

При $M = 0$ величина $|Z|$ обращается в бесконечность, что соответствует обрыву электрической цепи с пьезорезонатором.

Рассмотрим условие антирезонанса вначале графически, а затем проведем более детальное математическое рассмотрение этого вопроса.

На рис. 3.9 изображен в сильно увеличенном масштабе фрагмент зависимости $\operatorname{tg} \frac{\omega l}{2V} / \frac{\omega l}{2V}$ в области одной из точек $\frac{\pi l}{2V}$, отвечающих резонанс-

ной частоте.

Из анализа формулы (3.39) и рис. 3.9 следует, что его решение обеспечивается на частотах, превышающих резонансные $\omega_{pi}/2V$ на некоторую величину $\delta \omega_{i\ell}/2V$: на рисунке значение антирезонансной частоты отвечает точке A_1 .

Резонансные частоты f_{pi} расположены строго периодически с периодом

$$\frac{2}{f_{p1}} = \frac{4l}{V} \quad (3.40)$$

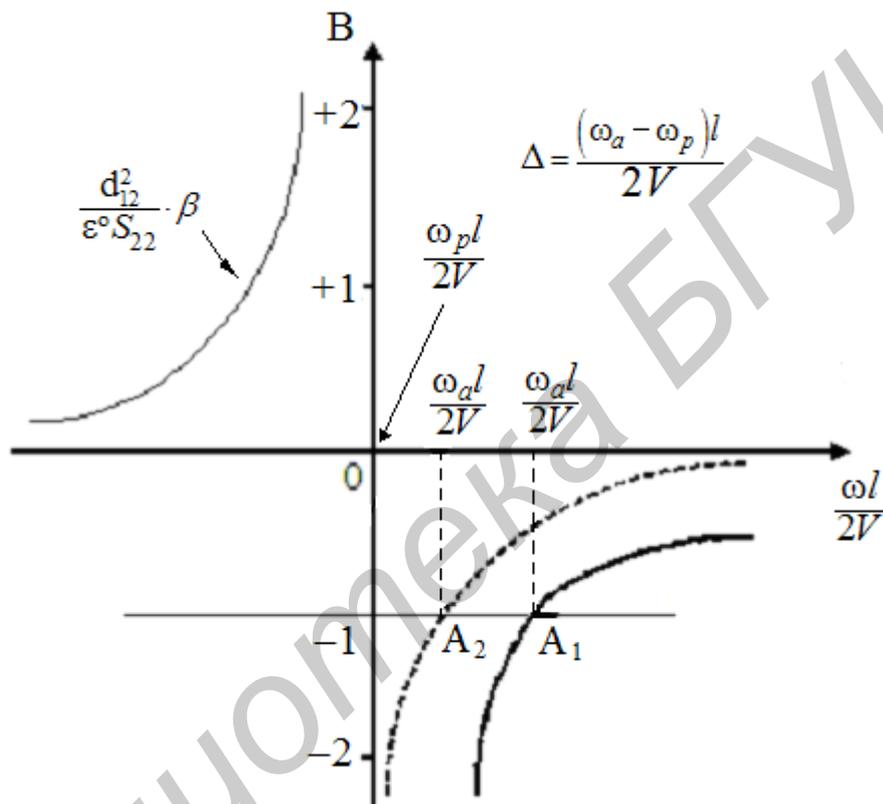


Рис. 3.9. Фрагмент частотной дисперсии параметра B в области одной из резонансных частот

Однако антирезонансные частоты периода не имеют. Это обусловлено тем, что с ростом величины $\omega l/2V$ зависимость компонента β на рис. 3.8 и компонента $\delta_{12}^2 / \varepsilon^\circ S_{22} \times \beta$ на рис. 3.9 от частоты становится более сильной. На рис. 9 эта закономерность проиллюстрирована стрелкой, выходящей из точки A_1 , и соответствующей пунктирной зависимостью. Следовательно, более высоким резонансным частотам будут отвечать меньшие частотные диапазоны δf , отделяющие резонансную и антирезонансные частоты. На рис. 3.9 точка A_1 при этом переместится в точку A_2 .

Итогом графического анализа формулы (3.39) является следующее: каждой резонансной частоте f_{pi} (см. формулу (3.36)) отвечает антирезонанс-

ная частота f_{ai} ; численное значение f_{ai} превышает значение f_{pi} на величину δf_i , причем величина δf_i с ростом номера резонансной частоты i уменьшается: $f_{ai} = f_{pi} + \delta f_i$; $\delta f_{i+1} < \delta f_i$; $\delta f_i/f_i \ll 1$. Антирезонансные частоты расположены неперiodически.

Проведем математическое рассмотрение условия равенства нулю множителя M (см. формулу (3.32)) для первого антирезонанса. Для этого осуществим разделение компонентов в формуле (3.32):

$$\frac{\omega_{a1}l}{2V} \operatorname{ctg} \frac{\omega_{a1}l}{2V} = -\frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}}. \quad (3.41)$$

Поскольку $\omega_{a1} = \omega_{p1} + \delta\omega_1$, то формулу для определения величины $\omega_{a1}l/2V$ можно преобразовать следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\omega_{a1}l}{2V} &= \frac{(\omega_{p1} + \delta\omega_1)l}{2V} = \frac{\omega_{p1}l}{2V} + \frac{\delta\omega_1 l}{2V} = \frac{\omega_{p1}l}{2V} + \frac{\delta\omega_1 l}{2V} \times \frac{\omega_{p1}}{\omega_{p1}} = \\ &= \frac{\omega_{p1}l}{2V} \left(1 + \frac{\delta\omega_1}{\omega_{p1}}\right) \equiv \frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{\delta\omega_1}{\omega_{p1}}\right) \equiv \frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{\delta f_1}{f_{p1}}\right) = \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \cdot \frac{\delta f_1}{f_{p1}}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

При выводе итоговой формулы (3.42) учитывалось, что $\frac{\omega_{p1}l}{2V} = \frac{\pi}{2}$ для первой резонансной частоты (см. формулу (3.33) и рис. 3.8). Кроме этого, для удобства осуществлен переход от круговой частоты ω к «радиотехнической» частоте f : $\omega = 2\pi f$.

Таким образом, формула (3.41) приобретает следующий вид:

$$\frac{\pi}{2} + \frac{\pi \delta f_1}{2f_0} \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi \delta f_1}{2f_0}\right) = -\frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}}. \quad (3.43)$$

Вследствие того, что $\operatorname{ctg}(\alpha + \beta) = (\operatorname{ctg} \alpha \operatorname{ctg} \beta - 1) / (\operatorname{ctg} \alpha + \operatorname{ctg} \beta)$ формулу (3.41) можно преобразовать следующим образом:

$$\frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{\delta f_1}{f_0}\right) \frac{\operatorname{ctg} \frac{\pi}{2} \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{2} \cdot \frac{\delta f_1}{f_0}\right) - 1}{\operatorname{ctg} \frac{\pi}{2} + \operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{2} \cdot \frac{\delta f_1}{f_0}\right)} = -\frac{\pi}{2} \left(1 + \frac{\delta f_1}{f_0}\right) \frac{1}{\operatorname{ctg} \left(\frac{\pi}{2} \cdot \frac{\delta f_1}{f_0}\right)} = -\frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}}, \quad (3.44)$$

поскольку $\operatorname{ctg} \frac{\pi}{2} = 0$.

Графический анализ формулы (3.39) позволил сделать вывод, что $\delta f_1/f_0 \ll 1$. При этом угол $\frac{\pi}{2} \cdot \delta f_1/f_0$ – малый угол. Для малых углов верно соотношение $(\operatorname{ctg} \alpha)^{-1} = \operatorname{tg} \alpha = \alpha$. Поэтому в конечном итоге формулу (3.44) можно записать следующим образом:

$$\frac{\pi^2}{4} \frac{\delta f_1}{f_0} = \frac{d_{12}^2}{\varepsilon^0 S_{22}}, \frac{\delta f_1}{f} = \frac{4d_{12}^2}{\pi^2 \varepsilon^0 S_{22}}. \quad (3.45)$$

Выразим отсюда величину δf_1 , учитывая, что $f_0 = \frac{V}{2l}$ (см. формулу (3.34)):

$$\delta f_1 = \frac{4d_{12}^2}{\pi^2 \varepsilon^0 S_{22} l} f_0 = \frac{4d_{12}^2 V}{2\pi^2 \varepsilon^0 S_{22} l}. \quad (3.46)$$

Следовательно, численное значение первой антирезонансной частоты f_{a1} определяется следующей формулой:

$$f_{a1} = \frac{V}{2l} \left(1 + \frac{4d_{12}^2}{\pi^2 \varepsilon^0 S_{22}}\right) \equiv f_0 \left(1 + \frac{4d_{12}^2}{\pi^2 \varepsilon^0 S_{22}}\right). \quad (3.47)$$

Теоретическую идеализированную дисперсию $|Z|$ пьезоэлектрического резонатора можно изобразить так, как это показано на рис. 3.10. На этом рисунке изображены общие закономерности дисперсии пьезоэлектрического резонатора (идеальный пьезоэлектрик без потерь).

Теория пьезоэлектрических резонансных систем была разработана около 100 лет назад в связи с бурным развитием радиотехники. Поэтому вполне естественно, что и эквивалентные схемы пьезоэлектрических резонаторов рассматривали в терминах радиотехники и электроники. Так, зависимость $|Z|$ от частоты (рис. 3.10) рассматривали как суммарное действие последовательного и параллельного колебательных контуров. Так было удобно.

При изучении же предмета «Физика твердого тела» целесообразно рассматривать суть протекающих процессов, говорить о нерезонансной, резонансной и антирезонансной диэлектрической проницаемости пьезоэлектрика. Ведь именно с использованием понятий поляризованности диэлектрика P , плотности поверхностного заряда $\sigma_{\text{зар}}$, вектора электрической индукции D , диэлектрической проницаемости диэлектрика ε_1 осуществлен вышеприведенный анализ.

