

Министерство образования РФ

---

Санкт-Петербургский государственный электротехнический  
университет «ЛЭТИ»

---

## **Физические основы микроэлектроники**

Методические указания  
к практическим занятиям

Санкт-Петербург  
Издательство СПбГЭТУ «ЛЭТИ»  
2003

УДК 539.2(076)

Физические основы микроэлектроники: Методические указания к практическим занятиям / Сост.: М. Ф. Ситникова, К. А. Титков, И. А. Колмаков, Я. А. Колмаков. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2003. 32 с.

Изложены основы анализа физических явлений, используемых в микроэлектронике. Рассматриваются вопросы кристаллофизики, динамики и теплоемкости решетки, статистики твердого тела, энергетического спектра электронов в кристалле, кинетических явлений в твердом теле.

Предназначены для студентов ФРТ и ОФ, обучающихся по специальности 200 800.

Утверждено  
редакционно-издательским советом университета  
в качестве методических указаний

© СПбГЭТУ "ЛЭТИ", 2003

## МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

Методические указания к практическим занятиям по курсу «Физические основы микроэлектроники» предназначены для студентов ФРТ и ОФ, обучающихся по специальности 200800.

Целями практических занятий являются: изучение физических явлений в твердых телах; приобретение навыков анализа физических задач с последующим выбором рационального решения для более глубокого усвоения теоретического лекционного материала; умение производить оценочные и инженерные расчеты физических явлений в твердых телах; грамотное пользование справочной литературой.

В указания включены задачи по каждой теме, позволяющие наряду с достижением указанных академических целей проследить динамику взаимосвязи микроструктуры и проявляемых физических свойств для основных материалов, используемых в современной радиоаппаратуре, микроэлектронике и соответствующей технологии производства.

Практические занятия проводятся с использованием метода параллельных письменных тестов (карт самоконтроля) и метода выборочного ввода альтернативных ответов. При этом достигается выполнение обучающей, управляющей и контролирующей функций контроля, а также обеспечивается индивидуальная проверка знаний каждого студента при наименьшей затрате времени преподавателя на контроль решения задачи.

Практические занятия по предлагаемой методике могут производиться как с применением технических средств обучения, так и без них.

### Тема 1. ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОФИЗИКИ (КФ)

Задачи кристаллофизики посвящены описанию структуры кристаллов, индентификации узлов, ребер и плоскостей, изучению симметричных свойств кристаллов. Основными методами изучения физических свойств кристаллов являются методы и принципы кристаллофизики.

Особое внимание уделяется задаче на определение плотности кристалла, поскольку указанная задача – ключевая для установления концентрации как атомов, так и электронов.

**Задача 1.1.** Написать формулу симметрии прямой тетрагональной призмы-параллелепипеда.

Для решения задачи необходимо воспользоваться основными положениями описания структуры кристалла.

Кристаллическая структура может быть, представлена в виде кристаллической (пространственной) решетки (КР), заполненной базисом (одним атомом или совокупностью атомов).

КР – математическая (геометрическая) абстракция, способ представления периодически повторяющихся в пространстве отдельных атомов (совокупности атомов).

Элементарная ячейка КР может быть построена на элементарных трансляциях (базисных векторах)  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ , так что все точки определяются радиус-вектором:

$$\mathbf{r} = n_1\mathbf{a} + n_2\mathbf{b} + n_3\mathbf{c}, \quad (1.1)$$

где  $n_1, n_2, n_3$  – произвольные целые числа.

В зависимости от соотношения модулей базисных векторов и углов между ними, а также от положения узлов все элементарные ячейки можно классифицировать по Браве.

По соотношению между базисными векторами и углами элементарные ячейки и соответствующие им кристаллические многогранники подразделяются на высшую, среднюю и низшую категории и на семь сингоний.

Симметричные преобразования над кристаллическим многогранником образуют точечную группу и объединяются в класс симметрии.

Все элементы симметрии данного класса могут быть записаны формулой симметрии. Например, для куба, имеющего 6 поворотных осей 2-го порядка, 4 поворотные оси 3-го порядка, 3 поворотных оси 4-го порядка, 9 плоскостей симметрии и центр инверсии, формула симметрии  $3L_4 4L_3 6L_2 9PC$ .

Рассматривая симметрию прямой тетрагональной призмы, выявляем (рис. 1.1) наличие осей 2-, 3-, 4-, 6-го порядка (возможных в кристалле). В нашем случае есть четыре оси  $L_2$ , ось  $L_4$ , нет осей 3-го и 6-го порядков.

Кроме того, у тетрагональной призмы имеются горизонтальная плоскость симметрии  $P_1$ , два семейства вертикальных взаимно перпендикулярных плоскостей симметрии  $P_2$ ,  $P_3$  и  $P_4$ ,  $P_5$  и центр симметрии.

**Задача 1.2.** Найти индексы плоскости, отсекающей по кристаллографическим осям отрезки 9, 10, 30, если длина базисных векторов  $a = 3$ ,  $b = 5$ ,  $c = 6$ .

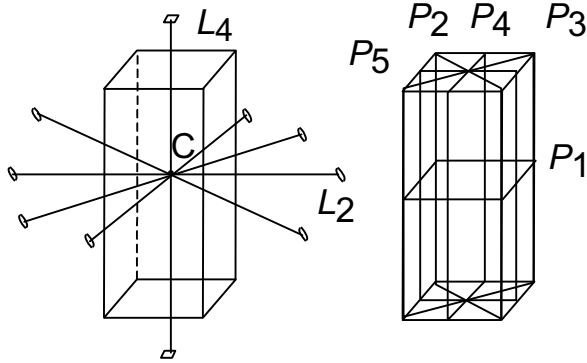


Рис. 1.1

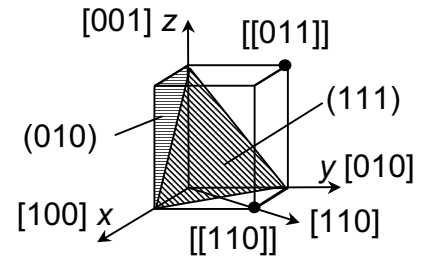


Рис. 1.2

Для индцирования (описания) узлов, направлений и плоскостей в кристаллах используют индексы (рис. 1.2).

Если  $r$  – радиус-вектор, проведенный из начала координат в рассматриваемый узел, то индексами узла будет совокупность чисел  $n_1, n_2, n_3$  в уравнении (1.1), записываемая как  $[[n_1, n_2, n_3]]$ .

За индексы направления ребра принимаются индексы ближайшего к началу координат узла, через которое проходит рассматриваемое направление, проведенное из начала координат  $[n_1, n_2, n_3]$ .

Индексы Миллера для плоскости представляют собой коэффициенты в уравнении плоскости, написанном в параметрическом виде. Для нахождения индексов Миллера надо:

- выразить отрезки, отсекаемые плоскостью на осях координат, через базисные отрезки (векторы)  $a, b, c$ ;
- найти обратные значения этих величин; привести их к виду наименьших возможных рациональных дробей, имеющих общий знаменатель;
- отбросить общий знаменатель и заключить полученные три числа в круглые скобки  $(hkl)$ .

В нашей задаче действуем, согласно указанному правилу:

- выразим отрезки, отсекаемые плоскостью на осях координат, через базисные векторы:

$$n_1 = \frac{9}{3} = 3; n_2 = \frac{10}{5} = 2; n_3 = \frac{30}{6} = 5;$$

- найдем обратные числа:

$$\frac{1}{n_1} = \frac{1}{3}; \frac{1}{n_2} = \frac{1}{2}; \frac{1}{n_3} = \frac{1}{5};$$

- приведем их к наименьшему общему знаменателю:

$$10/30; 15/30; 6/30$$

и отбросим знаменатель. Полученные числа есть индексы Миллера искомой плоскости  $(h\ k\ l) = (10, 15, 6)$ .

**Задача 1.3.** Записать матричное представление оси 2-го порядка, параллельно оси  $z$ .

Преобразования симметрии в кристаллическом пространстве описываются как соответствующие преобразования координат (рис.1.3).

Точка с координатами  $x, y, z$  после преобразования симметрии займет новое положение с координатами  $x', y', z'$ , определяющимися уравнениями преобразования:

$$\left. \begin{aligned} x' &= c_{11}x + c_{12}y + c_{13}z, \\ y' &= c_{21}x + c_{22}y + c_{23}z, \\ z' &= c_{31}x + c_{32}y + c_{33}z, \end{aligned} \right\}$$

где  $c_{i,j}$  – косинусы углов между осями координат  $i, j = 1, 2, 3$ .

