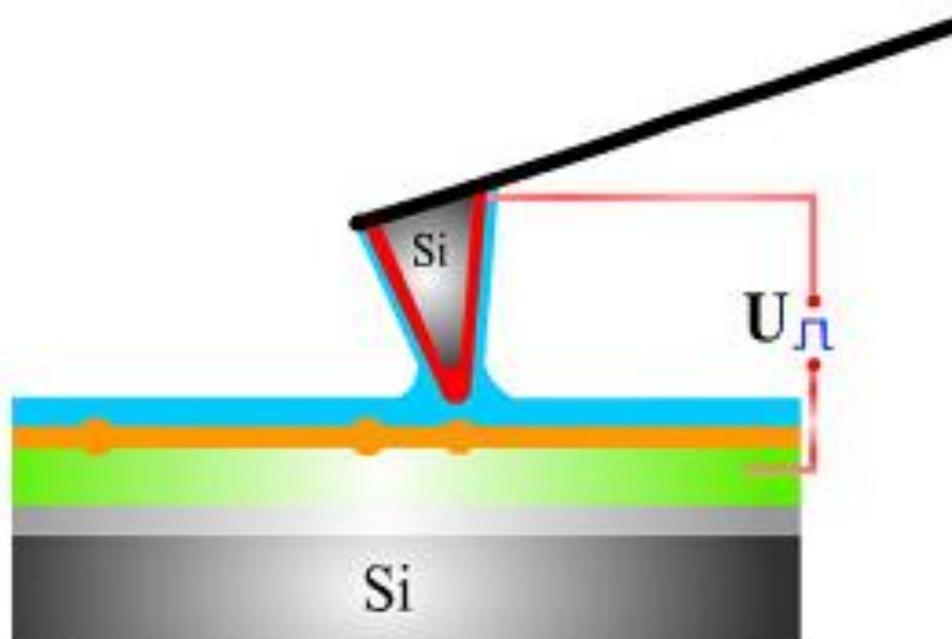


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

## ЗОНДОВЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР ЭЛЕКТРОНИКИ

Методические указания к лабораторным работам



УДК 621.3

Зондовые методы исследования материалов и структур электроники: методические указания к лабораторным работам / Рязан. гос. радиотехн. ун-т; сост.: А.П. Авачёв, В.Г. Литвинов, К.В. Митрофанов, В.Г. Мишустин. Рязань, 2011. 48 с.

Содержат сведения по изучению принципов и навыков работы на сканирующих зондовых микроскопах для исследования свойств материалов и структур электроники.

Предназначены для подготовки дипломированных специалистов по направлению 200100 – «Электроника и микроэлектроника».

Ил. 33. Библиогр.: 6 назв.

*Методы исследования, сканирующая зондовая микроскопия, атомно-силовая микроскопия, туннельная микроскопия*

Печатается по решению редакционно-издательского совета Рязанского государственного радиотехнического университета.

Рецензент: кафедра биомедицинской и полупроводниковой электроники РГРТУ (зав. кафедрой проф. С.П. Вихров)

Зондовые методы исследования материалов и структур электроники

Составители: А в а ч ё в Алексей Петрович  
Л и т в и н о в Владимир Георгиевич  
М и т р о ф а н о в Кирилл Валентинович  
М и ш у с т и н Владислав Геннадьевич

Редактор М.Е. Цветкова  
Корректор С.В. Макушина

Подписано в печать 18.04.11. Формат бумаги 60 × 84 1/16.

Бумага газетная. Печать трафаретная. Усл. печ. л. 3,0.

Тираж 50 экз. Заказ

Рязанский государственный радиотехнический университет.

390005, Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

Редакционно-издательский центр РГРТУ.

В основе методических указаний для проведения лабораторных работ лежат:

- учебное пособие «Сканирующая зондовая микроскопия, спектроскопия и литография», составленное компанией «НТ-МДТ»;
- руководство пользователя сканирующего зондового микроскопа «NanoEducator» производства компании «НТ-МДТ»;
- руководство пользователя атомно-силового микроскопа «Solver-Pro» производства компании «НТ-МДТ»;
- руководство пользователя атомно-силового микроскопа «NTEGRA-AURA» производства компании «НТ-МДТ»;
- учебные пособия и книги (см. библиографический список).

***Используемые при написании данного комплекса лабораторных работ материалы предоставлены с разрешения компании «НТ-МДТ»***

Лабораторные работы посвящены изучению основ сканирующей зондовой микроскопии, изучению конструкции и принципов работы сканирующих зондовых микроскопов (СЗМ) NanoEducator, NTEGRA. Экспериментальные работы проводятся на СЗМ NanoEducator, которые специально ориентированы на студенческую аудиторию, полностью управляются с помощью компьютера, имеют простой и наглядный интерфейс, анимационную поддержку, предполагает поэтапное освоение методик, отсутствие сложных настроек и недорогие расходные материалы.

Комплекс лабораторных работ предназначен для студентов старших курсов и магистрантов, изучающих дисциплины «Методы исследования материалов и структур электроники», «Физика твердого тела», «Процессы микро- и нанотехнологии», «Наноэлектроника».

## **Лабораторная работа № 1**

### **ПОЛУЧЕНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА НА СКАНИРУЮЩЕМ ЗОНДОВОМ МИКРОСКОПЕ NANOEDUCATOR В РЕЖИМЕ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ**

#### **Цель работы**

Изучение конструкции и принципа работы сканирующего зондового микроскопа (СЗМ) NanoEducator и получение изображения топологии исследуемого образца в режиме атомно-силовой микроскопии (АСМ).

#### **1. Краткие теоретические сведения**

Сканирующий зондовый микроскоп – это прибор для изучения свойств поверхности с помощью твердотельных заостренных зондов с разрешением, определяемым параметрами зонда, в процессе их взаимного перемещения по заданным алгоритмам. Любой СЗМ состоит из твердотельного зонда, системы сканирования, обеспечивающей относительное перемещение образца и зонда по трем координатам, системы регистрации отклонения зонда, системы управления сканером.

Принцип работы силового СЗМ заключается в сканировании поверхности образца зондовым датчиком с остроконечным зондом, находящимся во взаимодействии с исследуемой поверхностью. При этом возможны различные варианты – сканирование может осуществляться подвижным зондом при неподвижном образце, подвижным образцом при неподвижном зонде, а также комбинированно, при одновременном перемещении зонда и образца.

В основе сканирования лежит детектирование локального взаимодействия, возникающего между зондом и поверхностью исследуемого образца при их взаимном сближении до расстояния, соизмеримого с  $\lambda$ , где  $\lambda$  – характерная длина затухания взаимодействия «зонд-образец». Сканирующая силовая микроскопия, в свою очередь, подразделяется на атомно-силовую микроскопию (АСМ), магнитно-силовую микроскопию (МСМ), электросиловую микроскопию (ЭСМ) и другие, в зависимости от вида силового взаимодействия.

Атомно-силовой микроскоп (англ. AFM - atomic force microscope) – сканирующий зондовый микроскоп высокого разрешения, основанный на взаимодействии иглы кантилевера (зонда) с поверхностью исследуемого образца. Обычно под взаимодействием понимается притяжение или отталкивание кантилевера от поверхности из-за сил Ван-дер-Ваальса. Но при использовании специальных кантилеверов можно изучать электрические и магнитные свойства поверхности. Атомно-силовой микроскоп позволяет исследовать как проводящие, так и непроводящие поверхности даже через слой жидкости, что позволяет работать с органическими молекулами (ДНК). Пространственное разрешение атомно-силового микроскопа зависит от размера кантилевера и кривизны его острия. Разрешение по горизонтали достигает атомарного уровня.

СЗМ NanoEducator состоит из следующих основных компонентов (рис. 1.1): 1 - зонд; 2 - образец; 3 - пьезоэлектрические двигатели x, y, z для прецизионного

перемещения зонда над поверхностью исследуемого образца; 4 - генератор раз-  
 вертки, подающий напряжения на пьезодвигатели x и y, обеспечивающие скани-  
 рование зонда в горизонтальной плоскости; 5 - электронный датчик, детектиру-  
 ющий величину локального взаимодействия между зондом и образцом; 6 - ком-  
 паратор, сравнивающий текущий сигнал в цепи датчика  $P(t)$  с изначально задан-  
 ным  $P_0$  и, при его отклонении, вырабатывающий корректирующий сигнал  $P_{fb}$ ; 7  
 - электронная цепь обратной связи, управляющая положением зонда по оси z; 8  
 - компьютер, управляющий процессом сканирования и получением изображения  
 (9).

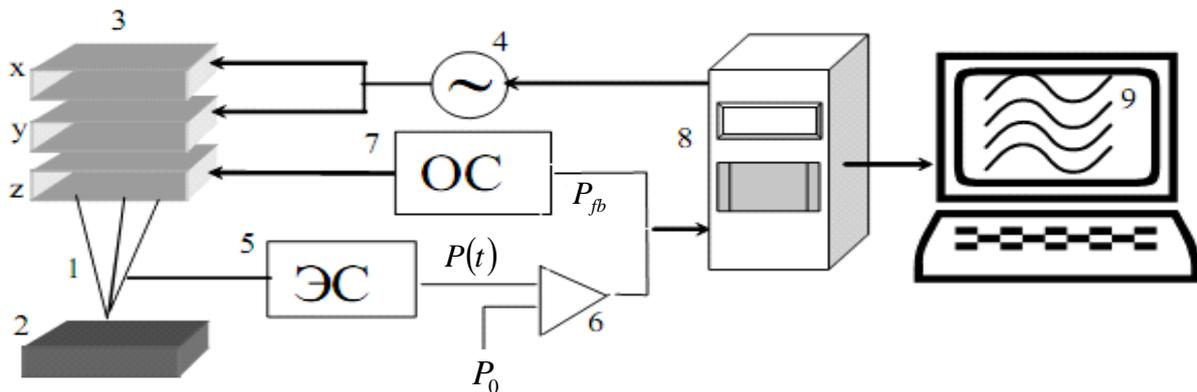


Рис. 1.1. Общая схема сканирующего зондового микроскопа

При работе прибора образец движется в плоскости XY (рис.1.2) постро-  
 чно таким образом, что кончик иглы постепенно проходит над всей заданной площа-  
 дью образца с шагом  $\Delta$ . Этот процесс называется сканированием.

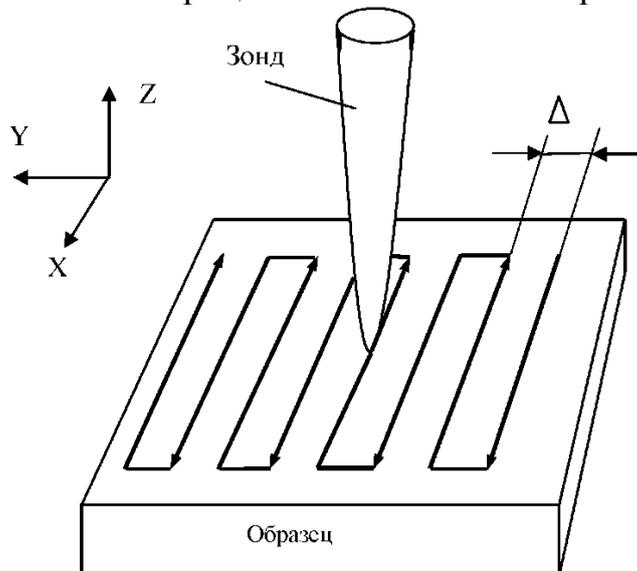


Рис. 1.2. Принцип сканирования

Информация, полученная с помощью сканирующего зондового микроскопа,  
 хранится в виде СЗМ кадра - двумерного массива целых чисел  $Z_{ij}$  (матрицы).  
 Каждому значению пары индексов  $i$  и  $j$  соответствует определенная точка по-

верхности в пределах поля сканирования. Как правило, СЗМ кадры представляют собой квадратные матрицы, имеющие размер 200x200 или 300x300 элементов.

Визуализация СЗМ кадров производится средствами компьютерной графики в основном в виде трехмерных (3D) и двумерных яркостных (2D) изображений. При 2D визуализации каждой точке поверхности  $Z = f(x, y)$  ставится в соответствие цвет. Наиболее широко используются градиентные палитры, в которых раскраска изображения производится тоном определенного цвета в соответствии с высотой точки поверхности. Наиболее эффективным способом раскраски 3D изображений является моделирование условий подсветки поверхности точечным источником, расположенным в некоторой точке пространства над поверхностью. При этом удастся подчеркнуть мелкомасштабные неровности рельефа. Также средствами компьютерной обработки и графики реализуются масштабирование и вращение 3D СЗМ изображений (рис.1.3).

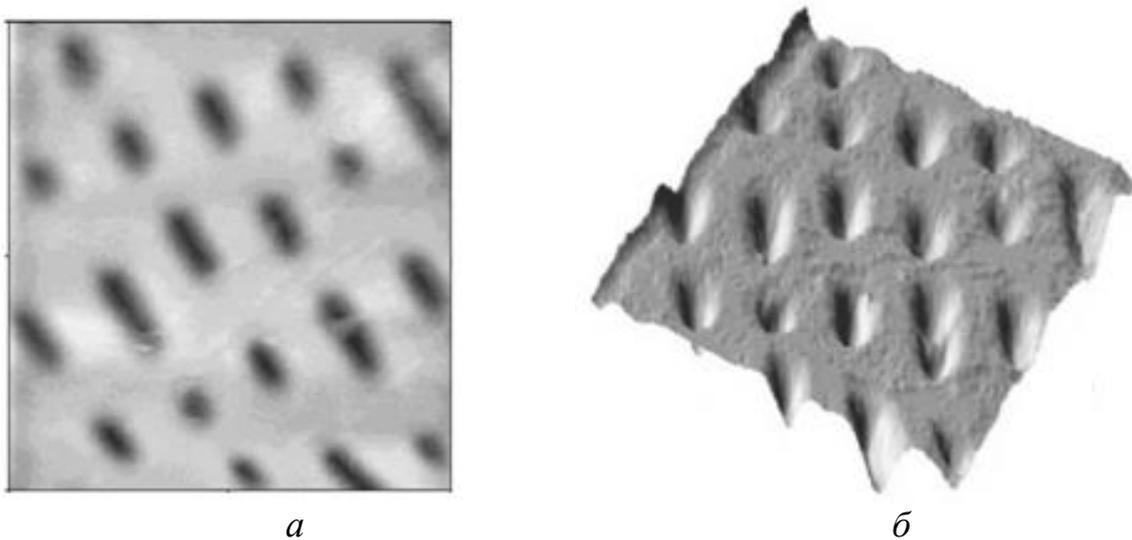


Рис. 1.3. Способы графического представления СЗМ-изображения:  
а – двумерное, б – трехмерное

В приборе NanoEducator применяется универсальный датчик туннельного тока и модуляционного силового взаимодействия. Датчик выполнен в виде пьезокерамической трубки длиной  $l = 7$  мм, диаметром  $d = 1.2$  мм и толщиной стенки  $h = 0.25$  мм, жестко закрепленной с одного конца. На внутреннюю поверхность трубки нанесен проводящий электрод. На внешнюю поверхность трубки нанесены два электрически изолированных полуцилиндрических электрода. К свободному концу трубки прикреплена вольфрамовая проволока диаметром 100 мкм (рис. 1.4).

В качестве датчика силового взаимодействия одна часть пьезо-электрической трубки используется как пьезовибратор, а другая - как датчик механических колебаний (рис. 1.5, а). К пьезовибратору подводится переменное электрическое напряжение с частотой, равной резонансной частоте силового датчика. Амплитуда колебаний при большом расстоянии зонд-образец максимальна.

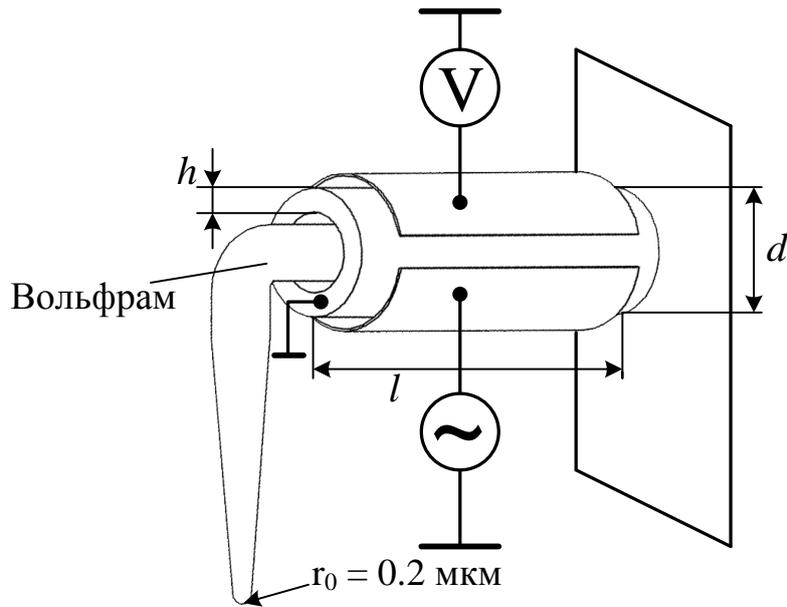


Рис. 1.4. Конструкция универсального датчика прибора NanoEducador

Как видно из рис. 1.5, б, в процессе колебаний зонд отклоняется от равновесного положения на величину  $A_0$ , равную амплитуде его вынужденных механических колебаний (она составляет доли микрона), при этом на второй части пьезоэлемента (датчике колебаний) возникает переменное электрическое напряжение, пропорциональное смещению зонда, которое и измеряется прибором.

При приближении зонда к поверхности образца зонд начинает касаться образца в процессе колебаний. Это приводит к смещению амплитудно-частотной характеристики (АЧХ) колебаний датчика влево по сравнению с АЧХ, измеренной вдали от поверхности (рис. 1.5, в). Так как частота вынуждающих колебаний пьезотрубки поддерживается постоянной и равной  $\omega_0$  в свободном состоянии, то при приближении зонда к поверхности амплитуда его колебаний уменьшается и становится равной  $A$ . Эта амплитуда колебаний регистрируется со второй половины пьезотрубки.

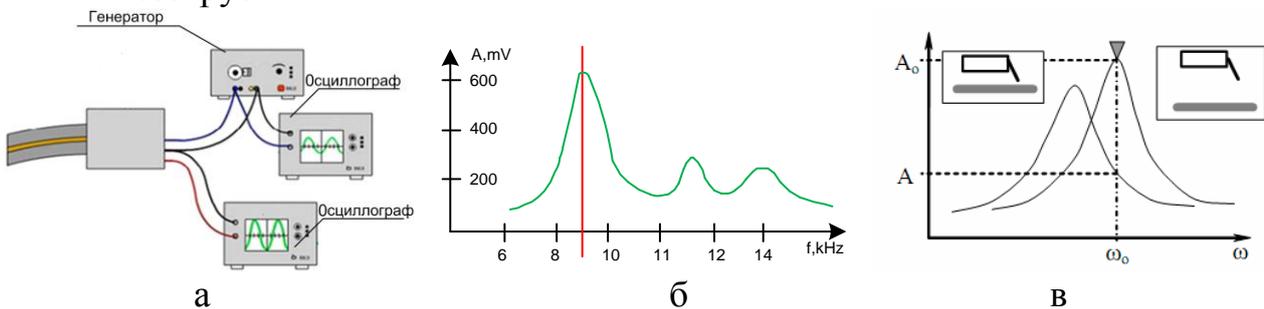


Рис. 1.5. Принцип работы пьезоэлектрической трубки в качестве датчика силового взаимодействия: а – подключение датчика; б – АЧХ; в – смещение АЧХ в процессе взаимодействия

Для контролируемого перемещения иглы на сверхмалых расстояниях в СЗМ используются пьезоэлектрические двигатели. Их задача - обеспечить прецизионное механическое сканирование зондом исследуемого образца путем перемещения зонда относительно неподвижного образца или перемещения образца относительно неподвижного зонда.

Работа большинства пьезоэлектрических двигателей, применяемых в современных СЗМ, основана на использовании обратного пьезоэффекта, который заключается в изменении размеров пьезоматериала под действием электрического поля.

В СЗМ, как правило, в качестве пьезоматериала используется не кристаллические материалы, вроде кварца, а пьезокерамика, обладающая более высоким значением пьезомодуля. Пьезокерамика представляет собой совокупность сегнетоэлектрических монокристаллических зерен с типичным размером 0.5 – 50 мкм. Основой большинства применяемых в СЗМ пьезокерамик является состав  $Pb(ZrTi)O_3$  (цирконат-титанат свинца, ЦТС) с различными добавками.

Конструкции из пьезокерамик, обеспечивающие перемещение по трем координатам  $x$ ,  $y$  (в латеральной плоскости образца) и  $z$  (по вертикали), называются «сканерами». Существует несколько типов сканеров, наиболее распространенными из которых являются треногий и трубчатый (рис. 1.6).

В треногом сканере перемещения по трем координатам обеспечивают расположенные в ортогональную структуру три независимых элемента пьезосканера (рис. 1.6, а).

Трубчатые сканеры работают посредством изгиба полой пьезоэлектрической трубки в латеральной плоскости и удлинения или сжатия трубки по оси  $Z$ . Электроды, управляющие перемещениями трубки в  $X$  и  $Y$  направлениях, размещаются в виде четырех сегментов по наружной поверхности трубки (рис. 1.6, б).

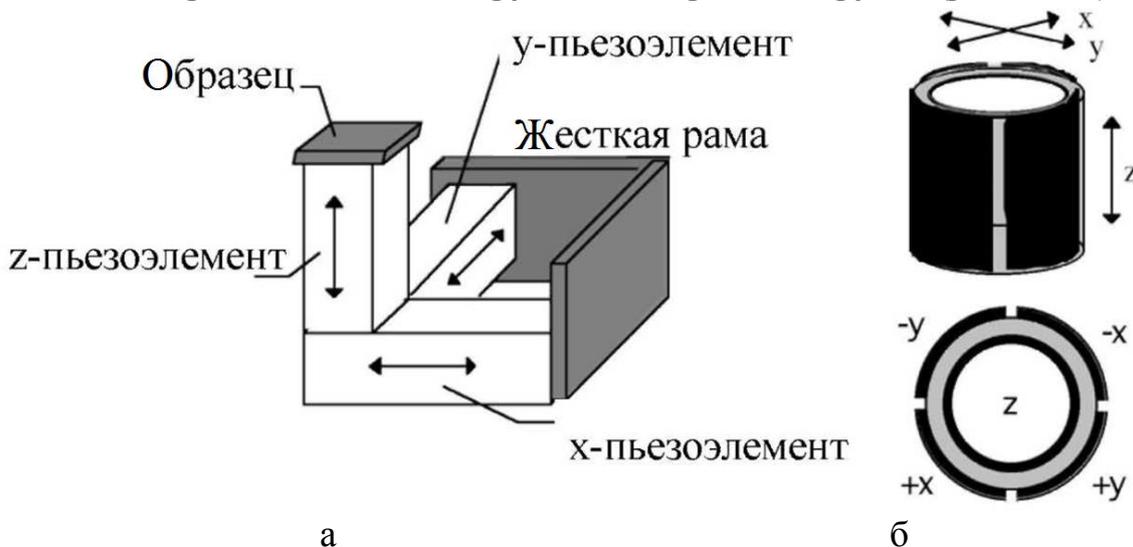


Рис. 1.6. Основные конструкции сканеров: а – треногий, б – трубчатый

Для изгиба трубки в направлении  $X$  на  $+X$  контакт подается напряжение для удлинения одной из ее сторон. Тот же самый принцип используется для задания движения в направлении  $Y$ . Смещения в  $X$  и  $Y$  направлениях пропорциональны

приложенному напряжению и квадрату длины трубки. Движение в  $Z$  направлении генерируется подачей напряжения на электрод в центре трубки. Это приводит к удлинению всей трубки пропорционально ее длине и приложенному напряжению.

Диапазон перемещений сканера по оси  $Z$  составляет около 10 мкм, поэтому перед началом сканирования необходимо приблизить зонд к образцу на это расстояние. Для этого предназначен механизм подвода, схема которого приведена на рис. 1.7. Шаговый двигатель 1 при подаче на него электрических импульсов вращает винт подачи 2 и перемещает планку 3 с зондом 4, приближая или отдаляя его от образца 5, установленного на сканере 6. Величина одного шага составляет около 2 мкм.

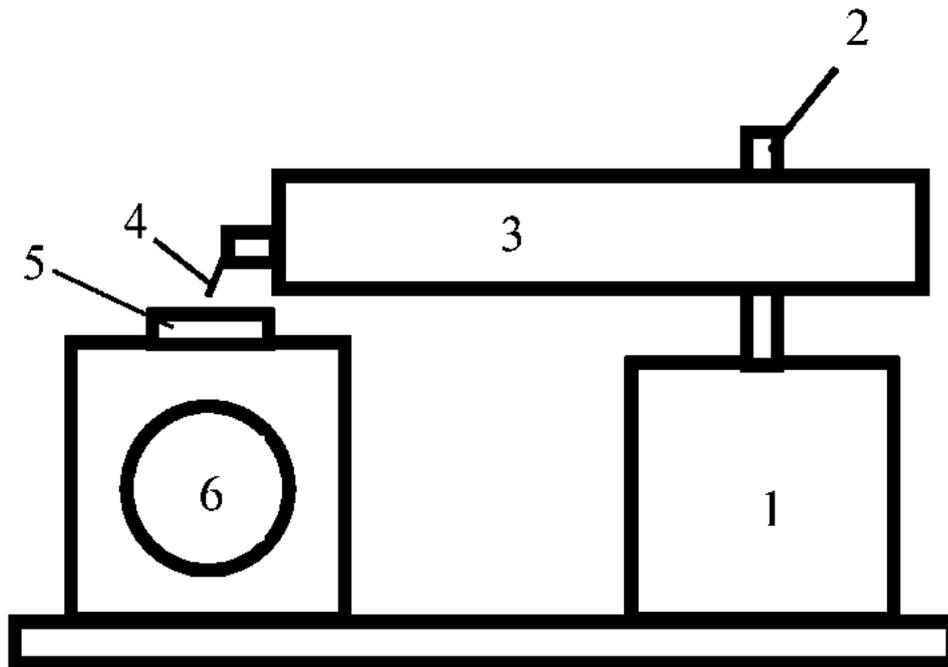


Рис. 1.7. Схема механизма подвода зонда к поверхности образца

Так как шаг механизма подвода значительно превосходит величину требуемого расстояния зонд-образец в процессе сканирования, то во избежание деформации зонда его подвод осуществляется при одновременной работе шагового двигателя и перемещении сканера по оси  $Z$  по следующему алгоритму.

