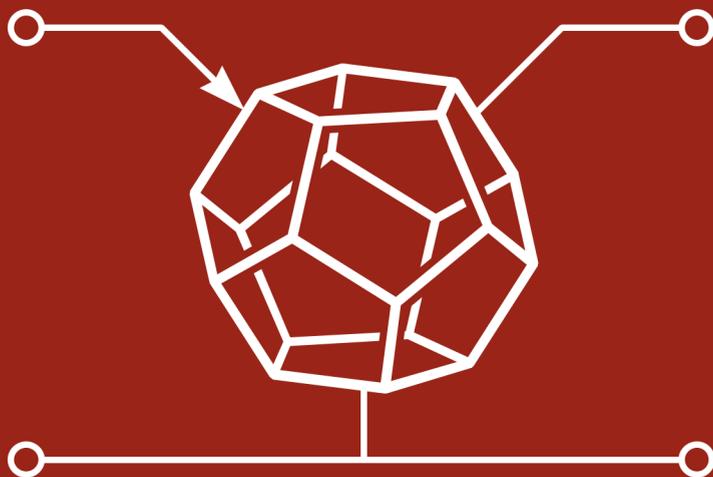


Н. А. Поклонский
С. А. Вырко
О. Н. Поклонская

ФИЗИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СИСТЕМ

Основные понятия



Н. А. Поклонский
С. А. Вырко
О. Н. Поклонская

ФИЗИКА
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
СИСТЕМ
Основные понятия

Минск
«Беларуская навука»
2023

УДК 537.311.322
ББК 22.379
П48

Рецензенты:

академик НАН Беларуси, доктор физико-математических наук,
профессор С. В. Гапоненко,
доктор физико-математических наук А. П. Сайко

Поклонский, Н. А.

П48 Физика полупроводниковых систем. Основные понятия /
Н. А. Поклонский, С. А. Вырко, О. Н. Поклонская. – Минск: Бе-
ларуская навука, 2023. – 311 с.: ил.
ISBN 978-985-08-3053-1.

Издание содержит основные понятия физики полупроводниковых материалов и элементов приборных структур на их основе. В основе книги — опыт выполнения проектов Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований и чтения лекций членом-корреспондентом, профессором Н. А. Поклонским. Кратко формулируются понятия о состояниях и процессах с участием электронов, дырок, фононов и атомных дефектов кристаллической матрицы в полупроводниковых системах различной размерности, а также в дискретных полупроводниковых приборах. Приведен необходимый для понимания терминов (основных понятий) минимум сведений из статистической термодинамики и квантовой механики.

Книга предназначена для студентов и аспирантов, а также научных работников, специализирующихся в области физики и техники разноразмерных полупроводниковых систем.

УДК 537.311.322
ББК 22.379

ISBN 978-985-08-3053-1

© Поклонский Н. А., Вырко С. А.,
Поклонская О. Н., 2023
© Оформление. РУП «Издательский
дом «Беларуская навука», 2023

Содержание

Предисловие	4
Пролог. Полупроводники в мире материалов	5
Глава 1. Полупроводниковые материалы и приборы	12
Глава 2. Межатомные связи. Структура конденсированных систем. Прямая и обратная решетки Браве	26
Глава 3. Решеточные свойства кристаллических систем. Зоны Бриллюэна. Концепция квазичастиц	60
Глава 4. Колебания кристаллической решетки	71
Глава 5. Делокализованные электронные и дырочные состояния. Энергетические зоны в трехмерных кристаллах	79
Глава 6. Поверхность. Пленки, нити, наночастицы	100
Глава 7. Дефекты кристаллической структуры. Неупорядоченные конденсированные системы	115
Глава 8. Локализованные электронные состояния	132
Глава 9. Решеточная теплопроводность. Атомная диффузия в кристаллических матрицах	148
Глава 10. Миграция электронов и дырок. Термоэлектричество. Сверхпроводимость	156
Глава 11. Магнитные свойства материалов. Резонансы	183
Глава 12. Оптические и электрические свойства полупроводниковых материалов	204
Глава 13. Нелинейные свойства конденсированных систем	237
Глава 14. Полупроводниковые приборные структуры	253
Приложение. Начала статистической термодинамики и квантовой механики	268
Список литературы	303
Предметный указатель	304
Фундаментальные физические постоянные	311

Предисловие

Научное издание по основным понятиям, используемым в процессе познания физики полупроводниковых систем, основано на опыте выполнения проектов Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований, а также чтения лекций на физическом факультете Белорусского государственного университета и в Университете НАН Беларуси членом-корреспондентом, профессором Н. А. Поклонским.