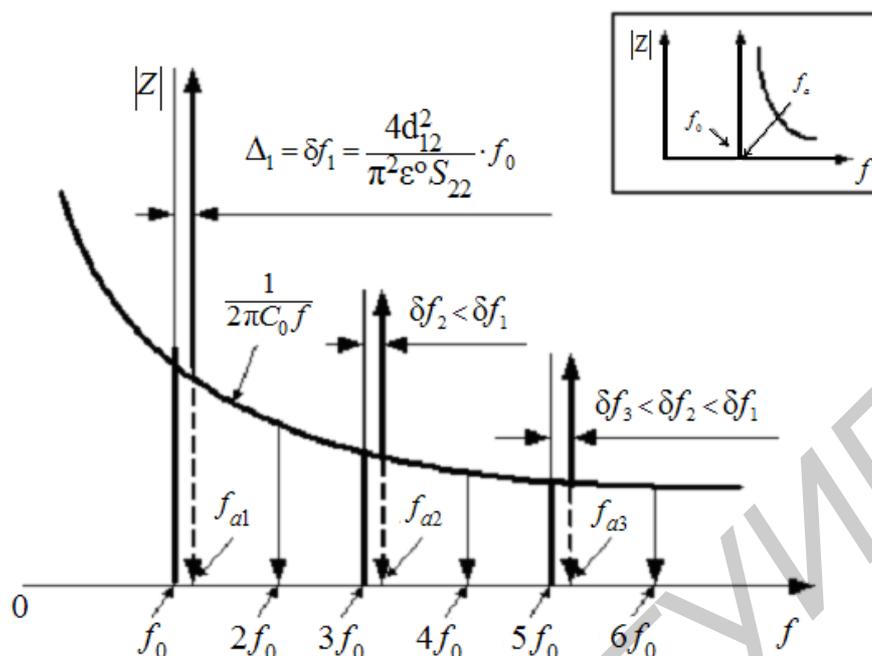


Рис. 3.10. Дисперсия пьезоэлектрического резонатора без потерь

Далее мы остановимся на классическом с точки зрения предмета «Радиотехника» объяснении свойств пьезоэлектрических резонаторов (подразд. 3.4), а затем объясним те же свойства в терминах предмета «Физики твердого тела» (подразд. 3.5).

3.4. Эквивалентная схема пьезоэлектрического резонатора на основе LC-контуров

Получим сначала эквивалентную схему пьезорезонатора в области первой резонансной частоты. После этого распространим полученные результаты на другие резонансные частоты.

Прежде всегда следует отметить, что при повышении частоты от нуля пьезорезонатор ведет себя как обычный конденсатор постоянной емкости $C_0 = \varepsilon^o \delta l / h$ (см. формулу (3.28) и график $|Z|$ от частоты на рис. 3.7). По мере приближения частоты к f_0 эквивалентное сопротивление пьезорезонатора, оставаясь в целом емкостным, уменьшается до нуля, после чего увеличивается, приобретая опять-таки емкостный характер (антирезонанс пока не рассматривается). Такому поведению LC-цепей соответствует схема, изображенная на рис. 3.11, а. На рис. 3.11, а представлена эквивалентная идеализированная и практическая (рис. 3.11, б) схемы пьезорезонатора в области частоты f_0 .

В последовательном резонансном контуре, образованном элементами C_1 и L_1 , наблюдается резонанс напряжений на частоте

$$f_0 = \frac{1}{2\pi\sqrt{L_1 C_1}}. \quad (3.48)$$

При этом сопротивление нижней ветви схемы (см. рис. 3.11, а) обра-

щается в нуль, а следовательно, и сопротивление между электродами 1 и 2 также будет равно нулю.

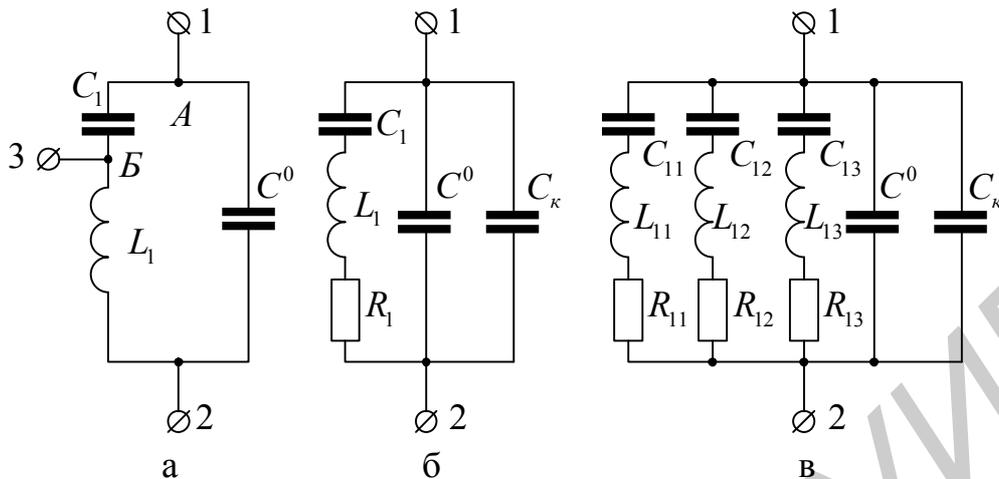


Рис. 3.11. Эквивалентные схемы пьезоэлектрического резонатора

В параллельном контуре, образованном элементами L_1 и последовательно соединенными C_1 и C^0 , на частоте f_{a1} будет наблюдаться резонанс токов. При этом сопротивление между электродами 1 и 2 будет максимальным (но не достигать бесконечности, поскольку электрод 1 подключен к точке A , а не B (см. рис. 3.11, а)). Частота $f_{a1} > f_0$, так как эквивалентная емкость для резонанса токов меньше:

$$C_{\text{экв}} = \frac{C_1 C^0}{C_1 + C^0} < C_1, C^0;$$

$$f_{a1} = \frac{1}{2\pi\sqrt{L_1 \frac{C_1 C^0}{C_1 + C^0}}} = \frac{1}{2\pi\sqrt{L_1 C_1}} \cdot \sqrt{1 + \frac{C_1}{C^0}} = f_0 \sqrt{1 + \frac{C_1}{C^0}} = f_0 \sqrt{1 + \frac{C_1}{C^0}}. \quad (3.49)$$

Полоса частот, разделяющая резонансную и антирезонансную частоты, может быть найдена следующим образом:

$$\delta f_1 = f_{a1} - f_0 = f_0 \sqrt{1 + \frac{C_1}{C^0}} - f_0 = f_0 \left(\sqrt{1 + \frac{C_1}{C^0}} - 1 \right). \quad (3.50)$$

Удобно пользоваться для расчетов не величиной δf_1 , а величиной $\delta f_1 / f_0$:

$$\frac{\delta f_1}{f_0} = \sqrt{1 + \frac{C_1}{C^0}} - 1. \quad (3.51)$$

Для практических расчетов формулу (3.51) целесообразно упростить, разложив подкоренное выражение по степеням C_1 / C^0 в ряд Тейлора и ограничившись первыми двумя членами. Для этого введем временное обозначение

ние: $(1 + C_1/C^0) = X$; тогда $F(X) = \sqrt{X}$. Разложение будем осуществлять в области $X_0 = 1$; при этом $(X - X_0) = C_1/C^0$:

$$F(X) = F(X_0) + \frac{1}{2} F'(X_0) \times (X - X_0) = 1 + \frac{1}{2} (1 + X)^{-1/2} \Big|_{X=1} \times \frac{C_1}{C^0} = 1 + \frac{C_1}{C^0}.$$

С учетом полученного разложения формула (3.51) примет следующий вид:

$$\frac{\delta f_1}{f_0} = \frac{C_1}{2C^0}. \quad (3.52)$$

Как уже упоминалось, значение C^0 легко определить по частотной зависимости $|Z|$ пьезорезонатора в области низких частот, когда измерительные частоты существенно ниже f_0 (см. начало подразд. 3.4). Величины δf_1 и f_0 также легко определяются после регистрации $|Z|$ от частоты в соответствии с рис. 3.10. При этом легко, используя полученную формулу (3.52), определить величину C_1 . Для определения величины C_1 можно, конечно, воспользоваться и формулой (3.49).

Реальные пьезорезонаторы имеют потери на переполяризацию, так называемые диэлектрические потери. Причины их различны и здесь анализироваться не будут.

Наличие диэлектрических потерь в пьезорезонаторах приводит к отличной от нуля величине $|Z|$ на частотах резонанса и не равной бесконечности $|Z|$ на частотах антирезонансов. Для учета диэлектрических потерь в цепь последовательного резонансного контура включается сопротивление R_1 (рис. 3.11, б), моделирующее потери.

При практической работе с пьезорезонаторами следует учитывать еще два обстоятельства.

Во-первых, пространственное расположение электрических подводов к пьезорезонатору создает дополнительную емкость C_k . В эквивалентной схеме она подключена так, как показано на рис. 3.11, б.

Во-вторых, конечное сопротивление токопроводящих проводов R_2 и их индуктивность L_2 учитываются в эквивалентной схеме в явном виде (см. рис. 3.11, б).

Для обеспечения набора резонансных и антирезонансных частот в соответствии с рис. 3.10, в эквивалентной схеме пьезорезонатора включают столько последовательных LC-цепочек, сколько необходимо при решении конкретной задачи (рис. 3.11, в).

3.5. Резонансная и антирезонансная диэлектрические проницаемости

Существенно упростить описание пьезоэффекта можно с помощью следующих замечаний и модельных представлений.

До сих пор предполагалось, что диэлектрическая проницаемость пьезоэлектрика – величина постоянная. Она такая же, как у обычного непьезоэлектрического материала. Вместе с тем известно, что диэлектрическая проницаемость достаточно быстро изменяется в области частот, отвечающих ус-

$$f_i \sim \frac{1}{\tau_i}, \quad (3.53)$$

где τ_i – время одного из i механизмов поляризации, происходящих в твердом теле, жидкости или газе. Эту ситуацию иллюстрирует рис. 3.12.

На рис. 3.12 представлена частотная дисперсия диэлектрической проницаемости материала, имеющего три механизма поляризации с соответствующими временами релаксации $\tau_1 = f_1^{-1}$; $\tau_2 = f_2^{-1}$ и $\tau_3 = f_3^{-1}$. На рис. 3.12 ϵ_{r1} , ϵ_{r2} и ϵ_{r3} – парциальные вклады в суммарную диэлектрическую проницаемость материала соответствующих механизмов поляризации. Анализируя рис. 3.12, обычно говорят, что на частотах f_1 , f_2 или f_3 «выключается», перестает работать тот или иной механизм поляризации.

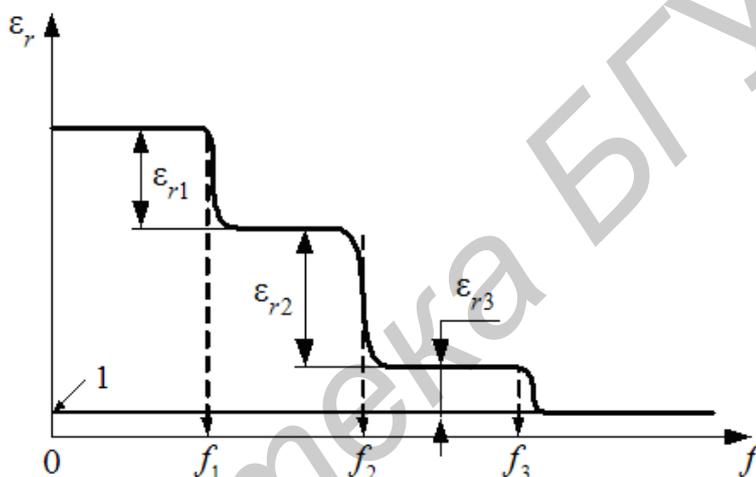


Рис. 3.12. Дисперсия диэлектрической проницаемости для материала с тремя механизмами поляризации

Если определить величину $|Z|$ для конденсатора, в качестве диэлектрика у которого использован материал по рис. 3.12, то зависимость $|Z|$ от частоты будет отвечать рис. 3.12. На рис. 3.12 представлен характер поведения $|Z|$ от частоты для конденсатора с диэлектриком, имеющим три механизма поляризации.