Любому преобразованию симметрии можно поставить в соответствие матрицу преобразования  $\Delta$ , элементами которой являются косинусы углов  $c_{i,j}$ :

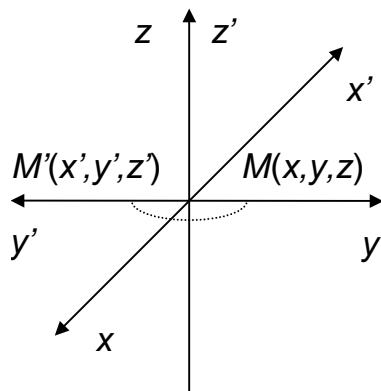


Рис. 1.3

$$\Delta = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{pmatrix}.$$

Требуемое симметричное преобразование представляет собой поворот кристаллографических координат вокруг оси  $L_2$  (оси  $z$ ) на угол  $180^\circ$ . Введем новую систему координат  $x', y', z'$ , связанную с исходной  $x, y, z$  следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} x' &= \cos(\angle xx') \cdot x = \cos(\pi) \cdot x = (-1) \cdot x, \\ y' &= \cos(\angle yy') \cdot y = \cos(\pi) \cdot y = (-1) \cdot y, \\ z' &= \cos(\angle zz') \cdot z = \cos(0) \cdot z = (+1) \cdot z. \end{aligned}$$

Соотношения между разноименными осями (например,  $xu'$ ) определяются косинусами углов, равных  $90^\circ$  (все разноименные оси взаимно перпендикулярны), поэтому искомое преобразование симметрии следует записать в виде матрицы:

$$\Delta(L_2 \parallel z) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

**Задача 1.4.** К кубическому кристаллу с симметрией  $m\bar{3}m$  приложили одноосное напряжение растяжения вдоль оси  $L_4$ . Какой симметрией будет обладать кристалл?

Взаимосвязь физических свойств кристаллов и симметрии их структуры описывается принципами кристаллофизики.

**Принцип Неймана:** группа симметрии любого физического свойства кристалла должна включать в себя группу симметрии кристалла.

Для описания симметрии физических свойств и внешних воздействий служат предельные группы симметрии (группы Кюри), содержащие оси бесконечного порядка.

**Принцип суперпозиции Кюри:** кристалл, находящийся под влиянием внешнего воздействия, будет обладать теми элементами симметрии, которые являются общими и для воздействия и для кристалла в отсутствие воздействия. Свойства кристалла, связывающие воздействия и явления, можно отобразить схемой:

$$(\text{явление (эффект)}) = (\text{свойство}) \times (\text{воздействие}). \quad (1.2)$$

По условию задачи растягивающее напряжение приложено по оси  $L_4$  вдоль направления  $[0\ 0\ 0]$ . Симметрия приложенного воздействия соответствует предельной группе  $\infty/mmm$  с геометрическим образом в виде покоящегося цилиндра вращения.

Применяя принцип суперпозиции Кюри (1.2), найдем общие элементы для кристалла в отсутствие воздействия и воздействия в отсутствие кристалла (рис. 1.4).

Общими элементами симметрии будут ось  $L_4$ , четыре вертикальные плоскости, проходящие параллельно  $L_4$ , одна горизонтальная плоскость, перпендикулярная оси  $L_4$ , четыре оси  $L_2$  на пересечении вертикальных плоскостей с горизонтальной плоскостью и центр инверсии.

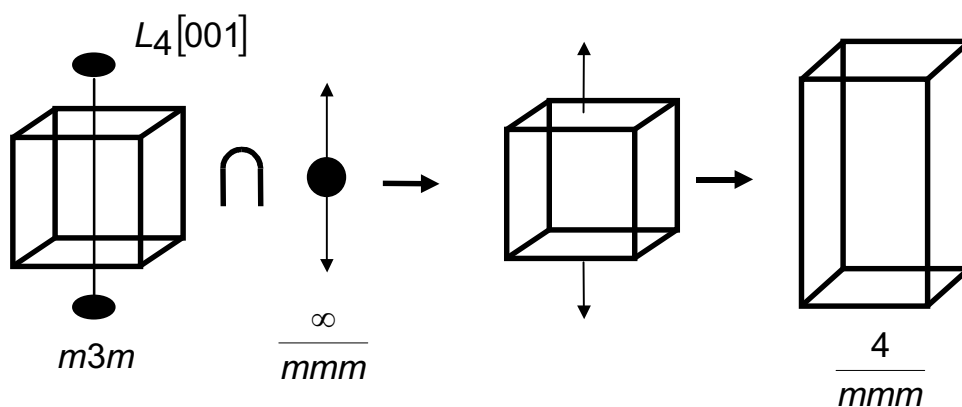


Рис. 1.4

Полученная симметрия соответствует симметрии тетрагональной призмы  $4/mmm$ .

В аналитическом виде схеме (1.2) соответствует операция перемножения матрицы симметрии кристалла и матрицы предельной группы, соответствующей данному физическому воздействию, т.е.

$$(m3m) \times \left( \frac{\infty}{mmm} \right) = \left( \frac{4}{mmm} \right).$$

**Задача 1.5.** Определить постоянную решетки кристалла NaCl (плотность кристалла  $\rho = 2.18 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$ ).

Плотность вещества зависит от типа структуры, плотности упаковки, атомной массы. С увеличением плотности упаковки возрастает и плотность вещества (кристалла). Плотность кристалла  $\rho$  связана с его относительной массой  $A$ , объемом элементарной ячейки  $V$ , числом атомов  $N$  в элементарной ячейке формулой (где  $N_A$  – число Авогадро):

$$\rho = \frac{M}{V} = \frac{AN}{VN_A}. \quad (1.3)$$

В кристалле NaCl можно выделить ячейку в виде куба, в вершинах которого поочередно находятся атомы Na и Cl. Ребро куба  $d$ , его объем  $d^3$ . Такая ячейка содержит  $1/2$  атома Na и  $1/2$  атома Cl. Если атомный вес  $A_{Na} = 23$ ,  $A_{Cl} = 35.46$ , то масса выделенной ячейки в выражении (1.3):

$$M = m_H(N_{Na}A_{Na} + N_{Cl}A_{Cl}) = \rho d^3, \quad m_H = N_A^{-1},$$

где  $m_H$  – масса атома водорода ( $m_H = 1.66 \cdot 10^{-27} \text{ кг}$ ),  $N_{Na}$  и  $N_{Cl}$  – числа атомов Na и Cl в выбранной ячейке соответственно. Разрешив формулу относительно  $d$ , получим:

$$d = \sqrt[3]{\frac{m_H}{\rho} \cdot \frac{1}{2}(A_{Na} + A_{Cl})} = \sqrt[3]{\frac{1.66 \cdot 10^{-27} (23 + 35.6)}{2.18 \cdot 10^3 \cdot 2}} = 2.8 \cdot 10^{-10} \text{ м}.$$

Постоянная решетка кристалла определяется расстоянием между двумя одинаковыми атомами, т.е.  $a = 2d = 0.56 \text{ нм}$ .

**Примечание** применение соотношения (1.3) может быть полезным для оценки концентрации электронов  $n$  в кристаллах металлов по известной концентрации атомов  $N$  и валентности  $Z$ :  $n = NZ$ .

## Тема 2. ДИНАМИКА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ. ТЕПЛОЕМКОСТЬ РЕШЕТКИ

Движение атомов кристаллов за счет теплового или механического возмущения представляет довольно сложную задачу. Здесь рассматриваются простые задачи с использованием различных моделей-приближений (модель изолированного атома; модель Дебая; одномерной цепочки атомов). Основными физическими задачами являются задачи по определению скорости звука, теплоемкости, спектра фононов.

**Задача 2.1.** Определить частоту колебания атомов, используя модель изолированного атома для кристалла меди.

Простейшей моделью, описывающей движение атома, является модель изолированного атома, в которой он рассматривается в виде точечной массы  $m$ , закрепленной на пружинных связях относительно неподвижных опор (соседних атомов).

В гармоническом приближении в случае изотропной кубической решетки для потенциальной энергии  $V(u)$  как функции малого смещения атома  $u$  из положения равновесия можно записать

$$V(u) = \beta u^2 / 2,$$

где  $\beta$  – параметр упругости материала (жесткость связей). Соответствующая сила, противостоящая смещению атома из положения равновесия:

$$F(u) = -\frac{dV(u)}{du} = -\beta u.$$

Смещение атома из положения равновесия в зависимости от времени  $t$

$$u = A_0 \sin \omega_0 t, \quad \omega_0 = \sqrt{\beta/m}, \quad (2.1)$$

где  $\omega_0$  – частота собственных колебаний атома массой  $m$ .

