

Лекция 3

Тема Лекции:

Зонная структура полупроводников

к.ф.-м.н., PhD, ассоциированный профессор
Тулегенова Аида Тулегенкызы

Цель лекции:

Ознакомление с физическими принципами функционирования электропроводящих зондов, применяемых в зондовой микроскопии и наноэлектронике, а также рассмотреть понятие зонной структуры полупроводников как фундаментальной основы для понимания проводящих свойств зондов и исследуемых материалов.

Основные вопросы:

1. Влияние зонной структуры на работу электропроводящих зондов.
2. Современные направления развития
3. Колебательная спектроскопия (ИК- и КР-спектры).
4. Современные тенденции и автоматизация анализа.
5. Комплементарность методов .

Зонная структура полупроводников

Если твердое тело состоит из N атомов, то энергетические уровни оказываются N кратно вырожденными. Электрическое поле ядер, или остовов атомов, выступает как возмущение, снимающее это вырождение. **Дискретные моноэнергетические уровни атомов,** составляющие твердое тело, расщепляются в энергетические зоны. Решение квантовых уравнений в приближении сильной или слабой связи дает качественно одну и ту же картину для структуры энергетических зон твердых тел.

Если величина энергетической щели между этими зонами (обычно называемой запрещенной зоной) больше 3 эВ, то твердое тело является диэлектриком. И, наконец, если ширина запрещенной зоны Eg лежит в диапазоне (0,1 ÷ 3,0) эВ, то твердое тело принадлежит к классу полупроводников

x

Для диэлектриков ширина запрещенной зоны Eg > 3 эВ, величина удельной проводимости $\sigma < 10^{-8}$ Ом*см, удельное сопротивление Ом*см. Для металлов величина удельной проводимости $\sigma > 10^{6}$ Ом*см.:

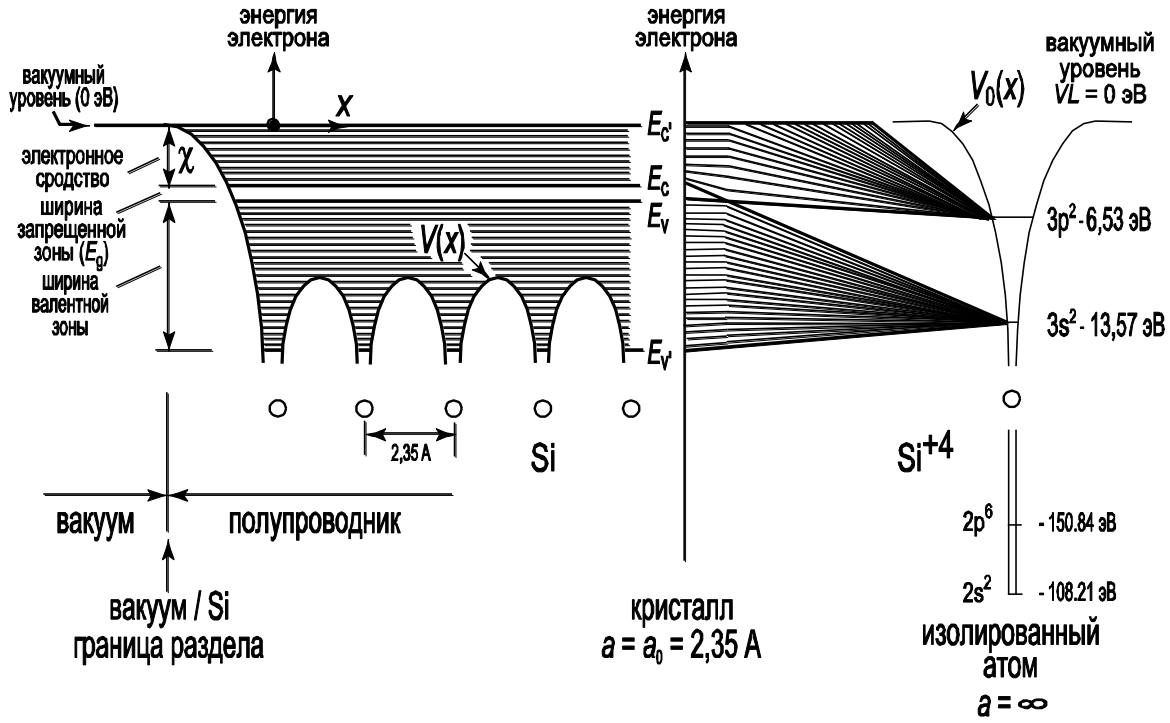


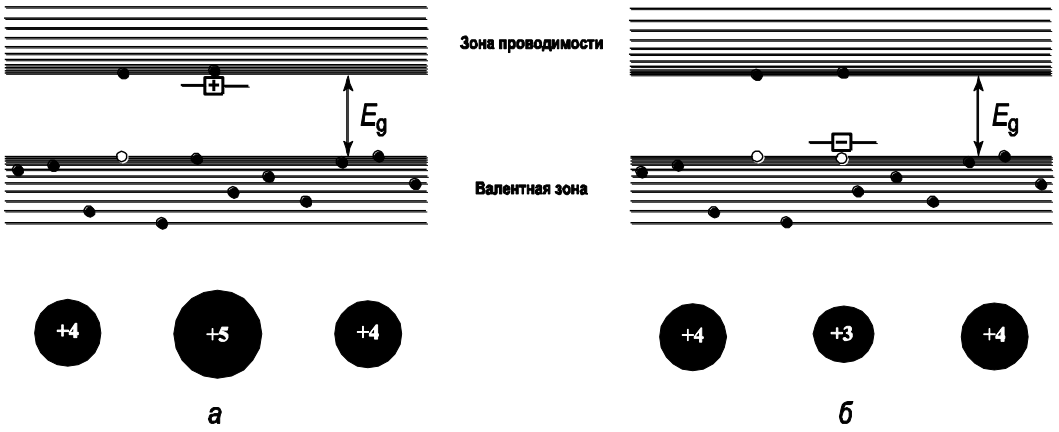
Рис. 1.- Структура энергетических уровней в изолированном атоме кремния

x

Терминология и основные понятия:

Собственные полупроводники – это полупроводники, в которых нет примесей (доноров и акцепторов). ***Собственная концентрация (ni)*** – концентрация носителей заряда в собственном полупроводнике (электронов в зоне проводимости n и дырок в валентной зоне p, причем ***n = p = ni)***. При T = 0 в собственном полупроводнике свободные носители отсутствуют ***(n = p = 0).***

Легирование – введение примеси в полупроводник, в этом случае полупроводник называется примесным



Статистика в полупроводника*электронов и дырок* **в полупроводниках**

Равновесные процессы – процессы, происходящие в телах, которые не подвергаются внешним воздействиям. *В состоянии термодинамического равновесия для данного образца кристалла при заданной температуре существует определенное* распределение электронов и дырок по энергиям, а также значения их концентраций. Вычисление концентраций основных и неосновных носителей заряда составляет главную задачу статистики ***электронов и дырок*** в кристаллах.

Распределение квантовых состояний в зонах

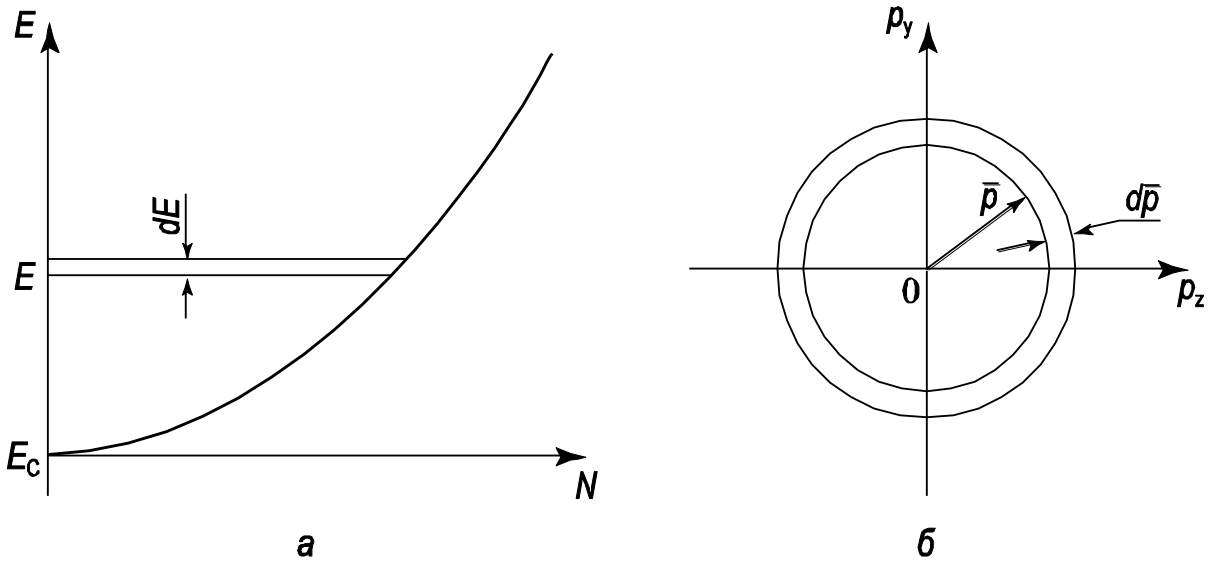
Стационарные состояния электрона в идеальном кристалле характеризуются квазиимпульсом p. Запи-шем принцип неоднородностей *Гейзенберга* для квазиимпульсов $\mathbf{dp_x}$, $\mathbf{dp_y}$ и $\mathbf{dp_z}$:

$$dx \cdot dp_x \leq h$$

$$dz \cdot dp_z \leq h$$

$$dy \cdot dp_y \leq h$$

Зона проводимости – одномерная относительно энергии. Зона Бриллюэна – трехмерная (p_x, p_y, p_z). **Заполнение зоны Бриллюэна начинается с самых малых значений квазиимпульса *p***. Поэтому в качестве *dp* надо выбрать элемент объема, заключенный между двумя очень близкими изоэнергетическими поверхностями. Внутри этого тонкого шарового слоя радиусом *p* и толщиной ***dp*** число квантовых состояний будет равно:



x

Концентрация носителей заряда и положение уровня Ферми

$$f(E,T)=\frac{1}{1+\exp\left(\frac{E-F}{kT}\right)}$$

F – электрохимический потенциал, или уровень Ферми.

Выводы лекции:

Работа электропроводящих зондов в сканирующей туннельной микроскопии, проводящей АСМ (C-AFM) и зонде Кельвина (KPFM) определяется зонной структурой материала зонда и исследуемого образца. От ширины запрещённой зоны, положения уровня Ферми и работы выхода зависит характер контакта «зонд–образец»: он может быть омическим или с барьером Шоттки. Через эти же параметры зонная структура задаёт величину туннельного тока, вид локальных вольт-амперных характеристик и контраст изображения. Поэтому для правильной интерпретации измерений нужно учитывать, из чего сделан зонд (металлизированный кремний, легированный алмаз, Pt, W) и как меняется зонная структура исследуемого материала. Сегодня зондовые методы развиваются в сторону более износостойких и стабильных покрытий, многочастотных и многоканальных режимов, а также измерений в жидкости и при варьировании температуры. Электрические, механические и спектральные данные всё чаще получают в одной точке образца.Колебательная спектроскопия даёт информацию о химических связях, фазовом составе, механических напряжениях и степени кристалличности. ИК-спектроскопия чувствительна к колебаниям, при которых меняется дипольный момент, а спектроскопия комбинационного рассеяния (КР) — к колебаниям, при которых меняется поляризуемость. Поэтому эти два метода взаимно дополняют друг друга. Современная тенденция — автоматизация анализа: картирование, обработка больших массивов спектров, а также применение машинного обучения для распознавания фаз и дефектов. Ни один метод в отдельности не даёт полной картины. Зондовая микроскопия описывает морфологию и локальные электрические свойства, колебательная спектроскопия — химический и структурный состав. Пример их объединения — гигантское КР-рассеяние, усиленное зондом (TERS), которое даёт химическую информацию с нанометровым разрешением. Таким образом, цель лекции достигнута: показана связь зонной структуры с работой проводящих зондов и обоснована необходимость комплексного, комплементарного подхода к исследованию материалов.

Вопросы для контроля изучаемого материала:

1. Что представляет собой электропроводящий зонд и какие требования к нему предъявляются?
2. Какие существуют основные методы получения и модификации зондов?
3. Как зонная структура полупроводников влияет на их электрические свойства?
4. В чём различие между собственным и примесным полупроводником?
5. Что такое барьер Шоттки и как он проявляется в контакте зонд–поверхность?
6. Какие современные материалы применяются для создания зондов с нанометровым разрешением?
7. Как с помощью зондовой микроскопии можно изучать локальную электронную структуру полупроводников?

Список литературных источников:

1. Соколов В. И. Физика и технология полупроводников. — М.: МИФИ, 2018.
2. Боровик-Романов А. С., Горин Б. Н. Физика магнитных и электронных явлений в твёрдых телах. — М.: Наука, 1980.
3. Kittel, C. Introduction to Solid State Physics. — Wiley, 2018.
4. Sze, S. M., Ng, K. K. Physics of Semiconductor Devices. — Wiley, 2007.
5. Wiesendanger, R. Scanning Probe Microscopy and Spectroscopy: Methods and Applications. — Cambridge University Press, 1994.
6. Bhushan, B. Springer Handbook of Nanotechnology. — Springer, 2017.
7. Coey, J. M. D. Magnetism and Magnetic Materials. — Cambridge University Press, 2010.