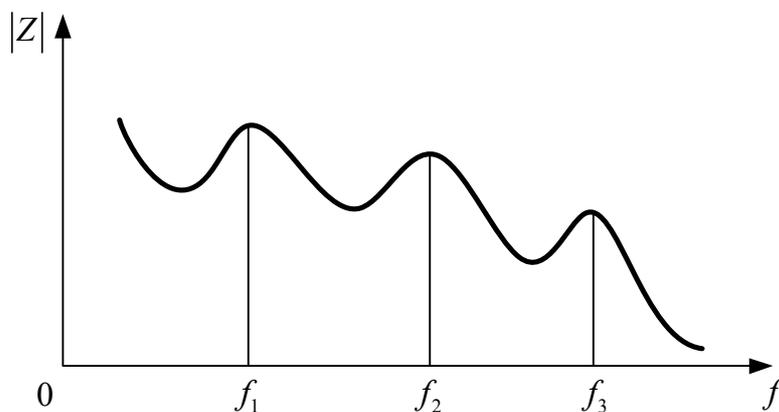


Рис. 3.13. Частотная дисперсия модуля комплексного сопротивления конденсатора, изготовленного из диэлектрика по рис. 3.12

Вполне логично при этом отказаться от условия постоянства диэлектрической проницаемости. Будем полагать, что пьезоэлектрический резонатор – это плоский конденсатор, имеющий специфическую дисперсию диэлектрической проницаемости (рис. 3.14). На рис. 3.14, а изображены параллельная и последовательная (рис. 3.14, б) схемы замещения пьезоэлектрического резонатора с элементами R_1 и R_2 , обеспечивающими необходимые потери энергии.

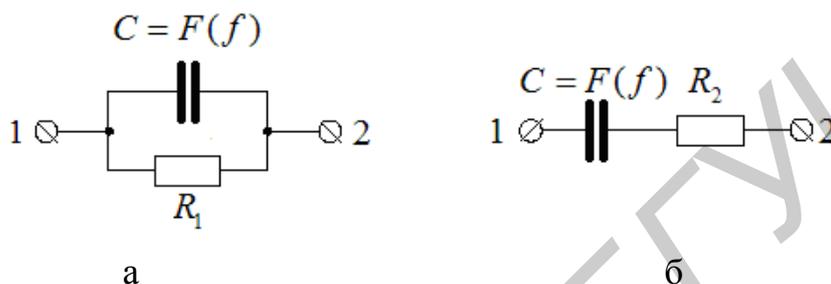


Рис. 3.14. Схема замещения пьезоэлектрического резонатора

Нетрудно установить, что зависимости, показанной на рис. 3.10, отвечает следующая зависимость ϵ_r от частоты (рис. 3.15).

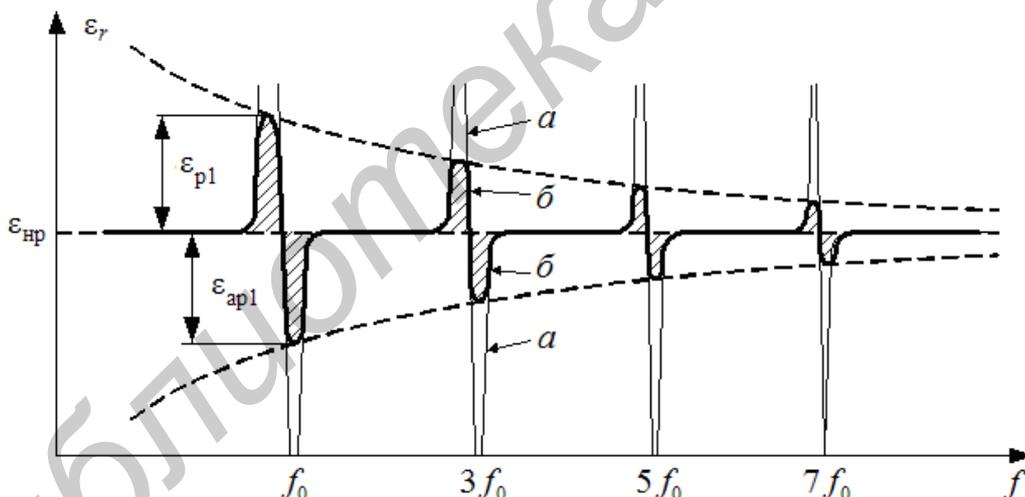


Рис. 3.15. Зависимость эквивалентной диэлектрической проницаемости от частоты для конденсатора, изготовленного из пьезоэлектрика

На рис. 3.15, а изображена зависимость эквивалентной диэлектрической проницаемости от частоты для пьезоэлектрического материала идеальный пьезоэлектрик без потерь, на рис. 3.15, б – реальный пьезоэлектрик. Эта зависимость получена для такого диапазона частот, в пределах которого нерезонансная диэлектрическая проницаемость ϵ_{nr} остается величиной постоянной. Для рис. 3.12 это может быть участок от f_1 до f_2 или какой-либо другой.

Величину «избыточной» диэлектрической проницаемости ε_p целесообразно назвать резонансной диэлектрической проницаемостью.

Величина ε_p , как легко видеть, – положительная.

В то же время антирезонансной диэлектрической проницаемостью ε_{ap} должна быть признана отрицательной.

Для идеального пьезоэлектрика максимальное значение ε_p равно $+\infty$. Минимальное значение ε_{ap} равно $-\infty$. На практике, регистрируя $|Z|$ для пьезорезонаторов, значения $|Z|$, равные нулю и бесконечности, конечно, не получают. Этот факт отображен на рис. 3.15 штриховкой соответствующих областей зависимости ε от частоты.

Плавными пунктирными кривыми, соединяющими соответствующие экстремумы, подчеркнуты общие закономерности изменения этих экстремумов.

Формулы для расчетов соответствующих каждой частоте диэлектрических проницаемостей исключительно просты. На любой частоте обычными радиотехническими приборами и методами определяют $|Z|$ пьезорезонатора:

$$|Z_x| = \frac{1}{2\pi f_x C_x} = \frac{h}{2\pi f_x \varepsilon_0 \varepsilon_x S}, \quad (3.54)$$

где f_x – частота, на которой производится определение величины $|Z|$; ε_x – определяемая величина диэлектрической проницаемости; S и h – площадь обкладок и расстояние между ними.

С использованием формулы (3.54) получают зависимость $\varepsilon_x = F(f_x)$ и строят соответствующий график, осуществляют его качественный и количественный анализ.

Примечание. На рис. 3.14 не указана емкость конструктивных элементов, подключенных (как и на рис. 3.11) параллельно электродам 1 и 2; не указаны также элементы R_2 и L_2 , учитывающие конечное сопротивление и индуктивность токоподводящих элементов пьезоэлектрического резонатора.

3.6. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

1. Зарегистрировать амплитудно-частотную характеристику четырехполюсника для последовательной и параллельной схем включения (см. инструкцию на рабочем месте).

2. Выявить общий характер поведения АЧХ и определить нерезонансную диэлектрическую проницаемость пьезоматериала ε_r .

3. Выявить и зарегистрировать детально АЧХ в области первой резонансной частоты f_0 .

4. Проверить наличие резонансных явлений в области частот $3f_0$ и $5f_0$; зарегистрировать точное значение частот и значений коэффициента передачи на этих частотах.

5. Осуществить расчёт соответствующих первых, вторых и третьих

резонансных и антирезонансных диэлектрических проницаемостей; результаты представить графически или в виде таблицы, сравнить их с результатами задания по п. 2.

6. Определить добротность пьезоэлектрического резонатора и сравнить полученное значение со значением добротности для известных вам реальных LC -резонаторов.

7. С использованием результатов пп. 3 и 4, а также формулы (3.37) определить (для $n = 1$, резонансная частота f_0) скорость распространения акустической волны в пьезоматериале.

8. По формуле, отвечающей условию формирования стоячей волны в пьезорезонаторе (информация имеется на лицевой панели лабораторной установки), определить скорость распространения акустической волны в пьезоматериале и сравнить ее со скоростью, полученной в п. 7.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. В чем заключается сущность прямого и обратного пьезоэффектов?
2. В чем заключается сущность эффекта электрострикции?
3. Пояснить, какие напряжения действуют в объеме кристалла при воздействии на него сжимающей или растягивающей силы.
4. Как записывается уравнение движения для напряженного твердого тела?
5. Какие виды колебаний могут быть возбуждены в пьезоэлектрическом резонаторе?
6. Как в общем виде выглядит частотная характеристика пьезорезонатора? В каких вариантах могут проявляться резонансные и антирезонансные частоты?
7. Как определить скорость распространения акустических колебаний на одной из резонансных частот?
8. Как диэлектрическая проницаемость пьезоэлектрика зависит от частоты? Поясните смысл понятий резонансная, антирезонансная и нерезонансная диэлектрическая проницаемости.
9. Какие варианты экспериментального определения добротности пьезоэлектрического резонатора вы можете предложить?

ИЗУЧЕНИЕ СОБСТВЕННОГО ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ДИЭЛЕКТРИКАХ

Цель работы:

- расширение и закрепление лекционного материала по теме «Оптические свойства твердых тел»;
- изучение и освоение методики определения коэффициента поглощения;
- определение вида оптических переходов носителей заряда (прямые или непрямые) из валентной зоны в зону проводимости и характера энергетических зон с использованием спектров пропускания;
- определение ширины запрещенной зоны изучаемого материала по спектрам пропускания;
- определение энергии фонов и идентификация вида фононов, принимающих участие в оптических переходах «зона – зона»;
- идентификация материала с использованием полученных экспериментальных результатов.

Задание к выполнению экспериментальной и расчетной частей лабораторной работы:

- зарегистрировать спектр пропускания предложенных полупроводников и диэлектриков;
- используя полученные в п. 1 спектры в области края собственного поглощения, перерассчитать спектр пропускания в спектр поглощения;
- построить зависимости $\alpha^2(\hbar\omega)$ и $\alpha^{1/2} = f(\hbar\omega)$ для исследуемых образцов. Определить тип оптических переходов (прямой или непрямой) и ширину запрещенной зоны образцов, энергию и вид фононов, принимающих участие в фундаментальном поглощении;
- сравнить полученные значения параметров с табличными значениями и идентифицировать изучаемое твердое тело.