1. Система обратной связи отключается, и сканер "втягивается", т.е. опускает образец в нижнее крайнее положение.

2. Механизм подвода зонда производит один шаг и останавливается.

3. Система обратной связи включается, и сканер плавно поднимает образец, одновременно производится анализ наличия взаимодействия зонд-образец.

4. Если взаимодействие отсутствует, процесс повторяется с п. 1.

Если во время вытягивания сканера вверх появится ненулевой сигнал, система обратной связи остановит движение сканера вверх и зафиксирует величину взаимодействия на заданном уровне. Далее после остановки зонда и будет происходить сканирование.

## 2. Программное обеспечение АСМ

После вызова программы NanoEducator на экране компьютера появляется главное окно (рис. 1.8). Программа позволяет осуществлять просмотр и обработку данных параллельно с измерениями.

Подготовку к измерениям рекомендуется проводить, используя окно «Подготовка к сканированию». Окно открывается кнопкой на панели основных операций.

Если контроллер прибора был включен до запуска программы NanoEducator, то при запуске программы произойдет автоматический выбор контроллера. Для работы прибора в качестве атомно-силового микроскопа в меню Выбор режима выберите конфигурацию АСМ.

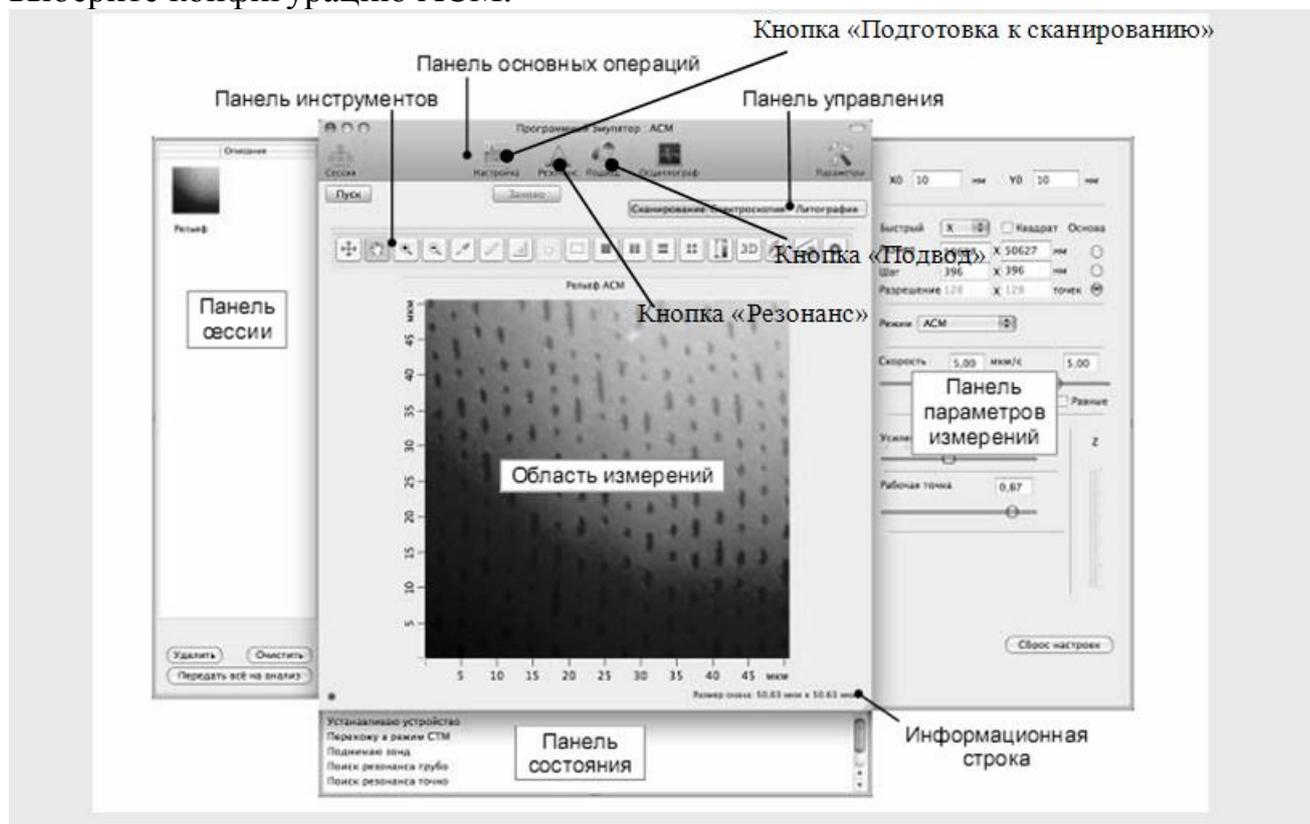


Рис. 1.8. Главное окно программы NanoEducator

Для выбора участка для исследования на образце используйте винты перемещения двухкоординатного столика, расположенного в нижней части прибора.

После этого необходимо произвести операцию предварительного подвода. Её желательно производить, если расстояние между кончиком зонда и поверхностью образца превышает 0.5 – 1 мм.

## 3. Построение резонансной кривой и установка рабочей частоты

Поиск резонанса и установку рабочей частоты колебаний зонда рекомендуется выполнять перед началом каждого измерения, более того, в процессе измерений иногда возникают ситуации, требующие повторного выполнения этой операции (например, при потере контакта).

Окно «Резонанс» открывается кнопкой на панели основных операций главного окна программы (рис. 1.9).

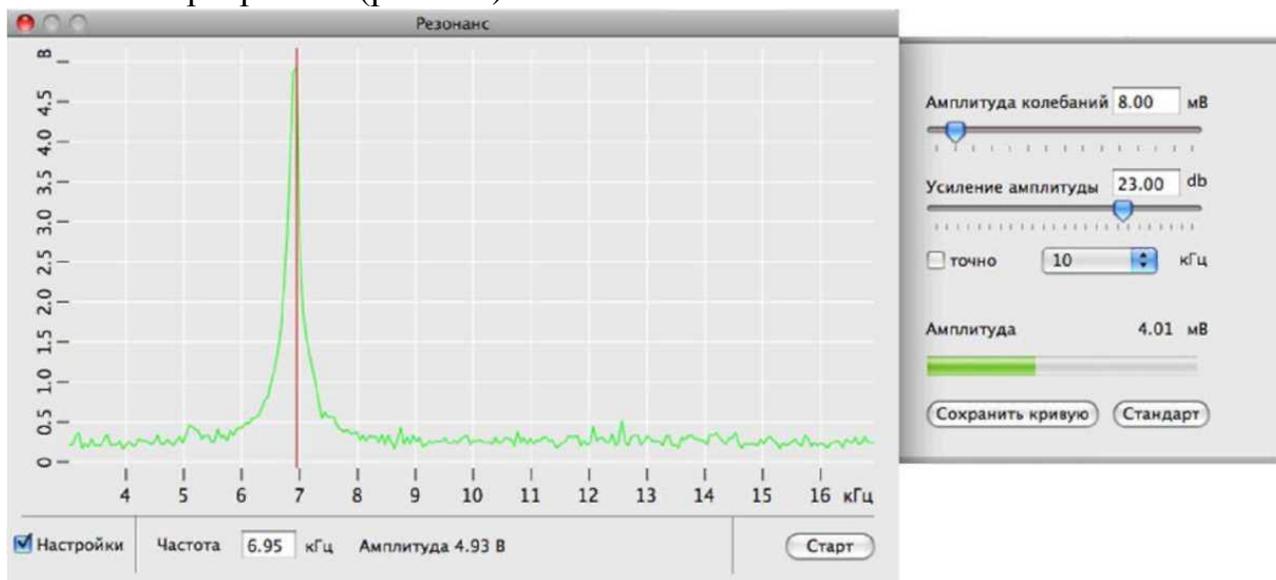


Рис. 1.9. Окно «Резонанс»

Выполнение операции поиска резонанса предусматривает измерение амплитуды колебаний зонда при изменении частоты вынужденных колебаний, задаваемых генератором. Запуск автоматического поиска резонансной частоты осуществляется кнопкой «Старт».

В результате измерения амплитуды колебаний зонда автоматически устанавливается частота генератора, равная частоте, при которой наблюдалась максимальная амплитуда. В процессе поиска резонансной частоты при необходимости автоматически подстраиваются амплитуда выходного сигнала генератора и коэффициент усиления таким образом, чтобы амплитуда колебаний зондового датчика на резонансной частоте была не менее 2 В. Если резонансный пик недостаточно ярко выражен или амплитуда при частоте резонанса мала (менее 1В), то необходимо изменить параметры проведения измерений и повторно провести определение резонансной частоты.

#### 4. Захват взаимодействия

Для захвата взаимодействия выполняется процедура контролируемого сближения зонда и образца с помощью механизма автоматизированного подвода.

Окно «Подвод» открывается кнопкой на панели основных операций главного

окна программы. Чтобы подвести зонд к образцу, щелкните на кнопку. 

В результате:

- 1) замкнется цепь обратной связи, и Z-сканер выдвинется на максимальную длину, что отобразится на индикаторе Z-сканер;
- 2) включится шаговый двигатель, выполняющий подвод образца к зонду;
- 3) индикатор «Шаги» начнет отсчитывать пройденные шаги.

Подвод закончится, когда амплитуда колебаний зонда уменьшится до значения параметра «Амплитуда остановки» (устанавливается в окне «Свойства»). Это уменьшение будет отражено на индикаторе «Амплитуда». По окончании подвода индикатор Z-сканер займет промежуточное положение, что соответствует середине полного диапазона удлинения сканера.

Для вывода зонда из области взаимодействия и увеличения расстояния между зондом и образцом используется кнопка . Зонд отводится от образца на расстояние, заданное в поле «Шаги».

После выполнения всех пунктов закройте окна «Резонанс» и «Подвод».

## 5. Сканирование

В главном окне программы нажмите кнопку «Сканирование».

В режиме сканирования необходимо установить параметры сканирования. Эти параметры сгруппированы на панели сканирования, открываемой кнопкой в правой части окна программы.

Область сканирования можно выбрать в пределах максимально доступной области. Для этого нажмите кнопку  на панели инструментов главного окна программы и с помощью мыши с нажатой левой кнопкой выделите нужный участок.

Запуск сканирования осуществляется кнопкой «Пуск» в главном окне программы. В результате начнется построчное сканирование поверхности образца и в области измерений, строчка за строчкой, будет появляться изображение сканируемой поверхности.

Для сохранения результатов измерений выполните следующие действия.

1. В главном меню выберите Файл -> Сохранить как.
2. В открывшемся диалоговом окне выберите папку, в которой будут храниться полученные данные. Введите название файла и сохраните его с расширением \*.mdt.

В полученном файле будут содержаться фреймы, представленные в окне сессии в момент сохранения.

## 6. Порядок выполнения работы

1. Установите флажок «Настройки». В результате справа от окна программы откроется панель параметров поиска резонанса.
2. Убедитесь, что флажок точно сброшен.
3. Щелкните на кнопке «Старт» для грубого поиска резонанса. В результате будет измерена АЧХ зонда и приблизительно установлена резонансная частота.
4. Убедитесь, что резонансная кривая симметрична и максимум находится на уровне не менее 2 В. Если резонансный пик имеет искаженную форму или амплитуда колебаний зонда на частоте резонанса мала (менее 2 В), измените параметры «Амплитуда колебаний» и «Усиление амплитуды», после чего повторно проведите определение резонансной частоты.

5. Установите флажок «точно». Щелкните на кнопке «Старт» для точного поиска резонанса. В результате в области максимума, найденного при грубом поиске, будет измерена АЧХ зонда и рабочая частота генератора (параметр «Частота») будет установлена равной резонансной частоте зонда.

6. В главном окне программы нажмите кнопку «Сканирование».

7. Выберите область сканирования с помощью кнопки на панели инструментов главного окна программы и мыши.

8. Нажмите кнопку «Пуск» для начала сканирования.

9. Сохраните полученные результаты.

### **7. Содержание отчета**

1. Амплитудно-частотная характеристика зонда.
2. Изображение топологии исследуемого образца.

### **8. Контрольные вопросы**

1. Назовите основные компоненты СЗМ.
2. Объясните понятие пьезоэлектрического эффекта и принцип действия пьезоэлектрического двигателя. Опишите различные конструкции сканеров.
3. Объясните конструкцию зондового датчика силового взаимодействия прибора NanoEducator и принцип его действия.
4. Опишите механизм подвода зонда к образцу в приборе NanoEducator. Поясните параметры, определяющие силу взаимодействия зонда с образцом.
5. Объясните принцип сканирования и работы системы обратной связи. Расскажите о критериях выбора параметров сканирования.

**Лабораторная работа № 2**  
**ИССЛЕДОВАНИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СИСТЕМЫ**  
**ДАТЧИКА СИЛОВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ**  
**В АТОМНО-СИЛОВОМ МИКРОСКОПЕ NANOEDUCATOR**

**Цель работы**

Изучение принципа работы атомно-силового микроскопа в бесконтактном режиме, определение основных параметров датчика силового взаимодействия прибора и параметров сканирующей зондовой микроскопии.

**1. Краткие теоретические сведения**

В атомно-силовом микроскопе наблюдаются взаимодействующие силы при приближении зонда к образцу. Сначала зонд притягивается к поверхности благодаря наличию наиболее дальнедействующих сил Ван-дер-Ваальса.

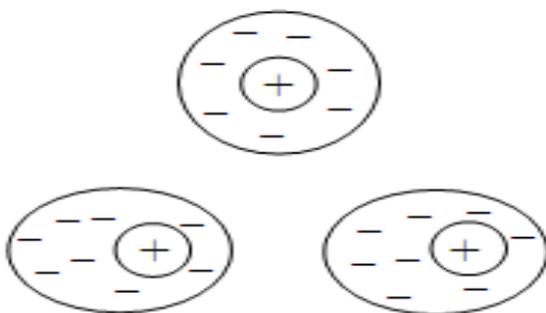


Рис. 2.1. Притяжение двух атомов благодаря силам Ван-дер-Ваальса

Силы Ван-дер-Ваальса обусловлены тем, что нейтральный изотропный атом может поляризоваться под влиянием электрического поля. Причем даже два нейтральных атома индуцируют друг в друге малые дипольные электрические моменты, когда они находятся достаточно близко друг от друга, так, что движение электронов в электронных оболочках соседних атомов не претерпевает радикального изменения, а только испытывает слабое возмущение (рис. 2.1). Так как притяжение более близких друг к другу противоположных зарядов увеличивается при сближении сильнее, чем отталкивание далеких одноименных зарядов, то результатом будет притяжение атомов друг к другу.

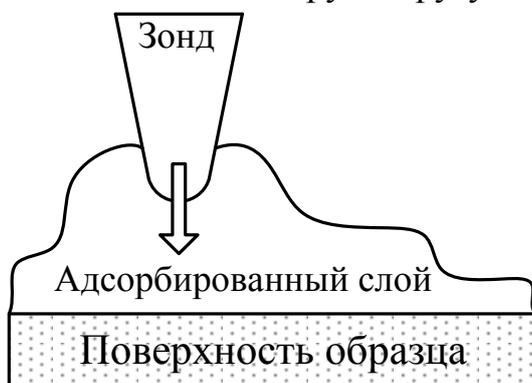


Рис. 2.2. Притяжение зонда к поверхности за счет капиллярных сил

Если на поверхности образца имеется адсорбированный слой (рис. 2.2), то при соприкосновении зонда с его поверхностью возникает притяжение за счет капиллярных сил. Притягивающие силы могут быть обусловлены также электростатическим взаимодействием.

При дальнейшем уменьшении расстояния возникают силы отталкивания. Когда расстояние между зондом и образцом станет меньше среднего межатомного расстояния, то начнется перекрытие электронных оболочек ближайших атомов, в результате чего электроны первого атома стремятся частично занять состояния второго. В результате действия принципа запрета Паули они вынуждены занимать состояние с более высокой энергией. Увеличение энергии системы двух взаимодействующих атомов приводит к появлению отталкивающей силы. При еще большем сближении атомов доминирующей становится кулоновская сила отталкивания ядер.

В общем виде зависимость силы межатомного взаимодействия  $F$  от расстояния между атомами  $R$  имеет вид:

$$F(R) = -\frac{a}{R^m} + \frac{b}{R^n}. \quad (2.1)$$

Константы  $a$  и  $b$  и показатели степени  $m$  и  $n$  зависят от сорта атомов и типа химических связей. Для притягивающих сил Ван-дер-Ваальса  $m = 7$ , для кулоновской силы  $n \approx 2$ . Качественно зависимость  $F(R)$  показана на рис. 2.3.

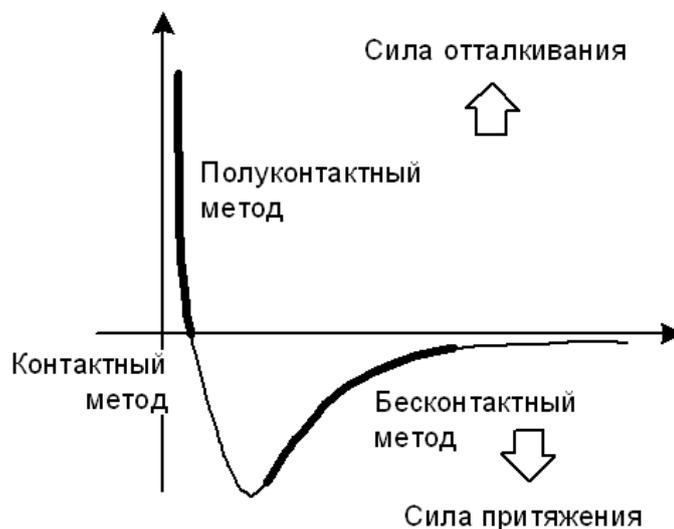


Рис. 2.3. Зависимость силы  $F$  взаимодействия между атомами от расстояния  $R$

В зависимости от действующих сил и расстояния между зондом и образцом различают следующие режимы работы АСМ: контактный, бесконтактный и полуконтактный (рис. 2.3).

### 1.1. Бесконтактный режим работы АСМ

В этом режиме работы зонд находится достаточно далеко от поверхности образца в области действия сил притяжения.

Силы притяжения и их градиенты слабее отталкивающих контактных сил, поэтому для их детектирования обычно используется модуляционная методика. Для этого на пьезовибратор, на котором укреплен кантилевер с зондом, прикладывается переменное напряжение, которое вызывает изменение его геометрических размеров. Частоту переменного напряжения выбирают равной собственной частоте колебаний кантилевера. Вследствие этого кантилевер колеблется над образцом с резонансной частотой  $\omega_0$ :

$$\omega_0 \sim \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (2.2)$$

где  $m$  – масса системы зонд-кантилевер.

Уравнение, описывающее движение зонда при малой амплитуде колебаний, имеет вид:

$$\frac{d^2 z}{dt^2} + \frac{\omega_0}{Q} \cdot \frac{dz}{dt} + \omega_0^2 \cdot (z - z_0) = \Delta z \omega_0^2 \cos(\omega t), \quad (2.3)$$

где  $\omega$  – частота вынуждающих колебаний пьезодрайвера,  $z(t)$  – расстояние зонд-образец в момент времени  $t$ ,  $z_0$  – расстояние зонд-образец при нулевой амплитуде колебаний,  $\Delta z$  – амплитуда вынуждающих колебаний (закрепленного на пьезовибраторе конца кантилевера),  $Q$  – добротность, зависящая от колебательной системы и условий внешней среды (воздух, жидкость или вакуум). Величина  $Q$  связана с характерным временем затухания  $\tau$  соотношением:

$$2Q = \omega_0 \cdot \tau. \quad (2.4)$$

Вынужденные колебания образуются из двух различных типов колебаний – переходного процесса и стационарного колебания. Переходный процесс является общим решением уравнения (2.3) при  $\Delta z = 0$ ; он затухает с течением времени и интереса не представляет. Стационарное колебание представляет собой чисто гармоническое колебание с частотой  $\omega$  и амплитудой возбуждения  $\Delta z \neq 0$ .

Амплитуда стационарных колебаний зонда равна:

$$\delta = \Delta z \sqrt{\frac{Q^2 \omega_0^4}{\omega_0^2 \cdot \omega^2 + Q^2 \cdot (\omega_0^2 - \omega^2)^2}}. \quad (2.5)$$

Сдвиг фазы  $\varphi$  колебаний свободного конца кантилевера относительно закрепленного определяется выражением:

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{1}{Q} \cdot \frac{\omega \cdot \omega_0}{\omega_0^2 - \omega^2}. \quad (2.6)$$

Приближение зонда к поверхности образца приводит к возникновению силы взаимодействия между ними, что эквивалентно увеличению массы зонда. Это

приводит к смещению амплитудно-частотной характеристики (АЧХ) и фазо-частотной характеристики (ФЧХ) колебаний кантилевера влево по частоте по сравнению с измеренными вдали от поверхности (рис. 2.4).

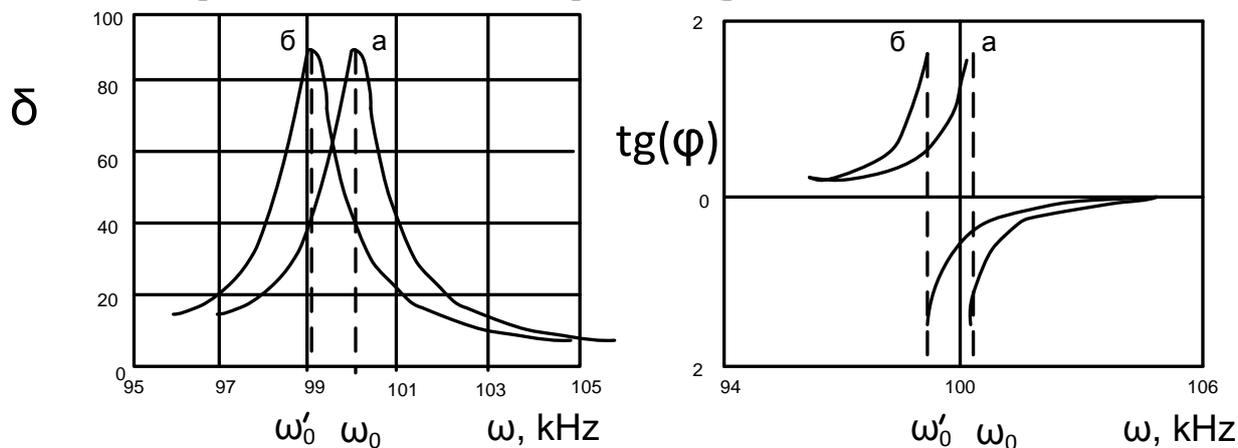


Рис. 2.4. Зависимость амплитуды  $\delta$  и фазы  $\varphi$  колебаний зонда вдали от поверхности (а) и при приближении к поверхности образца (б)

Резонансная частота колебаний кантилевера изменяется при изменении градиента силы  $\partial F/\partial z$  (при приближении зонда к поверхности) по сравнению со свободно резонирующим кантилевером (вдали от поверхности) в соответствии с выражением:

$$\omega_0 = \omega \cdot \sqrt{1 - \frac{1}{k} \cdot \frac{\partial F}{\partial z}} \quad (2.7)$$

Так как частота вынуждающих колебаний кантилевера поддерживается постоянной и равной  $\omega_0$  в свободном состоянии, то, при приближении зонда к поверхности, амплитуда колебаний свободного конца кантилевера уменьшается. Эта амплитуда колебаний регистрируется с помощью обратной связи. Далее с помощью синхронного детектора выделяется постоянный сигнал, согласованный с синхросигналом от генератора напряжения.

Компаратор сравнивает текущий сигнал в цепи датчика с изначально заданным  $P_0$  (характеризует уровень силы, поддерживаемый между зондом и поверхностью образца) и, при его отклонении, вырабатывает корректирующий сигнал  $P_{fb}$ . Взаимодействие зонда с образцом поддерживается постоянным за счет приближения и отвода зонда от поверхности системой обратной связи, управляющей Z-пьезоприводом таким образом, чтобы сила взаимодействия между зондом и образцом (а как следствие и амплитуда колебаний зонда) была постоянной (режим постоянной силы). Сигнал о высоте  $z$  в каждом изображении ( $x$ ,  $y$ ) берется из Z-пьезопривода.

Поскольку в неконтактном режиме нет физического контакта с образцом, сила взаимодействия между зондом и образцом очень мала, этот режим более подходит для сканирования с высоким разрешением мягких и «липких» образцов (полимеров) или слишком твердых образцов.

## 1.2. Фазовый контраст

Если отдельные участки поверхности имеют различные свойства, то изображение будет иметь дополнительный контраст, зависящий от природы материала на отдельных участках. Он проявляется в изменении фазы колебаний зонда, в то время как амплитуда колебаний отражает топографию поверхности.