Кратко сформулированы основные понятия о равновесных состояниях квазичастиц (электронов s -зоны, дырок v -зоны, фононов) и атомных дефектов кристаллической структуры, а также об электрических, магнитных, тепловых и оптических процессах в полупроводниковых системах различной размерности. Рассматриваются в основном материалы с ковалентными и ионно-ковалентными химическими связями между атомами. Представлены также элементы физики дискретных полупроводниковых приборов. Приведен минимум необходимых сведений из статистической термодинамики и квантовой механики. Текстовый материал дополнен оригинальными рисунками и таблицами. Способ изложения — от простого к сложному, от явления к сущности.

Издание представлено в форме эссе, предполагающего оперативное применение его студентами и аспирантами при подготовке к экзаменам, а также в исследовательской работе. Приводится список литературы, рекомендуемой для ориентировки на крутых траекториях познания удивительного мира физики и техники полупроводников. Предметный указатель также служит этой цели. Фундаментальные физические постоянные (в системе единиц СИ) и их стандартные обозначения приведены в конце книги.

Авторы сознавали, что при формулировке любых понятий приходится использовать лингвистические переменные. Например, Теоретик говорит, что линия есть длина без ширины, но Экспериментатор не может понять длины, не имеющей ширины. Теоретик вводит (по Н. Лобачевскому) понятие пересечения параллельных линий, а Экспериментатор рассуждает (по Ф. Достоевскому) так: “Пусть даже параллельные линии сойдутся и я это сам увижу: увижу и скажу, что сошлись, а все-таки не приму...”.

Н. А. Поклонский, С. А. Вырко, О. Н. Поклонская

Пролог. Полупроводники в мире материалов

Полупроводники — это вещества в твердом или жидком агрегатных состояниях, электрическая проводимость которых на постоянном токе увеличивается при нагревании и/или освещении. Полупроводники электричества открыл М. Фарадей (1833 г.). Он установил, что электропроводность сернистого серебра (Ag_2S) увеличивается как при нагревании теплом от руки или свечи, так и при нагревании возбуждаемым в нем током. Положительную фотопроводимость селена, т. е. увеличение его электропроводности при освещении, обнаружил В. Смит (1873 г.). Позднее были выявлены полупроводниковые свойства закиси меди (Cu_2O) и других веществ. Исследования по физике и технологии полупроводников привели к созданию твердотельной электроники и интегральной оптики, которые во многом определили прогресс в техносфере. К тому же, полупроводники определенно могли участвовать в процессе зарождения и эволюции живой природы на Земле.

Наибольшее распространение получили полупроводниковые материалы в виде моно- и поликристаллов. При нагревании или освещении полупроводникового образца образующие его атомы достаточно легко ионизируются, в результате чего возникают и подвижные электроны, и подвижные дырки (электронные вакансии в ковалентных химических связях атомов кристаллической матрицы). Вообще, дырка является элементарным возбуждением электронной подсистемы кристалла, квазичастицей, т. е. воображаемой частицей (В. Гейзенберг; 1931 г.). Электрический заряд дырки равен по величине и противоположен по знаку заряду электрона, а спин дырки (собственный дипольный магнитный момент дырки) равен по величине спиновому магнитному моменту электрона. Связанное состояние электрона и дырки в кристаллических полупроводниках и диэлектриках (иначе непроводниках тока), осуществляющее перенос энергии, но не электрического заряда, называется экситоном [Я. Френкель (1931 г.); Дж. Ванье, Н. Мотт (1937–1938 гг.)].

Согласно зонной теории (А. Вильсон; 1931 г.), спектр разрешенных и запрещенных значений энергии электронов в трехмерных кристаллических материалах состоит из чередующихся полос, иначе энергетических зон. Энергетические зоны образованы квазинепрерывной совокупностью атомных уровней энергии, “расще-

пившихся” в результате агрегации свободных атомов в кристаллическую структуру. В кристаллических полупроводниках заполненные электронами состояния валентной зоны (v -зоны) отделены от вакантных состояний электронов в зоне проводимости (c -зоне) запрещенной зоной (энергетической щелью E_g) между дном c -зоны и потолком v -зоны. Электроны заполняют разрешенные зоны энергий в соответствии с принципом Паули: на Q уровнях энергии квантовой системы может находиться не более $2Q$ электронов, так как каждому уровню соответствует 2 состояния спина электрона. Зонная теория состояний электронов в кристаллах основана на использовании при решении уравнения Шрёдингера адиабатического и одноэлектронного приближений: 1) средняя скорость движений ядер атомов около положений равновесия много меньше средней скорости движений электронов; 2) каждый электрон движется в пространственно-периодическом поле, создаваемом ядрами и остальными электронами.