4.1. ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ

Если пренебречь эффектами рассеяния, то при прохождении света через вещество его интенсивность уменьшается вследствие отражения и поглощения. Пусть интенсивность падающей волны I_0 , отраженной – I_R . Величину

$$R = \frac{I_R}{I_0} \quad (4.1)$$

называют коэффициентом отражения. Зависимость коэффициента отражения от длины волны $R(\lambda)$ или ее частоты $R(\omega)$ называется *спектром отражения*.

В лабораторной работе предлагаются к изучению (теоретическому и экспериментальному) пленочные образцы с параллельными поверхностями при нормальном падении на их поверхность света. Эффектами рассеяния света поверхностями и объемом образца при этом пренебрежем. Последнее

условие в микроэлектронике достигается достаточно легко: размер неоднородностей, практически не влияющих на вид спектров отражения и пропускания, должен быть не более $\lambda/8$, где λ – длина волны, при которой регистрируется соответствующий коэффициент.

Для ИК-диапазона, в пределах которого осуществляются исследования в данной лабораторной работе, значения длин волн находятся в пределах 2,5 – 25 мкм. Для видимого диапазона (VIS-диапазона) длины волн соответствуют интервалу 0,33 – 0,8 мкм, а для ультрафиолетового диапазона – длинам волн от 0,2 до 0,36 мкм.

Химико-динамическая полировка поверхности материалов, используемая в технологии микро- и нанoeлектроники, обеспечивает четырнадцатый класс чистоты поверхностей. Этого вполне достаточно для устранения эффектов рассеяния поверхностями изучаемых образцов.

Обозначим интенсивность света, падающего на слой dx в твердом теле толщиной d , через I (рис. 4.1).

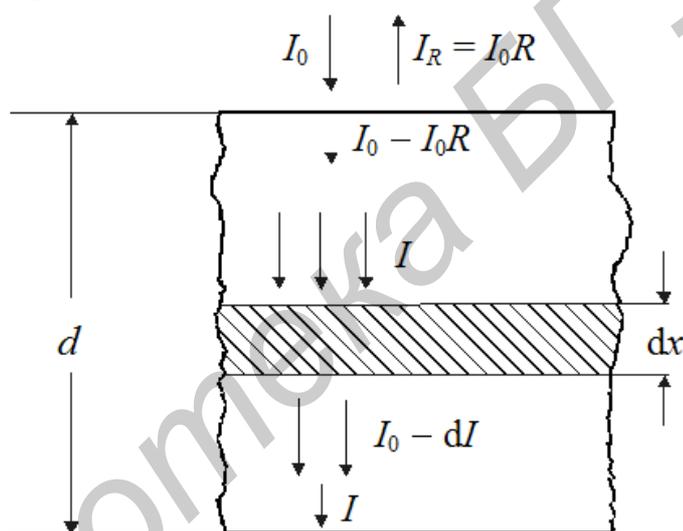


Рис. 4.1. Схема прохождения света через твердое тело

Вследствие эффекта поглощения в слое dx интенсивность света уменьшится на величину dI , которая пропорциональна количеству падающей на слой интенсивности света I и толщине поглощающего слоя dx :

$$-dI = \alpha I dx. \quad (4.2)$$

Коэффициент α называется *дифференциальным коэффициентом поглощения*. Он имеет размерность обратной длины и его можно интерпретировать как вероятность поглощения света слоем единичной длины.

Величина, обратная α , имеет смысл длины свободного пробега волны в изучаемой среде.

Проинтегрируем формулу (4.2):

$$\int_{I_0 - I_0 R}^I dI / I = - \int_0^d \alpha dx. \quad (4.3)$$

При этом получим следующий результат:

$$I = I_0(1 - R)\exp(-\alpha d). \quad (4.4)$$

Формула (4.4) известна как *закон Бугера–Ламберта*.

Зависимость коэффициента поглощения от длины волны света $\alpha(\lambda)$ или его частоты $\alpha(\omega)$ называется *спектром поглощения вещества*.

Поглощение света в твердых телах может быть связано с *изменением энергетического состояния свободных или связанных с атомами электронов, а также с изменением колебательной энергии атомов решетки*. В связи с этим в твердых телах различают пять основных типов поглощения:

- 1) *собственное*, связанное с возбуждением электронов из валентной зоны в зону проводимости;
- 2) *экситонное*, связанное с образованием экситонов;
- 3) *примесное*, обусловленное переходами электронов между примесным уровнем и какой-либо зоной;
- 4) *поглощение свободными носителями заряда*, связанное с возбуждением свободных электронов и дырок в пределах одной и той же разрешенной зоны;
- 5) *колебательное (или решеточное)*, связанное с возбуждением колебаний кристаллической решетки и ее дефектов.

Существенный интерес для изучения свойств полупроводниковых и диэлектрических твердых тел, а также их идентификации, представляет собственное поглощение. Рассмотрим подробно этот тип поглощения.

4.2. Собственное поглощение

В зависимости от ширины запрещенной зоны твердого тела разность энергий E_C и E_V (рис. 4.2) может соответствовать и инфракрасному, и видимому, и ультрафиолетовому диапазонам частот (длин волн) света. Поэтому здесь и в дальнейшем под словом «оптическое поглощение» подразумевается любой из этих диапазонов. При этом экспериментальные исследования полупроводников и диэлектриков будут проводиться и на приборе **IR-SPECORD** (инфракрасный диапазон), и на приборе **UV, VIS-SPECORD** (прибор видимого и ближнего ультрафиолетового диапазонов).

Если энергия фотонов света $\hbar\omega \geq E_g$, где E_g – ширина запрещенной зоны твердого тела, то возможны переходы электронов из валентной зоны в зону проводимости. При этом наблюдается сильное поглощение света твердым телом. Такое поглощение принято называть *собственным*, или *фундаментальным*.

4.2.1. Прямозонные и непрямозонные полупроводники и диэлектрики

Характер собственного поглощения существенно зависит от структуры энергетических зон твердого тела. Известные в настоящее время полупроводники и диэлектрики в соответствии с конфигурацией их зон делятся на два основных вида. У первого из них минимум энергии в зоне проводимости (характеризуемый волновым вектором \vec{k}_{\min}) и максимум энергии в валентной зоне (характеризуемый волновым вектором \vec{k}_{\max}) расположены в одной и той же точке зоны Бриллюэна (обычно при $\vec{k} = 0$). Другими словами, у таких твердых тел $\vec{k}_{\min} = \vec{k}_{\max}$ (рис. 4.2, а), и они называются *прямозонными*.

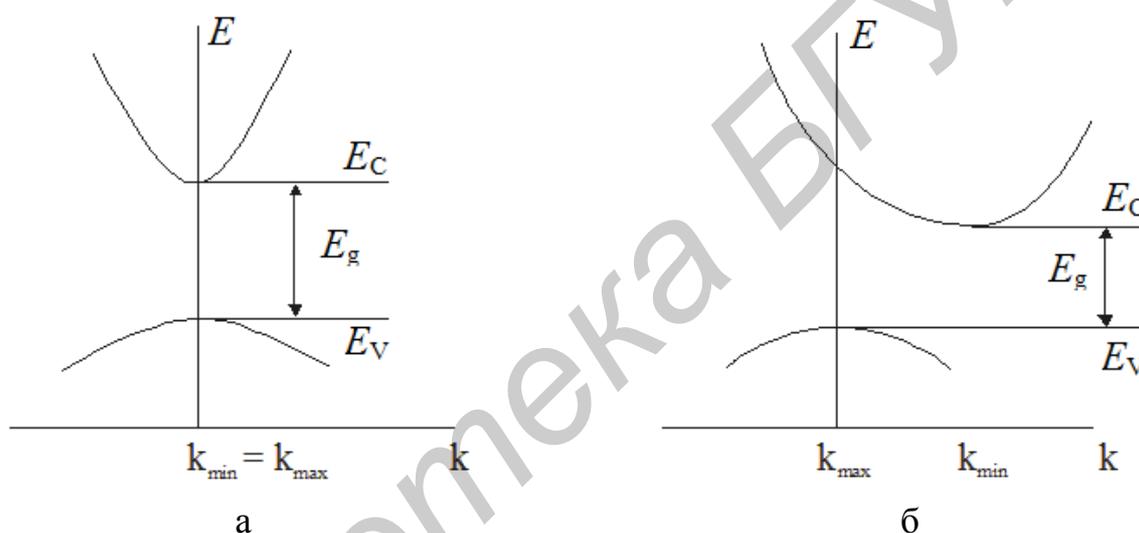


Рис. 4.2. Энергетические диаграммы прямозонного (а) и непрямозонного (б) твердых тел

У второго типа твердых тел абсолютные экстремумы в зоне проводимости и валентной зоне находятся в разных точках зоны Бриллюэна, т. е. $\vec{k}_{\min} \neq \vec{k}_{\max}$ (рис. 4.2, б). Такие твердые тела называются *непрямозонными*.

4.2.2. Разрешенные прямые переходы

Переходы электронов между состояниями с одинаковым значением волнового вектора \vec{k} называются *прямыми*.

Рассмотрим квантовый переход из состояния j в состояние f при поглощении фотона $\hbar\omega$ и определим, при каких условиях он возможен. Схема, поясняющая процесс поглощения фотона электроном валентной зоны, имеет вид, представленный на рис. 4.3.

На этой схеме

$$V_{k_f, k_j}^{e\text{-фот}} = \int \psi_{k_f} V \psi_{k_j} d\vec{r} \quad (4.5)$$

представляет собой матричный элемент электрон-фотонного взаимодействия для состояний с волновыми векторами \vec{k}_j и \vec{k}_f . Точка на схеме обозначает само взаимодействие, а непрерывная горизонтальная линия – возможные состояния системы.

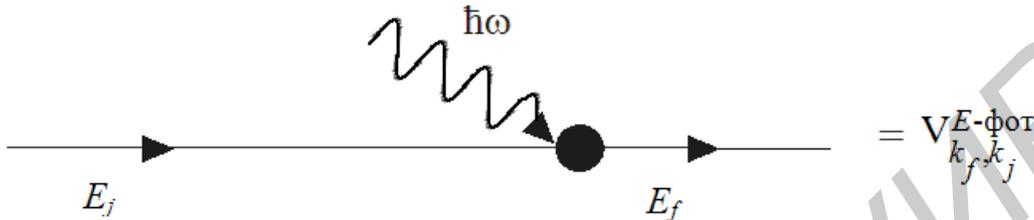


Рис. 4.3. Схема, поясняющая поглощение фотона электроном (прямой переход)

Схема показывает, что в результате взаимодействия с фотоном $\hbar\omega$ электрон переходит непосредственно из состояния с энергией E_j в состояние с энергией E_f . Итоговое возмущение V при этом можно записать в виде плоской монохроматической волны

$$V = A \exp(i\vec{k}_{\text{фот}} \vec{r}), \quad (4.6)$$

где $\vec{k}_{\text{фот}}$ – волновой вектор фотона, $\vec{k}_{\text{фот}} = \frac{2\pi}{\lambda} \vec{n}$ (\vec{n} – единичный вектор в направлении $\vec{k}_{\text{фот}}$), а временной множитель $\exp(-i\omega t)$ включен в коэффициент A .