Параметр упругости материала в рамках закона Гука (механическое напряжение пропорционально относительной деформации) определяется выражением

$$\beta = 4aY, \quad (2.2)$$

где  $a$  – параметр решетки;  $Y$  – модуль Юнга.

Для кристалла меди из приложения находим значение необходимых параметров  $a$ ,  $Y$ ,  $A_{Cu}$ . Используя соотношения (2.1) и (2.2) находим для частоты колебаний атомов при заданных допущениях значение  $\omega_0$ :

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{\beta}{m}} = \sqrt{\frac{4aY}{A_{Cu}m_H}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 3.61 \cdot 10^{-10} \cdot 1.15 \cdot 10^{11}}{63.5 \cdot 1.67 \cdot 10^{-27}}} = 4 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}.$$

**Задача 2.2.** Определить скорость звука в кристалле меди, используя модель Дебая для описания спектра акустических фононов.

Для изотропных кристаллов при описании спектра акустических фононов можно воспользоваться решением, полученным для одномерной цепочки одинаковых масс  $m$ , связанных упругими связями  $\beta$  с ближайшими соседями.

Дисперсионное уравнение, связывающее частоту колебаний  $\omega$  и длину волнового вектора  $k$  (рис. 2.1,а)

$$\omega(k) = 2\sqrt{\frac{\beta}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|, \quad (2.3)$$

где  $k = 2\pi/\lambda$  ( $\lambda$  – длина волны упругих смещений атома);  $a$  – постоянная решетки.

Область значений волнового вектора, для которой не возникает неоднозначности дисперсионной кривой  $\omega(k)$ , называется зоной Бриллюэна.

Для одномерной цепочки из атомов двух сортов с массами  $m$  и  $M$  ( $M > m$ ) дисперсионное уравнение

$$\omega_{1,2}^2(k) = \beta^2 \left[ \left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \sqrt{\left( \frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4\sin^2(ka)}{mM}} \right] \quad (2.4)$$

имеет две ветви (рис. 2.1,б). Нижняя ветвь (знак «минус» перед корнем в (2.4)) соответствует акустическим колебаниям, верхняя ветвь (знак «плюс» перед корнем в (2.4)) – оптическим колебаниям.

Для цепочки из  $N$  атомов число допустимых значений модуля волнового вектора  $k_S$  в зоне Бриллюэна:  $k_S = \frac{2\pi}{Na} S$ ;  $S = 0, 1, 2, \dots, N-1$ .

Полная сумма волн с различными  $k_S$ , описывающая движение  $n$ -атома в составе цепочки:

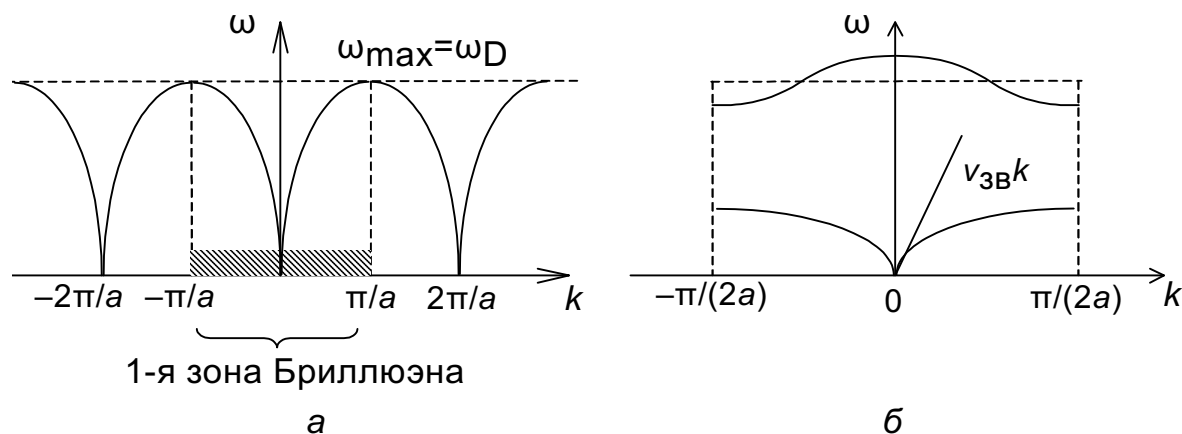


Рис 2.1

$$\left. \begin{aligned} u_n &= \sum_{S=-N/2}^{(N/2)-1} A_S \exp \left[ i \left( \omega_S t - \frac{2\pi}{N} S n \right) \right], \\ A_S &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} u_n \exp \left[ -i \left( \omega_S t - \frac{2\pi}{N} S n \right) \right]. \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

Каждая из бегущих волн по цепочке (2.5) представляет собой независимый осциллятор с частотой колебания  $\omega_S$  и амплитудой  $A_S$ , независимой от амплитуды других волн. Ортогональные волны цепочки называются нормальными колебаниями.

Квант нормальных колебаний кристаллической решетки – фонон – квазичастица с энергией  $E_S = \hbar \omega_S$  и квазиимпульсом  $p_S = \hbar k_S$  ( $\hbar = h/2\pi$ ,  $h$  – постоянная Планка).

В модели Дебая вместо сложных зависимостей  $\omega(\mathbf{k})$  (2.3), (2.4) принимается линейная аппроксимация (см. рис. 2.1,б)

$$\omega(k) = v_{3B} k, \quad (2.6)$$

что хорошо описывает зависимость  $\omega(\mathbf{k})$  на низких (звуковых частотах).

Скорость звука  $v_{3B}$  в этом случае находится из соотношения (2.6) по известной максимальной частоте акустических фононов – частоте Дебая ( $\omega_{\max} = \omega_D$ ) и соответствующему максимальному значению волнового вектора  $k_{\max}$ , при этом  $k_{\max} = 2\pi/\lambda_{\min} = \pi/a$ ,  $\lambda_{\min} = 2a$ .

Частоту Дебая  $\omega_D$  находят, обычно, по известной характеристической температуре Дебая  $T_D$  из соотношения

$$k T_D = \hbar \omega_D.$$

Окончательно для скорости звука (скорости акустических фононов по модели Дебая) получаем

$$v_{3B} = \frac{\omega_D}{k_{\max}} = \frac{k T_D a}{\pi \hbar}, \quad (2.7)$$

Используя соотношение (2.7) и данные для меди находим:

$$v_{3B} = \frac{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 315 \cdot 3.61 \cdot 10^{-10}}{3.14 \cdot 1.05 \cdot 10^{-34}} = 4.75 \cdot 10^3 \text{ м/с.}$$

**Задача 2.3.** Определить число оптических фононов в кремнии при  $T = 300$  К. Энергию возбуждения оптических фононов считать равной энергии Дебая ( $E = \hbar \omega_D = \hbar \omega_{\text{опт}} = k T_D$ ).

Среднее число фононов с энергией  $E_n = \hbar\omega_n$  определяется распределением Планка:

$$f(E_n) = f(\omega_n) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_n}{kT}\right) - 1},$$

где  $k$  – постоянная Больцмана;  $T$  – температура кристаллической решетки. При  $kT_D \gg \hbar\omega_n$  (случай высоких температур)

$$f(\omega_n) = \frac{kT}{\hbar\omega_n} = \frac{kT}{\hbar\omega_D} = \frac{T}{T_D}.$$

Для нашего случая среднее число фононов с энергией  $\hbar\omega_D$

$$\bar{N}(\omega_D) = f(\omega_D) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_D}{kT}\right) - 1} = \frac{1}{\exp\left(\frac{T_D}{T}\right) - 1}$$

При  $T_D > T$  имеем  $\bar{N}(\omega_D) = \exp(-T_D/T) = \exp(-625/300) \approx 0.135 < 1$ , т.е. оптические фононы в кремнии при 300 К не возбуждаются.

**Задача 2.4.** Найти векторы обратной решетки для ромбоэдрического кристалла кальция ( $\text{CaCO}_3$ ), если  $a = 0.536$  нм,  $\alpha = 46^\circ$ .

Для описания свойств волнового вектора служит обратное пространство (или пространство волнового вектора). Связь обратного пространства (обратной решетки) с конфигурационным пространством (прямой решеткой) осуществляется соотношениями

$$\begin{cases} \mathbf{a}^* = \frac{2\pi}{V} [\mathbf{b} \times \mathbf{c}], & \mathbf{b}^* = \frac{2\pi}{V} [\mathbf{c} \times \mathbf{a}], & \mathbf{c}^* = \frac{2\pi}{V} [\mathbf{a} \times \mathbf{b}]; \\ V = \mathbf{a}[\mathbf{b} \times \mathbf{c}] \end{cases} \quad (2.8)$$

где  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  – базисные векторы обратной решетки;  $\mathbf{a}$ ,  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$  – базисные векторы прямой решетки;  $V$  – объем элементарной ячейки.