Поскольку детектирование фазы колебаний возможно одновременно с получением топографии поверхности при амплитудном детектировании положения зонда в обратной связи, то из сравнения амплитудного и фазового изображений возможно получить информацию о фазовом составе образца (так называемый фазовый контраст, рис. 2.5).

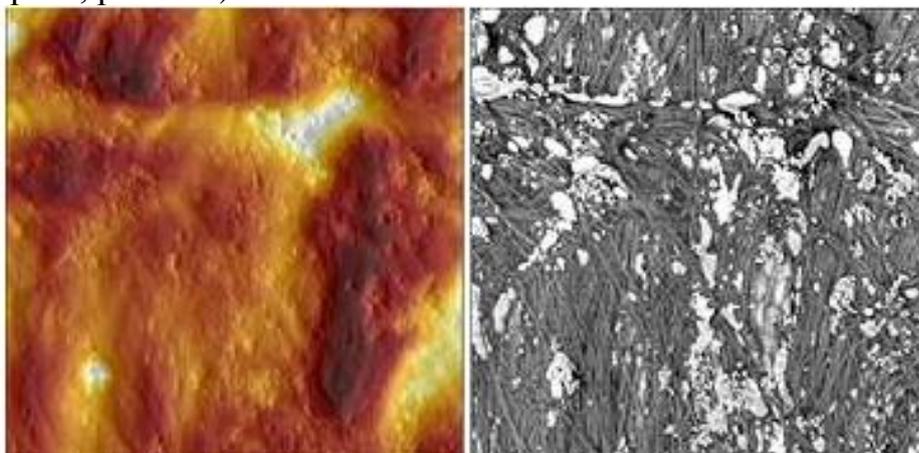


Рис. 2.5. Топография (слева) и фазовое изображение (справа) поверхности трехкомпонентной системы полимеров

## 1.3. Спектроскопия

Режим «Спектроскопия» позволяет получить зависимость амплитуды колебаний зонда от расстояния между зондом и образцом. Спектроскопия может выполняться как в одной точке образца [точке, соответствующей текущему положению зонда в координате (X, Y)], так и в точках, указанных на полученном при сканировании изображении поверхности образца. Спектроскопия позволяет выбрать оптимальную для данного измерения величину подавления амплитуды колебаний зонда (параметр «Амплитуда останова») и оценить величину амплитуды колебаний зонда при отсутствии взаимодействия.

Результат измерения представляется на графике, состоящем из двух кривых (рис. 2.6). По оси абсцисс на графике отложены величины перемещения зонда в направлении Z. Нулевое значение абсцисс соответствует начальному положению зонда (расстояние между зондом и образцом в обратной связи).

Отрицательные значения по оси абсцисс на графике окна «Спектроскопия» соответствуют изменениям расстояния зонд-образец при отдалении зонда от образца, а положительные – изменениям расстояния зонд-образец при приближении зонда к образцу.

Точка А соответствует появлению взаимодействия между зондом и образцом в результате их сближения. Начиная с этой точки, при дальнейшем сближении

амплитуда колебаний зонда уменьшается до полного затухания колебания (точка В). Участок кривой правее точки В соответствует колебаниям пьезодатчика, при которых зонд находится в полном механическом контакте с поверхностью образца. Положение точки В определяется наклоном кривой.

Проекция на ось абсцисс расстояния от точки А до точки В показывает величину зазора между зондом и образцом при захваченном взаимодействии. Проекция всего наклонного участка кривой на ось абсцисс показывает величину колебаний при отсутствии взаимодействия между зондом и образцом в нанометрах.



Рис. 2.6. Осциллограмма окна режима «Спектроскопия»: 1 – кривая, полученная при приближении зонда к образцу; 2 – кривая, полученная при отдалении зонда от образца

## 2. Порядок выполнения работы

1. Определение частоты механического резонанса датчика силового взаимодействия.

1.1. Установите на держатель образца исследуемый образец.

1.2. Установите зондовый датчик в гнездо измерительной головки прибора. Лишь слегка затяните прижимающий винт.

1.3. Запустите управляющую программу прибора. Выберите режим атомно-силового микроскопа (АСМ).

1.4. Нажмите на панели инструментов кнопку «Резонанс» . Установите флажок «Настройка». Нажмите кнопку «Старт», получите график зависимости амплитуды колебаний зонда от частоты (АЧХ зондового датчика). Убедитесь, что маркер (вертикальная красная линия) находится на максимальном пике графика. Величина частоты при этом выводится в поле «Частота», а соответствующая ей амплитуда колебаний – справа от частоты.

Регулируйте параметры «Амплитуда колебаний» и «Усиление амплитуды» таким образом, чтобы на кривой наблюдался один выраженный симметричный максимум. Рекомендуется устанавливать величину амплитуды, задаваемой генератором, минимальной (вплоть до нуля) и не более 50 мВ. При недостаточной величине амплитуды ответных колебаний зонда ( $\leq 1\text{В}$ ) рекомендуется увеличить коэффициент «Усиление амплитуды».

Если на графике есть несколько пиков, попытайтесь уменьшить амплитуду дополнительных пиков, подбирая степень прижатия датчика винтом фиксации.

Сохраните полученную амплитудно-частотную характеристику.

1.5. Произведите тонкую настройку резонансной частоты, для этого установите флажок «точно» и нажмите кнопку «Старт» для уточнения значения частоты резонанса. Сохраните полученную амплитудно-частотную характеристику, щелкнув на кнопке «Сохранить кривую».

2. Определение добротности колебательной системы с пьезорезонансным датчиком.

2.1. Из амплитудно-частотной характеристики, измеренной в режиме «точно», определите значение частоты ( $f_{рез}$ ) и амплитуды ( $A_{max}$ ) в максимуме резонансного пика.

2.2. С помощью мыши установите красный маркер в такое положение, при котором значение параметров «Амплитуда» равно половине максимального значения амплитуды ( $A_{max}/2$ ) в резонансе справа и слева от резонансного пика на графике (текущие значения частоты и амплитуды индицируются под графиком автоматически). Запишите измеренные значения частоты справа ( $f_1$ ) и слева ( $f_2$ ).

2.3. Вычислите ширину пика на половине высоты ( $f_1 - f_2$ ) и величину добротности  $Q = f_{рез} / (f_1 - f_2)$ .

3. Определение зависимости величины силового взаимодействия (амплитуды колебаний зонда) от расстояния зонд-образец.

3.1. Установите рабочую частоту зондового датчика в резонансное положение.

3.2. Осуществите захват взаимодействия при значениях: амплитуда останова=0.3, усиление ОС=3.

3.3. Запомните величину  $Z$  на индикаторе «Сканер». Для надежности захвата силового взаимодействия его величина обычно выбирается больше, чем требуется в процессе сканирования. Для перехода к рабочему значению амплитуды колебаний зонда уменьшите величину параметра «Амплитуда останова» до значения приблизительно 0.2 – 0.1.

3.4. Выполните режим спектроскопии в текущей точке.

3.4.1. Выполнить сканирование в режиме получения рельефа поверхности.

3.4.2. Перейти на вкладку «Спектроскопия», нажав соответствующую кнопку в верхней части окна программы.



3.4.3. Нажать кнопку . С помощью основной кнопки мыши указать одну или несколько точек проведения спектроскопии на предварительно полученном

сканированном изображении поверхности либо на максимально доступной области. При выборе нескольких точек спектроскопии каждая последующая точка задается щелчком мыши с нажатием клавишей <Ctrl>. Удаление выбранных точек осуществляется нажатием клавиши <Delete>.



3.4.4. Открыть панель настройки параметров спектроскопии кнопкой  в правом верхнем углу окна программы.

3.4.5. Установить параметры спектроскопии («Режим», «Граница», «Число точек», «Задержка»).

3.4.6. Запустить процесс спектроскопии кнопкой «Пуск» главного окна программы.

3.5. Оцените амплитуду колебаний зонда в свободном состоянии (вдали от поверхности) и расстояние зонд-образец при захваченном взаимодействии. Найдите среднее значение колебаний зонда с учетом гистерезиса по графикам прямого и обратного движения сканера.

3.6. Выберите оптимальную для данного измерения величину подавления амплитуды колебаний зонда (например, «Амплитуда останова»). Зеленый курсор рекомендуется поставить на наклонный участок кривой ближе к горизонтальному участку, где взаимодействие слабее, а крутизна кривой больше и, как следствие, выше разрешение по оси  $z$ .

### 3. Содержание отчета

1. Амплитудно-частотная характеристика датчика силового взаимодействия.
2. Вычисление добротности колебательной системы.
3. Зависимость амплитуды колебаний зонда от расстояния зонд-образец.
4. Вычисление среднего значения колебания зонда.

### 4. Контрольные вопросы

1. Назовите основные режимы работы АСМ, их назначение, преимущества и недостатки.
2. Объясните принцип неконтактного режима работы АСМ.
3. Что представляет собой режим измерения фазового контраста при работе в неконтактном режиме АСМ?
4. Дайте определение резонанса и добротности.

## Лабораторная работа № 3 ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА МЕТОДОМ СКАНИРУЮЩЕЙ ТУННЕЛЬНОЙ МИКРОСКОПИИ

### Цель работы

Изучение основ физики туннельного эффекта и принципов работы сканирующего туннельного микроскопа, работы датчика туннельного тока в приборе NanoEducator и получение топологии поверхности исследуемого образца в режиме постоянного туннельного тока.

### 1. Краткие теоретические сведения

Туннельный эффект является принципиально квантово-механическим эффектом, не имеющим аналога в классической физике, и потому представляет огромный интерес для исследователей. Он основан на корпускулярно-волновом дуализме – двойственной природе элементарных частиц. Сущность туннельного эффекта заключается в преодолении микрочастицей потенциального барьера в случае, когда ее полная энергия меньше высоты барьера (рис. 3.1). Это явление чисто квантовое, ведь классическая частица не может находиться внутри потенциального барьера высоты  $V$ , если ее энергия  $E < V$ , так как кинетическая энергия частицы становится при этом отрицательной, а ее импульс – мнимой величиной.

$$\frac{p^2}{2m} = E - V \quad (3.1)$$



Рис. 3.1. Условная схема туннельного перехода

Однако для микрочастицы этот вывод несправедлив: вследствие соотношения неопределенностей фиксация частицы внутри барьера делает неопределенным ее импульс  $\Delta p$ . Поскольку потенциальная энергия частицы однозначно определяется ее координатой, кинетическая энергия – импульсом, а в силу соотношения неопределенностей одновременно и точно координату и импульс частицы определить невозможно, то разделение энергии на кинетическую и потенциальную в квантовой физике бессмысленно. Соответственно появляется вероятность прохождения частицы сквозь потенциальный барьер.

Туннелирование является следствием того, что электрону присущи как корпускулярные, так и волновые свойства. Будучи одновременно и частицей, и волной, он проходит сквозь эту преграду подобно тому, как рентгеновские волны свободно проходят сквозь материальные объекты.

Чем «тоньше» барьер геометрически и чем меньше разность между высотой барьера  $V$  и  $E$  квантовой частицы, тем больше шансов у электрона пройти этот барьер. В соответствии с гипотезой де Бройля для электрона, имеющего скорость 106 м/с (такую скорость он приобретет в вакууме за счет разности потенциалов в 3 В), длина волны  $\lambda$  составляет несколько межатомных расстояний. Если ширина барьера  $d$  меньше или равна  $\lambda$ , то случай перехода частицы через барьер становится возможным.

Основной вклад в туннельный ток вносят электроны, имеющие наибольшую энергию, то есть около границы раздела металл – вакуум электроны проводимости оказываются вблизи края потенциальной ямы, который служит для них потенциальным барьером, высота которого определяется работой выхода  $\phi$ .

При сближении двух металлов на расстояние, меньшее расстояния, на котором волновые функции покинувших потенциальные ямы электронов затухают, возникает туннельный контакт металл – вакуум – металл (рис. 3.2). В такой системе при наличии внешнего напряжения между двумя металлами возможно протекание туннельного тока. Если напряжение смещения невелико ( $eV \ll \phi$ ), то величина туннельного тока  $I_T$  пропорциональна приложенному напряжению:

$$I_T = AVe^{-B\sqrt{\phi d}}, \quad (3.2)$$

где  $d$  – расстояние между двумя металлами,  $A$  и  $B$  – константы. Важным выводом из этого соотношения является экспоненциальный характер зависимости величины туннельного тока от ширины туннельного барьера  $d$ . С помощью зависимости (3.2) можно получить, что увеличение ширины туннельного барьера на  $10^{10}$  м приводит к уменьшению величины туннельного тока на порядок.

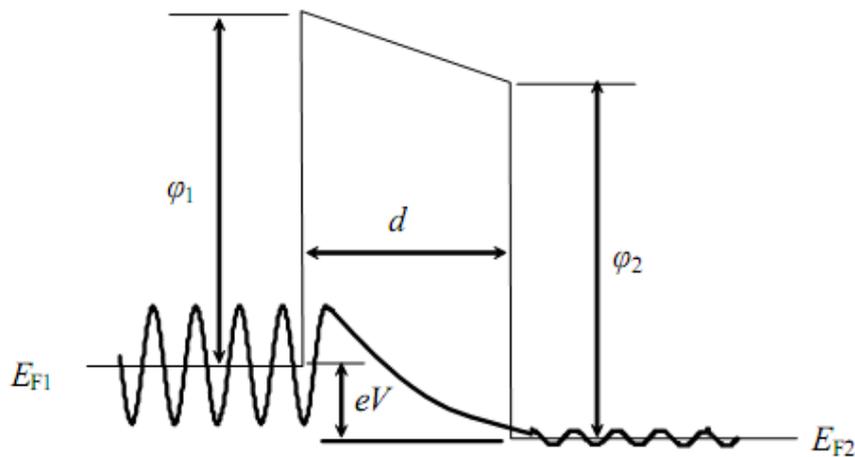


Рис. 3.2. Зонная диаграмма туннельного контакта двух проводников и огибающие волновые функции электронов в металле и в барьере в приближении эффективной массы

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) – система образец + игла, к которой приложена разность потенциалов (рис. 3.3). Электроны из образца туннелируют на иглу, создавая таким образом туннельный ток, который измеряется

туннельным сенсором 5. Величина этого тока экспоненциально зависит от расстояния образец-игла. Типичные значения тока составляют  $1-10^4$  пА при расстояниях около  $10^{-10}$  м.

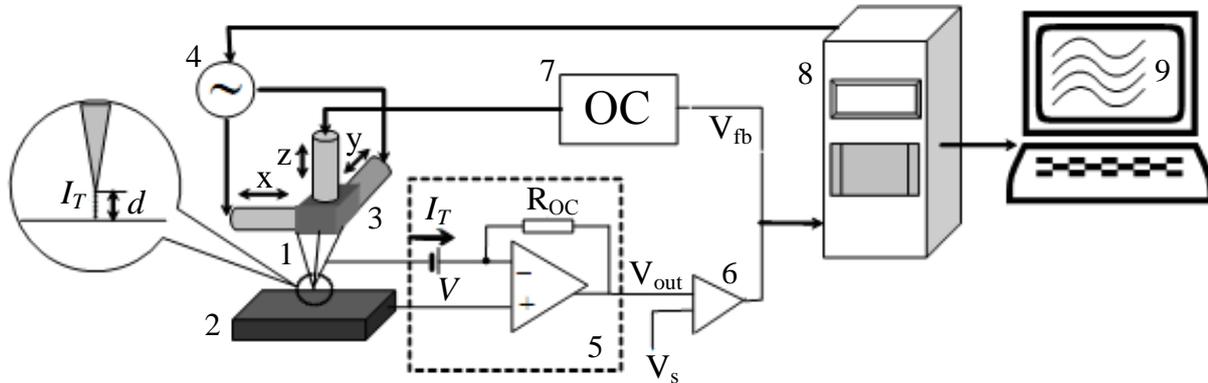


Рис. 3.3. Схема сканирующего туннельного микроскопа: 1 – зонд; 2 – образец; 3 – пьезоэлектрические двигатели  $x$ ,  $y$ ,  $z$ ; 4 – генератор развертки  $x$ ,  $y$ ; 5 – туннельный сенсор; 6 – компаратор; 7 – электронная цепь обратной связи; 8 – компьютер; 9 – изображение  $z(x,y)$

В процессе сканирования игла движется вдоль образца, туннельный ток поддерживается стабильным за счёт действия обратной связи и удлинение  $Z$ -сканера меняется в зависимости от топографии поверхности. Такие изменения фиксируются, и на их основе строится топологическая картина.

В качестве зонда в СТМ используется остро заточенная металлическая игла. Предельное пространственное разрешение СТМ определяется в основном радиусом закругления острия (которое может достигать нескольких ангстрем) и его механической жесткостью. Если механическая жесткость в продольном и поперечном направлениях оказывается достаточно малой, механические, тепловые и квантовые флуктуации иглы могут существенно ухудшить разрешение СТМ. В качестве материала для зонда обычно используются металлы с высокой твердостью и химической стойкостью: вольфрам или платина.

Ограничения на использование метода накладываются, во-первых, условием проводимости образца (поверхностное сопротивление должно быть не больше  $20$  МОм/см<sup>2</sup>), во-вторых, «глубина канавки должна быть меньше её ширины», потому что в противном случае может наблюдаться туннелирование с боковых поверхностей.

### 1.1. Метод постоянного тока

Метод постоянного тока (МПТ) предполагает поддержание в процессе сканирования постоянной величины туннельного тока с помощью системы обратной связи. При этом вертикальное смещение сканера (сигнал обратной связи) отражает рельеф поверхности (рис. 3.4).

Скорость сканирования в МПТ ограничивается использованием системы обратной связи. При этом не могут быть достигнуты большие скорости сканирования, однако МПТ позволяет исследовать образцы с развитым рельефом.

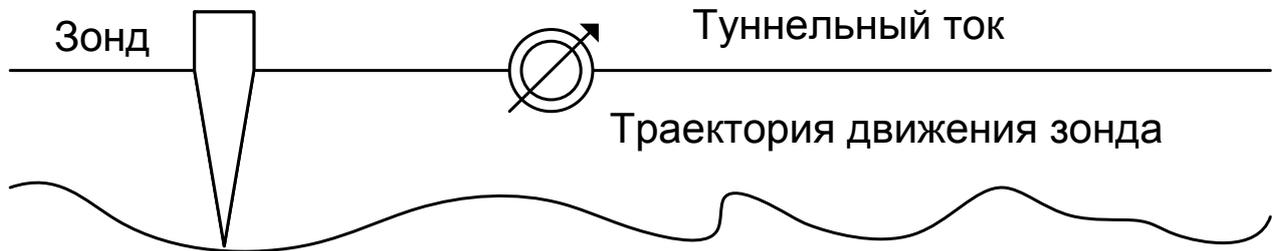


Рис. 3.4. Режим постоянного тока

Характерные величины туннельных токов, регистрируемых в процессе измерений, являются достаточно малыми – вплоть до 0.03 нА (а со специальными измерительными СТМ-головками – до 0.01 нА), что позволяет также исследовать плохо проводящие поверхности, в частности биологические объекты.

Среди недостатков СТМ можно упомянуть сложность интерпретации результатов измерений некоторых поверхностей, поскольку СТМ-изображение определяется не только рельефом поверхности, но также и плотностью состояний, величиной и знаком напряжения смещения, величиной тока.

### 1.2. Метод постоянной высоты

При использовании метода постоянной высоты (МПВ) сканер СТМ перемещает зонд только в плоскости, так что изменения тока между острием зонда и поверхностью образца отражают рельеф поверхности. Поскольку по этому методу нет необходимости отслеживать зондом расстояние до поверхности образца, скорости сканирования могут быть более высокими. МПВ может быть применен, таким образом, к образцам с очень ровной поверхностью, поскольку неоднородности поверхности выше  $(5-10) \cdot 10^{-10}$  м будут приводить к разрушению кончика зонда.

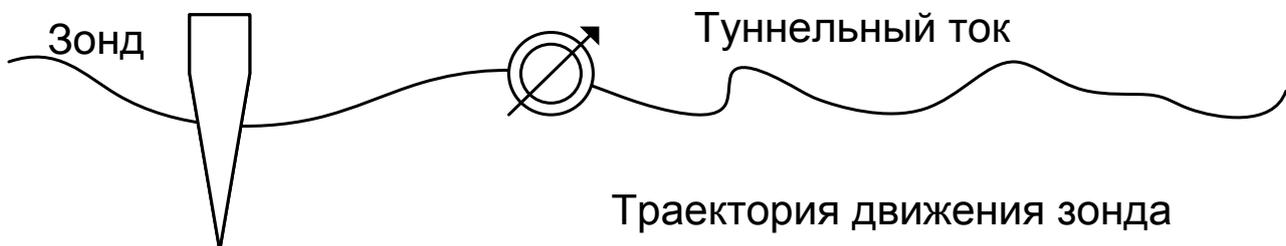


Рис. 3.5. Режим постоянной высоты

### 1.3. Факторы, влияющие на качество изображения СТМ

Сканирующий зондовый микроскоп дает изображение поверхности, увеличенное во всех трех измерениях: x, y и z, максимальная разрешающая способность для каждой из осей определяется различными факторами.

Разрешение по оси  $z$  ограничивается, во-первых, чувствительностью сенсора, и, во-вторых, амплитудой вибраций зонда относительно поверхности образца. Конструкция микроскопа должна обеспечивать уменьшение амплитуды этих вибраций до долей ангстрема.

Максимальное разрешение в плоскости  $x$ - $y$  определяется, прежде всего, точностью позиционирования зонда. Важное значение имеет геометрия острия зонда. При сканировании предельно плоских (атомно-плоских) поверхностей разрешение лимитируется диаметром атома на самом конце иглы (так называемый эффект последнего атома, (рис. 3.6)). Таким образом, для оценки предельного разрешения можно принять, что туннелирование (до 90 % тока) происходит с единственного атома. Макроскопическая геометрия зонда не является определяющей для атомного разрешения.

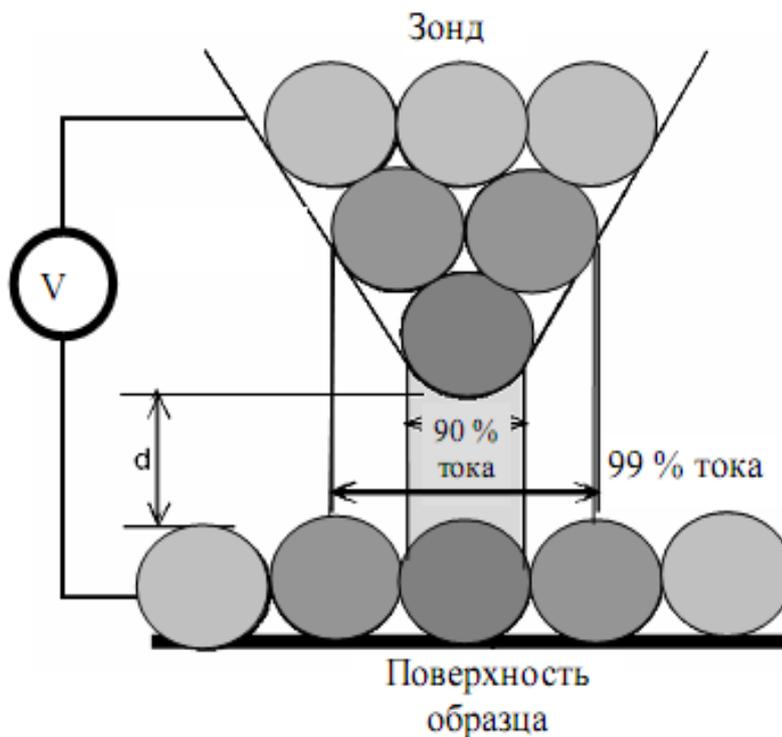


Рис. 3.6. Принцип регистрации туннельного тока

В приборе NanoEducator применяется универсальный датчик туннельного тока и силового взаимодействия. Зонд датчика имеет электрический контакт с внутренним электродом трубки. При измерении туннельного тока пьезотрубка играет роль жесткой пассивной балки. Электрическое смещение прикладывается к образцу относительно заземленного зонда (рис. 3.7). Преобразователь, изображенный на рисунке, вырабатывает электрическое напряжение, обуславливающее протекание туннельного тока  $I$ , и выдает напряжение  $U$ , пропорциональное этому току, в электронный блок.

## 2. Порядок выполнения работы

1. Предварительно выберите режим «Комбо».
2. Установите на держатель образца исследуемый образец.
3. Установите зондовый датчик в гнездо измерительной головки прибора NanoEducator.

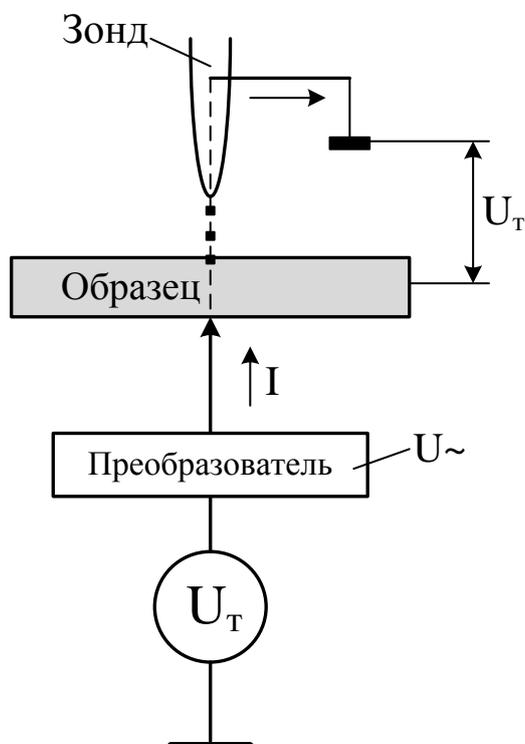


Рис. 3.7. Схематическое изображение взаимодействия кончика иглы с образцом

4. Запустите управляющую программу прибора NanoEducator. Выберите режим атомно-силового микроскопа (АСМ). Захват взаимодействия на приборе NanoEducator, работающем на воздухе, лучше осуществлять в режиме силового взаимодействия. Эта предосторожность необходима для того, чтобы не повредить зонд во время захвата, т.к. исследуемые в СТМ образцы на воздухе могут быть частично окислены.