Волновые функции электронов в кристалле берутся в виде блоховских функций:

$$\psi_{k_j} = \exp(i\vec{k}_j \vec{r}) U_{k_j}(\vec{r}), \quad \psi_{k_f} = \exp(i\vec{k}_f \vec{r}) U_{k_f}(\vec{r}). \quad (4.7)$$

Подставляя формулы (4.6) и (4.7) в формулу (4.5), можно убедиться, что подынтегральная функция в матричном элементе будет содержать множитель $\exp[i(-\vec{k}_f + \vec{k}_j + \vec{k}_{\text{фот}}) \vec{r}]$.

Этот множитель осциллирует в пространстве за исключением случая, когда

$$-\vec{k}_f + \vec{k}_j + \vec{k}_{\text{фот}} = 0. \quad (4.8)$$

Поэтому при интегрировании по \vec{r} при всех значениях \vec{k}_j и \vec{k}_f , не удовлетворяющих этому равенству, величина $V_{k_f, k_j}^{e\text{-фот}}$ обращается в нуль.

Отсюда вытекает правило отбора по волновому вектору при прямых оптических переходах $j \rightarrow f$:

$$\vec{k}_j + \vec{k}_{\text{фот}} = \vec{k}_f. \quad (4.9)$$

Формула (4.9) отражает закон сохранения волнового вектора или квазиимпульса, так как $p = \hbar k$). Поскольку волновой вектор электрона в кристалле определен с точностью до вектора обратной кристаллической решетки, то условие (4.9) определено с такой же точностью.

Волновой вектор электрона имеет величину порядка $\pi/a \approx 10^8 \text{ см}^{-1}$, где a – параметр прямой кристаллической решетки. Волновой вектор фотона ($2\pi/\lambda$) в ультрафиолетовой, видимой и инфракрасной областях имеет значение порядка $\approx 10^5 \text{ см}^{-1}$. Поэтому $|\vec{k}_f|, |\vec{k}_j| \gg \vec{k}_{\text{фот}}$ и формула (4.9) приобретает вид

$$\vec{k}_f = \vec{k}_j. \quad (4.10)$$

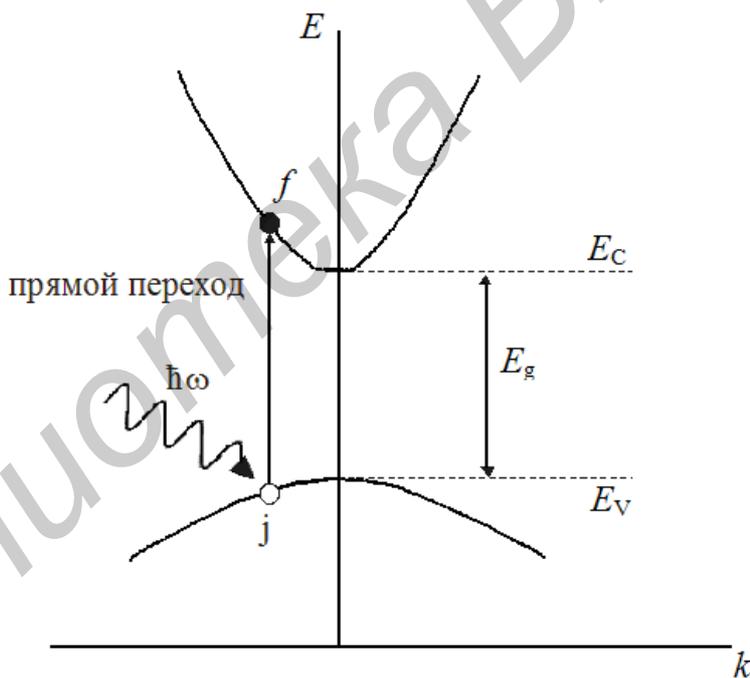


Рис. 4.4. Энергетическая диаграмма, поясняющая процесс поглощения фотона электроном в прямозонном твердом теле (прямой переход)

Таким образом, при взаимодействии электрона с фотоном могут осуществляться только переходы без изменения волнового вектора, т. е. между состояниями, расположенными в одной и той же точке k – пространства (или одной и той же точке зоны Бриллюэна). На диаграмме $E(\vec{k})$ переход, изображенный вертикальной линией, называется *прямым* (или *вертикальным*) переходом (рис. 4.4).

Формулы (4.9) и (4.10) оценивают условия, при котором матричный

элемент $V_{k_f, k_j}^{e\text{-фот}}$ будет отличен от нуля.

Для осуществления реального перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости необходимо дополнительно соблюсти закон сохранения энергии. В рассматриваемом случае это требование отвечает условию

$$E_j + \hbar\omega = E_f. \quad (4.11)$$

4.2.3. Разрешенные не прямые переходы

Переходы электронов между состояниями с различным значением волнового вектора \vec{k} называются *непрямыми*.

Если j - и f -состояния принадлежат, например, одной долине (подзоне) зоны проводимости или валентной зоны или различным зонам, экстремумы которых расположены в разных точках зоны Бриллюэна, то непосредственный переход $j \rightarrow f$ между этими состояниями должен быть запрещен, так как для него возмущение $V_{ff} = 0$. Однако равенство $V_{ff} = 0$ не означает, что переход $j \rightarrow f$ вообще невозможен. Он невозможен лишь в первом приближении теории возмущений, но может быть возможен во втором приближении при переходе через виртуальное состояние.

Так как взаимодействие только с фотоном практически не изменяет волнового вектора электрона, то для осуществления перехода при условии $|\vec{k}_j - \vec{k}_f| > \vec{k}_{\text{фот}}$ необходим дополнительный процесс рассеяния с участием так называемых рассеивающих центров. Взаимодействие с рассеивающими центрами должно обеспечить изменение волнового вектора электрона. Такими рассеивающими центрами могут быть фононы, примесные атомы (узловые, междоузельные), собственные междоузельные атомы, вакансии и т. д.

Рассмотрим не прямой оптический переход $j \rightarrow f$, определяющий процесс поглощения фотона $\hbar\omega$ с рассеянием за счет взаимодействия с фононом $\hbar\Omega_{\text{фон}} = E_{\text{ф}}$ (рис. 4.5).

На этой диаграмме для определенности показано, что рассеяние осуществляется путем *испускания* фонона $E_{\text{ф}}$ с волновым вектором $\vec{k}_{\text{фон}}$.

Матричный элемент $V_{k_f, k_j}^{e\text{-фот}}$ по-прежнему (см. формулу (4.5) и соответствующий текст) учитывает электрон-фононное взаимодействие. Состояние с энергией E_l есть виртуальное состояние.

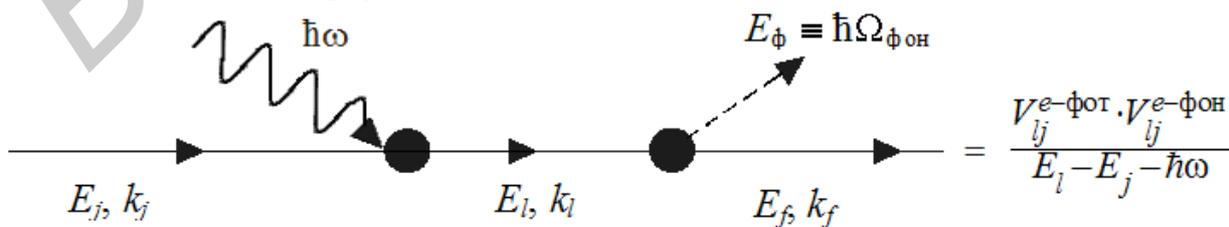


Рис. 4.5. Схема, поясняющая поглощение фотона электроном через виртуальное состояние (непрямой переход)

Если начальное j -состояние принадлежит максимуму валентной зоны, а конечное f -состояние – непрямому минимуму зоны проводимости, то процесс поглощения фотона на энергетической диаграмме можно изобразить следующим образом (рис. 4.6).

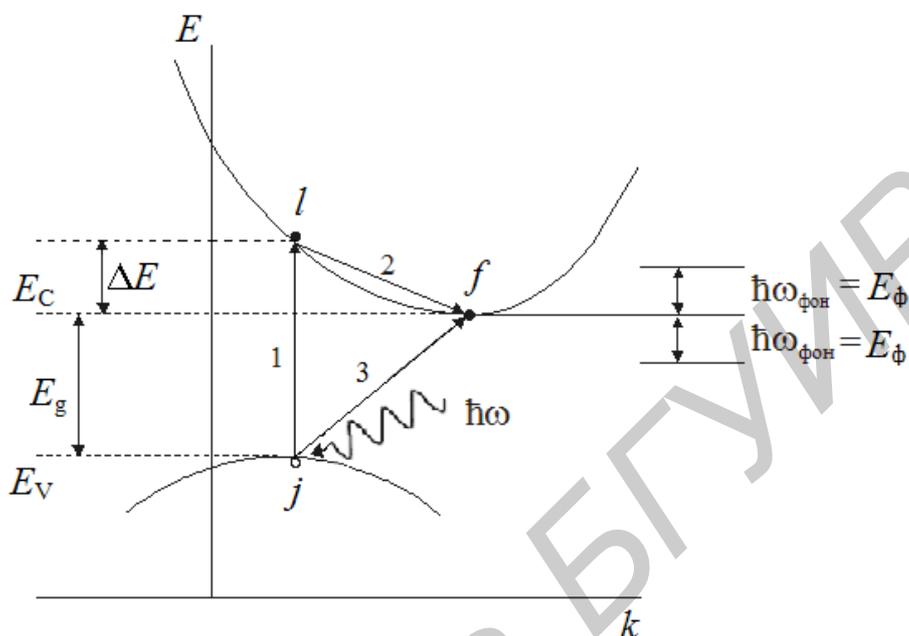


Рис. 4.6. Энергетическая диаграмма, поясняющая процесс поглощения фотона электроном в непрямозонном твердом теле (непрямой переход)

Под воздействием возмущения электрон переходит из j -состояния в валентной зоне в промежуточное, виртуальное l -состояние в зоне проводимости. Таким состоянием должно быть *реально существующее* (например, более высоко лежащее) состояние в зоне проводимости (состояние l на рис. 4.6).

Находясь в виртуальном l -состоянии, электрон взаимодействует с фононом (переход 2 на рис. 4.6). В результате этого взаимодействия электрон переходит в конечное f -состояние.

Полный переход $j \rightarrow f$ возможен, если соблюдаются законы сохранения энергии и импульса (волнового вектора). В рассматриваемом случае эти законы выглядят следующим образом:

$$E_j + (\hbar\omega \pm E_\phi) = E_f; \quad (4.12)$$

$$\vec{k}_j \pm \vec{k}_{\text{фон}} = \vec{k}_f, \quad (4.13)$$

Здесь знаки плюс и минус соответствуют поглощению и испусканию фонона соответственно.