Электромагнитные свойства кристалла зависят от степени заполнения энергетических зон электронами, т. е. от числа электронов в зоне проводимости и от числа незаполненных электронами состояний (электронных вакансий, дырок) в валентной зоне. Если разрешенная энергетическая зона заполнена электронами частично, то под действием внешнего электрического поля электроны перераспределяются по состояниям в этой зоне. При этом появляется наведенная полем анизотропия распределения электронов по скоростям, возникает электрический ток. Поэтому кристалл с частично заполненной электронами c -зоной даже при самых низких температурах остается проводником электричества — металлом. Электроны в полностью заполненной ими v -зоне не могут перераспределяться по состояниям в этой зоне (так как они “заморожены” из-за принципа Паули). Кристалл с заполненной электронами v -зоной при отсутствии электронов в c -зоне является диэлектриком (изолятором, который не проводит постоянный ток, а лишь поляризуется во внешнем электрическом поле). Если же при нагревании или освещении кристалла подводимой к нему энергии достаточно для перевода малой части электронов из v -зоны в c -зону, то его электрическая проводимость увеличивается. Такой кристалл представляет собой полупроводник.

В отличие от типичных металлов (Ag, Cu, Al), в полупроводниках (Ge, Si, GaAs) концентрация и подвижных электронов в c -зоне, и подвижных дырок в v -зоне значительно меньше кон-

центрации образующих кристаллическую матрицу атомов. К тому же для нормальных (несверхпроводящих) металлов без магнитных примесей характерно увеличение электрического сопротивления на постоянном токе при нагревании и нечувствительность к свету. От кристаллических диэлектриков полупроводники отличаются лишь меньшей энергетической щелью E_g между краями зон разрешенных значений энергии. У широкозонных полупроводников величина E_g больше энергии сродства к электрону E_A , т. е. энергии, необходимой для выхода электрона со дна s -зоны в вакуум. Типичные широкозонные полупроводники — алмаз, BN, AlN. Узкозонными кристаллическими полупроводниками ($E_g < E_A$) являются InSb, Ge, Si и др. Бесщелевые полупроводники имеют нулевую ширину запрещенной зоны (например, серое олово). От типичных полупроводников их отличает отсутствие пороговой энергии ($E_g = 0$), необходимой для появления электронно-дырочной пары, а от типичных полуметаллов (Bi, Sb, As) — значительно меньшая концентрация и электронов в s -зоне, и дырок в v -зоне.

К бесщелевым полупроводникам ($E_g = 0$) относится графен — кристаллический плоский слой из углерода толщиной в 1 атом (А. Гейм, К. Новоселов; 2004 г.). Атомы углерода (C) расположены в вершинах правильных шестиугольников двухмерной кристаллической решетки, так что каждый атом принадлежит трем шестиугольникам. Расстояние между ближайшими атомами углерода 0.142 нм, толщина графена принимается равной 0.335 нм, т. е. расстоянию между соседними атомными плоскостями в трехмерном кристаллическом графите. Графен площадью 1 см² содержит $3.8 \cdot 10^{15}$ атомов углерода. Каждый атом C имеет 4 валентных электрона: 3 электрона локализованы (участвуют в образовании ковалентных C–C-связей и определяют механические свойства графена), а 1 электрон делокализован (обуславливает оптическое поглощение и электрическую проводимость графена). Пропускание света оптического диапазона графеном не зависит от длины электромагнитной волны и составляет $\approx 97.7\%$. Присоединение к каждому атому C одного атома водорода превращает графен в графан — кристаллический диэлектрик в виде квазиплоского слоя. При термической обработке графан восстанавливается до исходного полупроводникового состояния графена.

Состояние электрона (и дырки) в кристалле характеризуется не только энергией и спиновым магнитным моментом, но и квазиимпульсом. Квазиимпульс — это расширение понятия импульса