5. Определите амплитудно-частотную характеристику зондового датчика и установите рабочую частоту.

6. Осуществите сближение зонда с образцом с помощью винта ручного подвода до расстояния примерно 1 мм.

7. Осуществите захват взаимодействия в режиме АСМ.

8. Перейдите в режим туннельного микроскопа, выбрав СТМ в окне «Подготовка к сканированию» программы NanoEducator.

9. Выполните захват взаимодействия в режиме туннельной микроскопии (если при переключении между режимами взаимодействие было потеряно) при следующих параметрах СТМ (задаются на вкладке «Подвод» окна «Свойства»): рабочая точка 0.5 нА, задержка интегратора 1000 мс, усиление ОС 3, напряжение -2 В.

10. Откройте окно сканирования. Задайте необходимые параметры сканирования, исходя из предварительных сведений об исследуемом образце. Начните измерение топографии поверхности в режиме постоянного туннельного тока.

11. В случае отсутствия корректного изображения остановите сканирование и попробуйте стабилизировать контакт путем изменения значения параметров: усиление ОС 1 – 3; рабочая точка 0.2 – 1 нА; напряжение  $-2 \div -1$  В. Если величина  $Z$  на индикаторе «Сканер» начнет уменьшаться, увеличьте один из параметров «Усиление ОС» или «Рабочая точка», пока величина  $Z$  не восстановится. Осуществите измерение рельефа поверхности в режиме постоянного туннельного тока. Сохраните полученные результаты.

12. После окончания эксперимента закройте окно сканирования и осуществите отвод зонда от образца.

13. Выведите зависимость удлинения  $Z$ -сканера от координаты  $X$ .

### **3. Содержание отчета**

1. Амплитудно-частотная характеристика зонда в режиме АСМ.
2. Изображение топологии исследуемого образца в режиме СТМ.
3. 3D-изображение топологии исследуемого образца.
4. Диапазон измеренных значений туннельного тока.
5. Выводы по полученным результатам.

### **4. Контрольные вопросы**

1. Назовите основные компоненты СТМ и их назначение. Объясните принцип работы СТМ на примере туннельного контакта двух проводников.
2. Поясните устройство и принцип действия туннельного сенсора.
3. Опишите основные параметры, которые вы будете определять в работе.
4. Что такое режим постоянного тока и постоянной высоты?
5. Назовите факторы, определяющие качество изображения в СТМ. Какие требования предъявляются к СТМ-зонду?

## Лабораторная работа № 4

### ПОЛУЧЕНИЕ ИЗОБРАЖЕНИЯ ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА НА СКАНИРУЮЩЕМ ТУННЕЛЬНОМ МИКРОСКОПЕ NTEGRA

#### Цель работы

Изучение структуры и принципа работы зондовой нанолaborатории (ЗНЛ) NTEGRA и получение изображения поверхности высокоориентированного пиролитического графита (НОРГ) в режиме постоянного туннельного тока.

#### 1. Функциональные характеристики ЗНЛ NTEGRA

ЗНЛ NTEGRA – универсальный прибор, предназначенный для измерения поверхностных характеристик различных объектов с разрешением вплоть до атомного уровня.

Прибор состоит из следующих основных систем и блоков (рис. 4.1): базовый блок; набор измерительных головок (в данной лабораторной работе используется СТМ-головка); сменные элементы: сканеры, держатели образца, температурные столики и т.п.; защитный колпак; система видеонаблюдения; контроллер управления; термоконтроллер; компьютер.

NTEGRA может быть сконфигурирована для решения различных задач благодаря возможности установки на базовый блок различных типов сменных оснований, измерительных головок, сканеров, жидкостных ячеек и т.п.



Рис. 4.1. Зондовая нанолaborатория NTEGRA: 1 – базовый блок; 2 – измерительная головка; 3 – система виброизоляции; 4 – система видеонаблюдения; 5 – система управления

В ЗНЛ NTEGRA реализованы несколько схем сканирования, так чтобы по совокупности характеристик исследование могло наиболее полно отвечать требованиям конкретных приложений. Наибольшую детализацию исследования поверхности можно получить с использованием режима сканирования образцом. Сканеры с малыми размерами поля сканирования имеют низкие шумы и очень малый шаг сканирования, который становится возможным благодаря 22-разрядному ЦАП в контроллере ЗНЛ. При этом удастся получать наиболее подробные изображения поверхности с визуализацией отдельных атомов.

### 1.1. Система управления ЗНЛ

Система управления ЗНЛ включает: ЗНЛ-контроллер; термоконтроллер; компьютер; интерфейсные платы. Система управления размещается в специальной стойке - в шкафу электроники (рис. 4.1).

### 1.2. Базовый блок

Общий вид базового блока представлен на рис. 4.2.

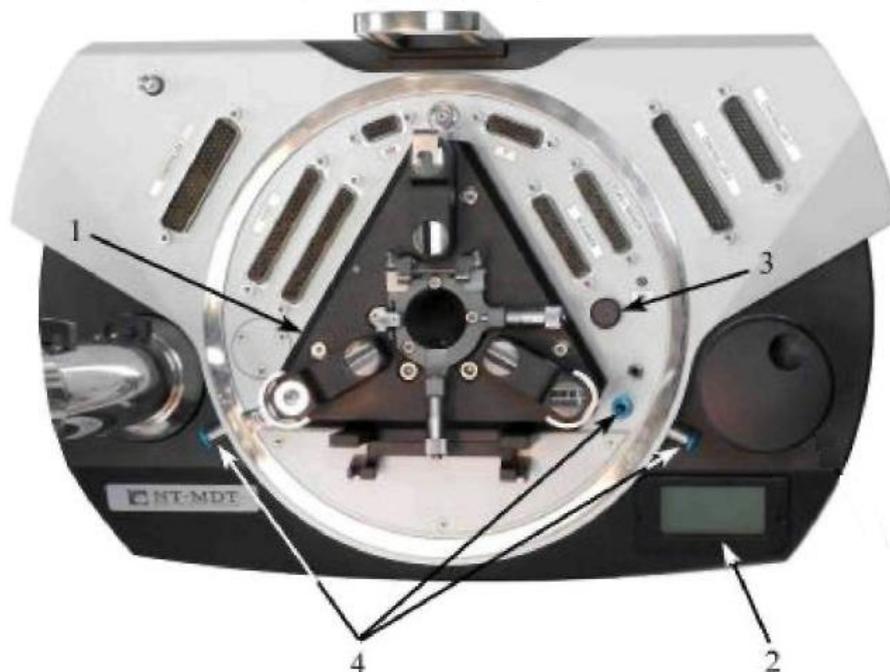


Рис. 4.2. Основные элементы базового блока: 1 - сменное основание; 2 - ЖК-дисплей; 3 - датчик температуры и влажности; 4 - штуцеры

В базовом блоке расположен механизм подвода, обеспечивающий подвод образца к зонду. На ЖК-дисплее 2 отображаются данные о температуре и влажности окружающей среды, измеряемые датчиком 3. Штуцеры 4 используются для подачи газа и откачки воздуха.

### 1.3. Измерительные головки

В NTEGRA используются несколько типов измерительных головок. Рассмотрим конструкцию СТМ-головки. Внешний вид СТМ-головки представлен на рис. 4.3.

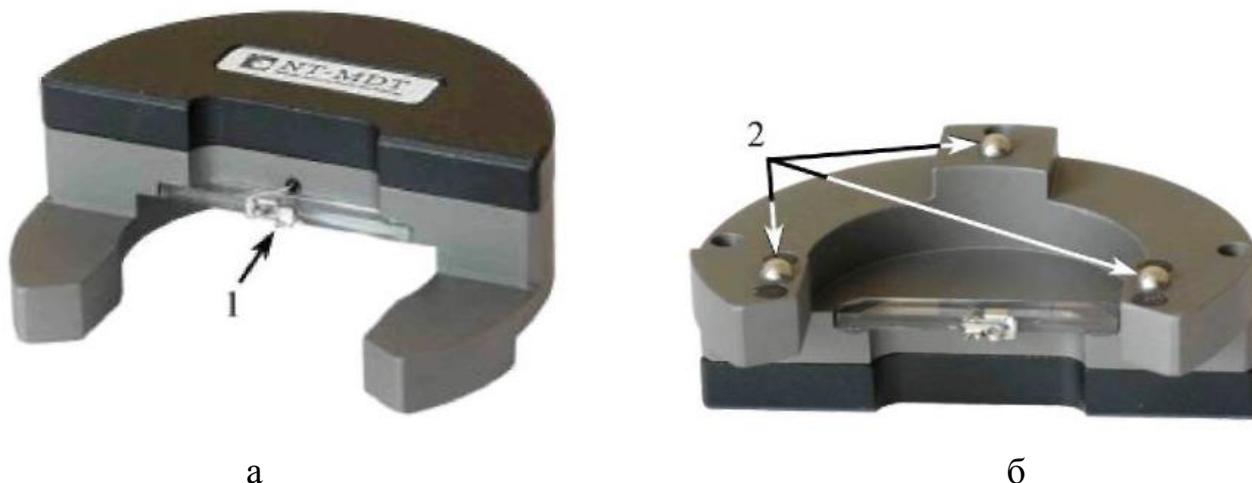


Рис. 4.3. СТМ-головка: 1 – держатель зондового датчика; 2 – опоры для установки на сменное основание; а – вид сверху; б – вид снизу

В качестве СТМ-зонда используется заостренная часть PtIr, PtRo или W проволоки длиной 8 – 10 мм и диаметром от 0.25 до 0.5 мм. Зонд устанавливается в V-образные направляющие и фиксируется прижимной пружиной (рис. 4.4).

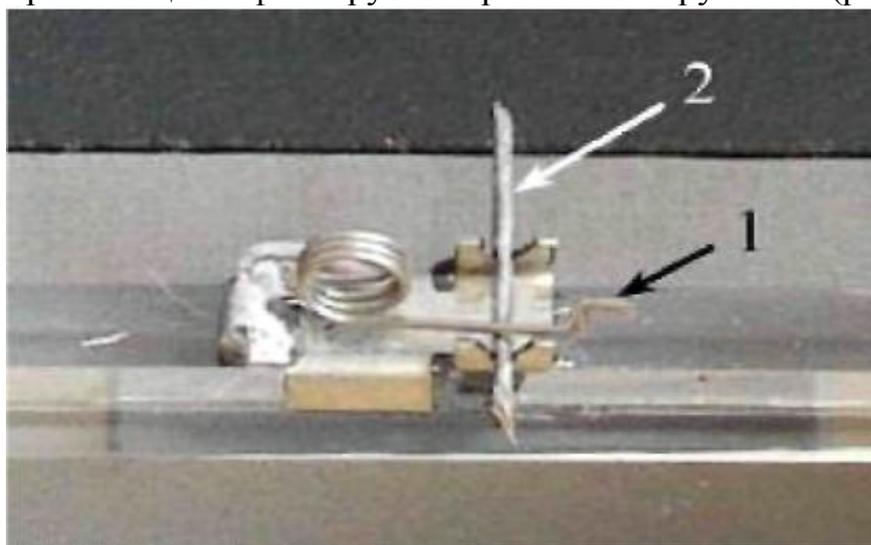


Рис. 4.4. Держатель зондового датчика: 1- прижимная пружина; 2 – зонд

#### 1.4. Сканер

Для проводимых измерений в NTEGRA используется сканер без датчиков (рис. 4.5). Сканер подключается к базовому блоку с помощью разъема SCANNER.

**ВНИМАНИЕ!** Не прилагайте к сканеру усилий, больших, чем это необходимо для установки подложки с образцом. Избегайте ударов по сканеру и его боковых смещений. Помните, что толщина стенок сканера составляет всего 0.5 мм. Не устанавливайте на сканер образцы весом более 100 грамм.

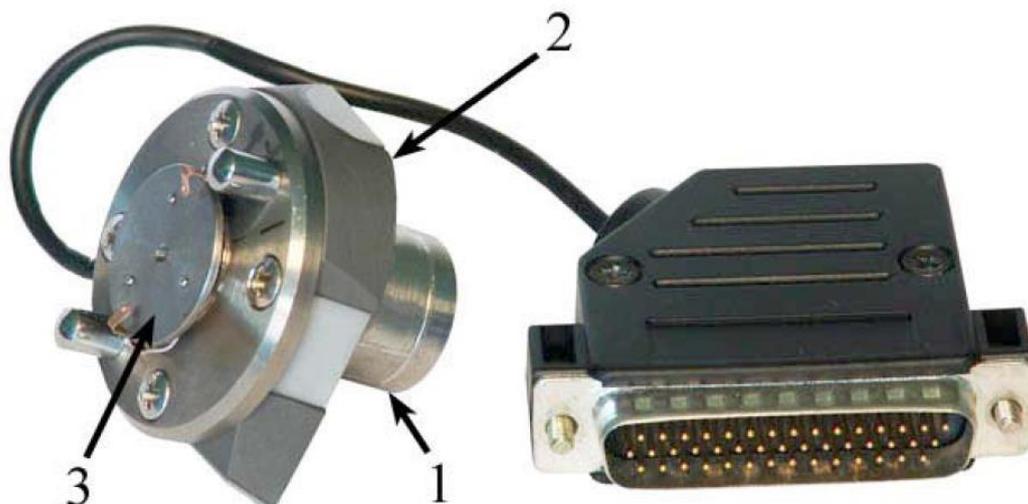


Рис. 4.5. Сканер без датчиков: 1 – защитный кожух трубки сканера; 2 – каретка; 3 – предметный столик

Основой сменного сканера является пьезокерамическая трубка, закрытая металлическим кожухом (рис. 4.6). Каретка 2 крепится к кожуху. Предметный столик закреплен на пьезотрубке.

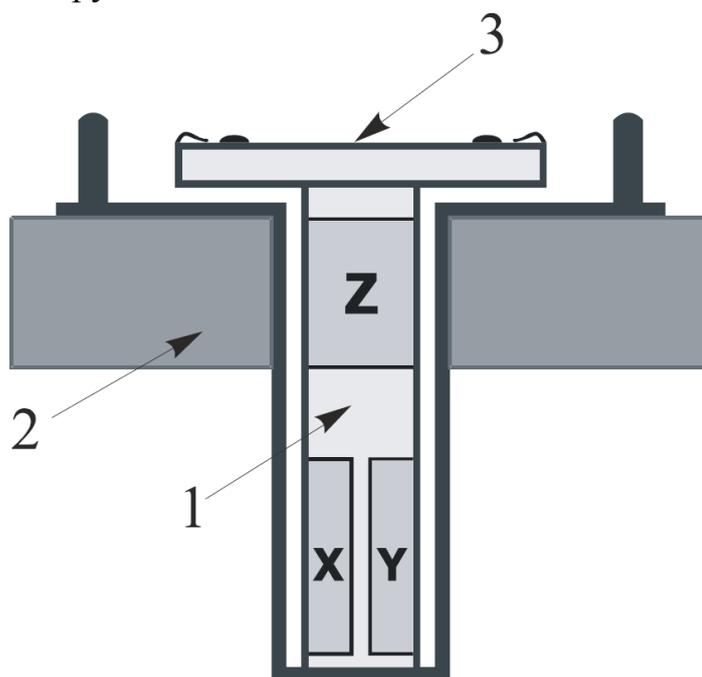


Рис. 4.6. Устройство сканера: 1 – пьезокерамическая трубка сканера; 2 – каретка; 3 – предметный столик

### 1.5. Защитный колпак

Защитный колпак (рис. 4.7) предназначен для защиты от электромагнитных полей, акустического шума, перепадов температуры. Кроме того, защитный колпак создает объем для надува газа либо откачки воздуха.

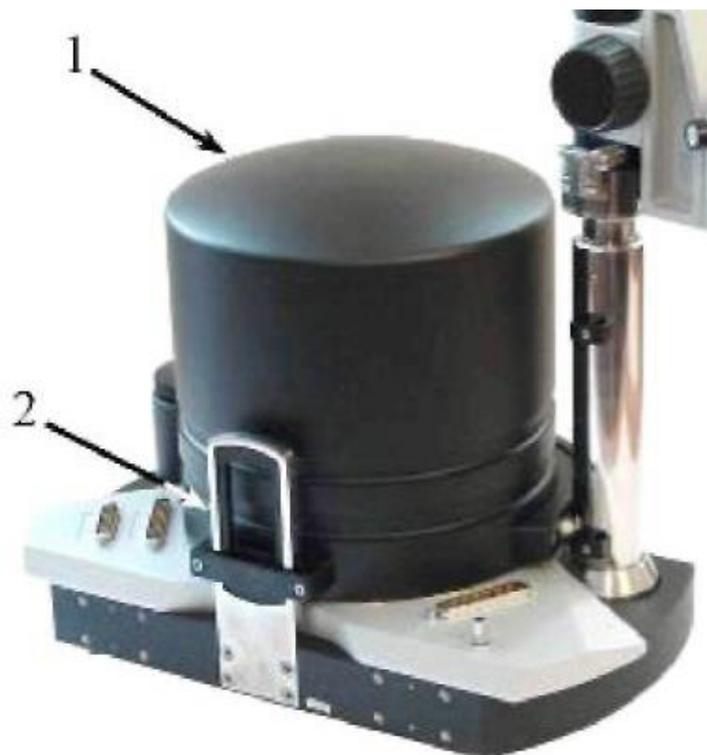


Рис. 4.7. Защитный колпак установлен на базовый блок: 1 - защитный колпак; 2 – рамка

ЗНЛ NTEGRA за счет использования различных типов измерительных головок (ИГ) даёт возможность проведения всесторонних СТМ-исследований образца, не снимая его с держателя. При этом весь спектр измерительных методик, которые реализуются выбранной ИГ, осуществляется путем программного конфигурирования.

Использование специальных методов в ЗНЛ NTEGRA дает возможность исследовать распределение по поверхности различных электрических характеристик: работы выхода, локальной плотности состояний электронов и т.д.

Методами туннельной сканирующей микроскопии являются:

*метод постоянного тока (Constant current mode)* – измерение рельефа поверхности при сканировании образца проводящим зондом, при этом система обратной связи поддерживает постоянной величину туннельного тока между зондом и поверхностью;

*метод постоянной высоты (Constant height mode)* – измерение рельефа поверхности при сканировании образца проводящим зондом, при этом система обратной связи разорвана, и z-координата сканера поддерживается постоянной.

## 2. Последовательность подготовки прибора к работе

Основные операции, которые нужно выполнить при подготовке прибора к работе.

### 2.1. Изготовление зонда

Изготовить СТМ зонд можно двумя способами:

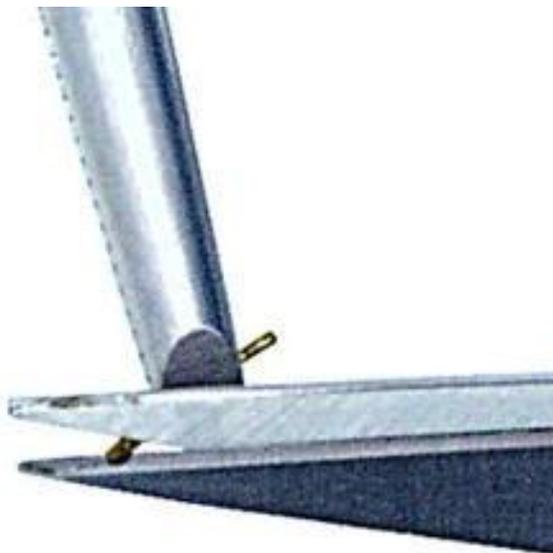
- путем обрезки кончика проволоки ножницами;

- с помощью электрохимического травления.

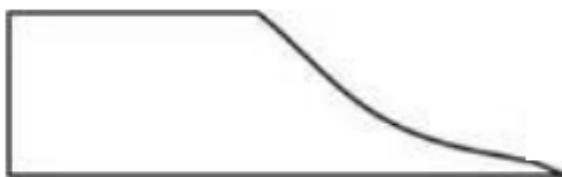
Самая простая методика приготовления СТМ-зонда заключается в обрезке кончика проволоки ножницами. Полученные таким образом зонды имеют радиус кривизны острия менее 10 нм.

Процедура формирования острия.

1. Зажмите проволоку широким пинцетом так, чтобы она выступала за край на 2-3 мм.



2. Надрежьте проволоку под углом 10-15 градусов как можно ближе к краю проволоки и одновременно тяните ножницы вдоль оси проволоки, чтобы «оторвать» отрезаемую часть. Это делается для того, чтобы избежать контакта режущих кромок ножниц и непосредственно острия зонда. Фактически эта методика заострения зонда скорее подразумевает разрывание проволоки в последний момент, чем обрезание ее. В этом случае получается острый скол на конце проволоки:



3. Проверьте форму полученного среза с помощью оптического микроскопа с 200-кратным увеличением (при возможности). Участок среза должен быть ярким и не иметь никаких следов сажи или пыли. Если необходимо, повторите процесс обрезки еще раз. Общая длина зонда не должна превышать 10 мм.

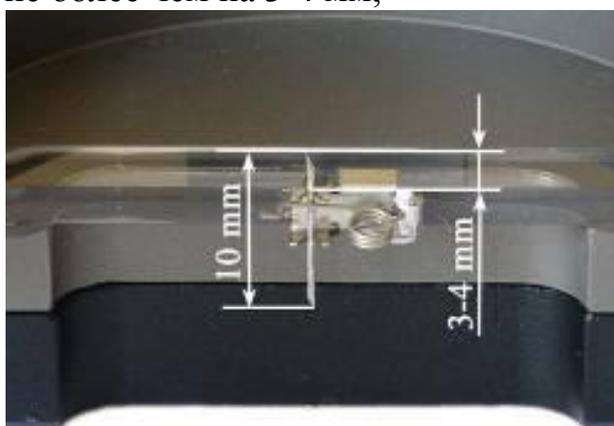
## 2.2. Установка зонда в держатель

Изготовленный зонд необходимо установить в держатель зонда. Для этого:

- 1) переверните СТМ-головку вверх опорами и поставьте на ровную поверхность;
- 2) возьмите в одну руку широкий пинцет, а в другую – узкий пинцет с зажатым в нём зондом;
- 3) отожмите прижимную пружину широким пинцетом;



4) вставьте зонд в держатель тупым концом так, чтобы острый конец выступал за край держателя не более чем на 3-4 мм;



5) зафиксируйте зонд в держателе, отпустив пружину. Зонд должен прочно фиксироваться в держателе.

Качество остроты зонда и прочность фиксации зонда в зажиме являются одними из главных факторов, определяющих качество получаемых в СТМ результатов.

### 2.3. Включение прибора

1. Запустите программу управления прибором. Запуск производится с помощью ярлыка программы, расположенного на рабочем столе. В результате на экране монитора появится окно программы.

2. Включите компьютер и запустите программу управления прибором.

3. Включите ЗНЛ-контроллер с помощью тумблера, расположенного на передней панели. Если включение прошло успешно, то на экране монитора в левом нижнем углу появится зеленая «галочка».

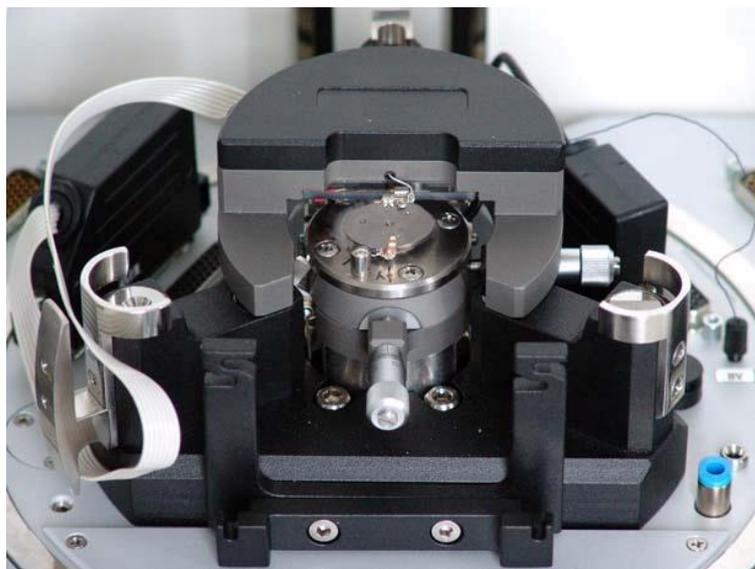
### 2.4. Центрирование сканера

Для уменьшения наклона при сканировании необходимо выставить сканер относительно измерительной головки таким образом, чтобы зонд находился на оси сканера. Для этого:

1) переместите сканер в крайнее нижнее положение. Для этого откройте окно **Approach** (закладка **Approach** на панели закладок основных операций) и нажмите кнопку **Fast (Backward)**:

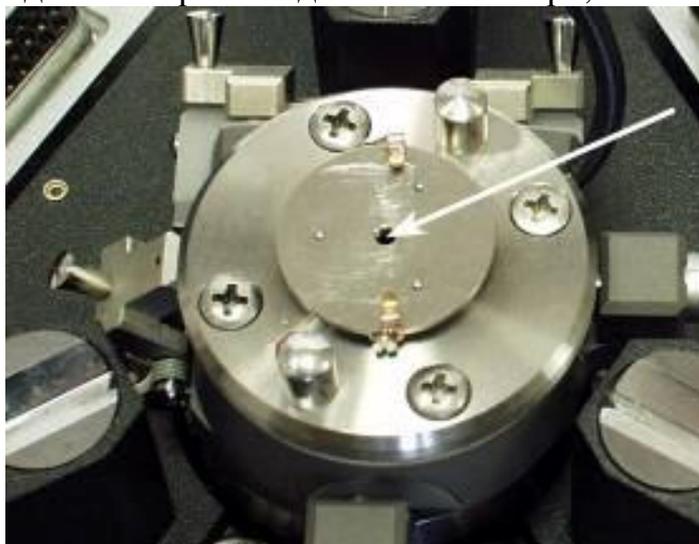


2) установите измерительную головку опорами в посадочные гнезда сменного основания:



3) наблюдая сбоку, установите расстояние между зондом и предметным столиком равным 2-3 мм, нажимая кнопку пошагового подвода **One Step (Forward)** на закладке **Approach**;

4) глядя на головку сверху, с помощью микрометрических винтов позиционера добейтесь совпадения острия зонда с осью сканера;

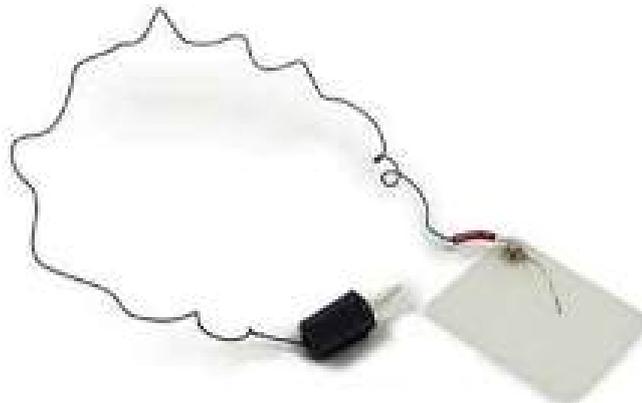


5) отведите сканер, вращая ручку подвода по часовой стрелке;

6) снимите измерительную головку со сменного основания.