Для реализации прямых переходов необходима «встреча» двух частиц: электрона и фотона. Для реализации же непрямых переходов «встречаются» уже три частицы: электрон, фотон и фонон. Поэтому вероятность таких переходов существенно ниже, чем прямых, а соответствующее значение коэффициента поглощения α существенно меньше, чем для прямых переходов.

Примечание. В матричных элементах для непрямых переходов стоит энергетический множитель $(E_l - E_j - \hbar\omega)^{-1}$, см. рис. 4.5. Поэтому чем ближе виртуальное состояние расположено по энергии к конечному f -состоянию (чем меньше энергетическая щель ΔE), тем больше будет вероятность непрямого перехода.

4.2.4. Форма края собственного поглощения

Край собственного поглощения – это зависимость коэффициента поглощения или пропускания от частоты фотона (энергии, волнового числа, длины волны) вблизи $\hbar\omega = E_g$ (рис. 4.7).

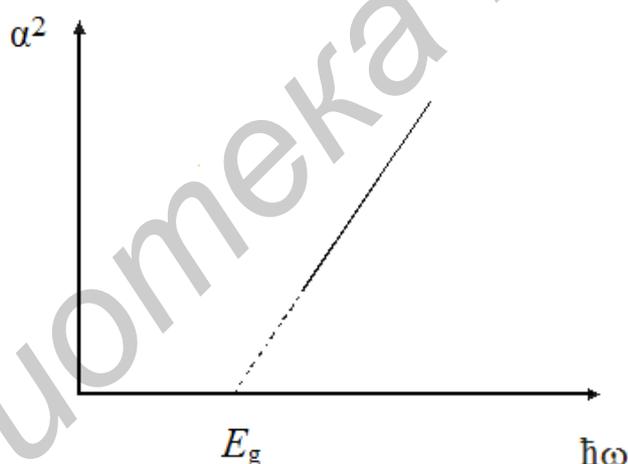


Рис. 4.7. Край собственного поглощения при прямых переходах в прямозонных твердых телах

Форма края собственного поглощения определяется особенностями структуры энергетических зон твердого тела, а следовательно – вероятностью реализации прямых или непрямых оптических переходов.

4.2.4.1. Форма края собственного поглощения в прямозонных твердых телах без учета экситонного поглощения

Коэффициент поглощения α пропорционален вероятности перехода W_{jf} , а также плотности начальных занятых и конечных свободных электронных состояний, разделенных энергией $\hbar\omega$, для которых выполняются правила отбора (4.9), (4.10). Число пар таких состояний, приходящихся на единичный интервал энергии и единицу объема твердого тела, называется *комбинированной плотностью состояний*. Обозначим это количество пар как $N(\hbar\omega)$. Тогда

$$\alpha \approx W_{jf} \cdot N(\hbar\omega). \quad (4.14)$$

Учитывая, что f -состояние расположено в зоне проводимости, j -состояние – в валентной зоне и приняв, что $E_C = 0$, а зоны вблизи экстремумов носят параболический характер, можно записать:

$$E_j = -E_g - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_p^*}; \quad E_f = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*}. \quad (4.15)$$

Из этих формул следует, что

$$E_f - E_j = \hbar\omega = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_n^*} + \frac{1}{m_p^*} \right) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r^*}, \quad (4.16)$$

где $m_r^* = m_n^* m_p^* / (m_n^* + m_p^*)$.

Определим комбинированную плотность состояний следующим образом. Объем сферического слоя в \vec{k} -пространстве толщиной dk (при больших численных значениях k) равен $4\pi^2 k^2 dk$. При этом одно состояние в \vec{k} -пространстве занимает объем $(2\pi)^3/V$, где V – объем твердого тела. Приняв $V=1$ и учитывая спиновое вырождение (равное двум), с учетом формулы (4.16) получаем следующее:

$$N(\hbar\omega) d(\hbar\omega) = \frac{8\pi k dk}{(2\pi)^3} = \frac{(2m_r^*)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} (\hbar\omega - E_g)^{1/2} d(\hbar\omega). \quad (4.17)$$

Вероятность оптического перехода W_{jf} определяется квадратом матричного элемента $|V_{jf}|^2$, вид зависимости от k (или от $\hbar\omega$) которого связан с симметрией волновых функций U_{kj} и U_{kf} . Для большинства твердых тел (полупроводников и диэлектриков) симметрия U_{kj} и U_{kf} такова, что V_{jf} слабо зависит от волнового вектора. Такие переходы называются *разрешенными по симмет-*

при. В этом случае можно положить $V_{ff} = V_{CV}(k=0) = \text{const}$. Тогда из формул (4.14) и (4.17) коэффициент поглощения для прямых разрешенных переходов будет иметь следующий вид:

$$\alpha = A(\hbar\omega - E_g)^{1/2}. \quad (4.18)$$

Из формулы (4.18) следует, что α очень быстро растет с увеличением энергии фотонов при $\hbar\omega$, превышающих величину E_g . При этом форма полосы собственного поглощения при прямых переходах в координатах « $\hbar\omega - \alpha^2$ » будет представлять собой прямую линию, пересекающую ось энергий в точке $\hbar\omega = E_g$ (см. рис. 4.7).

4.2.4.2. Форма края собственного поглощения в прямозонных твердых телах с учетом экситонного поглощения

При исследовании края собственного поглощения ряда материалов было обнаружено, что экспериментальные данные существенно отличаются от теоретических (рис. 4.8).

Это отличие объясняется тем, что при выводе формулы (4.18) не учитывалось взаимодействие между электроном и дыркой, созданными в результате поглощения фотона. Однако электрон и дырка, кулоновски взаимодействуя друг с другом, образуют квазичастицу, называемую *экситоном*.

Экситону можно приписать кинетическую энергию, связанную с движением его центра масс, и внутреннюю энергию, обусловленную кулоновским взаимодействием электрона и дырки. Систему «электрон-дырка», являющуюся экситоном, можно считать в некоторой степени аналогичной атому водорода.

В отличие от атома водорода экситон является возбужденной неравновесной квазичастицей. Он может исчезнуть либо в результате теплового «довозбуждения» (т. е. термической диссоциации) либо вследствие рекомбинации электрона и дырки с испусканием фотона.

Решение уравнения Шредингера для полной энергии экситона дает следующий результат:

$$E_{\text{экс}}(k_{\text{экс}}) = \frac{\hbar^2 k_{\text{экс}}^2}{2M} + E_C + E_n, \quad (4.19)$$

где $k_{\text{экс}}$ – волновой вектор экситона, а $M = m_p + m_n$.

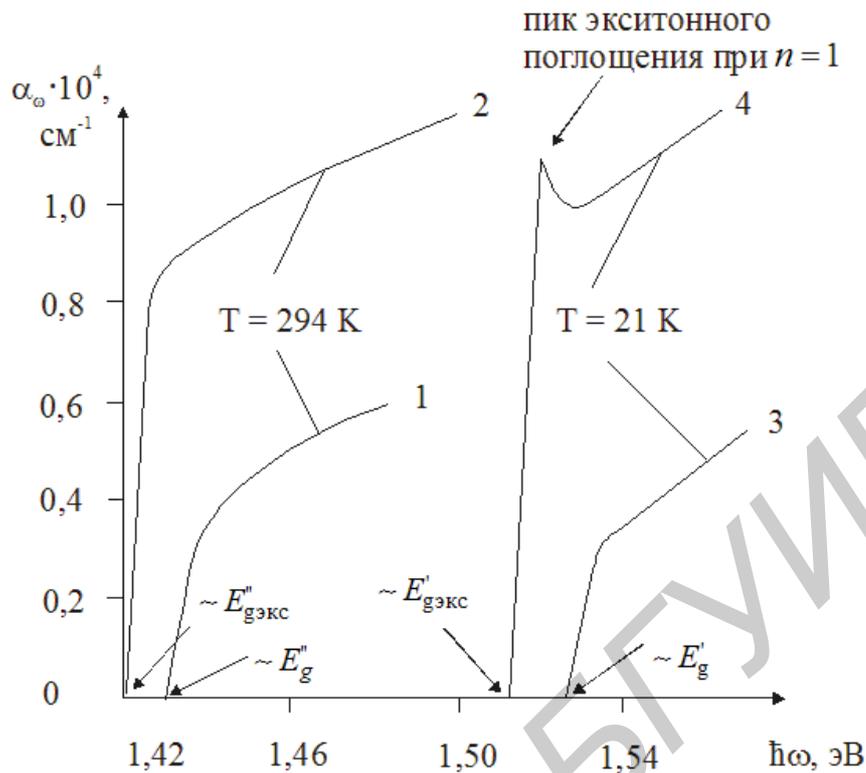


Рис. 4.8. Край собственного поглощения арсенида галлия при различных температурах: 1, 3 – результат, рассчитанный по формуле (4.18); 2, 4 – экспериментальный

Величина E_n определяется следующим образом:

$$E_n = -R \frac{(m_r^* / m_0)}{\epsilon_r^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{E_{\text{экс}}}{n^2}, \quad (4.20)$$

где $n = 1, 2, \dots$; $R = 13,52$ эВ – постоянная Ридберга, m_0 – масса свободного электрона; ϵ_r – относительная диэлектрическая проницаемость твердого тела. Смысл величины m_r^* раскрыт при рассмотрении формулы (4.16).

Таким образом, полная энергия экситона $E_{\text{экс}}$ состоит из его кинетической энергии $\hbar^2 k_{\text{экс}}^2 / 2M$, определяемой движением его центра масс, и внутренней энергии $E_C + E_n$.

Из формул (4.19) и (4.20) следует, что энергетический спектр экситонов содержит серию дискретных параболических зон, расположенных ниже дна зоны проводимости. Эти зоны сливаются в континуум при $n \rightarrow \infty$, т. е. при энергиях фотонов, соответствующих величине E_g (рис. 4.9). Каждая из зависимостей $E(k_{\text{экс}})$ с конкретным n образует экситонную зону. Точка по вертикали 0 на рис. 4.9 – это энергия невозбужденного твердого тела. Минимальная энергия $E_{g \text{ экс}} = E_g - E_{\text{экс}}$, необходимая для создания экситона, называется *экситонной шириной запрещенной зоны*.