В ромбоэдрической ячейке  $a = b = c$ ,  $\alpha = \beta = \gamma$ . Следовательно, согласно (2.8),  $a^* = b^* = c^*$ ,  $\alpha^* = \beta^* = \gamma^*$  (углы между базисными векторами обратной решетки).

Объем элементарной ячейки

$$V = \mathbf{a}[\mathbf{b} \times \mathbf{c}] = a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha} = 0.121 \text{ нм}^3,$$

$$a^* = a^2 \sin \alpha / V = 0.024 \text{ нм}^{-1},$$

$$\cos \alpha^* = (\cos^2 \alpha - \cos \alpha) / \sin^2 \alpha = -\cos \alpha / (1 + \cos \alpha) = -0.409; \quad \alpha^* = 114^\circ 5'.$$

**Задача 2.5.** Определить теплоемкость кристалла меди, погруженного в криостат с жидким гелием.

Теплоемкость твердых тел при высокой температуре описывается законом Дюлонга–Пти (классическая модель)

$$C_V = \left. \frac{d\bar{E}}{dT} \right|_V = 3kN_A = 3R, \quad (2.9)$$

где  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Согласно модели Дебая, теплоемкость решетки, в которой могут распространяться колебания без дисперсии с частотами от 0 до  $\omega_D$ :

$$C_V = 9kN_0 \left( \frac{T}{T_D} \right)^3 \cdot \int_0^{T_D/T} \frac{x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2},$$

где  $T_D = \hbar \omega_D / k$  – температура Дебая ( $\omega_D$  – частота Дебая; соответствующая волне минимальной длины ( $\lambda_{\min} = 2a$ ), распространяющейся по решетке);  $x = \hbar \omega / (kT)$ .

Случай высоких температур ( $T \gg T_D$ ) соответствует (2.9). В случае низких температур ( $T \ll T_D$ )

$$C_V = 234R(T/T_D)^3. \quad (2.10)$$

Температура Дебая меди  $T_D = 315$  К много больше заданной температуры эксперимента  $T_{He} = 315$  К. Следовательно, для области низких температур справедлива формула определения теплоемкости (2.10):

$$C_V = 234 \cdot 8.31 \left( \frac{4.2}{315} \right)^3 = 4 \cdot 10^{-3} \frac{\text{Дж}}{\text{К} \cdot \text{моль}}.$$

### Тема 3. СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОНОВ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Для характеристики состояния большого числа частиц и квазичастиц в твердом теле, таких как электроны, фононы, дырки, атомы, примеси и пр., используют классические и квантовые статистические распределения: статистику Больцмана – для классических частиц, статистику Бозе–Эйнштейна и Планка – для фононов, статистику Ферми–Дирака – для электронов и дырок в вырожденном состоянии.

Задачи этой темы служат формированию навыков правильного выбора и использования той или иной статистики для описания свойств частиц в заданных состояниях (главным образом электронов в твердом теле).

**Задача 3.1.** Определить состояние электронного газа в кристалле кремния ( $n = 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ,  $m^* = 0.7m_0$ ) при  $T = 77 \text{ К}$ .

Состояние электронного газа в кристалле может быть вырожденным, т.е. описывается распределением Ферми–Дирака для системы квантовых частиц с полуцелым спином и с химическим потенциалом, равным энергии Ферми  $E_F$ :

$$\bar{N}_n(E_n) = f(\omega_n) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_n - E_F}{kT}\right) + 1}, \quad (3.1)$$

где  $\bar{N}_n$  – среднее число частиц в соответствии с энергией  $E_n$  при температуре  $T$ ;  $f(E_n)$  – функция распределения частиц по состояниям с энергией  $E_n$ .

Если  $kT > E_F$  для любого  $E_n$ , то (3.1) переходит в распределение для идеального газа электронов (дырок), которое называется невырожденным и описывается распределением Больцмана по состояниям с энергией  $E_n$  для системы классических невзаимодействующих частиц:

$$f(E_n) = \exp\left(\frac{\mu - E_n}{kT}\right) = A \exp\left(-\frac{E_n}{kT}\right),$$

где  $A = \exp(\mu/kT)$  – постоянная для данной системы при заданной температуре  $T$ ;  $E_F = \mu$  ( $\mu$  – химический потенциал).

Вырожденный электронный газ характеризуется значением параметров Ферми и прежде всего значением энергии Ферми  $E_F$ .

Изоэнергетическая поверхность в  $\mathbf{k}$  – пространстве с энергией  $E = E_F$  называется поверхностью Ферми. Для свободного электронного газа с концентрацией электронов  $n$  и эффективной массой  $m^*$  поверхность Ферми – сфера с радиусом  $k_F$ , при этом

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}, \quad k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3}. \quad (3.2)$$

Для оценки степени вырождения электронного газа вычисляем энергию Ферми (3.2):

$$E_F = \frac{\hbar^2 \left(3\pi^2 n\right)^{2/3}}{2m^*} = \frac{\left(1.05 \cdot 10^{-34}\right)^2 \left(3\pi^2 \cdot 10^{-21}\right)^{2/3}}{2 \cdot 0.7 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31}} = 3.8 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$$

и тепловую энергию ( $E_T$ ) при заданной температуре:

$$E_T = kT = 1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 77 = 1.06 \cdot 10^{-21} \text{ Дж.}$$

С использованием критерия вырождения, т.е. неравенства  $kT < E_F$ , при котором электронный (дырочный) газ вырожден и описывается распределением Ферми–Дирака (3.1), в нашем случае  $1.06 \cdot 10^{-21} < 3.8 \cdot 10^{-21}$ , т. е.  $E_T < E_F$  и, следовательно, состояние электронов в кристалле кремния при 77 К вырождено.

**Задача 3.2.** Найти давление электронного газа в металле с концентрацией электронов  $n = 10^{28} \text{ м}^{-3}$  и эффективной массой  $m^* = m_0$  при комнатной температуре ( $T = 300 \text{ К}$ ).

Давление газа, состоящего из  $N$  электронов, каждый из которых имеет среднюю энергию  $\bar{E}$ , определяется производной от средней энергии по объему, занимаемому газом, т. е.

$$P = d(\bar{E}N)/dV.$$

В металле электронный газ находится в вырожденном состоянии и  $\bar{E} = (3/5)E_F$ .

С использованием (3.2) получаем

$$\begin{aligned} P &= \frac{3}{5} \frac{d(E_F N)}{dV} = \frac{3}{5} \frac{d}{dV} (n V E_F) = \frac{3}{5} n \left[ \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{2/3} \right] = \\ &= \frac{3}{5} (10^{28})^{5/3} \cdot \frac{(1.05 \cdot 10^{-34})^2 (3\pi^2)^{2/3}}{2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31}} = 1.5 \cdot 10^9 \frac{\text{Н}}{\text{м}} \end{aligned}$$

#### Тема 4. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В КРИСТАЛЛЕ (ЗОННАЯ СТРУКТУРА)

Для описания поведения электронов в кристалле воспользуемся вероятностными законами квантовой механики и так называемым квазиклассическим приближением. Критерием выбора является соотношение между длиной волны де Бройля для частицы  $\lambda$  и характерным геометрическим размером системы, например постоянной решетки  $a$ .

Соотношение де Бройля сопоставляет свободной частице с энергией  $E$  и импульсом  $p$  волну с частотой  $\omega$  и длиной волны  $\lambda$ :

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mV}. \quad (4.1)$$

Если  $\lambda$  становится соизмеримой с постоянной решетки  $a$ , частица описывается вероятностными законами квантовой механики. В этом случае движение частицы определяется волновой функцией  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , которую находят из уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{d\psi(\mathbf{r}, t)}{dt} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t),$$

где  $\hat{H}$  – оператор полной энергии.

Для характеристики частицы в пространстве необходимо решить уравнение Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}) + [E - V(\mathbf{r})]\psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (4.2)$$

и найти энергетический спектр, т. е. зависимость энергии частицы от волнового вектора  $\mathbf{k}$ .

**Задача 4.1.** Найти длину волны де Бройля для электронов в электронном микроскопе с ускоряющим напряжением 50 В.

Для частицы в ускоряющем электрическом поле с потенциалом  $V$  соотношения (4.1) переходит в соотношение

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}}.$$

Тогда для свободного электрона с массой  $m_0$  и зарядом  $e$  имеем:

$$\lambda = \frac{6.62 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 50}} = 1.65 \cdot 10^{-10} \text{ м}^{-1}$$

**Задача 4.2.** Найти энергетический спектр  $E(\mathbf{k})$  и волновую функцию  $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  для свободных электронов.