## 2.5. Подготовка и установка образца

Для крепления образцов при СТМ-исследованиях используются специальные подложки, имеющие электрический контакт для подачи на образец постоянного напряжения:

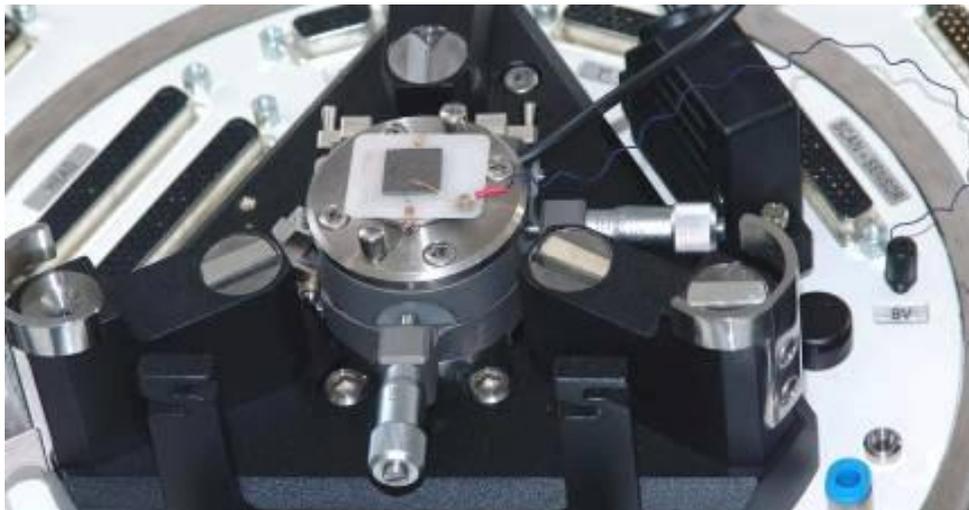


Процедура подготовки образца:

1. Возьмите чистую подложку. Отрежьте полоску двухстороннего скотча чуть шире, чем образец.
2. Наклейте скотч на подложку, разгладьте его поверхность обратной стороной пинцета, чтобы удалить воздушные пузырьки между подложкой и скотчем.
3. Положите образец на скотч и осторожно прижмите его пинцетом в нескольких местах (не касаясь предполагаемого места исследования).

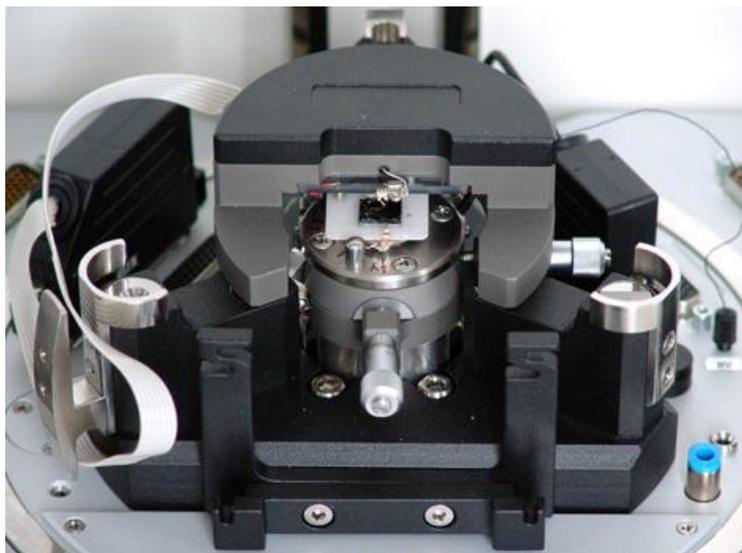


4. Пинцетом поверните контактную пружину для подачи туннельного напряжения и зафиксируйте её на краю образца так, чтобы центр образца оставался свободным.
5. Установите подложку с образцом на предметный столик, вдвигая сбоку под прижимные клипсы. Подложка вставляется таким образом, чтобы пружинный контакт располагался со стороны оператора. Убедитесь, что пружинный контакт для подачи туннельного напряжения не соприкасается с металлическими частями держателя зонда.
6. Вставьте вывод контакта для подачи напряжения в гнездо **VV** на базовом блоке. **Перед подсоединением или отсоединением разъемов выключите контроллер!** Отсоединение или подсоединение разъемов во время работы прибора может привести к повреждению электронной схемы.



## 2.6. Установка измерительной головки

1. Установите опоры измерительной головки в посадочные гнезда сменного основания.
2. Заправьте кабель измерительной головки в предназначенный для него держатель на базовом блоке.



## 3. Порядок выполнения работы

### 3.1. Предварительный подвод образца к зонду

1. Наблюдая сбоку, приблизьте образец к острию зонда на расстояние 2–3 мм, нажимая кнопку пошагового подвода **One Step (Forward)** на закладке **Approach**.
2. Глядя на головку сверху, поместите зонд над предполагаемой для исследования областью, вращая винты позиционера.
3. Затем, наблюдая сбоку, уменьшите расстояние между образцом и острием зонда до 0.5-1 мм.



### 3.2. Установка защитного колпака

1. Поверните штатив для видеомикроскопа по часовой стрелке до упора.
2. Возьмите защитный колпак левой рукой за ручку 1, а правой – за ручку 2:



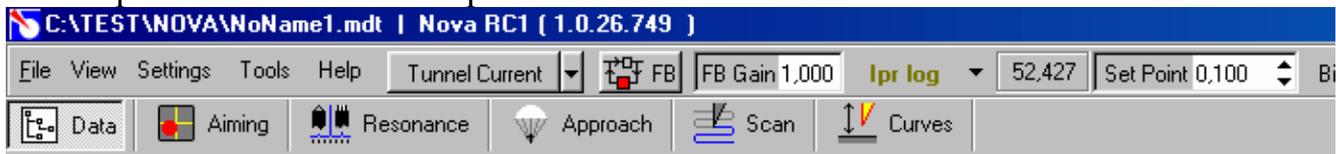
3. Поднесите колпак к штативу так, чтобы пластиковые вставки на ручке 1 колпака упирались в штатив, а прорезь в ручке 2 была расположена над рамкой базового блока.

4. Наденьте колпак так, чтобы рамка попала в прорезь. При этом пластиковые вставки должны скользить по штативу.



### 3.3. Конфигурирование прибора

Чтобы переключить прибор для работы методами туннельной микроскопии, щелкните на кнопке-переключателе выбора электронной конфигурации прибора и в открывшемся меню выберите **Tunnel Current**:



### 3.4. Подвод образца к зонду

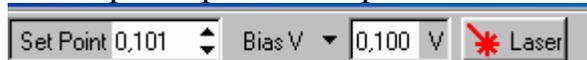
1. Откройте окно **Approach** (закладка **Approach** на панели закладок основных операций):



2. Проверьте состояние кнопки автоматической установки параметра **Set Point**. Кнопка **Auto SetPoint** должна быть во включенном состоянии:



3. Установите значение параметра **Bias V** равным 0.1 В.



4. Запустите процедуру подвода, щелкнув на кнопке **Landing**.

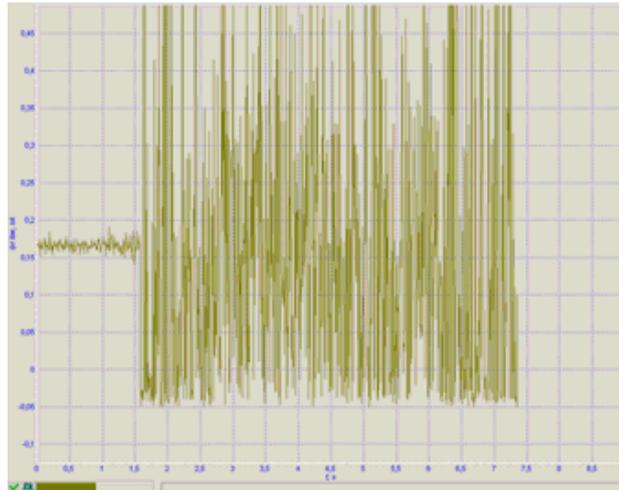
5. После появления сообщения об окончании подвода щёлкните на кнопке ОК и переходите к следующему шагу.

### 3.5. Установка рабочего уровня коэффициента усиления обратной связи

1. Дважды щелкните левой клавишей мыши в поле ввода параметра **FB Gain** на панели основных операций. С помощью появившегося бегунка увеличивайте величину **FB Gain**, следя за уровнем сигнала **IprLow** с помощью программного осциллографа:



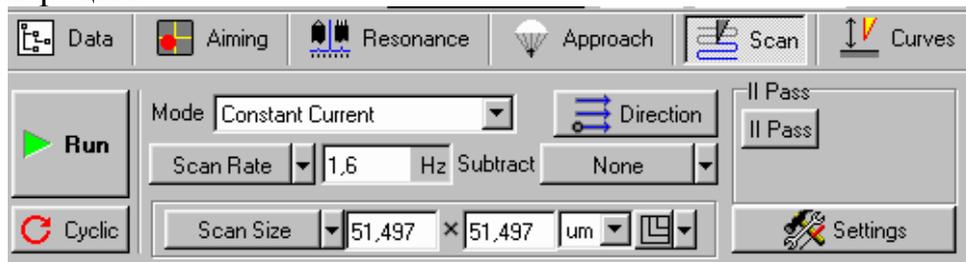
2. Определите значение коэффициента **FB Gain**, при котором начинается генерация. Начало генерации регистрируется по резкому увеличению переменной составляющей сигнала **IprLow**:



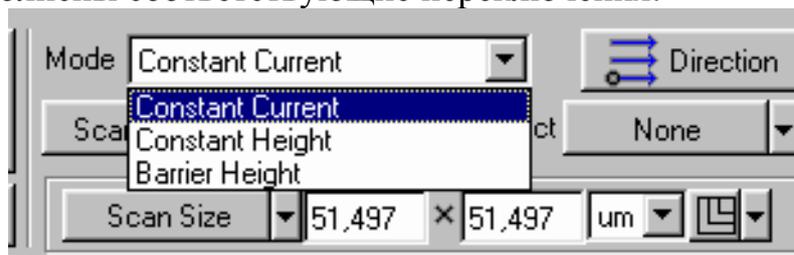
3. Уменьшая параметр **FB Gain**, установите в качестве рабочей величины значение, равное 0.6-0.7 от значения **FB Gain**, при котором начинается генерация сигнала **IprLow**.

### 3.6. Установка параметров сканирования

1. Перейдите в окно **SCAN**, щелкнув на закладке **Scan** на панели закладок основных операций:

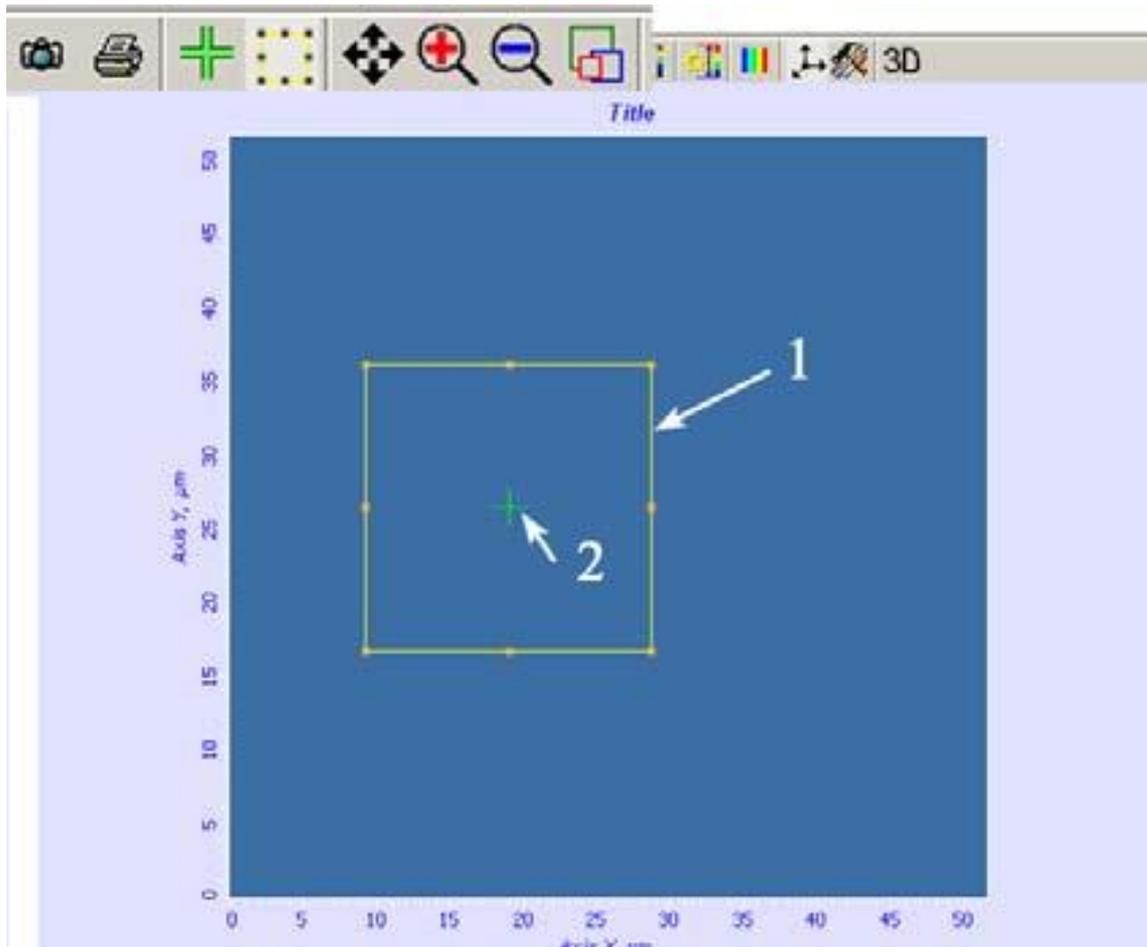


2. Установите СЗМ-метод. Для этого щелкните на окне-индикаторе **Mode** и в открывшемся меню выберите **Constant Current**. При этом в приборе автоматически будут выполнены соответствующие переключения:

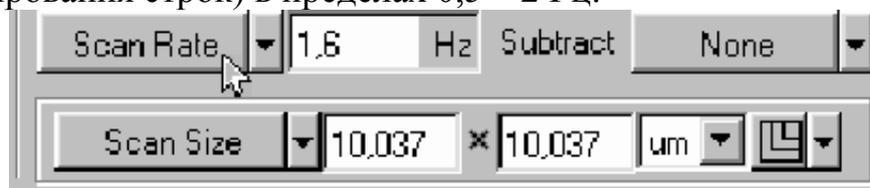


3. Для задания области сканирования выполните следующие действия.

- На панели инструментов окна просмотра сканированных изображений щелкните на кнопке  изменения размера и положения области сканирования.
  - С помощью мыши измените размер и положение области сканирования.
  - Задайте параметры **Scan Size** (размер области), **Point Number** (число точек) и **Step Size** (шаг сканирования) с помощью соответствующей кнопки-переключателя и расположенных рядом полей ввода.



4. Установите скорость сканирования с помощью переключателя **Scan Rate** (частота сканирования строк) в пределах 0,5 – 2 Гц:



### 3.7. Сканирование

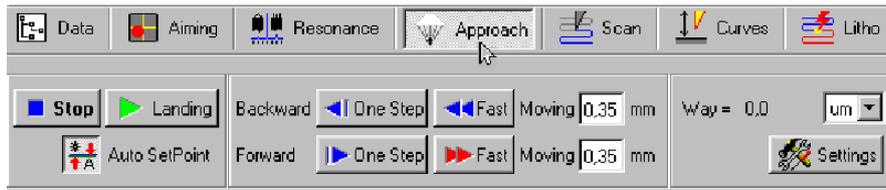
После того как выполнены подготовительные операции, произведен подвод зонда к образцу, выбрана рабочая точка, установлены параметры сканирования, можно начинать сканирование поверхности образца.

Для запуска сканирования щелкните на кнопке **Run**, расположенной слева на панели управления окна **SCAN**.

Для сохранения результатов измерений выполните следующие действия. В главном меню выберите **File > Save As...** В открывшемся диалоговом окне выберите папку, в которой будут храниться полученные данные. Введите название файла и сохраните его с расширением \*.mdt.

Для завершения работы необходимо отвести образец от зонда примерно на 2-3 мм. Чтобы сделать это, необходимо следующее.

1. Открыть окно **Approach** посредством нажатия на кнопку **Approach** в строке операций:



2. Щелкнуть дважды по окну-индикатору параметра **Moving** для **Backward**.
3. С помощью окна-регулятора установить значение, равное 2-3 мм.
4. Нажать на кнопку **Fast** для **Backward**.
5. Отключить обратную связь посредством кнопки **FB**, установив ее в отжатое положение.



#### 4. Содержание отчета

1. Изображение скана исследуемого образца.
2. Диапазон измеренных значений туннельного тока.
3. Выводы по полученным результатам.

#### 5. Контрольные вопросы

1. Назовите основные компоненты ЗНЛ NTEGRA и их назначение.
2. Объясните назначение и принцип действия обратной связи.
3. Назовите и объясните методы сканирующей туннельной микроскопии.

**Лабораторная работа № 5**  
**РАБОТА СКАНИРУЮЩЕГО ЗОНДОВОГО МИКРОСКОПА**  
**NANOEDUCATOR В РЕЖИМЕ ИЗМЕРЕНИЯ**  
**ВОЛЬТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК**

**Цель работы**

Изучение особенностей работы сканирующей туннельной спектроскопии в режиме измерения вольт-амперных характеристик (ВАХ) исследуемого образца.

**1. Краткие теоретические сведения**

Сканирующий туннельный микроскоп позволяет получать вольт-амперные характеристики (ВАХ) туннельного контакта зонд-поверхность в любой точке поверхности и исследовать локальные электрические свойства образца. Для характерных напряжений на туннельном контакте порядка 0.1 - 1 В и туннельных токов на уровне 0.1 - 1 нА сопротивление туннельного контакта  $R_t$  по порядку величин составляет  $10^8 - 10^{10}$  Ом. Как правило, сопротивление исследуемых в СТМ образцов  $R_s$  существенно меньше  $R_t$ , и характер ВАХ определяется в основном свойствами небольшой области образца вблизи туннельного контакта (рис. 5.1).

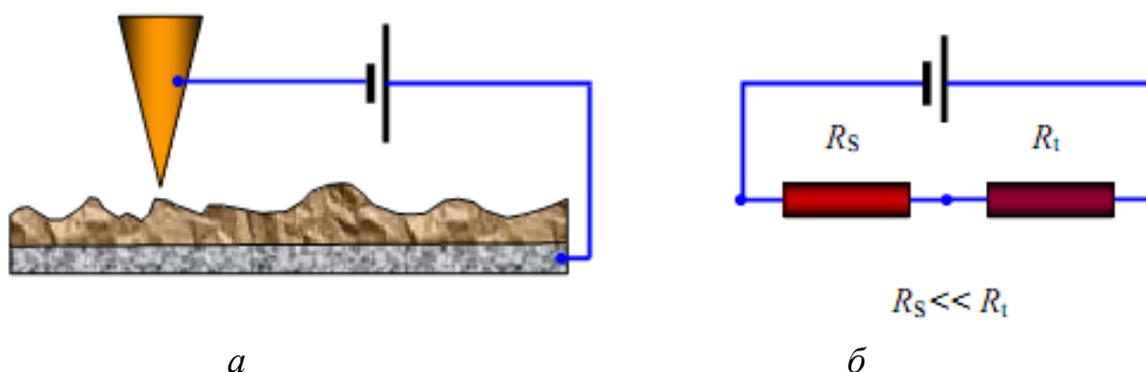


Рис. 5.1. Электрическая цепь зонд+игла (а) и эквивалентная схема туннельного контакта по постоянному току (б)

Характер туннельной ВАХ существенно зависит от энергетического спектра электронов в образце.

В туннельном токе участвуют в основном электроны с энергиями вблизи уровня Ферми. При прямом смещении электроны туннелируют из заполненных состояний зоны проводимости зонда на свободные состояния зоны проводимости образца. При обратном смещении электроны туннелируют из образца в зонд. Величина туннельного тока определяется напряжением смещения, коэффициентом прозрачности барьера и плотностью состояний вблизи уровня Ферми.

$$dI = A \cdot D(E) \rho_p(E) f_p(E) \rho_s(E) (1 - f_s(E)) dE, \quad (5.1)$$

где  $A$  – некоторая постоянная;  $D(E)$  - прозрачность барьера;  $\rho_p(E)$ ,  $\rho_s(E)$  – плотность состояний в материале зонда и исследуемого образца соответственно;

$f(E)$  – функция распределения Ферми. В простейшем случае прямоугольного барьера при низких температурах и в предположении, что плотность состояний вблизи уровня Ферми в металле зонда практически постоянна, выражение для тока представляется в виде:

$$I(V) = B \int_0^{eV} \rho_s(E) dE. \quad (5.2)$$

В этом случае зависимость туннельного тока от напряжения определяется в основном плотностью состояний в энергетическом спектре образца. На практике величину  $\rho_s(E)$  оценивают по величине производной туннельного тока по напряжению:

$$\rho_s(eV) \sim \frac{\partial I}{\partial V}. \quad (5.3)$$

Исследования локальных туннельных спектров различных материалов проводят, как правило, в условиях высокого вакуума (поскольку туннельный ток очень чувствителен к состоянию поверхности исследуемых образцов) и при низких температурах (так как тепловые возбуждения сильно размывают особенности в электронных спектрах).

### 1.1. ВАХ контакта металл-металл

На рис. 5.2 приведена энергетическая диаграмма туннельного контакта двух металлов.

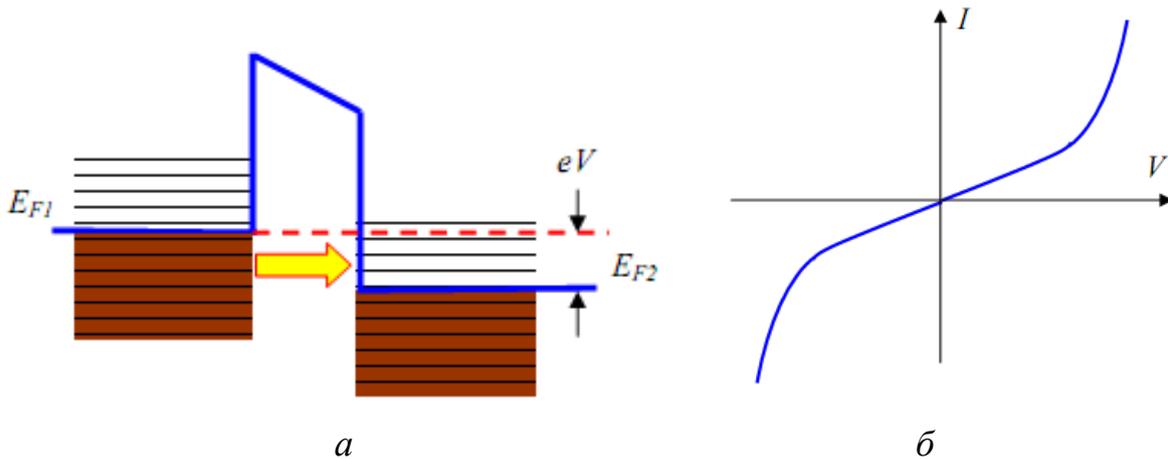


Рис. 5.2. Энергетическая диаграмма туннельного контакта двух металлов (а) и характерный вид ВАХ туннельного контакта металл-металл (б)

Плотность тока туннельных электронов через барьер между двумя металлами определяется в основном параметрами барьера:

$$j_t = j_0(V) \exp\left(-\frac{4\pi}{h} \sqrt{2m\phi^*} \Delta Z\right). \quad (5.4)$$

При очень высоких напряжениях форма барьера будет сильно изменяться, и ток будет описываться формулой Фаулера-Нордгейма. Типичная ВАХ, наблюдаемая для туннельного контакта металл-металл, изображена схематически на рис. 5. 2, б. Как видно из рисунка, вольт-амперная характеристика туннельного контакта металл-металл нелинейна и, как правило, практически симметрична.