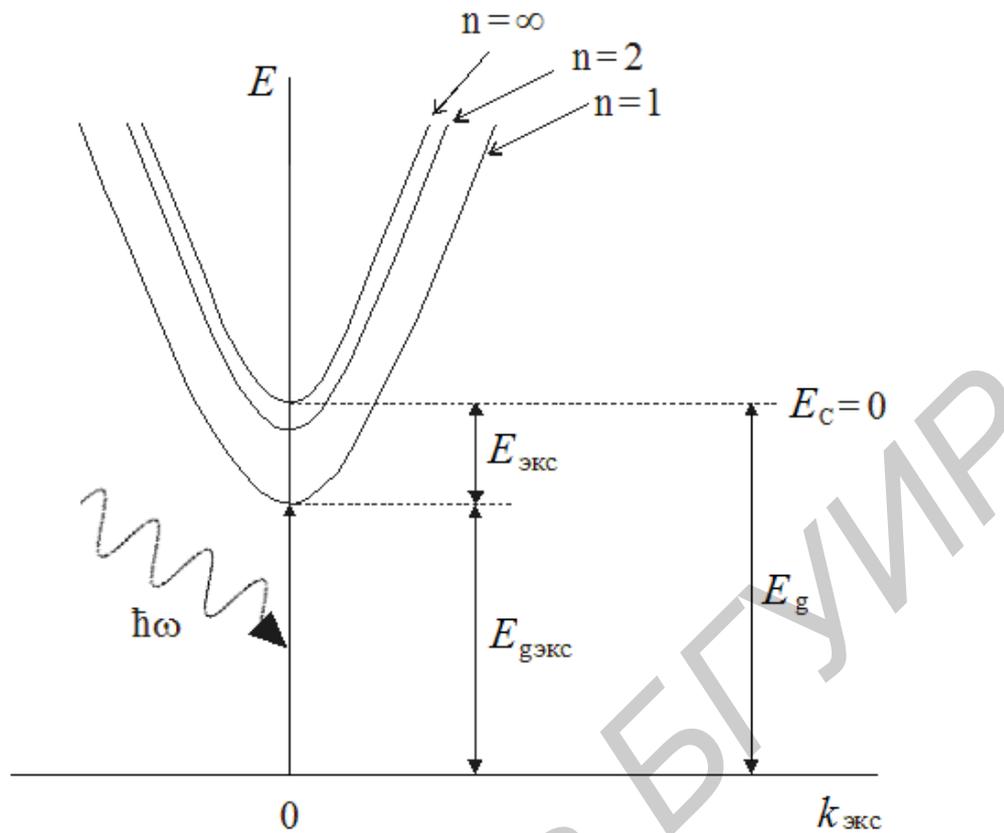


Рис. 4.9. Экситонные энергетические состояния в твердых телах

Экситонные состояния и эффекты, связанные с ними, не могут быть изображены на обычных энергетических диаграммах типа рис. 4.4 и рис. 4.6: эти диаграммы справедливы в одноэлектронном приближении, а экситон состоит как минимум из двух частиц: электрона и дырки. Поэтому рис. 4.9 принципиально отличается от рис. 4.4 и 4.6 несмотря на внешнюю схожесть. В частности, по горизонтальной оси отложен квазиволновой вектор экситона, а не электрона.

Непосредственный оптический переход в экситонное состояние при поглощении фотона $\hbar\omega$ будет возможен при соблюдении закона сохранения энергии и квазиимпульса:

$$\hbar\omega = \hbar^2 k_{\text{экс}}^2 / 2M + E_C + E_n; \quad \hbar k_{\text{фот}} = \hbar k_{\text{экс}} \quad (4.21)$$

Поскольку $\hbar k_{\text{фот}} \rightarrow 0$ и начальному состоянию отвечает точка $k_{\text{экс}} \approx 0$, непосредственные оптические переходы возможны только с образованием экситона с $k_{\text{экс}} \approx 0$. Поэтому спектр собственного поглощения в области края полосы собственного поглощения с учетом экситонных эффектов должен состоять из серии линий

$$\hbar\omega = E_g - \frac{E_{\text{экс}}}{n^2}, \quad (4.22)$$

которые переходят в непрерывный спектр при $\hbar\omega \geq E_g$. Следует учитывать и то, что каждая из экситонных линий уширена как за счет тепловых флуктуаций энергии, так и принципа неопределенности Гейзенберга. Поэтому в реальных условиях в спектре поглощения относительно четко проявляется только линия с $n = 1$, а линии с $n \geq 2$ накладываются друг на друга, образуя сплошной спектр (см. рис. 4.8).

4.2.4.3. Форма края собственного поглощения в непрямозонных твердых телах без учета экситонного поглощения

Законы сохранения для непрямых переходов вблизи края полосы собственного поглощения в таких материалах будут определяться формулами (4.12) и (4.13).

Непрямой переход с поглощением фонона E_ϕ через виртуальное состояние l изображен на рис. 4.6.

Пусть оптический переход из j -состояния в виртуальное l -состояние разрешен. Тогда оптический матричный элемент $V_{jl}^{e\text{-фот}}(\vec{k}) = V_{jl}(0) = \text{const}$. При этом коэффициент поглощения будет пропорционален комбинированной плотности состояний, разделенных энергией $\hbar\omega = E_\phi$, и вероятности взаимодействия электронов и дырок с фононами. При поглощении фонона вероятность взаимодействия будет пропорциональна концентрации фононов N_ϕ .

Так как фононы подчиняются статистике Бозе–Энштейна, то их концентрацию можно определить по формуле

$$N_\phi = N / \exp(E_\phi / kT) - 1. \quad (4.23)$$

При непрямых переходах возможны переходы из любого занятого j -состояния валентной зоны в любое свободное f -состояние зоны проводимости. Необходимое условие при этом – выполнение закона сохранения энергии (см. формулу 4.12). Тогда комбинированная плотность состояний $N(\hbar\omega)$ будет определяться интегралом по всем возможным парам состояний, разделенных энергией $\hbar\omega = E_\phi$ произведения плотностей занятых j -состояний и свободных f -состояний. Для зон с параболическим характером энергетических зон $E(k)$ получатся следующая формула:

$$N(\hbar\omega) = \frac{N}{\pi^3} \left(\frac{2}{\hbar^2} \right)^3 (m_n^* m_p^*)^{3/2} (\hbar\omega + E_\phi - E_g)^2. \quad (4.24)$$

При этом зависимость коэффициента поглощения от частоты для непрямых переходов примет следующий вид:

$$\alpha'(\omega) = \frac{B}{\exp\left(\frac{E_\phi}{kT}\right) - 1} \cdot (\hbar\omega + E_\phi - E_g)^2. \quad (4.25)$$

Величина коэффициента B зависит от произведения квадрата оптического матричного элемента $V_{jl}^{e\text{-фот}}$ и квадрата матричного элемента рассеяния $V_{jl}^{e\text{-фон}}$, эффективных масс m_n^* и m_p^* , множителя $(\hbar\omega + E_j - E_l)$ и других констант.

Аналогичные рассуждения можно привести и для переходов с *испусканием* фононов. При этом знак перед E_ϕ в формулах (4.24) и (4.25) изменится на противоположный. Поэтому для переходов с *испусканием* фононов

$$\alpha''(\omega) = \frac{B}{1 - \exp\left(\frac{E_\phi}{kT}\right)} \cdot (\hbar\omega - E_\phi - E_g)^2. \quad (4.26)$$

Анализ формул (4.25) и (4.26) позволяет сделать вывод, что для непрямых переходов поглощение фотона с одновременным *испусканием* фонона будет начинаться при энергии $\hbar\omega_a = E_g + E_\phi$, а с *поглощением* фонона – при энергии $\hbar\omega_a = E_g - E_\phi$. Суммарный коэффициент поглощения вследствие соблюдения принципа суперпозиции можно записать следующим образом:

$$\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + \alpha''(\omega). \quad (4.27)$$

Как видно из формулы (4.27), форма края собственного поглощения при непрямых переходах в координатах $(\hbar\omega - \alpha^{-1/2})$ будет представлять собой две прямые, пересекающие ось абсцисс в точках $E_g + E_\phi$ и $E_g - E_\phi$, (рис. 4.10). Очевидно, что значение E_g лежит посередине между этими точками.

При получении формул (4.25) и (4.26), а также построении рис. 4.10 учтено взаимодействие только с одним фононом. Поэтому рис. 4.10 позволяет определить энергию фононов E_ϕ . С учетом того, что энергия фононов (как и ширина запрещенной зоны) индивидуальна для каждого твердого тела, полученный результат дает дополнительную информацию в вопросе идентификации изучаемого твердого тела.

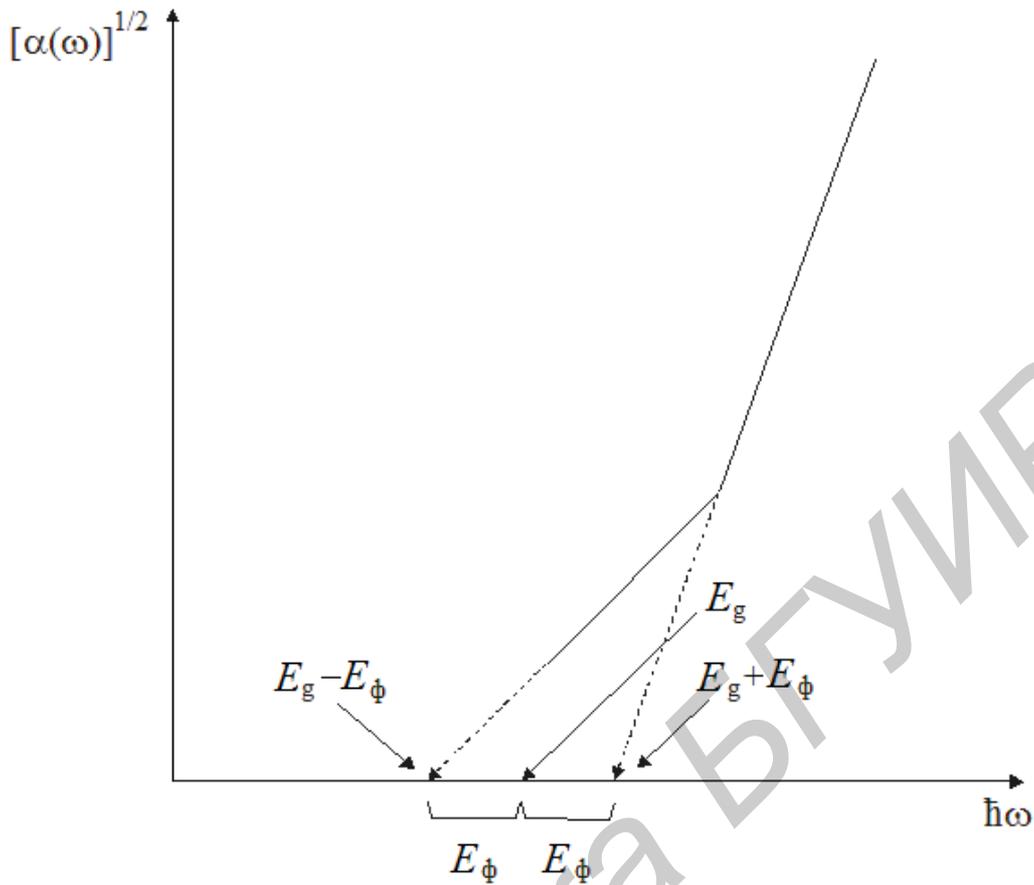


Рис. 4.10. Край собственного поглощения при не прямых переходах

При наличии фононов разных типов коэффициент поглощения можно представить в виде суммы

$$\alpha(\omega) = \sum_i [\alpha_i'(\omega) + \alpha_i''(\omega)], \quad (4.28)$$

где индекс суммирования i означает конкретный вид фононов.