на случай движения электрона или дырки в кристалле, где их потенциальная энергия периодически зависит от координат (Ф. Блох, Р. Пайерлс, Л. Бриллюэн; 1928–1930 гг.). Если минимуму энергии электрона в c -зоне и минимуму энергии дырки в v -зоне соответствует одно и то же значение квазиимпульса, то полупроводник называется прямозонным (di). В непрямозонном (id) полупроводнике долинам (эквивалентным минимумам энергии электронов c -зоны) и минимуму энергии дырки v -зоны соответствуют разные значения квазиимпульса. Акт межзонной электронно-дырочной рекомбинации — это переход электрона из c -зоны в v -зону, в результате которого происходит исчезновение дырки, иначе электронной вакансии в v -зоне. При прочих равных условиях вероятность рекомбинации электрона c -зоны и дырки v -зоны с излучением фотона больше в прямозонных полупроводниках, чем в непрямозонных. Это происходит потому, что в прямозонных полупроводниках, в отличие от непрямозонных, законы сохранения энергии и квазиимпульса электрона, дырки и фотона выполняются и без поглощения или испускания фонона (кванта энергии колебаний кристаллической решетки). Именно это обстоятельство обусловило появление прямозонных полупроводниковых лазеров, работающих при комнатной температуре.

Параметром, характеризующим тепловые свойства кристаллической решетки диэлектриков, полупроводников и металлов, является температура Дебая T_D , при которой возбуждаются практически все моды колебаний атомов (П. Дебай; 1912 г.). При температурах T больших T_D теплоемкость трехмерного образца твердого тела не зависит от T (закон Дюлонга – Пти), а при T меньших T_D она пропорциональна T^3 . Для материалов, состоящих из легких атомов с прочными химическими связями между ними (например, алмаз), значения T_D больше, чем для материалов из тяжелых атомов со слабыми связями (например, олово).

Значения (при лабораторных условиях) энергетической ширины запрещенной зоны E_g (в электронвольтах), ее тип (прямозонный — di, непрямозонный — id), постоянной кристаллической решетки a (в нанометрах), относительной диэлектрической проницаемости ϵ_r и температуры Дебая T_D (в кельвинах) для типичных полупроводников кубической сингонии объединены в табл. 1.

Собственный полупроводник (т. е. i -типа) не содержит атомов примесей, и поэтому концентрация электронов c -зоны равна концентрации дырок v -зоны. В примесном полупроводнике, содержа-

Таблица 1

**Параметры кристаллических полупроводников
кубической сингонии при лабораторных условиях**

Полупроводник	E_g , эВ	Тип E_g	a , нм	ϵ_r	T_D , К
Нитрид бора (BN)	6.2	id	0.36160	6.8	1730
Алмаз (C)	5.5	id	0.35669	5.7	1860
Карбид кремния (3C-SiC)	2.2	id	0.43596	9.7	1270
Арсенид галлия (GaAs)	1.4	di	0.56536	12.8	344
Кремний (Si)	1.1	id	0.54310	11.5	636
Германий (Ge)	0.66	id	0.56579	15.7	374
Антимонид индия (InSb)	0.18	di	0.64794	17.2	203
Серое олово (α -Sn)	0	di	0.64892	23	220

Примечание. Кристаллы нитрида алюминия (AlN) и нитрида галлия (GaN) имеют ковалентно-ионный тип химической связи, гексагональную решетку Браве и низкочастотную относительную диэлектрическую проницаемость ϵ_r : 9.1 (AlN) и 9.9 (GaN). Эти кристаллы являются прямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны (di-тип энергетической щели) E_g , эВ: 6.1 (AlN) и 3.4 (GaN).

щем атомы примесей в кристаллической матрице, это равенство может нарушаться, и тогда электропроводность в основном обеспечивается одним типом носителей заряда (электронами или дырками). Атомы примесей вводятся в полупроводниковый кристалл в процессе его выращивания из расплава, а также посредством ионной имплантации (внедрения) или диффузии из внешних источников. Процесс введения атомов примесей в полупроводник называется легированием (или допированием). В полупроводнике n -типа концентрация электронов в c -зоне больше концентрации дырок в v -зоне. В полупроводнике p -типа концентрация дырок в v -зоне больше концентрации электронов в c -зоне. Наличие в полупроводнике примесей и собственных точечных дефектов структуры, занимающих узлы или междоузлия кристаллической решетки, приводит к появлению локальных уровней энергии в запрещенной зоне (реже — в зонах разрешенных значений энергии). Вследствие термической или оптической ионизации примеси приобретают электрический заряд на фоне кристаллической матрицы: водородоподобные доноры — положительный, а водородоподобные акцепторы — отрицательный. Ионизация донора сопровождается появлением электрона в c -зоне, а ионизация акцептора — дырки в v -зоне. Электрическая активность атома примеси обусловлена тем, что он имеет другую валентность по сравнению с атомом кри-

сталлической матрицы (решетки). Когда атом примеси изовалентно замещает один из атомов, формирующих кристаллическую структуру, то чаще всего эта примесь электрически неактивна (т. е. не создает локализованного состояния с уровнем энергии в запрещенной зоне). Изовалентные примеси могут образовывать с атомами матрицы твердые растворы, например $\text{Ge}_\nu\text{Si}_{1-\nu}$, где ν — доля атомов германия в его химическом соединении с кремнием.