### 1.2. ВАХ контакта металл-полупроводник

Полупроводниковые образцы имеют более сложную структуру энергетического спектра электронов. Наличие запрещенной зоны и примесных уровней в спектре полупроводниковых материалов делает ВАХ туннельного контакта металл-полупроводник сильно нелинейной (рис. 5.3). Существенный вклад в туннельный ток дают также поверхностные состояния и уровни энергии, связанные с адсорбированными на поверхности чужеродными атомами. Поэтому исследования локальных туннельных спектров полупроводниковых материалов проводят в условиях высокого вакуума.

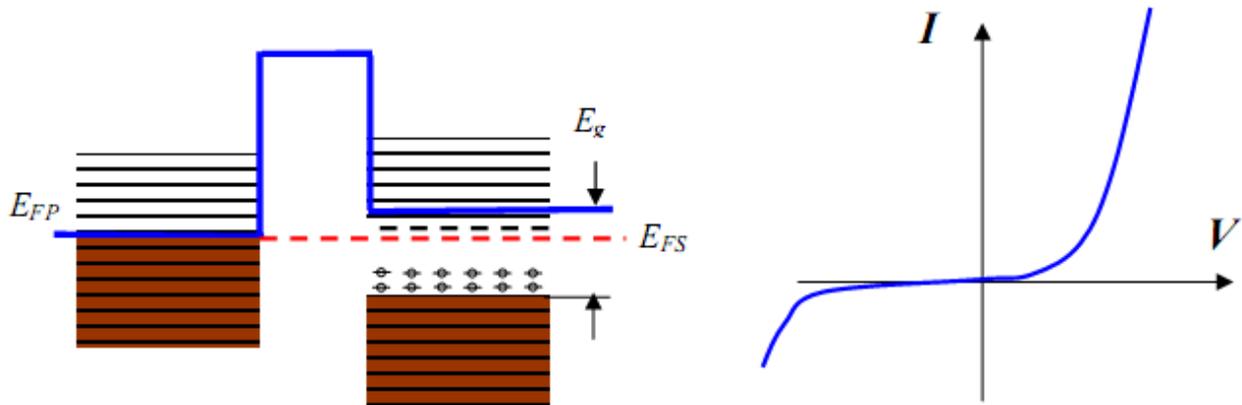


Рис. 5.3. Энергетическая диаграмма (а) и характерный вид вольт-амперной характеристики туннельного контакта металл-полупроводник (б)

Неконтролируемое присутствие на поверхности адсорбированных атомов сильно усложняет интерпретацию получаемых в эксперименте туннельных спектров. Кроме того, тепловые возбуждения приводят к значительному уширению дискретных уровней энергии, соответствующих локализованным состояниям, а также сильно размывают положение краев зоны проводимости и валентной зоны. В качестве примера на рис. 5.4 приведен туннельный спектр образца GaAs.

Туннельные спектры позволяют определить положения краев зоны проводимости и валентной зоны относительно уровня Ферми, а также идентифицировать спектральные пики, связанные с примесными состояниями внутри запрещенной зоны полупроводников.

Одним из приложений сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии является исследование неоднородности электрических свойств образцов сложного состава.

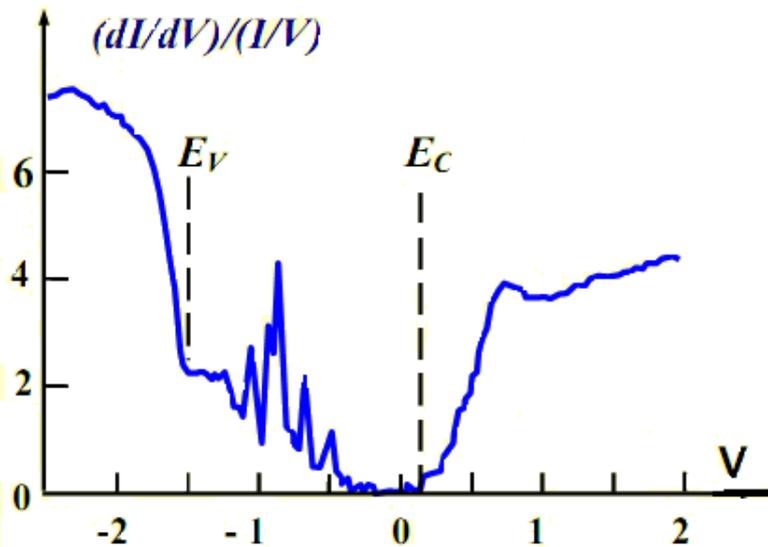


Рис. 5.4. СТМ спектр поверхности кристалла n-GaAs

В этом случае совместный анализ морфологии поверхности и вольт-амперных характеристик, снятых в различных точках поверхности, позволяет судить о распределении различных фаз на поверхности композитных структур, исследовать корреляции между технологическими параметрами их получения и электронными свойствами. В частности, снимая ВАХ в различных точках поверхности, можно исследовать распределение проводящей фазы в образцах неоднородного состава. С этой целью при сканировании одновременно с регистрацией рельефа поверхности в каждой точке производится снятие ВАХ. По локальной ВАХ рассчитываются значения электрофизических параметров.

## 2. Порядок выполнения работы

1. Перед выполнением работы необходимо осуществить подвод зонда к образцу в режиме АСМ.

2. Для выполнения лабораторной работы необходимо реализовать процедуру снятия вольт-амперных характеристик (определение зависимости величины протекающего через резистор тока от величины приложенного напряжения) – *туннельная спектроскопия*.

3. Перейдите к процедуре «Спектроскопия», нажав одноименную кнопку в главном окне программы.

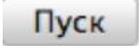


4. Нажмите кнопку  на панели инструментов главного окна программы. Затем выберите точки проведения спектроскопии, щелкнув мышью в нужном месте области проведения спектроскопии. При выборе нескольких точек спектроскопии каждая последующая задается щелчком мыши с нажатой клавишей <Ctrl>. Выберите две точки.



5. Нажмите кнопку настройки  . При этом откроется панель настроек параметров спектроскопии. Выберите «Режим» проведения спектроскопии *СТМ*

(*B-A*). Установите начальное и конечное значения напряжения для получения вольт-амперной характеристики: «От, До» (-5 В, 5 В), количество точек измерения в одном графике – «Число точек» [например, 200. Задержку в измерениях между точками оставьте установленной по умолчанию («Задержка» = 1 мс)].

6. Нажмите кнопку  главного окна программы. Произойдет измерение туннельного тока (в нашем случае тока, протекающего через эталонный резистор) в каждой из 200 точек через интервалы, на которые разбит диапазон изменения напряжений (в нашем случае через 10 мВ). Программа визуализирует графики зависимости  $I(V)$ . Полученный график представляет собой прямую, отражающую закон Ома. Графики, измеренные в обеих точках, совпадают. Сохраните один из них для представления в отчете.

Если для спектроскопии были выбраны несколько точек, в правом верхнем углу графика появляется список выбора точки проведения спектроскопии (для этого в «Инспекторе просмотра», открываемом кнопкой , должен стоять флажок «Заголовок»). На графике отображается результат в выбранной точке.

### 3. Содержание отчета

1. ВАХ исследуемого образца.
2. Диапазон величин измеренного тока.
3. Порядок определения величины образцового резистора.

### 4. Контрольные вопросы

1. Объясните процесс формирования туннельного контакта зонда с поверхностью.
2. Чем определяется ВАХ контакта металл-металл?
3. Какие параметры определяют вид ВАХ контакта металл-полупроводник?
4. Какую информацию можно получить из СТМ-спектра полупроводникового образца?

**Библиографический список**

1. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Нижний Новгород, 2004. 114 с.
2. Неволин В.К. Основы туннельно-зондовой нанотехнологии: учеб. пособие. М.: МИЭТ, 2000.
3. Павлов П.В., Хохлов А.Ф. Физика твердого тела. Нижний Новгород: изд. ННГУ, 1993.
4. Введение в процессы интегральных микро- и нанотехнологий: учеб. пособие для вузов: в 2 т. Т.1: Физико-химические основы технологии микроэлектроники / Ю.Д. Чистяков, Ю.П. Райнова. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. 392 с.
5. Пул Ч., Оуэнс Ф. Нанотехнологии. М.: Техносфера, 2005. 336 с.
6. Нанотехнология: физика, процессы, диагностика, приборы / под ред. В.В. Лучинина, Ю.М. Таирова. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006. 552 с.

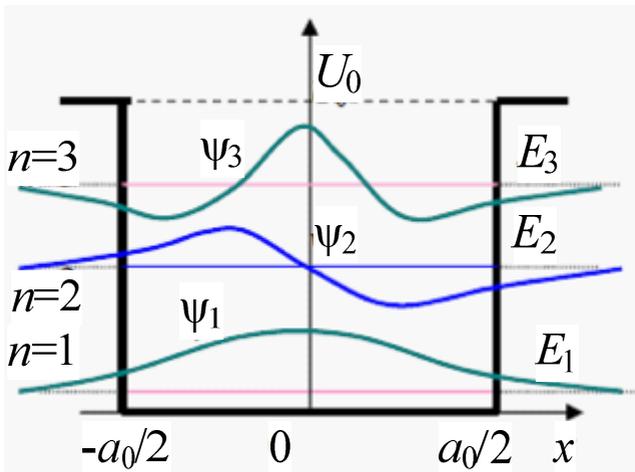
**СОДЕРЖАНИЕ**

№ 1	Получение изображения поверхности твердого тела на сканирующем зондовом микроскопе NanoEducator в режиме атомно-силовой микроскопии.....	2
№ 2	Исследования колебательной системы датчика силового взаимодействия в атомно-силовом микроскопе Nanoeducator .....	12
№ 3	Исследование поверхности твердого тела методом сканирующей туннельной микроскопии.....	20
№ 4	Получение изображения поверхности твердого тела на сканирующем туннельном микроскопе NTEGRA.....	27
№ 5	Работа сканирующего зондового микроскопа NanoEducator в режиме измерения вольт-амперных характеристик.....	42

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

## КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Методические указания к лабораторным работам



Рязань 2014

УДК 621.315.592

Квантовая физика: методические указания к лабораторным работам / Рязан. гос. радиотехн. ун-т; сост.: В.Г. Литвинов, Н.Б. Рыбин, Н.В. Рыбина, А.В. Ермачихин. Рязань, 2014. 24 с.

Содержат краткие теоретические сведения об эффектах туннелирования и размерного квантования, а также материалы для выполнения лабораторных работ по дисциплинам: "Квантовая физика" и "Физика наносистем".

Предназначены для студентов дневного отделения направления 210100.

Ил. 8. Табл. 2. Библиогр.: 6 назв.

*Эффект туннелирования, потенциальный барьер, потенциальная яма, эффект размерного квантования*

Печатается по решению редакционно-издательского совета Рязанского государственного радиотехнического университета.

Рецензент: кафедра биомедицинской и полупроводниковой электроники (зав. кафедрой Т.А. Холомина)

Квантовая физика  
Составители: Л и т в и н о в Владимир Георгиевич  
Р ы б и н Николай Борисович  
Р ы б и н а Наталья Владимировна  
Е р м а ч и х и н Александр Валерьевич

Редактор М.Е. Цветкова  
Корректор С.В. Макушина

Подписано в печать 10.03.2014. Формат бумаги 60×84 1/16.

Бумага газетная. Печать трафаретная. Усл. печ. л. 1,5.

Тираж 100 экз. Заказ

Рязанский государственный радиотехнический университет.

390005, Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

Редакционно-издательский центр РГРТУ.

## Лабораторная работа № 1

### ИЗУЧЕНИЕ ЭФФЕКТА ТУННЕЛИРОВАНИЯ

#### Цель работы

Изучение эффекта туннелирования микрочастиц, лежащего в основе работы сканирующего туннельного микроскопа.

#### 1. Краткие теоретические сведения

Туннелирование (tunneling) означает перенос частицы через область, ограниченную потенциальным барьером, высота которого больше полной энергии данной частицы, или проникновение в эту область. Такой эффект невозможен с точки зрения классической механики, однако имеет место для квантовых частиц, которым присущ корпускулярно-волновой дуализм. Волновые свойства квантовых частиц приводят и к другому, аномальному с точки зрения классической механики, эффекту – надбарьерному отражению. Основные закономерности этих явлений рассмотрены ниже.

Взаимодействие квантовых частиц с различными потенциальными барьерами в одномерном пространстве  $z$  и соответствующее изменение волновой функции микрочастицы  $\psi(z)$  и  $|\psi(z)|^2$  иллюстрирует рис. 1.

Согласно классической механике частица с энергией  $E < U_0$ , движущаяся слева направо, то есть приближающаяся к потенциальному барьеру, отразится от него и начнет двигаться в обратном направлении. Если же  $E > U_0$ , то частица продолжит движение в прежнем направлении. В квантовой механике картина иная.

На языке квантовой механики движение частицы в одномерном потенциальном поле  $U(z)$  описывается уравнением Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + U(z) \psi(z) = E \psi(z), \quad (1)$$

где  $m$  – масса частицы,  $\psi(z)$  – ее волновая функция,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $U(z)$  – потенциальная энергия,  $E$  – полная энергия микрочастицы. Движению микрочастицы ставится в соответствие распространение волны де Бройля (далее – волны), описываемой функцией  $\psi(z)$ .

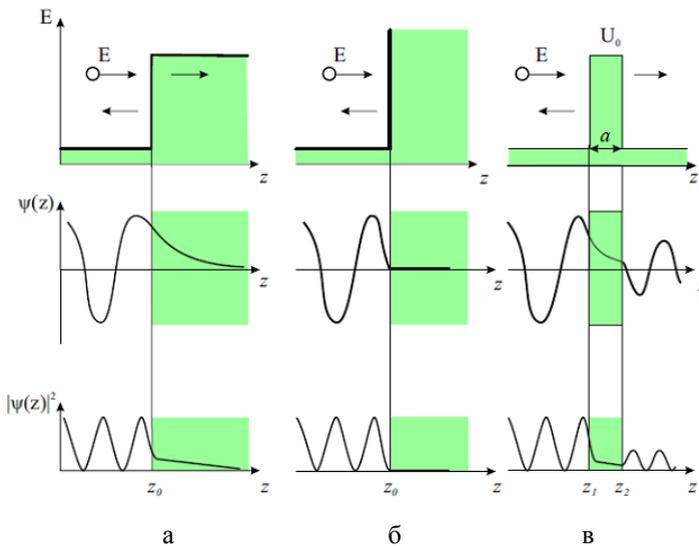


Рис. 1. Особенности взаимодействия квантовой микрочастицы с полной энергией  $E$ : а – со ступенчатым барьером конечной высоты  $U_0$ ; б – с бесконечно высоким потенциальным барьером; в – с прямоугольным барьером высотой  $U_0$  и шириной  $a$

Если энергия квантовой частицы больше высоты ступенчатого барьера ( $E > U_0$ ), то в области перед потенциальным барьером, где

$U(z) = 0$ , решение уравнения Шредингера для частицы с импульсом  $k_1 = (1/\hbar)\sqrt{2mE}$  имеет вид суперпозиции двух волн:

$$\psi = A' \exp(ik_1 z) + B \exp(-ik_1 z), \quad (2)$$

где  $A'$ ,  $B$  – константы или амплитуды волн де Бройля,  $i$  – мнимая единица. Волновую функцию обычно нормируют таким образом, что  $A' = 1$ .

Первый член в (2) соответствует падающей на барьер волне де Бройля, движущейся вдоль оси  $z$  слева направо. Второй член описывает отраженную волну де Бройля, движущуюся вдоль оси  $z$  в противоположном направлении.

При  $z \rightarrow \infty$  волновая функция прошедшей над потенциальным барьером частицы имеет асимптотический вид:

$$\psi = A \exp(ik_2 z), \quad (3)$$

где  $k_2 = (1/\hbar)\sqrt{2m(E-U_0)}$ . Плотность потока в падающей волне пропорциональна  $k_1$ , в отраженной –  $k_1|B|^2$ , а в прошедшей –  $k_2|A|^2$ .

Коэффициент прохождения частицы через границу потенциального барьера, определяемый как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей волне, равен:

$$D(E) = \frac{k_2}{k_1} |A|^2. \quad (4)$$

Коэффициент отражения частицы от потенциального барьера, определяемый отношением плотности отраженного потока к плотности падающего потока, равен:

$$R(E) = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1} |A|^2. \quad (5)$$

Очевидно, что  $R(E) = 1 - D(E)$ . Постоянные  $A$  и  $B$ , определяемые из условия непрерывности волновой функции и ее первой производной при  $z = z_0$ , равны:

$$A = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (6)$$

В соответствии с (6) коэффициенты отражения и прохождения равны:

$$R(E) = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, D(E) = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (7)$$

Из выражения (7) следует, что при  $E = U_0$  ( $k_2 = 0$ ) коэффициент отражения  $R$  обращается в единицу, а коэффициент прохождения – в нуль. С ростом энергии частицы коэффициент отражения уменьшается и стремится к нулю при  $E \rightarrow \infty$ , так как  $R \approx (U_0/4E)^2$  при  $E \gg U_0$ .

Если квантовая частица движется над прямоугольным потенциальным барьером высотой  $U_0$  и конечной толщиной  $a = z_2 - z_1$ , то решение уравнения Шредингера для каждой из трех областей имеет вид:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 \exp(ik_1 z) + B_1 \exp(-ik_1 z), z < z_1, \\ \psi_2 &= A_2 \exp(ik_2 z) + B_2 \exp(-ik_2 z), z_1 < z < z_2, \\ \psi_3 &= A_3 \exp(ik_1 z) + B_3 \exp(-ik_1 z), z > z_2, \end{aligned} \quad (8)$$

где волновые векторы  $k_1$  и  $k_2$  определены выше, а  $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$  – амплитуды волн де Бройля. В выражениях (8) члены  $A_1 \exp(ik_1 z)$  и  $B_1 \exp(-ik_1 z)$  описывают соответственно падающую и отраженную волны, а  $A_3 \exp(ik_1 z)$  – прошедшую волну. Примем для удобства, что  $A_1 = 1$ , а амплитуды  $B_1, A_2, B_2, A_3$  определяются из условий непрерывности волновой функции и ее первой производной в точках  $z = z_1$  и  $z = z_2$ . Амплитуда  $B_3 = 0$ , так как отраженная волна в третьей области отсутствует.

Коэффициент прохождения частицы в данном случае определяется как  $D(E) = |A_3|^2$ , что приводит к выражению:

$$D(E) = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2(ak^2) + 4k_1^2 k_2^2}. \quad (9)$$

Максимум коэффициента прохождения ( $D(E) = 1$ ) достигается для частиц с энергиями:

$$E = U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \text{ где } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (10)$$

При других значениях энергии наблюдается частичное отражение падающих на барьер частиц. Таким образом, из квантовой теории следует, что даже в случае, когда энергия падающей на потенциальный барьер частицы больше высоты этого барьера, коэффициент ее отражения может быть отличен от 0. Этим квантовая частица отличается от классической, для которой никакого отражения в подобной ситуации быть не может.

Рассмотрим теперь другой практически важный случай, когда квантовая частица взаимодействует с прямоугольным потенциальным барьером шириной  $a$ , высота которого больше ее энергии ( $E < U_0$ ). Классическая частица не может пройти через такой барьер. Она будет отражаться в так называемых классических точках поворота. Точка поворота (turning point) – это точка с координатой  $x$ , в которой кинетическая энергия частицы обращается в нуль, то есть ее полная энергия  $E$  равна  $U(z)$ . Для прямоугольного барьера точки поворота совпадают с координатами его границ (точки  $z_1$  и  $z_2$  на рис. 1, в). Достигнув точки поворота, частица меняет направление своего движения и начинает двигаться в обратном направлении.

Для квантовой частицы решение уравнения Шредингера в каждой из трех областей (перед, внутри и за барьером) имеет вид:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \exp(ik_1 z) + B_1 \exp(-ik_1 z), z < z_1, \\ \psi_2 &= A_2 \exp(-\zeta z) + B_2 \exp(\zeta z), z_1 < z < z_2, \\ \psi_3 &= A_3 \exp(ik_1 z), z > z_2, \end{aligned} \quad (11)$$

где волновой вектор  $k_1$  определяется выражением, приведенным выше,  $\zeta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$ ,  $A_2, A_3, B_1, B_2$  – константы.

В выражениях (11) члены  $\exp(ik_1z)$  и  $\exp(-ik_1z)$  описывают падающую и отраженную волну соответственно, а  $A_3 \exp(ik_1z)$  – волну, прошедшую через барьер. Существование прошедшей через барьер волны, отвечающей квантовой частице с энергией меньше высоты барьера, называют туннельным эффектом. Для его количественного описания используют коэффициент туннельной прозрачности барьера, под которым понимают модуль отношения плотности потока частиц, прошедших через барьер, к плотности потока падающих частиц. В нашем случае этот коэффициент равен:

$$D(E) = \frac{4k_1^2 \zeta^2}{(k_1^2 + \zeta^2)^2 \operatorname{sh}^2(a\zeta) + 4k_1^2 \zeta^2}. \quad (12)$$

Если выполняется условие  $a\zeta \gg 1$ , то выражение для коэффициента туннельной прозрачности примет вид:

$$D(E) = D_0 \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right), \quad (13)$$

где  $D_0 = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2}$ . В расчетах обычно принимают  $D_0 = 1$ .

Если рассматривать потенциальный барьер произвольной формы, то коэффициент прозрачности будет:

$$D(E) \cong \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{2m(U(z) - E)} dx\right), \quad (14)$$

где точки поворота  $z_1$  и  $z_2$  зависят от вида функции  $U(z)$  и определяются из условия  $E = U(z_1) = U(z_2)$ . Коэффициент отражения в этом случае также определяется из выражения  $R(E) = 1 - D(E)$ .

Туннельный эффект был положен в основу создания целого ряда методов исследования материалов и полупроводниковых приборов.

Рассмотрим физические основы туннельной микроскопии. Исторически первым в семействе зондовых микроскопов появился сканирующий туннельный микроскоп (СТМ). Принцип работы СТМ основан на явлении туннелирования электронов через узкий потенциальный барьер между металлическим зондом и проводящим образцом во внешнем электрическом поле (рис. 2).

В СТМ зонд подводится к поверхности образца на расстояние в несколько ангстрем. При этом образуется туннельно-прозрачный потенциальный барьер, величина которого определяется в основном значениями работы выхода электронов из материала зонда  $\varphi_P$  и образца  $\varphi_S$ . При качественном рассмотрении барьер можно считать прямоугольным с эффективной высотой, равной средней работе выхода материалов:

$$\varphi^* = \frac{1}{2}(\varphi_P + \varphi_S).$$

Как показано выше и известно из квантовой механики, вероятность туннелирования электрона (коэффициент прозрачности или прохождения) через одномерный барьер прямоугольной формы определяется выражением (13) или равна:

$$D(E) \cong \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m\varphi^*}a\right),$$

где  $a$  – ширина потенциального барьера,  $m$  – масса электрона,  $\varphi^*$  – средняя работа выхода электрона,  $\hbar$  – постоянная Планка. При приложении к туннельному контакту разности потенциалов  $V$  между зондом и образцом появляется туннельный ток (рис. 3).