Для свободной частицы  $V(\mathbf{r}) = 0$  уравнение Шредингера (4.2) имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta \psi(\mathbf{r}) + E\psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (4.3)$$

Решением уравнения (4.3) для свободных электронов является плоская волна де Бройля  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = A e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ .

Энергия свободных электронов связана со значениями волнового вектора параболически:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}.$$

**Задача 4.3.** Определить вид энергетического спектра для электронов в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и плоским дном. Найти энергию второго квантового состояния, если ширина ямы  $a = 0.5$  нм,  $m = m_0$ .

Для частицы в одномерной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и плоским дном из решения (4.2) находим:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad K_n = n \frac{\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Для  $n = 2$  получим

$$E_2 = \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 n^2 \left(\frac{\pi}{a}\right)^2}{2m_0} = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 4\pi^2}{2 \cdot 9,31 \cdot 10^{-31} \cdot (5 \cdot 10^{-10})^2} = 10^{-18} \text{ Дж.}$$

**Задача 4.4.** В приближении слабой связи определить концентрацию электронов в кубических кристаллах из условия касания сферы Ферми и зоны Бриллюэна в обратном пространстве ( $a = 0.3$  нм).

Потенциальное поле кристалла  $V(r)$  можно аппроксимировать повторяющимися с периодом  $a$  потенциальными барьерами заданной высоты. Решение уравнения Шредингера (4.2) в этом случае приводит к зависимости  $E(k)$  в виде повторяющихся разрешенных (РЗ) и запрещенных (ЗЗ) зон значений энергии электронов (рис. 4.1).

Функция  $E(k)$  имеет разрывы в точках  $k_S = \pm S \pi/a$  ( $S = 1, 2, 3, \dots$ ) и описывается выражением

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

Для изотропных кристаллов кубической сингонии зона Бриллюэна – куб со стороной  $2\pi/a$ . Для 1-й зоны Бриллюэна ( $s = 1$ )  $k = \pm \pi/a$  (рис. 4.2).

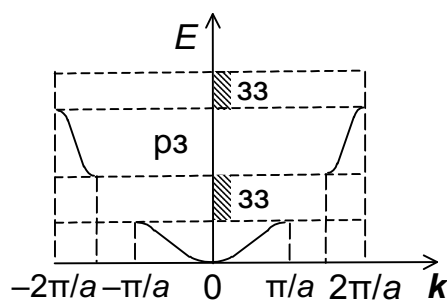


Рис. 4.1

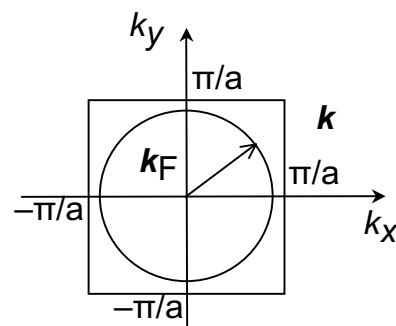


Рис. 4.2

Поверхность Ферми для слабосвязанных (свободных) электронов есть сфера, радиус которой  $k_F$  связан с концентрацией электронов  $n$  зависимостью  $k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3}$ .

Из условия  $k_F = k = \frac{\pi}{a}$ , получаем  $n = \frac{\pi}{3a^3} = \frac{\pi}{3} \frac{1}{\left(0.3 \cdot 10^{-9}\right)^3} \approx 4 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ .

**Задача 4.5.** Определить групповую скорость электрона на поверхности Ферми, если  $m^* = 0.1m_0$ ;  $k_F = 10^{28} \text{ м}^{-1}$ .

Групповая скорость электронов в кристалле определяется соотношением

$$v_{\text{гр}} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} = \frac{\hbar k}{m^*}. \quad (4.4)$$

Для нашего случая  $k = k_F$  и групповая скорость электрона на поверхности Ферми

$$v_{\text{гр}} = v_F = \frac{\hbar k_F}{m^*} = \frac{1.05 \cdot 10^{-34} \cdot 10^{10}}{9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 0.1} = 10^7 \text{ м/с}.$$

**Задача 4.6.** Указать правильное соотношение между эффективными массами электронов в состояниях с волновыми векторами  $k_A$ ,  $k_B$  для заданного энергетического спектра  $E(k)$  (рис. 4.3).

Рассматриваемый энергетический спектр  $E(k)$  имеет три ветви: вырожденные  $E_1(k)$  и  $E_2(k)$  и двухдолинную  $E_3(k)$ . Поведение электронов в кристалле описывается с помощью эффективной массы  $m^*$ , определяемой вблизи экстремальных точек функции  $E(k)$  как

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left. \frac{d^2 E(k)}{dk^2} \right|_{\text{экс}}}. \quad (4.5)$$

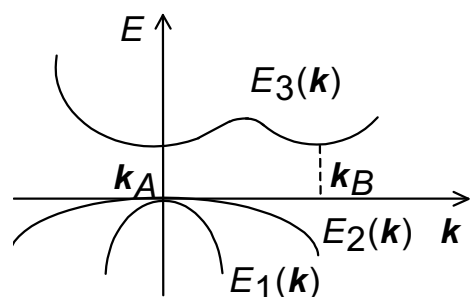


Рис 4.3

Для изотропного кристалла эффективная масса  $m^*$  – скалярная величина. В общем случае необходимо использовать тензор обратной эффективной массы. Из (4.5) следует, что эффективная масса прямо пропорциональна радиусу кривизны функции  $E(k)$ .

В нашем случае для вырожденных ветвей, согласно (4.5), имеем

$$m^*_1(k_A) = \frac{\hbar^2}{\left. \frac{d^2 E_1}{dk^2} \right|_{k_A}} < m^*_2(k_A) = \frac{\hbar^2}{\left. \frac{d^2 E_2}{dk^2} \right|_{k_A}}, \text{ так как } \left. \frac{d^2 E_1}{dk^2} \right|_{k_A} > \left. \frac{d^2 E_2}{dk^2} \right|_{k_A}$$

и  $m^*_1(k_A) < 0$ ,  $m^*_2(k_A) < 0$  для выпуклых экстремумов  $E(k)$ . Для двухдолинной ветви  $E_3(k)$ , используя (4.5), получаем:

$$m^*_3(k_A) < m^*_3(k_B); m^*_3(k_A) > 0; m^*_3(k_B) > 0.$$

## Тема 5. КИНЕТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

Для качественного описания кинетических явлений используют элементарный кинетический метод, в котором носители электрического заряда – электроны (дырки) и носители тепла – фононы рассматриваются как свободные частицы. При этом расчет ведется для одной частицы, движущейся свободно между двумя последовательными столкновениями с различными рассеивающими центрами, и последующим усреднением по всем частицам.

Электропроводность при заданной концентрации электронов (дырок) с эффективной массой  $m^*$ , определяется выражением

$$G = e^2 n \tau / m^* = en\mu,$$

где использовано соотношение между средним временем свободного пробега  $\tau$  и подвижностью носителей заряда  $\mu$ ,  $\mu = e/m^*\tau$ .

Подвижность носителя заряда  $\mu$  численно равна скорости дрейфа  $v_{др}$  в электрическом поле единичной напряженности  $\mathcal{E}$ .

Теплопроводность  $\kappa$  твердого тела определяется выражением

$$\kappa = \frac{1}{3} C_V v_T^2 \tau = \frac{1}{3} C_V v_T \lambda,$$

где  $C_V$  – теплоемкость,  $v_T$  – средняя тепловая скорость носителей тепла;  $\lambda$  – средняя длина свободного пробега ( $\lambda = v_T \tau$ ).

**Задача 5.1.** Рассчитать удельное сопротивление пленки алюминия толщиной  $d = 100$  нм,  $\rho = 0.5$  при  $T = 77$  К.

Для Al из прил.1. находим:  $a = 0.405$  нм,  $T_D = 394$  К,  $T_{пл} = 933$  К.

Различают классические и квантовые размерные эффекты электропроводности. Классический размерный эффект проявляется при

соизмеримости толщины образца (пленки)  $d$  и средней длины свободного пробега  $\lambda_\infty$  в объемном образце.

Квантовый размерный эффект может возникать в пленках, толщина которых сравнима с длиной волны де Бройля.