4.2.4.4. Форма края собственного поглощения в непрямозонных твердых телах с учетом экситонного поглощения

Кулоновское взаимодействие электронов и дырок, приводящее к образованию экситонов, может существенно влиять на форму края поглощения и при не прямых переходах.

Непрямые экситонные переходы, как и не прямые электронные переходы, возможны во втором приближении теории возмущений. Для их осуществления необходимо рассеяние на фононах. Процесс экситонного поглощения при не прямых переходах поясняет рис. 4.11. Начальным состоянием здесь также является состояние невозбужденного кристалла с $\bar{k} = 0$.

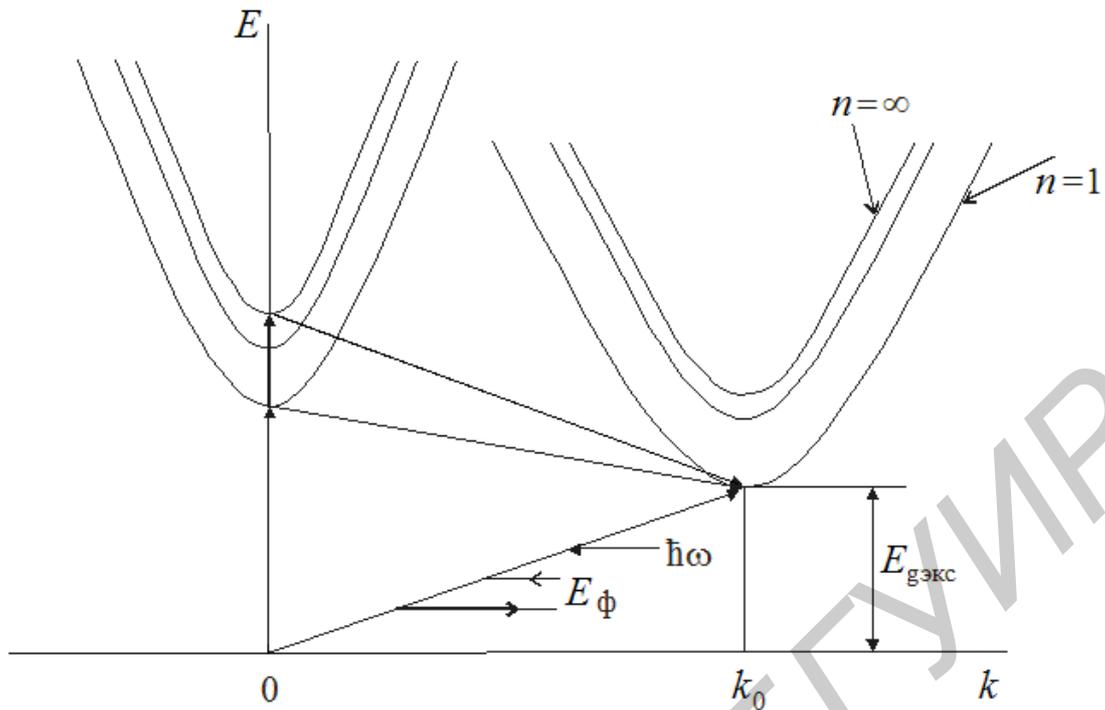


Рис. 4.11. Непрямые оптические переходы в экситонные состояния при взаимодействии с фононом E_{ϕ}

При не прямых экситонных переходах в спектре поглощения не будут проявляться резкие линии. Это объясняется тем, что благодаря участию фононов возможны переходы не только в точку k_0 , но и в любое состояние около нее. При этом частотная зависимость коэффициента поглощения от каждого экситонного состояния с заданным n будет определяться изменением плотности состояний в экситонной зоне. Эта плотность состояний изменяется аналогично в зоне проводимости. Поэтому для не прямых переходов в экситонные состояния получается следующая формула для коэффициента поглощения:

$$\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + \alpha''(\omega) = \frac{C}{E_{\phi}} \frac{1}{e^{kT} - 1} \left[(\hbar\omega - E_{гэкс} + E_{\phi})^{1/2} + e^{\frac{E_{\phi}}{kT}} (\hbar\omega - E_{гэкс} - E_{\phi})^{1/2} \right], \quad (4.29)$$

где $E_{гэкс} = E_g - E_{\text{экс}}$.

Формула (4.29) справедлива лишь в области $E_{гэкс} \leq (\hbar\omega \pm E_{\phi}) < E_g$. При $(\hbar\omega - E_{гэкс}) \gg E_{\text{экс}}$ она переходит в формулы (4.25) и (4.26), описывающие процесс поглощения без участия экситонного поглощения. Реальный спектр поглощения будет определяться суммой спектров, обусловленных взаимодействием с различными типами фононов.

Коэффициент поглощения α рассчитывается по данным измерений коэффициента пропускания образца T . Коэффициентом пропускания T называется отношение интенсивности I_T света, прошедшего через образец, к интенсивности падающего света I_0 . Если толщина образца d много больше длины волны λ , то связь между коэффициентом пропускания T , коэффициентом отражения R и коэффициентом поглощения α выглядит следующим образом (без учета эффектов рассеяния и интерференции и при нормальном падении света):

$$T = \frac{(1-R)^2 \left[1 + (\lambda\alpha / 4\pi n)^2 \right]}{\exp(\alpha d) - R^2 \exp(-\alpha d)}. \quad (4.30)$$

В этом выражении n – действительная часть коэффициента оптического преломления материала.

В области изменения коэффициента пропускания образца от $(1-R)/(1+R)$ до 10% для коэффициента пропускания получается более простое выражение:

$$T = \frac{(1+R)^2 \exp(-\alpha d)}{1 - R^2 \exp(-2\alpha d)}. \quad (4.31)$$

Когда $T < 10\%$, формула (4.31) приобретает следующий вид:

$$T = (1-R)^2 \exp(-\alpha d). \quad (4.32)$$

При этом коэффициент поглощения определяется следующим образом:

$$\alpha = \frac{1}{d} \cdot \ln \frac{(1-R)^2}{T}. \quad (4.33)$$

Из формулы (4.33) следует, что для расчета α кроме коэффициента пропускания необходимо измерить еще и коэффициент отражения R . Этого можно избежать, если измерять коэффициент пропускания T двух идентичных образцов с толщинами d_1 и d_2 . В этом случае

$$\alpha = \frac{1}{d_1 - d_2} \cdot \frac{\lg T_1 - \lg T_2}{\lg e}. \quad (4.34)$$

Примечание. Величина $D = -\lg T$ называется *оптической плотностью образца* и на приборе **SPECORD UV VIS** может регистрироваться непосредственно.

В простейшем случае в узкой спектральной области вблизи края

полосы собственного поглощения можно просто пренебречь изменением коэффициента отражения R .

Для определения типа оптических переходов и величины E_g необходимо построить зависимости $\alpha^2 = f(\hbar\omega)$ и $\alpha^{1/2} = f(\hbar\omega)$. Если зависимость $\alpha^2 = f(\hbar\omega)$ будет представлять собой прямую линию, то это указывает на то, что твердое тело – прямозонное (см. п. 4.2.3.1). Если же прямую линию будет представлять зависимость $\alpha^{1/2} = f(\hbar\omega)$, то это будет указывать на непрямозонное твердое тело. Величина E_g определяется при экстраполяции прямой к значению $\alpha = 0$ (см. рис. 4.7 и 4.10 соответственно).

В том случае, если построение этих зависимостей будет соответствовать рис. 4.10, то появится возможность определить так же энергию и вид фононов, участвующих в поглощении света.

Что касается вида фононов, то следует отметить следующие основные моменты.

В твердых телах существуют продольные (L) и поперечные (T) колебания кристаллической решетки твердых тел. Соответствующие этим колебаниям фононы носят название продольных оптических и акустических (LO и LA соответственно) и поперечных оптических и акустических (TO и TA соответственно).

Энергии фотонов (LO , LA , TO и TA) квантуются и имеют конкретные численные значения для конкретных материалов. Эти значения энергией фотонов могут быть использованы для уточнения в идентификации изучаемого твердого тела.

В заключение следует отметить, что в поглощении света могут участвовать не только одиночные фотоны (LO , LA , TO и TA), но и их линейные комбинации. Например, $2LO$; $2TA$; $LO+TA$; $LO+2TA$; $LO+LA+TO$ и т. д. Это обстоятельство может существенно осложнить интерпретацию получаемых экспериментально спектральных кривых.

4.3. ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

1. Зарегистрировать спектр пропускания предложенных полупроводников и диэлектриков (см. инструкцию на рабочем месте).

2. Используя полученные спектры, перерассчитать спектр пропускания в спектр поглощения.

3. Построить зависимости $\alpha^2(\hbar\omega)$ и $\alpha^{1/2} = f(\hbar\omega)$ для исследуемых образцов. Определить тип оптических переходов (прямые или не прямые) и ширину запрещенной зоны образцов, энергию и вид фононов, принимающих участие в фундаментальном поглощении.

4. Сравнить полученные значения параметров по п. 3 с табличными значениями и идентифицировать изучаемое твердое тело. Табличные данные для ряда используемых в микроэлектронике материалов приведены в инструкции по проведению экспериментальной части лабораторной работы.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какой смысл имеют понятия: коэффициент отражения, коэффициент пропускания, коэффициент поглощения?
2. Как выглядит и какие явления описывает закон Бугера–Ламберта?
3. Как выглядит спектр поглощения? Какие характерные области на нем имеются?
4. В чем отличие спектров собственного поглощения для прямозонных и непрямозонных твердых тел?
5. Объясните законы сохранения энергии и импульса при реализации разрешенных прямых и непрямых переходов.
6. Какова роль фононов при реализации непрямых переходов?
7. Как сказывается экситонное поглощение на форме края собственного поглощения?
8. Как определяется ширина запрещенной зоны и энергия фононов по спектрам поглощения для непрямозонных твердых тел?

Библиотека БГУИР

Учебное издание

**Волчѣк Светлана Анатольевна
Петрович Владимир Алексеевич**

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

*Лабораторный практикум
для студентов специальностей*

1-41 01 02 «Микро- и наноэлектронные технологии и системы»,
1-41 01 03 «Квантовые информационные системы»
и 1-41 01 04 «Нанотехнологии и наноматериалы в электронике»
всех форм обучения

Редактор Т. П. Андрейченко
Корректор Е. Н. Батурчик
Компьютерная верстка Ю. Ч. Ключкевич

Подписано в печать 20.04.2011.
Гарнитура «Таймс».
Уч.-изд. л. 5,9.

Формат 60×84 1/16.
Отпечатано на ризографе.
Тираж 100 экз.

Бумага офсетная.
Усл. печ. л. 6,05.
Заказ 352.

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