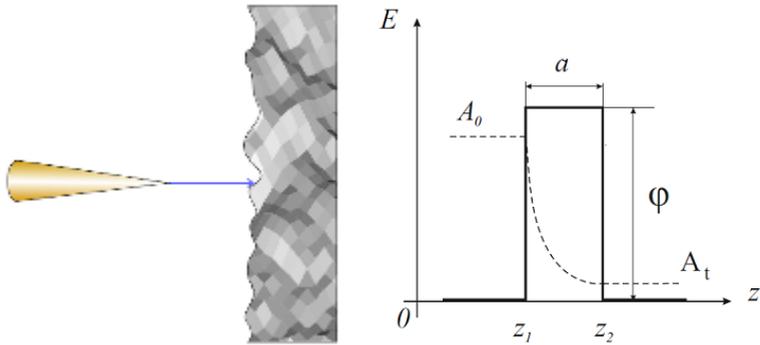


Рис. 2. Схема туннелирования электронов через потенциальный барьер в туннельном микроскопе

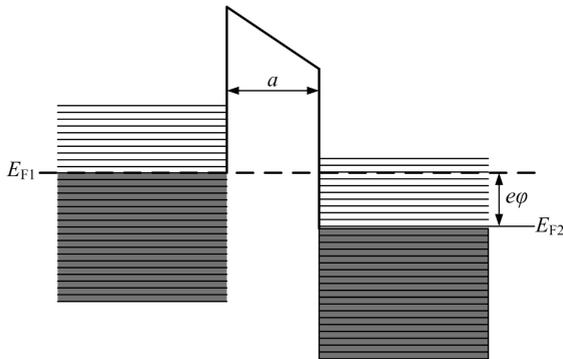


Рис. 3. Энергетическая диаграмма туннельного контакта двух металлов [2]

В процессе туннелирования участвуют в основном электроны с энергией в окрестности уровня Ферми  $E_F$ . В случае контакта двух металлов выражение для плотности туннельного тока (в одномерном приближении) имеет вид:

$$j_i(V) = j_0 \left[ \varphi^* \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m\varphi^*} a\right) - (\varphi^* + eV) \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(\varphi^* + eV)} a\right) \right], \quad (15)$$

где  $j_0 = \frac{e}{4\pi^2 \hbar (a)^2}$ . При условии малости напряжения смещения

( $eV < \varphi$ ) выражение для плотности тока можно представить в более простом виде. Линеаризуя вторую экспоненту в выражении (15) по параметру  $eV$ , получают:

$$j_i(V) = j_0 \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m\varphi^*} a\right) \left[ \varphi^* - (\varphi^* + eV) \left(1 - \frac{eV \sqrt{2ma}}{\hbar \sqrt{\varphi^*}}\right) \right].$$

Пренебрегая членом  $eV$  по сравнению с  $\varphi^*$ , выражение для плотности тока можно записать следующим образом:

$$j_i(V) = \frac{e^2 \sqrt{2m\varphi^*} V}{4\pi^2 \hbar^2 a} \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m\varphi^*} a\right). \quad (16)$$

Поскольку экспоненциальная зависимость очень сильная, то для оценок и качественных рассуждений часто пользуются упрощенной формулой, в которой предэкспоненциальный множитель считается не зависящим от изменения расстояния зонд - образец. Для типичных значений работы выхода ( $\varphi \sim 4$  эВ) значение коэффициента перед  $a$  в показателе экспоненты (константы затухания) составляет  $2 \text{ \AA}^{-1}$ , так что при изменении  $a$  на  $\sim 1 \text{ \AA}$  величина плотности туннельного тока меняется на порядок. Реальный туннельный контакт в СТМ не является одномерным и имеет более сложную геометрию, однако основные черты туннелирования, а именно экспоненциальная зависимость тока от расстояния зонд - образец, сохраняются также и в более сложных моделях, что подтверждается экспериментально. Для больших напряжений смещения ( $eV > \varphi^*$ ) из выражения (15) получается хорошо известная формула Фаулера – Нордгейма для полевой эмиссии электронов в вакуум [2]:

$$j(V) = \frac{e^3 V^2}{16\pi^2 \hbar \varphi^* a^2} \exp\left(-\frac{4\sqrt{2m}(\varphi^*)^{\frac{3}{2}} a}{3e\hbar V}\right).$$

Экспоненциальная зависимость туннельного тока от расстояния (16) позволяет осуществлять регулирование расстояния между зондом и образцом в сканирующем туннельном микроскопе с высокой точностью. СТМ представляет собой электромеханическую систему с отрицательной обратной связью. Система обратной связи поддерживает величину туннельного тока между зондом и образцом на заданном уровне, выбираемом оператором. Контроль величины туннельного тока, а следовательно, и расстояния зонд - поверхность осуществляется посредством перемещения зонда вдоль оси  $Z$  с помощью специального пьезодвигателя.

## 2. Последовательность выполнения работы

1. Изучите теоретическую часть работы.

2. Выберите из таблицы согласно номеру варианта (номеру бригады) исходные данные к лабораторной работе.

3. В программе “MathCAD” или в аналогичной программе по вышеприведенным формулам проведите следующие расчеты и постройте соответствующие зависимости:

а) для трех значений ширины  $a$  потенциального барьера - зависимость коэффициента прозрачности от энергии электрона  $D(E)$  в диапазоне энергий от 0 до  $U$ ;

б) для трех значений энергии  $E$  электрона - зависимость коэффициента прозрачности от ширины потенциального барьера  $D(a)$ , диапазон  $a$  взять в пределах от 0 до 10 нм;

в) для трех значений ширины  $a$  потенциального барьера - зависимость плотности туннельного тока от напряжения  $j(V)$  в диапазоне напряжений от 0 до 10 В;

г) для трех значений работы выхода - зависимость плотности туннельного тока от напряжения  $j(V)$  в диапазоне напряжений от 0 до 10 В.

№ вар.	Относительная эфф. масса электрона, $m^*/m_0$	Задание а		Задание б		Задание в		Задание г	
		Ширина пот. барьера, $a$ , нм	Высота пот. барьера, $U_0$ , эВ	Энергия электрона, $E$ , эВ	Высота пот. барьера, $U_0$ , эВ	Ширина пот. барьера, $a$ , нм	Работа выхода, $\phi^*$ , эВ	Ширина пот. барьера, $a$ , нм	Работа выхода, $\phi^*$ , эВ
1	0,2	1	0,1	0,2	2	1	2	1	1
		3		0,5		3			2
		7		0,8		7			3
2	0,3	1,5	0,5	1	2,5	1,5	2,5	2	2
		2,5		1,5		2,5			3
		5		2		5			4
3	0,4	2	1	2	3	2	3	3	1
		6		2,5		6			3
		10		3		10			5
4	0,5	2,5	1,5	1	3,5	2,5	3,5	4	2
		5		2		5			4
		7,5		3		7,5			6
5	0,6	1	2	2	4	1	4	1,5	3
		3		2,5		3			6
		9		3		9			9
6	0,1	1,5	2,5	1	3,5	1,5	3,5	2,5	1
		4,5		1,5		4,5			2
		9		3		9			5
7	0,3	3	3	0,5	3	3	3	3,5	2
		6		1,5		6			4
		9		2,5		9			8
8	0,5	3,5	3,5	1	2,5	3,5	2,5	0,5	1
		4,5		2		4,5			3
		8		2,5		8			6
9	0,7	2	4	0,5	2	2	2	1	1
		4		1		4			4
		7		1,5		7			8
10	0,8	2	4,5	0,5	1,5	2	1,5	2	4
		3,5		1		3,5			6
		8,5		1,5		8,5			8
11	0,9	4	5	2	5	4	5	3	2
		6		3		6			5
		8		4		8			8

4. Проанализируйте полученные зависимости коэффициента прозрачности одномерного прямоугольного потенциального барьера и величины плотности туннельного тока.

### **3. Содержание отчета**

1. Цель работы.
2. Краткие элементы теории.
3. Результаты расчетов согласно заданию.
4. Выводы по полученным результатам.

### **4. Контрольные вопросы**

1. Расскажите про туннельный эффект.
2. Опишите основные выражения для коэффициента прозрачности прямоугольного потенциального барьера и барьера произвольной формы.
3. Опишите основные выражения для туннельного тока.
4. Расскажите про практическое применение эффекта туннелирования.
5. Расскажите о волновой функции, каков ее физический смысл?
6. Опишите, что происходит с волновой функцией электрона при его прохождении через туннельно-прозрачный барьер.

### **Библиографический список**

1. Нанoeлектроника / В.Е. Борисенко, А.И. Воробьева, Е.А. Уткина. М.: Бинум. Лаборатория знаний, 2009. 223 с.
2. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. М.: Техносфера, 2005. 144 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2001. 804 с.
4. J.G. Simons. Electric tunnel effect between dissimilar electrodes separated by a thin insulating film // J. Appl. Phys., 34, 2581 (1963).
5. J.G. Simons. Generalized formula for the electric tunnel effect between similar electrodes separated by a thin insulating film // J. Appl. Phys., 34, 1793 (1963).

**Лабораторная работа № 2**  
**ИЗУЧЕНИЕ ЭФФЕКТА РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ**  
**ЭНЕРГИИ МИКРОЧАСТИЦЫ В ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ**

**Цель работы**

Изучение эффекта размерного квантования при нахождении микрочастицы в потенциальной яме.

**1. Краткие теоретические сведения**

**1.1. Одномерная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками**

Рассмотрим микрочастицу, совершающую одномерное движение вдоль оси  $x$  в потенциальной яме, изображенной на рис. 1.

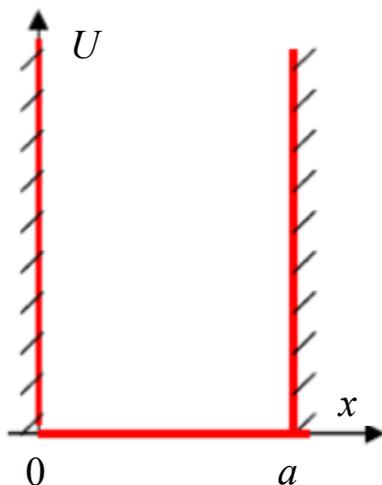


Рис. 1. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

Математически одномерный потенциал записывается в виде:

$$U = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty, & x > a, x < 0, \end{cases} \quad (1)$$

где  $a$  – ширина потенциальной ямы.

Запишем уравнение Шредингера для одномерной потенциальной ямы:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi, \quad (2)$$

где  $\hat{H}$  – оператор Гамильтона,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m$  – эффективная масса микрочастицы,  $U$  – потенциальная энергия микрочастицы,  $E$  – полная энергия микрочастицы,  $\psi$  – волновая функция.

Для области  $0 < x < a$   $U = 0$ , поэтому

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi. \quad (3)$$

После преобразований получим:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (4)$$

где  $k$  – волновое число,  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ .

Решение вне потенциальной ямы не существует, так как  $U = \infty$  и микрочастица не может покинуть потенциальную яму. В связи с этим имеем граничные условия:

$$\psi(0) = \psi(a) = 0. \quad (5)$$

Решение уравнения (4) будем искать в виде гармонической функции:

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx. \quad (6)$$

Коэффициенты  $A$  и  $B$  в (6) находим из граничных условий (5):

$$\psi(0) = B = 0, \quad \psi(a) = A\sin ka = 0.$$

Амплитуда волны де Бройля  $A \neq 0$ , так как иначе нет вообще никаких решений, откуда получаем  $\sin ka = 0$ ,

$$ka = \pm n\pi, \quad (7)$$

где  $n = 1, 2, 3 \dots$ . Полученное условие приводит к выводу о квантовании уровней энергии микрочастицы в потенциальной яме. С учетом сказанного получается решение уравнения (4) в виде:

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right). \quad (8)$$

Решения (8) называют собственными функциями гамильтониана уравнения (2) при заданных граничных условиях (5).

Подставим выражение (7) в дисперсионное соотношение  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  и получим:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2. \quad (9)$$

Таким образом, микрочастица, находящаяся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, имеет дискретный спектр энергии.

Амплитуду волновой функции  $A$  найдем из условия нормировки:

$$\int_0^a |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \frac{1}{2} A^2 \int_0^a \left(1 - \cos\frac{2n\pi}{a}x\right) dx = A^2 \frac{a}{2} = 1. \quad (10)$$

Из условия (10) получаем:

$$A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Таким образом, собственные функции и значения энергии:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right), \quad (11)$$

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right),$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2.$$

На рис. 2 представлены качественные изображения волновой функции и квадрата ее модуля, наложенные на дискретные уровни энергии.

Расстояния между соседними уровнями энергии растут линейно в зависимости от номера уровня:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} (2n + 1). \quad (12)$$

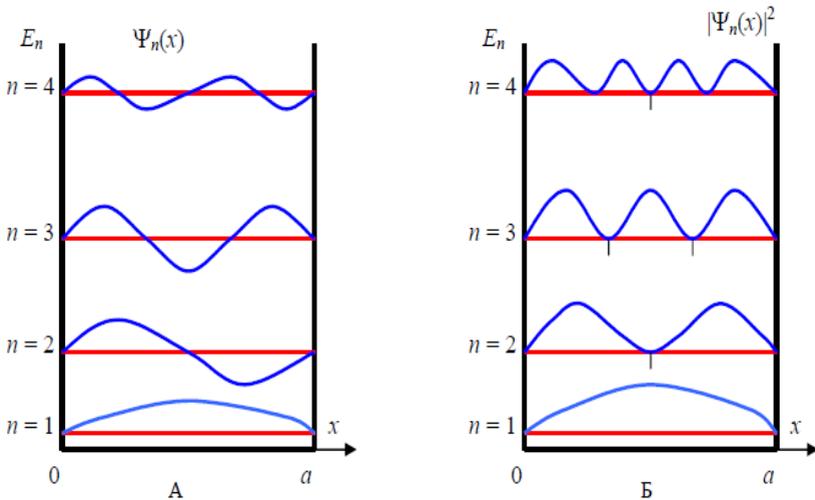


Рис. 2. Качественное изображение волновой функции (а) и квадрата ее модуля (б) в одномерной потенциальной яме

## 1.2. Одномерная потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим потенциальную яму конечной глубины  $U_0$  (рис. 3).

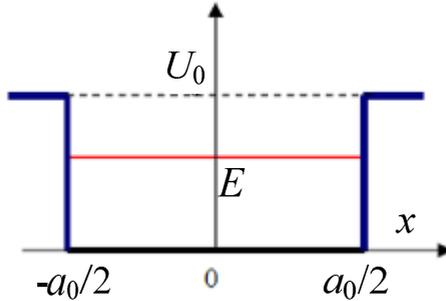


Рис. 3. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы со стенками конечной высоты

Пусть начало координат  $x = 0$  находится в центре ямы:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2} \\ U_0, & x > \frac{a}{2}, x < -\frac{a}{2}. \end{cases} \quad (13)$$

Рассмотрим отдельно решения уравнения Шредингера внутри и вне ямы, а затем объединим их, воспользовавшись условиями непрерывности волновой функции и ее первой производной на стенках ямы.

Пусть энергия микрочастицы  $E > U_0$ . Это соответствует непрерывному спектру энергии, поскольку микрочастица пролетает над потенциальной ямой и может иметь любую энергию. Для области внутри ямы запишем уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2} E \psi_1 = 0. \quad (14)$$

Введем волновое число  $k'_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_1 E}$ ,  $m_1$  – эффективная масса микрочастицы в яме. Решения для ямы ищем в виде:

$$\psi_1(x) = A_1 \sin k'_0 x + B_1 \cos k'_0 x. \quad (15)$$

В барьерных слоях уравнение Шредингера примет вид:

$$\frac{d^2 \psi_2}{dx^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2} (E - U_0) \psi_2 = 0.$$

Число  $k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_2 (E - U_0)}$ , где  $m_2$  – эффективная масса микрочастицы в барьерном слое, и решения для областей вне потенциальной ямы находятся в виде:

$$\psi_2(x) = A_2 \sin k_0 x + B_2 \cos k_0 x. \quad (16)$$

Далее объединяем (“сшиваем”) решения (15) и (16) на границах потенциальной ямы  $x = \pm \frac{a}{2}$ , приравнивая волновые функции и их первые производные. Из полученных уравнений определяют амплитуды  $A_1, B_1, A_2, B_2$  для любых величин  $k'_0$ , что означает наличие непрерывного энергетического спектра микрочастицы, пролетающей над потенциальной ямой.

Рассмотрим теперь случай, когда микрочастица находится внутри потенциальной ямы, т.е. для микрочастицы выполняется условие  $E < U_0$ .

В этом случае наблюдается дискретный спектр разрешенных значений энергии микрочастицы. Рассмотрим области внутри ямы и в барьерных слоях, для которых запишем соответствующие уравнения Шредингера и их решения:

$$1) \quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}; \quad \frac{d^2 \psi_1}{dx^2} + k^2 \psi_1 = 0; \quad k^2 = \frac{2m_1 E}{\hbar^2};$$

$$\psi_1(x) = A \sin kx + B \cos kx; \quad (17)$$

$$2) \quad |x| > \frac{a}{2}; \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \alpha^2\psi_2 = 0; \quad \alpha^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2}(U_0 - E);$$

$$\psi_2(x) = Ce^{\alpha x} + Ce^{-\alpha x}.$$
(18)

Для удобства введем оператор четности  $\hat{P}$  такой, что

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(-x).$$
(19)

Собственные числа оператора четности получаются при повторном действии оператора на выражение (19), после чего получается исходная волновая функция:

$$\hat{P}\hat{P}\psi(x) = \lambda^2\psi(x) = \psi(x).$$
(20)

Из (20) получаются значения собственных чисел  $\lambda = \pm 1$ . Считается, что когда  $\lambda = 1$ , то имеет место “четное состояние”, а когда  $\lambda = -1$ , – “нечетное состояние”.

Оператор четности коммутирует с гамильтонианом в уравнении Шредингера. Действительно,  $U(x) = U(-x)$ , поэтому:

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0.$$

Это означает, что четность и энергия одновременно могут иметь определенные значения, поэтому все получающиеся состояния имеют определенную четность: они либо четные, либо нечетные.

1. Нечетные состояния. Запишем волновые функции (17) и (18) для нечетных состояний:

$$\psi_1(x) = A \sin kx;$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} C \exp(-\alpha x), & x > \frac{a}{2} \\ -C \exp(\alpha x), & x < \frac{a}{2}. \end{cases}$$
(21)

В областях за пределами ямы бесконечно растущие решения не подходят, так как волновая функция не должна стремиться в бесконечность при  $x \rightarrow \pm \infty$ . В связи с этим физический смысл будут

иметь только затухающие решения. Очевидно, что частица может проникать в барьерные слои на глубину  $\sim 1/\alpha$ . Условия непрерывности волновой функции и ее производной на границе потенциальная яма – барьерный слой  $x = a/2$  позволяют найти амплитуды  $A$  и  $C$ :

$$\begin{cases} A \sin k \frac{a}{2} = C \exp\left(-\alpha \frac{a}{2}\right), \\ kA \cos k \frac{a}{2} = -\alpha C \exp\left(-\alpha \frac{a}{2}\right). \end{cases} \quad (22)$$

Качественный вид решений (21) представлен на рис. 4.

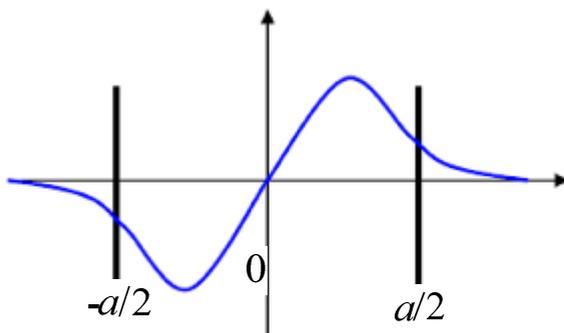


Рис. 4. Изображение волновой функции в яме конечной глубины

В системе (22) разделим верхнее уравнение на нижнее и получим трансцендентное уравнение:

$$\operatorname{tg} \frac{ka}{2} = -\frac{k}{\alpha}, \quad (23)$$

$$\operatorname{tg} \left( \frac{a}{2\hbar} \sqrt{2m_1 E} \right) = -\sqrt{\frac{m_1 E}{m_2 (U_0 - E)}}.$$

Из уравнения (23) определяют энергии уровней размерного квантования микрочастицы в потенциальной яме.

2. Четные состояния. Запишем волновые функции (17) и (18) для четных состояний:

$$\begin{aligned}\psi_1(x) &= B \cos kx ; \\ \psi_2(x) &= D \exp(-\alpha|x|).\end{aligned}\tag{24}$$

Запишем условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на границе ямы  $x = a/2$ , из которых можно найти амплитуды  $B$  и  $D$ :

$$\begin{cases} B \cos k \frac{a}{2} = D \exp\left(-\alpha \frac{a}{2}\right), \\ -kB \sin k \frac{a}{2} = -\alpha D \exp\left(-\alpha \frac{a}{2}\right).\end{cases}\tag{25}$$

Из (25) получаем уравнение:

$$\begin{aligned}tg \frac{ka}{2} &= \frac{\alpha}{k} ; \\ tg\left(\frac{a}{2\hbar} \sqrt{2m_1 E}\right) &= \sqrt{\frac{m_2(U_0 - E)}{m_1 E}}.\end{aligned}\tag{26}$$

Из уравнения (26) определяют энергии уровней размерного квантования микрочастицы в потенциальной яме, соответствующие четным состояниям.

Число уровней в одномерной потенциальной яме с конечной глубиной является конечным, но при этом всегда существует хотя бы одно связанное состояние. При малой глубине и ширине ямы в ней имеется только один уровень – четный. Четные и нечетные уровни появляются по очереди, причем вначале четные. Уровни энергии  $E_n$  в спектре нумеруются главными квантовыми числами  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Причем нечетным значениям  $n$  соответствуют четные состояния, а четным  $n$  - нечетные.

Качественное поведение волновых функций низших состояний показано на рис. 5. Возводя в квадрат эти волновые функции, получаем плотность вероятности нахождения частицы в яме. Важно отметить, что частица может некоторое время существовать в классически запрещенной зоне, где  $U_0 > E$ .

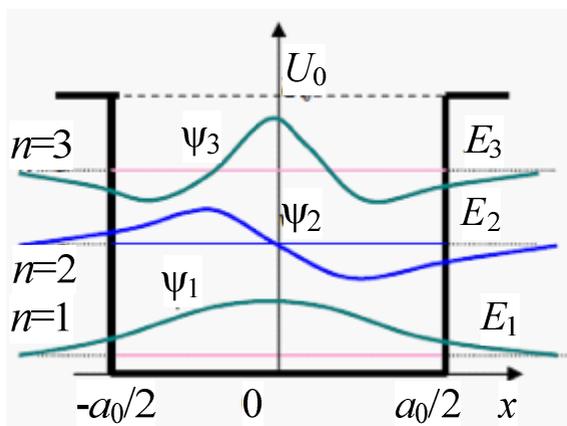


Рис. 5. Изображение волновых функций на трех нижних энергетических уровнях в яме конечной глубины

## 2. Последовательность выполнения работы

1. Изучите теоретическую часть работы.
2. Выберите из таблицы согласно номеру варианта (номеру бригады) исходные данные к лабораторной работе.
3. В программе “MathCAD” или в аналогичной программе по вышеприведенным формулам проведите следующие расчеты:
  - а) энергии микрочастицы в потенциальной яме конечной глубины;
  - б) энергии трех нижних уровней размерного квантования для электрона с указанной в задании эффективной массой, движущегося в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
4. Проанализируйте полученные результаты.

№ вар.	Задание а				Задание б	
	Ширина ямы, $a$ , нм	Глубина ямы, $U_0$ , эВ	Эфф. масса эл-на в яме, $m_1^*=m_1/m_0$	Эфф. масса эл-на в барьерном слое, $m_2^*=m_2/m_0$	Ширина ямы, $a$ , нм	Эфф. масса эл-на в яме, $m_1^*=m_1/m_0$
1	1	0,7	0,2	0,4	11	0,2
2	2	0,8	0,3	0,5	10	0,3
3	3	0,9	0,4	0,6	9	0,4
4	4	1	0,5	0,7	8	0,5
5	5	1,1	0,6	0,8	7	0,6
6	6	1	0,5	0,7	6	0,7
7	7	0,9	0,4	0,6	5	0,8
8	8	0,8	0,3	0,5	4	0,7
9	9	0,7	0,2	0,4	3	0,6
10	10	0,6	0,3	0,5	2	0,5
11	11	0,5	0,4	0,6	1	0,4

### 3. Содержание отчета

1. Цель работы, краткие теоретические сведения.
2. Результаты расчетов энергии уровней размерного квантования в потенциальной яме с конечной глубиной и бесконечно высокими стенками.
3. Выводы по полученным результатам.

### 4. Контрольные вопросы

1. Расскажите про квантово-размерные эффекты.
2. Напишите основные уравнения, описывающие поведение микрочастицы, находящейся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
3. Напишите основные уравнения, описывающие поведение микрочастицы, находящейся в потенциальной яме конечной глубины.

4. Поясните разницу между четными и нечетными решениями уравнения Шредингера.

5. Поясните, как получить выражение для нормированной волновой функции в случае нахождения микрочастицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.

6. Проанализируйте, что происходит с квадратом модуля волновой функции при увеличении номера энергетического уровня размерного квантования.

7. Получите выражение для нормированной волновой функции, соответствующей микрочастице, находящейся на  $n$ -м ( $n$  – по указанию преподавателя) уровне размерного квантования в потенциальной яме конечной глубины.

#### **Библиографический список**

1. Нанoeлектроника / В.Е. Борисенко, А.И. Воробьева, Е.А. Уткина. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009. 223 с.

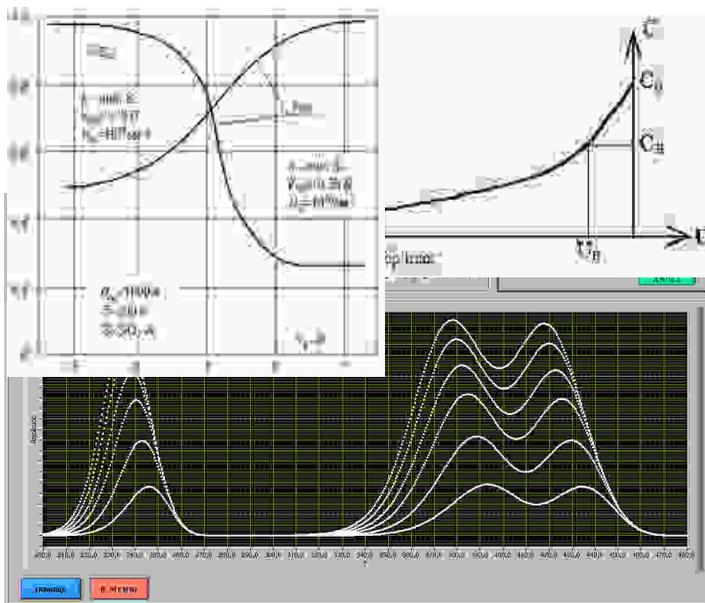
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2001. 804 с.

3. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974. 342 с.

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ  
И СТРУКТУР ЭЛЕКТРОНИКИ

Методические указания  
к лабораторным работам



УДК 621.315.592

Методы исследования материалов и структур электроники: методические указания к лабораторным работам /Рязан. гос. радиотехн. ун-т; сост.: В.Г. Литвинов, С.И. Мальченко, Н.Б. Рыбин, А.В. Ермачихин. Рязань, 2012. 40 с.