Для расчета электропроводности как функции толщины образца при классическом размерном эффекте используют выражения

$$\frac{\sigma}{\sigma_{\text{пл}}} = 1 + \frac{3}{8\gamma}(1-p), \quad \gamma > 1; \quad (5.1)$$

$$\frac{\sigma}{\sigma_{\text{пл}}} = \frac{4}{3} \frac{1}{\gamma \ln(1/\gamma)} \frac{(1-p)}{(1+p)}, \quad \gamma \ll 1, \quad p < 1, \quad (5.2)$$

где  $\sigma_{\text{пл}}$  – электропроводность пленки;  $\sigma$  – электропроводность объемного образца, в котором нет размерного эффекта;  $\gamma$  – относительная толщина пленочного образца ( $\gamma = d/\lambda$ );  $p$  – параметр зеркальности, характеризующий отражение электронов поверхностью образца.

Для толстых пленок ( $\gamma > 1$ ) для расчета электропроводности используют выражение (5.1), для тонких – (5.2).

Параметр зеркальности  $p$  зависит от шероховатости поверхности и определяется отношением зеркально отраженных электронов к полному числу электронов, падающих на поверхность.

При зеркальном отражении электронов от поверхности ( $p = 1$ ) угол падения электронов на поверхность равен углу отражения от поверхности и проекции импульса электрона в направлении продольного электрического поля, приложенного к образцу, сохраняются, а электропроводность образца не меняется.

При диффузном отражении угол отражения может быть произвольным и меняться от 0 до  $\pi$ . Количественное изменение электропроводности в этом случае учитываются выражениями (5.1) и (5.2) как функции параметра  $p$ . В нашей задаче  $p = 0.5$ , что соответствует равенству диффузного и зеркального отражений.

Средняя длина свободного пробега при  $T < T_D$  (5.1) для объемного образца:

$$\begin{aligned} \lambda &= 50 \frac{T_{\text{пл}}}{T_D} a \cdot 2 \cdot 10^{-3} \left( \frac{T_D}{T} \right)^5 = \\ &= 50 \cdot \frac{933}{394} \cdot 0.405 \cdot 10^{-9} \cdot 2 \cdot 10^{-3} \left( \frac{394}{77} \right)^5 = 3.3 \cdot 10^{-7} \text{ м} \end{aligned}$$

Полученное значение  $\lambda > d$ ; выбираем для расчета формулу (5.2):

$$\frac{\sigma}{\sigma_{пл}} = \frac{\rho_{пл}}{\rho} = \frac{4}{3} \frac{1}{\frac{10^{-7}}{3.3 \cdot 10^{-7}} \ln \left( \frac{3.3 \cdot 10^{-7}}{10^{-7}} \right)} \cdot \frac{(1-0.5)}{(1+0.5)} = 0.9.$$

Из прил.1. для Al  $\rho = 0.3$  мкОм·см, следовательно, искомое удельное сопротивление пленки  $\rho_{пл} \approx \rho = 0.3$  мкОм·см.

**Задача 5.2.** Найти частоту переменного электрического поля, при котором электропроводность металлического образца падает в два раза.

Электропроводность твердых тел как функция частоты  $\omega$  переменного электрического поля определяется выражением

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma(0)}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad \sigma(0) = \frac{e^2 n \tau}{m^*}. \quad (5.3)$$

Уменьшение электропроводности на высоких частотах обусловлено возникновением плазменных колебаний электронного газа. Из (5.3) находим  $\sigma(\omega)/\sigma(0) = 1/2$  при  $\omega\tau = 1$ , т. е. искомая частота определяется обратным временем релаксации электронов в образце.

**Задача 5.3.** Определить частоту плазменных колебаний при комнатной температуре и  $n = 10^{15}$  м<sup>-3</sup>.

Искомая плазменная частота  $\omega_p$  определяется как

$$\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n}{m^* \epsilon \epsilon_0}}. \quad (5.4)$$

Для Si относительная диэлектрическая проницаемость  $\epsilon = 12$ , эффективная масса электронов  $m^* = m_0$ . Подставляя численные данные в (5.4), находим  $\omega_p = 1.3 \cdot 10^{12}$  с<sup>-1</sup>.

**Задача 5.4.** Найти напряженность электрического поля, при которой возникает явление отражения от атомных плоскостей для меди и для висмута при  $T = 300$  К.

При отражении от атомных плоскостей критическая напряженность поля  $\epsilon_{кр}$ , при которой частота движения электронов по замкнутой траектории  $\omega_E$  равна обратной величине релаксации, находится как

$$\epsilon_{кр} = \frac{\Delta E_C}{3e\lambda} = \frac{\hbar^2}{ea\tau}, \quad (5.5)$$

где  $\Delta E_C$  – ширина зоны проводимости;  $a$  – параметр решетки;  $\lambda$  и  $\tau$  – средняя длина свободного пробега и время релаксации носителей.

Используя табличные данные прил.1. для меди:  $a = 0.256$  нм,  $\tau = 10^{-13}$  с ( $T = 300$  К) и для висмута:  $a = 0.45$  нм,  $\tau = 10^{-12}$  с, получаем, согласно (5.5),  $\epsilon_{кр} = 3 \cdot 10^8$  В/м для меди и  $\epsilon_{кр} = 1.45 \cdot 10^6$  В/м для висмута.

**Задача 5.5.** Определить максимальный ток, который можно пропустить по серебряной проволоке диаметром  $d = 0.1$  мм при комнатной температуре.

Если не учитывать процессы выделения тепла при прохождении тока, то максимальный ток будет ограничиваться явлением отражения от атомных плоскостей. В этом случае плотность тока определяется выражением

$$j = j_{\max} \frac{2\epsilon/\epsilon_{кр}}{1 + (\epsilon/\epsilon_{кр})^2}, \quad j_{\max} = \frac{en\hbar}{2m^* a}.$$

Следовательно, максимальная плотность тока  $j_{\max}$  в серебре:

$$j_{\max} = \frac{1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 5.86 \cdot 10^{28} \cdot 1.05 \cdot 10^{-34}}{2 \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \cdot 0.409 \cdot 10^{-9}} = 1.3 \cdot 10^{15} \frac{\text{А}}{\text{м}^2}. \quad (5.6)$$

В (5.6) использованы данные прил.1. для Ag:  $a = 0.409$  нм;  $m^* = m_0$ ,  $n = 5.86 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ .

Соответствующий максимальный ток

$$I_{\max} = j_{\max} \frac{\pi d^2}{4} = \frac{1.3 \cdot 10^{15} \cdot \pi (0.1 \cdot 10^{-3})^2}{4} = 10^7 \text{ А}.$$

**Задача 5.6.** Рассчитать электропроводность собственного кремния при  $T = 77$  К и  $T = 300$  К.

Электропроводность полупроводников с концентрацией электронов  $n$ , дырок  $p$  и подвижностью электронов и дырок, соответственно,  $\mu_n$  и  $\mu_p$  определяется так:

$$\sigma = en\mu_n + ep\mu_p. \quad (5.7)$$

Зависимость  $\sigma(T)$  определяется температурными зависимостями концентраций  $n(T)$ ,  $p(T)$ ,  $\text{см}^{-3}$ , и подвижностями  $\mu_n(T)$ ,  $\mu_p(T)$ ,  $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ :

$$n(T) = p(T) = n_i(T) = 3.1 \cdot 10^{26} T^{3/2} \exp\left(-\frac{1.2}{2kT}\right);$$

$$\mu_n(T) = 1300 \left(\frac{T}{300}\right)^{-2}, \quad (5.8)$$

$$\mu_p(T) = 500 \left( \frac{T}{300} \right)^{-2,7}. \quad (5.9)$$

Выражения (5.8), (5.9) учитывают рассеяние электронов и дырок на тепловых колебаниях решетки.

Для задачи 5.6:

$$\begin{aligned} n_i(300) &= 1.2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}, \quad n_i(77) = 0.6 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-3}; \\ \mu_n(300) &= 1350 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}), \quad \mu_n(300) = 10\,400 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}); \\ \mu_p(300) &= 480 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}), \quad \mu_p(77) = 11\,000 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с}); \\ \sigma(300) &= 0.36 (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}, \quad \sigma(77) = 1.6 (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}. \end{aligned}$$

**Задача 5.7.** Определить электропроводность дырочного кремния с концентрацией носителей  $p = 10^{15} \text{ см}^{-3}$  и подвижностью носителей  $\mu_p = 480 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$  при  $T = 300 \text{ К}$ .