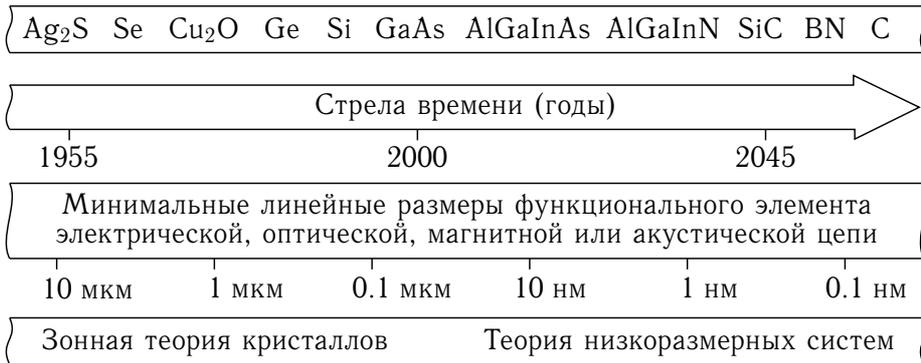
Практически все свойства полупроводника зависят от типа и концентрации дефектов кристаллической структуры, а также от температуры, освещения, деформации и других видов воздействия. Как и клетки живых организмов, полупроводники чувствительны к воздействию радиации: ультрафиолетового, рентгеновского и гамма-излучений, быстрых электронов, протонов, нейтронов, ионов. Энергия, передаваемая атому кристаллической матрицы радиацией (ионизирующим излучением), может привести к смещению его из положения термодинамического равновесия с образованием первичного радиационного дефекта — междоузельного атома и атомной вакансии. Накопление одиночных (уединенных) первичных радиационных дефектов и их ассоциатов друг с другом или с атомами примесей приводит к тому, что кристаллы теряют прозрачность (окрашиваются), увеличивают объем (разбухают) и др. Если под действием радиации происходят ядерные реакции, то изменяется состав нуклидов в веществе. В целом полупроводники оптимально сочетают высокую восприимчивость к внешним воздействиям и технологичность операций формирования на их основе стабильных приборов (сенсоров, диодов, солнечных элементов, транзисторов, интегральных схем и др.; см. табл. 2).

Низкоразмерная система — это консолидированная система из многих атомов, протяженность которой вдоль хотя бы одного направления в пространстве координат сравнима по величине с одним из параметров размерности длины, характеризующих состояния или процессы в этой системе. Материалы, состоящие в основном из низкоразмерных систем (с характерными размерами примерно от 1 до 100 нм), называются наноструктурированными материалами (или, кратко, наноматериалами). Изменяя размеры, форму или взаимное расположение низкоразмерных систем как компонентов наноматериала, можно управлять его свойствами (например, температурой плавления, растворимостью, прозрачностью) без изменения химического состава.

Для исследования, создания и применения низкоразмерных си-

Таблица 2

**Схема становления полупроводниковых материалов
для целей электроники, фотоники, спинтроники и акустики**



стем (для диапазона их размеров условно от 1 нм до 0.1 мкм в одном, двух или трех направлениях) необходимо развивать теорию таких систем. Дело в том, что основой для описания электронных, магнитных, оптических, акустических и тепловых явлений в трехмерных кристаллических диэлектриках, полупроводниках и металлах, размеры которых больше 0.1 мкм, является зонная теория. Однако для описания низкоразмерных систем зонная теория кристаллов неприменима из-за нарушений трансляционной симметрии и условий применимости адиабатического и одноэлектронного приближений в системах пониженной размерности. Для адекватного описания состояний и процессов в системах размером от 10 нм до 0.1 мкм не может быть использована и квантовая теория уединенных (одинокных) молекул, являющаяся базой для описания объектов атомного диапазона размеров (0.1–1 нм). Поэтому необходимо развить теорию, рассматривающую состояния и процессы в отдельных молекулах и атомах при учете их агломерации в низкоразмерную систему.

Представляется, что развитие методов создания и диагностики, а также расширение областей применения полупроводниковых систем в электронике, фотонике, спинтронике и акустике нового поколения будет происходить традиционно: от расчетов к эксперименту и далее к практике. Наконец, при научных исследованиях и их приложениях необходима опора на теорию, эксперимент и практику, благодаря которым физика и техника полупроводников возникли и развиваются.