Для электронного или дырочного полупроводника выражение (5.7) упрощается, т. е.

$$\sigma_p = 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 10^{21} \cdot 480 \cdot 10^{-4} = 7.7 (\text{Ом} \cdot \text{м})^{-1}.$$

#### Список рекомендуемой литературы

- Акустические кристаллы: Справ. /Под ред. М.П. Шаскольской – М.: Наука, 1982.
- Ансельм А. И. Основы статистической физики и термодинамики. – М.: Наука, 1973.
- Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. – М.: Мир, 1979.
- Блатт Ф. Физика электронной проводимости в твердых телах. – М.: Мир, 1971.
- Варикаш В. И., Ю. М. Хачатрян. Избранные задачи по физике твердого тела. – Минск, Вышэйш. шк., 1969.
- Вендик О. Г., Вендик И. Б. Электроника твердого тела / ЛЭТИ. Л., 1975.
- Горбачев В. В., Спицина Л. Г. Физика полупроводников и металлов. – М.: Металлургия, 1981.
- Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. – М.: Наука, 1978.
- Фистуль В. И. Введение в физику полупроводников. – М.: Высш. шк., 1975.
- Чопра К. Л. Электрические явления в тонких пленках. – М.: Мир, 1972.
- Шалимова К. В. Физика полупроводников. – М.: Энергия, 1976.
- Шаскольская М. П. Кристаллография. – М.: Высш. шк., 1976.

## ПРИЛОЖЕНИЯ

### 1. Некоторые свойства элементов

Элемент	Атомная масса	Параметр решетки, нм	Плотность, кг/м <sup>3</sup>	Модуль Юнга, Н/м <sup>2</sup>	Удельное сопротивление, мкОм·см	Температура, К			Структура
						Дебая (T <sub>D</sub> )	Ферми (T <sub>F</sub> ·10 <sup>-4</sup> )	плавления (T <sub>пл</sub> )	
Na	22.9	0.423	1.01	0.068	4.75	158	3.75	371	ОЦК
C	12.0	0.357	3.51	5.45	–	2230	–	4300	АЛМ
Mg	24.3	0.320	1.74	0.35	4.30	400	8.27	922	ГЕК
Al	26.9	0.405	2.70	0.72	2.74	428	13.49	933	ГЦК
Si	28.0	0.543	2.33	0.98	2.3·10 <sup>11</sup>	645	–	1683	АЛМ
Ti	47.9	0.295	4.51	1.05	43.1	420	–	1933	ГЕК
Cr	51.9	0.288	7.19	1.90	12.9	360	–	2130	ОЦК
Fe	55.8	0.287	7.87	1.68	9.8	470	13.00	1808	ОЦК
Cu	63.5	0.361	8.93	1.37	1.7	343	8.12	1356	ГЦК
Ge	72.5	0.566	5.32	0.77	4.7·10 <sup>6</sup>	374	–	1211	АЛМ
Nb	92.9	0.330	8.58	1.70	14.5	275	6.18	2741	ОЦК
Ag	107.8	0.409	10.50	1.00	1.61	225	6.36	1234	ГЦК
In	114.8	0.459	7.29	0.41	8.75	108	9.98	429.8	ТЕТ
Sn	118.6	0.532	5.76	1.11	11.0	200	11.64	505	АЛМ
Sb	121.7	0.451	6.69	0.38	41.3	211	12.70	900.4	РМЭ
Cs	132.9	0.605	1.99	0.02	20	38	1.83	302	ОЦК
W	183.8	0.316	19.2	3.23	53	400	–	3683	ОЦК
Au	196.9	0.408	19.3	1.73	2.2	165	6.39	1337	ГЦК
Pb	207.2	0.495	11.3	0.43	21	105	10.87	601	ГЦК
Bi	208.9	0.475	9.8	0.31	11.6	119	54	544.5	РМЭ

#### Примечание

ГЦК – гранецентрированная кубическая; ОЦК – объемноцентрированная кубическая; ТЕТ – тетрагональная; ГЕК – гексагональная; АЛМ – типа алмаза; РМЭ – ромбоэдрическая.

## 2. Свойства полупроводников

Полупроводник	Ширина запрещенной зоны $E_G$ , эВ при		Эффективная масса		Подвижность		Работа выхода, эВ
	0 K	300 K	$m_n^* / m_e$	$m_p^* / m_e$	$\mu_n$ , $\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	$\mu_p$ , $\text{см}^2 \cdot \text{В}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$	
Si	1.166	1.11	$m_l$ 0.98 $m_t$ 0.19	$m^*_{pT}$ 0.5 $m^*_{pL}$ 0.16	1 350	480	4.83
Ge	0.74	0.67	$m_l$ 1.58 $m_t$ 0.082	$m^*_{pT}$ 0.3 $m^*_{pL}$ 0.04	3 900	1900	4.80
GaAs	1.52	1.43	0.07	$m^*_{pT}$ 0.5 $m^*_{pL}$ 0.12	8 600	400	4.71
GaSb	0.81	0.69	0.045	0.39	4 000	650	4.76
InAs	0.43	0.36	0.028	0.33	30 000	240	4.90
InSb	0.235	0.17	0.0133	$m^*_{pT}$ 0.6 $m^*_{pL}$ 0.012	76 000	5 000 (78 K)	4.75
InP	1.42	1.28	0.07	0.4	4 000	650	4.45
AlSb	1.6	1.6	0.11	0.39	50	400	4.86

### 3. Фундаментальные постоянные\*

Физическая величина	Значение
Элементарный заряд $e$	$1.602177 \cdot 10^{-19}$ Кл
Масса покоя протона $m_p$	$1.672623 \cdot 10^{-27}$ кг
Масса покоя электрона $m_e$	$9.109389 \cdot 10^{-31}$ кг
Удельный заряд электрона $e / m_e$	$-1.758819 \cdot 10^{11}$ Кл/кг
Постоянная Планка $h$	$6.626075 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Постоянная Планка $\hbar = h/2\pi$	$1.054572 \cdot 10^{-34}$ Дж·с
Постоянная Авогадро $N_A$	$6.022136 \cdot 10^{23}$ моль <sup>-1</sup>
Постоянная Больцмана $k$	$1.380658 \cdot 10^{-23}$ Дж/К
Универсальная газовая постоянная $R$	8.314 Дж/(моль·К)
Скорость света $c$	$2.997925 \cdot 10^8$ м/с
Радиус бора $a$	$0.529117 \cdot 10^{-10}$ м
Магнитная постоянная $\mu_0$	$12.566371 \cdot 10^{-7}$ Гн/м
Электрическая постоянная $\epsilon_0$	$8.854187 \cdot 10^{-12}$ Ф/м

\* Физические величины: Справ. / Под ред. И. С. Григорьева и Е. З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991.

#### 4. Пределные группы (классы) симметрии

Группа симметрии	$\infty$	$\infty m$	$\frac{\infty}{m}$	$\infty 2$	$\frac{\infty}{mm}$	$\frac{\infty}{\infty}$	$\frac{\infty}{\infty m}$
Элементы симметрии	$L_{\infty}$	$L_{\infty}, \infty P \parallel L_{\infty}$	$L_{\infty}, P \perp L_{\infty}, C$	$L_{\infty}, \infty L_2$	$L_{\infty}, \infty L_2, \infty P \parallel L_{\infty}, P \perp L_{\infty}$	$\infty L_{\infty}$	$\infty L_{\infty}, \infty P, C$
Геометрический образ							
Физический образ, свойство	—	$\nu, \rho$ , однородное электрическое поле $E$	Однородное магнитное поле $H$	Вращение плоскости поляризации в анизотропной среде	Одноосное растяжение, сжатие	Изотропное вращение плоскополяризации	Гидростатическое сжатие, растяжение; однородный нагрев

## 5. Индивидуальные задания

### Задание 5.1. Физические свойства кристаллов

Определить форму указательной поверхности и симметрию заданного кристалла после приложенного внешнего воздействия.

**Указание.** Все пункты выполнения задания сопровождать необходимыми иллюстрациями. Задание выполнить на листах формата А4 на одной стороне.

#### *Рекомендуемый порядок выполнения задания*

1. По справочной литературе определить класс симметрии и формулу симметрии заданного кристалла. Представить графически элементы симметрии для исходной элементарной ячейки.

2. Выбрать физическое свойство, определить тензор 2-го порядка выбранного физического свойства и определить форму указательной поверхности.

3. Определить симметрию внешних воздействий и их геометрический образ.

4. Определить класс симметрии и формулу симметрии заданного кристалла после первого и второго приложенных внешних воздействий. Представить графически элементы симметрии преобразованной элементарной ячейки.

5. Определить тензор выбранного физического свойства и форму указательной поверхности заданного кристалла после приложенных внешних воздействий.

6. Сформулировать вывод с рекомендациями применения рассмотренного физического свойства заданного кристалла.

Варианты заданий приведены в табл. П1, где приняты следующие обозначения:

$DN$  – деформация в виде одноосного растяжения–сжатия вдоль оси  $N$ -го порядка;

$EN$  – однородное электрическое поле, приложенное вдоль оси  $N$ -го порядка;

$HN$  – однородное магнитное поле, приложенное вдоль оси  $N$ -го порядка

Таблица П1

## Исходные данные

Вариант	Кристалл	Столбцы						
		I	II	III	IV	V	VI	VII
		Воздействия на кристалл						
1	Ge	D3, E3	D2, E3	D3, H3	D3, E2	D3, H2	D4, E2	D3, H6
2	Si	D3, E2	D3, E3	D2, E3	D4, E3	D4, E4	D3, H3	D3, H2
3	TE	D4, E3	D3, E2	D4, E4	D2, E3	D3, H3	D4, E2	D6, H3
4	NaF	D2, E3	D3, E2	D3, H3	D4, E3	D4, E4	D3, H2	D4, E2
5	NaI	D4, E3	D2, E3	D3, E2	D4, E4	D3, H2	D3, H3	D2, E4
6	KBr	D3, E2	D4, E4	D4, E2	D2, E3	D4, E3	D3, H2	D2, H2
7	AgCl	D4, E4	D3, E2	D4, E3	D3, H2	D2, E3	D4, E2	D3, H3
8	MgO	D3, E2	D4, E4	D3, H2	D4, E3	D4, E2	D2, E3	D4, H2
9	CsCl	D3, H3	D4, E2	D3, E2	D4, E4	D4, E3	D3, H2	D2, E3
10	TlBr	D3, E2	D3, H2	D3, H3	D4, E3	D4, E2	D4, E4	D2, H2
11	$\alpha$ -HgS	D6, H3	D4, E3	D4, E4	D3, E2	D3, H3	D4, E2	D3, H2
12	GaP	D4, E3	D3, H3	D3, E3	D4, E4	D3, E2	D3, H2	D4, E2
13	GaAs	D2, E3	D4, E3	D4, E4	D3, E3	D3, H3	D3, E2	D2, H2
14	$\alpha$ -Zns	D6, H3	D3, H6	D3, H3	D3, E2	D4, E3	D2, E3	D3, H2
15	$\beta$ -ZnS	D3, H3	D3, H6	D4, E4	D6, H3	D3, E2	D3, H2	D4, E2
16	CDS	D3, H6	D2, E3	D3, E2	D3, H3	D4, E3	D6, H3	D3, H2
17	InSb	D3, E2	D4, E4	D2, E3	D3, H6	D3, E3	D4, E3	D3, H3
18	CaF	D4, E4	D3, E2	D3, H6	D3, H2	D4, E2	D3, E3	D4, H2
19	TiO – рутил	D2, E3	D3, H3	D6, H3	D3, H6	D3, H2	D4, E2	D2, H2
20	SiO – кварц	D6, H3	D3, H6	D2, E3	D3, E2	D3, H3	D3, H2	D4, E2
21	Сапфир	D3, H6	D6, H3	D3, E2	D3, H3	D3, H2	D2, H2	D3, E3
22	Рубин	D3, H3	D3, H6	D6, H3	D2, E3	D3, E2	D3, H2	D4, E2
23	BaTiO <sub>3</sub>	D3, H6	D3, E2	D3, H2	D4, E2	D3, H3	D6, H3	D4, E2
24	SrTiO <sub>3</sub>	D4, E4	D2, E3	D6, H3	D3, H6	D4, E3	D3, E2	D4, E2
25	PbTiO <sub>3</sub>	D3, H3	D4, E3	D2, E3	D3, H2	D6, H3	D3, H6	D3, E2
26	KDP	D3, H2	D6, H3	D3, H6	D2, E3	D3, E2	D3, H3	D4, E2
27	LiNbO	D3, E3	D3, H6	D6, H3	D3, H2	D2, E3	D4, E3	D4, E2
28	LiTaO	D3, H6	D3, E3	D3, E2	D6, H3	D4, E4	D2, E3	D3, H2
29	YIG	D3, H3	D4, E2	D3, E3	D3, H6	D6, H3	D3, E2	D2, E3
30	YAG	D3, H6	D3, E2	D4, E3	D3, E3	D3, H3	D6, H3	D4, E4

## Задание 5.2. Кинетические свойства металлов

Для заданного металла (МЕ) по справочным и по экспериментальным данным измерением удельного электрического сопротивления при 0 °С в приближении свободных электронов определить зависимости электропроводности от температуры и от толщины образца и построить соответствующие графики.

**Указание.** Все расчеты проводить в СИ. Графики представить начерченными на миллиметровой бумаге или выполнить в графическом редакторе на ПК. Задание выполнить на листах формата А4 на одной стороне.

### *Рекомендуемый порядок выполнения задания*

1. По заданным параметрам элементарной ячейки рассчитать и построить элементарную ячейку Вигнера–Зейтца в обратном пространстве. Определить размеры зоны Бриллюэна в направлениях  $X$ ,  $L$ ,  $K$ .
2. Определить концентрацию электронов из условия касания зоны Бриллюэна и сферы Ферми.
3. Для идеального кристалла рассчитать и построить зависимости времени релаксации и средней длины свободного пробега от температуры.
4. Для идеального кристалла рассчитать и построить зависимость электропроводности от температуры и, используя правило Маттиссена, построить такую же зависимость для реального кристалла.
5. Для идеального и реального кристаллов рассчитать и построить зависимости электропроводности от толщины при заданной температуре.

Варианты заданий представлены в табл. П2.

Таблица П2

## Исходные данные

Вариант	Металл	Столбец	I	II	III	IV	V	VI	VII
		T, K	4.2... 20	21... 77	77... 200	200... 350	4.2... 20	21... 77	77... 200
		Толщина, мкм	0.01... 0.1	0.1... 1	0.5... 1.5	0.01... 0.1	0.1... 1	0.5... 1.5	0.01... 0.1
		Удельное сопротивление (0C), мкОм·См	НАПРАВЛЕНИЕ						
1	In	8.0	X	K	L	X	K	L	X
2	Na	4.2	L	X	K	L	X	K	L
3	Pb	19.0	K	L	X	K	L	X	K
4	Rb	11.0	X	K	L	X	K	L	X
5	Cs	18.8	L	X	K	L	X	K	L
6	Cu	1.5	K	L	X	K	L	X	K
7	Tl	15.0	X	K	L	X	K	L	X
8	Au	2.0	L	X	K	L	X	K	L
9	Be	2.8	K	L	X	K	L	X	K
10	Mg	3.9	X	K	L	X	K	L	X
11	Pb	19.0	L	X	K	L	X	K	L
12	Sr	23.0	K	L	X	K	L	X	K
13	Ba	60.0	X	K	L	X	K	L	X
14	Nb	15.2	L	X	K	L	X	K	L
15	Fe	8.9	K	L	X	K	L	X	K
16	Zn	5.5	X	K	L	X	K	L	X
17	Sn	10.6	L	X	K	L	X	K	L
18	Al	2.4	K	L	X	K	L	X	K
19	Ga	14.8	X	K	L	X	K	L	X
20	Bi	107.0	L	X	K	L	X	K	L
21	K	6.1	K	L	X	K	L	X	K
22	Hg	5.8 при T = 77 K	X	K	L	X	K	L	X
23	Ti	23.1	L	X	K	L	X	K	L
24	Te	45.0	K	L	X	K	L	X	K
25	Ta	13.1	X	K	L	X	K	L	X
26	V	19.9	L	X	K	L	X	K	L
27	W	53.0	K	L	X	K	L	X	K
28	Ni	7.0	X	K	L	X	K	L	X
29	Cr	12.9	L	X	K	L	X	K	L
30	Mo	5.3	K	L	X	K	L	X	K
31	Pt	10.4	X	K	L	X	K	L	X

## СОДЕРЖАНИЕ

Методика проведения практических занятий .....	3
Тема 1. Основы кристаллофизики (КФ) .....	3
Тема 2. Динамика кристаллической решетки. Теплємкость решетки .....	9
Тема 3. Статистика электронов твердого тела .....	13
Тема 4. Энергетический спектр электронов в кристалле (зонная структура) .....	15
Тема 5. Кинетические явления в твердых телах .....	19
Список рекомендованной литературы.....	23
Приложения .....	24

Редактор И.Б.Синишева

ЛР № 020617 от 24.06.98

---

Подписано к печати 05.06.03. Формат 60×84  $\frac{1}{16}$ . Бумага офсетная.

Печать офсетная. Гарнитура «Arial Cyr.». Усл. печ. л. 1,86. Уч.-изд. л. 2,0.

Тираж 350 экз.

Заказ

---

Издательство СПбГЭТУ "ЛЭТИ"

197376 С.-Петербург, ул. Проф. Попова, 5