Рассматриваются лабораторные работы по курсу «Методы исследования материалов и структур электроники».

Предназначены студентам специальностей 210100, 210104.

Ил. 20 Библиогр.: 10 назв.

*Диодная структура, диод Шоттки, релаксационная спектроскопия глубоких уровней, энергия активации, постоянная времени релаксации, квантовая яма, вольт-фарадная характеристика*

Печатается по решению редакционно-издательского совета Рязанского государственного радиотехнического университета.

Рецензент: кафедра биомедицинской и полупроводниковой электроники Рязанского государственного радиотехнического университета (зав. кафедрой проф. С.П. Вихров)

Методы исследования материалов и структур электроники

Составители: Л и т в и н о в Владимир Георгиевич  
М а л ь ч е н к о Сергей Иосифович  
Р ы б и н Николай Борисович  
Е р м а ч и х и н Александр Валерьевич

Редактор Р.К. Мангутова

Корректор С.В. Макушина

Подписано в печать 17.10.12 Формат бумаги 60x84 1/16.

Бумага газетная. Печать трафаретная. Усл. печ. л. 2,5.

Тираж 50 экз. Заказ 2613

Рязанский государственный радиотехнический университет.

390005, Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

Редакционно-издательский центр РГРТУ.

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №1

### РЕЛАКСАЦИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ

**Цель работы:** изучение метода релаксационной спектроскопии глубоких уровней и методов анализа спектров РСГУ.

#### 1. Краткие теоретические сведения

Существование слоя объемного заряда (СОЗ) вблизи границы раздела p-n-перехода, барьера Шоттки, гетероперехода, МДП-структуры является фундаментальным свойством этих структур. В первом приближении СОЗ не содержит свободных носителей тока и поэтому обладает низкой электропроводностью.

Параметры слоя объемного заряда определяются свойствами образующих переход материалов. Так, в несимметричном p<sup>+</sup>-n-переходе без ловушек с однородным распределением легирующих примесей в p<sup>+</sup>-и n-областях толщина слоя объемного заряда  $W$  определяется соотношением [1, 2]

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon(V_k + V)}{eN_{DM}}}, \quad (1)$$

где  $V_k$  - встроенный (диффузионный) потенциал;  $V$  - величина приложенного к переходу напряжения смещения;  $N_{DM}$  - концентрация ионизированных доноров в слое объемного заряда;  $\varepsilon$  - абсолютная диэлектрическая проницаемость полупроводникового материала;  $e$  - элементарный заряд.

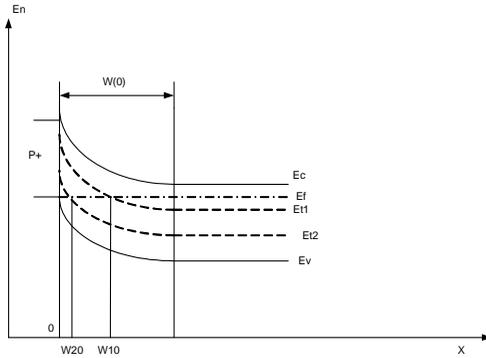
Емкость СОЗ равна  $C = \frac{\varepsilon A}{W}$ , где  $A$  – площадь перехода. Электрическое поле слоя объёмного заряда линейно изменяется с координатой, достигая максимальной величины  $F_{\max} = \frac{eN_{DM}W}{\varepsilon}$  на границе раздела p<sup>+</sup>-n-перехода. При этом электрическое поле уменьшается до нуля на внешней границе слоя объемного заряда. Даже в отсутствие внешнего электрического смещения напряженность электрического поля в слое объемного заряда достигает обычно достаточно больших ( $10^4$  –  $10^5$  В/см) величин.

Таким образом, толщина слоя объемного заряда может быть изменена внешним электрическим смещением. В случае появления в

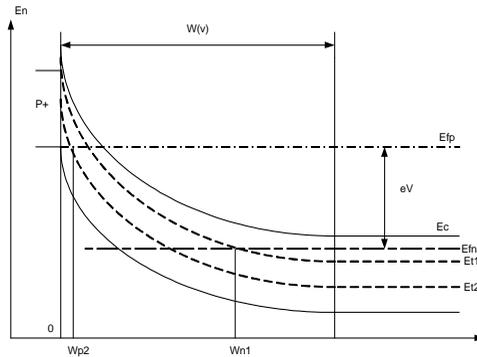
слое объемного заряда свободных носителей неоднородное электрическое поле приводит к быстрому их выносу из слоя объемного заряда (за время  $\sim 10^{-10}$  с), что практически исключает возможность повторного захвата их на глубоких уровнях.

Рассмотрим влияние глубоких уровней (ловушек) на барьерную ёмкость  $p^+$ - $n$ -перехода. Пусть в  $p^+$ - $n$ -переходе кроме основной примеси – мелких доноров с концентрацией  $N_{DM}$  – имеются два глубоких уровня с концентрацией  $N_{I1}$  и  $N_{I2}$ , энергетические уровни которых  $E_{I1}$  и  $E_{I2}$  располагаются соответственно в верхней и нижней половинах запрещённой зоны (рис. 1,а).

Аналогично примем для упрощения, что глубокий уровень полно-



а



б

Рис. 1. Зонная диаграмма  $p^+$ - $n$ -перехода при отсутствии внешнего напряжения, (а) и при обратном смещении (б)

стью заполнен электронами, если он расположен ниже уровня Ферми, и не заполнен там, где он расположен выше уровня Ферми. Тогда при внешнем напряжении  $V=0$  уровень  $E_{i1}$  заполнен электронами для координат  $x > W_{10}$ , а уровень  $E_{i2}$  – для координат  $x > W_{20}$ .

В момент времени  $t=0$  переключим диод от нуля до обратного напряжения  $V$  (рис. 1,б). Через некоторое время после переключения установится новое стационарное заполнение обоих уровней, определяемое для каждого из них следующими процессами:

- 1) тепловым выбросом электронов с уровня в зону проводимости;
- 2) тепловым выбросом дырок в валентную зону;
- 3) захватом электронов из зоны проводимости на уровень;
- 4) захватом дырок из валентной зоны на уровень.

Поскольку электрическое поле быстро удаляет свободные электроны и дырки из слоя объемного заряда, последние два процесса – захват электронов и дырок на уровни – можно не учитывать. Скорости эмиссии электронов и дырок из ловушек, по крайней мере, для случая, когда концентрация глубоких уровней значительно меньше концентрации мелких донорных примесей, экспоненциально зависят от энергий ионизации уровней. Поэтому стационарное заполнение уровня  $E_{i1}$  устанавливается с постоянной времени  $\tau$ , которая называется временем релаксации заполнения уровня и определяется из выражения [2]

$$\tau_1 = r_1 \exp\left(\frac{E_c - E_{i1}}{kT}\right). \quad (2)$$

Постоянная времени заполнения уровня  $E_{i2}$

$$\tau_2 = r_2 \exp\left(\frac{E_{i2} - E_v}{kT}\right). \quad (3)$$

Здесь  $r_1$  и  $r_2$  – коэффициенты, зависящие от параметров полупроводника и сечений захвата электронов на уровень  $E_{i1}$  и дырок на уровень  $E_{i2}$ .

Время релаксации заполнения не зависит от концентрации глубоких уровней, если  $N_{DM} \gg N_i$ , и слабо зависит от величины электрического поля. Область заполнения уровня  $E_{i2}$  изменяется намного меньше, чем уровня  $E_{i1}$  ( $W_{20}=W_{p2}$ ;  $W_{n1} \gg W_{10}$ ).

Если концентрация мелких доноров и ГУ не зависит от координаты  $x$ , то величина барьерной ёмкости перехода в стационарном состоянии может быть вычислена с учётом вклада заряда на ионизированных ГУ в общий заряд СОЗ. Причем в процессе установления стационарного состояния соответствующего напряжению  $V$ , положительный заряд в СОЗ полупроводника  $n$ -типа проводимости увеличивается за счет

опустошения уровня  $E_{t1}$  в области  $W_{10} < x < W_{n1}$  с постоянной времени релаксации  $\tau_1$ .

Ёмкость перехода будет увеличиваться в некоторых пределах, определяемых величиной эффективного заряда в СОЗ. В более простом случае  $p^+$ - $n$ -перехода с единственным глубоким донорным уровнем  $E_t$  в  $n$ -области при нулевом внешнем напряжении ёмкость перехода

$$C(0) = \sqrt{\frac{\varepsilon N_0}{2(V_k + V)}}, \quad (4)$$

$$\text{где } N_0 = \int_0^{W_0} \frac{x}{W_0} N_{DM}(x) dx + \int_0^{W_{i0}} \frac{x}{W_0} N_i(x) dx.$$

Мгновенное значение ёмкости в момент  $t_0$ , соответствующий приложению обратного напряжения  $V$ , будет равно

$$C(t) = \sqrt{\frac{\varepsilon N_{t_0}}{2(V_k + V)}}, \quad (5)$$

$$\text{где } N_{t_0} = \int_0^{W'_V} \frac{x}{W'_V} N_{DM}(x) dx + \int_0^{W_{i0}} \frac{x}{W'_V} N_i(x) dx.$$

Стационарное значение ёмкости [2]

$$C(V) = \sqrt{\frac{\varepsilon N_V}{2(V_k + V)}}, \quad (6)$$

$$\text{где } N_V = \int_0^{W_V} \frac{x}{W_V} N_{DM}(x) dx + \int_0^{W_{i1}} \frac{x}{W_V} N_i(x) dx.$$

При  $t > t_0$  начинается эмиссия электронов с ГУ, расположенных в интервале  $W_{10} < x < W_{n1}$ , что приводит к увеличению плотности объемного заряда в этом слое, а следовательно, к уменьшению толщины СОЗ и увеличению ёмкости перехода во времени. В простейшем случае, когда  $N_i \ll N_{DM}$ , возрастание ёмкости происходит с постоянной времени

$\tau = r \cdot \exp\left(\frac{E_c - E_t}{kT}\right)$ . Из температурной зависимости  $\tau(T)$  может

быть определена энергия ионизации глубокого уровня  $\Delta E = E_c - E_t$ . Концентрация  $N_i$  определяется по величине изменения ёмкости, вызванной опустошением ловушек.

Таким образом, процесс опустошения ГУ, вызванный любым внешним воздействием, может быть зарегистрирован по соответствующему изменению ёмкости СОЗ или по релаксации электрического тока через переход. Причём процесс опустошения каждой ловушки при данной температуре характеризуется вполне определенным вре-

менем релаксации, а с изменением температуры время релаксации тока или емкости изменяется по экспоненциальному закону

$$\tau = r \cdot \exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right). \text{ На использовании этих эффектов и основана}$$

РСГУ. Релаксация емкости перехода отражает изменение концентрации заряда, захваченного ловушками в СОЗ, в то время как релаксация тока обусловлена выносом освободившихся из ловушек носителей заряда к границам СОЗ.

Использование импульсного напряжения для управления толщиной СОЗ полупроводниковых структур даёт возможность разделения ловушек для основных и неосновных носителей тока. Так, при приложении обратного напряжения  $V$  к  $p^+$ - $n$ -переходу устанавливается стационарное состояние, при котором в некоторой области СОЗ ловушки в верхней половине запрещенной зоны опустошены.

Если резко уменьшить величину обратного напряжения, толщина СОЗ уменьшится, часть расположенных в СОЗ ловушек окажется ниже уровня Ферми. На протяжении цикла воздействия на структуру малого обратного напряжения ловушки будут захватывать основные носители тока вплоть до их полного заполнения. При увеличении обратного напряжения эти ловушки оказываются вновь ниже уровня Ферми в СОЗ и начинается процесс эмиссии электронов из них с постоянной времени  $\tau = \alpha_n^{-1}$ , где  $\alpha_n$  - скорость эмиссии электронов с ГУ при данной температуре. Таким образом, при большем обратном напряжении преобладает процесс эмиссии основных носителей тока из ГУ (опустошающий импульс напряжения), а при меньших напряжениях смещения идет процесс заполнения ловушек основными носителями в некоторой части СОЗ (заполняющий импульс напряжения).

В  $p^+$ - $n$ -переходе ловушки для неосновных носителей заряда могут быть заполнены при пропуске импульса прямого тока, когда через СОЗ протекает ток основных носителей заряда. Необходимо заметить, что равновесное заселение уровней соответствует соотношению сечений захвата основных и неосновных носителей заряда каждым конкретным ГУ.

Ловушки неосновных носителей могут быть заполнены и при освещении образца. Это особенно полезно для диодов Шоттки, где невозможно для этой цели использовать инжекцию неосновных носителей при включении диода в прямом направлении.

В основе РСГУ лежит измерение величины релаксации ёмкости перехода (ёмкостная РСГУ) или величины релаксации тока через переход (токовая РСГУ) с рядом заранее задаваемых постоянных време-

ни релаксации  $\tau_i$  при опустошении ГУ в СОЗ перехода. Причем с помощью импульсного внешнего воздействия на исследуемую структуру процесс заполнения и опустошения ловушек в СОЗ периодически повторяется, а совпадение времени релаксации опустошения ГУ с заданными значениями  $\tau_i$  достигается монотонным изменением температуры исследуемого образца. Соотношение периодичности повторения циклов заполнения – опустошения ГУ и скорости изменения температуры должно быть таким, чтобы каждый цикл происходил в условиях, близких к изотермическим.

Рассмотрим случай опустошения двух ловушек основных носителей тока в СОЗ перехода. На основании принципа детального равновесия скорость эмиссии электронов с глубокого уровня  $E_{ii}$  определяется соотношением [2]

$$\alpha_{ni} = \frac{1}{\tau_i} = \frac{\sigma_i \langle V_n \rangle N_c}{g_i} \exp\left(-\frac{\Delta E_{ii}}{kT}\right), \quad (7)$$

где  $\sigma_i$  - сечение захвата носителей;  $\langle V_n \rangle$  - средняя тепловая скорость электронов;  $N_c$  - эффективная плотность состояний в зоне проводимости полупроводника;  $g_i$  - коэффициент вырождения ловушек.

По отношению к экспоненциальному множителю, предэкспоненциальный член можно считать слабо зависящим от температуры, и в координатах Аррениуса зависимость  $\alpha_{ii}(T)$  линейна с наклоном, характеризующим величину  $E_{ii}$ . При изменении температуры образца и периодическом осуществлении процесса заполнения и опустошения ловушек регистрирующее устройство, настроенное на постоянную времени  $\tau_1$ , зафиксирует пики сигнала двух ловушек соответственно при температурах  $T_{m1}$  и  $T_{m2}$ .

При настройке на постоянную времени  $\tau_2$  те же ловушки проявятся при температурах  $T'_{m1}$  и  $T'_{m2}$ . Различие температур пиков для каждой ловушки при известных значениях  $\tau_1$  и  $\tau_2$  позволяет определить энергии термической активации рассматриваемых ГУ.

Сечения захвата носителей тока ловушками  $\sigma_i$  могут быть вычислены по известным величинам  $N_c$ ,  $E_{ii}$  и  $\langle V_n \rangle$  для диапазона температур, в котором фиксируются пики ГУ. Амплитуда регистри-

руемого сигнала связана с концентрацией носителей, эмитируемых глубокими уровнями. Однако на величину сигнала влияют, кроме того, пространственное расположение перезаряжающихся ловушек между границами СОЗ, тип ловушки, способ регистрации РСГУ, величина выбираемой постоянной времени.

Рассмотрим далее относительное изменение емкости перехода  $\left[ \frac{\Delta C}{C} \right]_x$ , обусловленное захватом  $n(x)$  электронов в интервале  $\Delta x$ , удаленном на расстояние  $x$  от границы  $p^+$ -перехода (диода Шоттки, МДП – структуры);  $0 < x < W$ . Из уравнения Пуассона следует, что изменение напряжения, индуцированное захватом  $n(x)$  электронов в окрестности точки  $x$ , равно [2]

$$\Delta V = \frac{e}{\varepsilon} [N_{DM} W \Delta W - n(x) x \Delta x]. \quad (8)$$

Для режима регистрации изменения ёмкости структуры при постоянном напряжении смещения получим:

$$\left[ \frac{\Delta C}{C} \right]_x = - \frac{n(x)}{N_{DM} W^2} x \Delta x. \quad (9)$$

Необходимо отметить, что чувствительность емкости перехода к перезарядке ловушек линейно изменяется от нуля (перезарядка ловушек вблизи границы раздела перехода) до максимального значения (перезарядка ловушек на внешней границе СОЗ). При емкостной РСГУ это справедливо для ловушек как основных, так и неосновных носителей тока.

При исследовании ГУ по релаксации ёмкости перехода имеется возможность разделения сигналов ловушек основных и неосновных носителей тока, если условия заполнения ГУ выбраны такими, что заполняются оба типа ловушек. Опустошение ловушек основных носителей тока после выключения заполняющего импульса приводит к увеличению плотности заряда в СОЗ и, следовательно, к увеличению ёмкости перехода в процессе релаксации до равновесного состояния, определяемого величиной амплитуды опустошающего импульса. В случае опустошения ловушек неосновных носителей тока ситуация обратная. Следовательно, сигналы емкостной РСГУ от ловушек основных и неосновных носителей тока будут при регистрации давать пики различного знака.

Релаксация тока через структуру вызвана выносом освободившихся носителей тока из глубоких уровней в СОЗ в электронейтральные области перехода. Если обозначить величину заряда, обусловленного эмиссией  $\Delta n(x)$  электронов из ловушек, расположенных в ин-

тервале  $\Delta x$  на расстоянии  $x$  от границы раздела перехода, как  $\Delta Q$ , тогда

$$\Delta Q = eA\Delta n(x)\Delta x. \quad (10)$$

В случае эмиссии электронов из материалов  $n$ -типа проводимости некоторая часть заряда  $\Delta Q_+$  вызывает изменение ёмкости перехода за счёт изменения толщины СОЗ:

$$\Delta Q_+ = eAN_{DM}\Delta W. \quad (11)$$

Протекающий по внешней цепи заряд  $\Delta Q_{ext}$  определяется как разность  $\Delta Q$  и  $\Delta Q_+$ :

$$\Delta Q_{ext} = eA\Delta n(x)\Delta x\left(1 - \frac{x}{W}\right). \quad (12)$$

При эмиссии дырок из полупроводника  $n$ -типа проводимости ситуация обратная: во внешней цепи регистрируется заряд  $\Delta Q_+$ .

Таким образом, перезарядка ловушек, расположенных в интервале  $\Delta x$  на расстоянии  $x$  от границы раздела перехода, приведёт к возникновению во внешней цепи электрического тока плотностью [3, 4]

$$I(x) = eA\Delta x \left[ \alpha_n n(x) \left(1 - \frac{x}{W}\right) + \alpha_p (N_t - n(x)) \frac{x}{W} \right], \quad (13)$$

где  $\alpha_n$  и  $\alpha_p$  - скорости тепловой эмиссии для электронов и дырок соответственно.

Из уравнения для плотности тока видно, что влияние пространственного расположения ловушек на величину регистрируемого сигнала для токовой и емкостной РСГУ совпадает в случае эмиссии неосновных носителей и противоположно для эмиссии основных носителей тока. Поскольку дырки и электроны, эмитируемые ловушками в СОЗ, движутся в противоположных направлениях, пики ГУ для этих ловушек совпадают по полярности для токовой РСГУ.

Как в емкостной, так и в токовой РСГУ величина сигнала пропорциональна концентрации захваченных ловушкой электронов  $n(t)$  или концентрации захваченных ловушками дырок  $[N_t - n(t)]$ . Временную зависимость  $n(t)$  можно описать следующими соотношениями:

$$\frac{n(t)}{N_t} = \left\{ \frac{\alpha_p}{\alpha_n + \alpha_p} \left[ 1 + \frac{\alpha_n}{\alpha_p} \exp[-(\alpha_n + \alpha_p)t] \right] \right\}, \quad (14)$$

если до момента времени  $t=0$  ловушки для электронов (в материале  $n$ -

типа) полностью заполнены и

$$\frac{n(t)}{N_i} = \left\{ \frac{\alpha_p}{\alpha_n + \alpha_p} \left[ 1 - \frac{\alpha_n}{\alpha_p} \exp[-(\alpha_n + \alpha_p)t] \right] \right\}, \quad (15)$$

когда инжектирующий импульс напряжения при  $t=0$  заполняет дырочные ловушки.

Ловушки, для которых  $\alpha_n \gg \alpha_p$ , называют ловушками для основных носителей заряда в полупроводнике n-типа проводимости и ловушками для неосновных носителей в полупроводнике p-типа. Противоположная ситуация обозначается как  $\alpha_n \ll \alpha_p$ .

Сигнал емкостной РСГУ определяется собственно величиной  $n(t)$ . Сигнал токовой РСГУ пропорционален  $\alpha_n n(t)$  (для случая эмиссии электронов в материале n-типа).

Таким образом, чувствительность емкостной РСГУ не зависит от выбираемой постоянной времени. Чувствительность токовой РСГУ обратно пропорциональна величине выбранной постоянной времени. Чувствительность этих методов совпадает при величине  $\tau$  на уровне 1 мс.

Метод РСГУ позволяет определять все основные параметры ловушек, расположенных в СОЗ полупроводниковых структур. В отличие от других термостимулированных методов контроля параметров ГУ при РСГУ отпадает необходимость использования специальных законов повышения температуры образца, что исключает ошибку в определении параметров ГУ, связанную с отклонениями от заданного закона нагрева.

Чувствительность РСГУ очень высока. При емкостной РСГУ чувствительность определяется произведением  $N_{DM} \frac{\Delta C}{C}$ . Современные высокочастотные емкостные мосты позволяют регистрировать величину  $\frac{\Delta C}{C}$  на уровне  $10^{-5}$ . При типичных значениях  $\Delta x$  в полупроводниковых структурах  $10^{14} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$  емкостная РСГУ обнаруживает ловушки с минимальной концентрацией  $10^{-9} - 10^{-12} \text{ см}^{-3}$ . При использовании токовой РСГУ с малыми ( $\sim 10$  мкс) постоянными времени чувствительность достигает  $10^8 \text{ см}^{-3}$ . При этом основным источником погрешности в оценке параметров ловушек при РСГУ является ошибка в измерении температуры образца.

Отметим еще одно достоинство РСГУ. Выше описывалась процедура определения сечения захвата ловушек по известным величинам

$E_{ii}$ ,  $\tau$  и  $T_m$  при отсутствии ловушки. Однако процесс опустошения идет при наложении внешнего напряжения, усиливающего собственное электрическое поле перехода. Это электрическое поле может привести к погрешностям в оценке величины сечения захвата. РСГУ позволяет проводить независимое измерение скорости захвата носителей тока в ловушках при заполнении.

Так как процесс заполнения ловушек проводится при небольшом внешнем напряжении смещения, можно определить степень влияния электрического поля на величину сечения захвата, сопоставив величины, полученные в экспериментах по заполнению и по опустошению ловушек.

В связи с тем, что для определения параметров глубоких уровней РСГУ используют релаксацию тока или емкости, РСГУ разделяют соответственно на емкостную и токовую разновидности. Но наряду с этим различные виды РСГУ могут отличаться и по способу возбуждения (заполнения) глубоких уровней. В этом случае выделяют РСГУ с электрическим, оптическим, фототоковым возбуждением, а также с возбуждением электронным лучом. Кроме того, возможно и комбинированное возбуждение ГУ (например, совместно с оптическим возбуждением ГУ часто используют электрическое возбуждение).

Важнейший параметр РСГУ–спектрометров определяется главным образом тем, какой тип сигнала они используют – релаксацию тока или емкости. В связи с этим совместное применение этих видов спектроскопий позволяет получить гораздо больше информации о глубоких уровнях, чем применение каждого вида спектроскопии в отдельности.

Что касается способов возбуждения глубоких уровней, то в настоящее время наиболее широко распространено электрическое возбуждение, осуществляемое импульсным напряжением смещения. Это связано с простотой данного способа. Но вместе с тем в некоторых случаях необходимо использовать и другие типы возбуждения, например при исследовании ловушек неосновных носителей заряда в барьерах Шоттки, определении оптических характеристик глубоких уровней. Для этих целей могут быть использованы и другие способы возбуждения глубоких уровней: оптический, фототоковый, оптический в комбинации с электрическим и т.д.

При емкостной РСГУ для регистрации релаксаций емкости используется высокочастотный (с частотой  $f \gg \frac{1}{C}$ ) измерительный сигнал малой амплитуды, накладываемый на импульсное напряжение

смещения. Применение высокочастотного сигнала приводит к тому, что емкостные РСГУ–спектрометры этого типа состоят из следующих частей:

- источник импульсного напряжения;
- преобразователь «емкость – напряжение»;
- селектирующее устройство;
- графопостроитель.

Более совершенные РСГУ – спектрометры содержат дополнительные блоки, обеспечивающие автоматическое управление спектрометром и обработку результатов эксперимента.

Последние разработки в области автоматизации процесса измерения в РСГУ связаны с применением ЭВМ.

Такие важные параметры ловушек, как концентрация, поперечное сечение захвата, энергия активации, полевой эффект и профиль концентрации ловушек, могут быть измерены в течение одного температурного сканирования.

Установки для исследования, в основе которых лежит токовая РСГУ отличаются большей простотой реализации. Структурная схема одной из таких установок, выполненной на основе программно аппаратного комплекса фирмы National Instruments, приведена на рис.2. Управление установкой осуществляет управляющий виртуальный прибор, реализованный на языке инженерного графического программирования LabVIEW. Аналого-цифровое и цифро-аналоговое преобразование сигналов установки обеспечивается установленной в персональный компьютер (ПК) платой NI PCIe-6361. Подключение сигналов установки к плате NI PCIe-6361 происходит с помощью специального

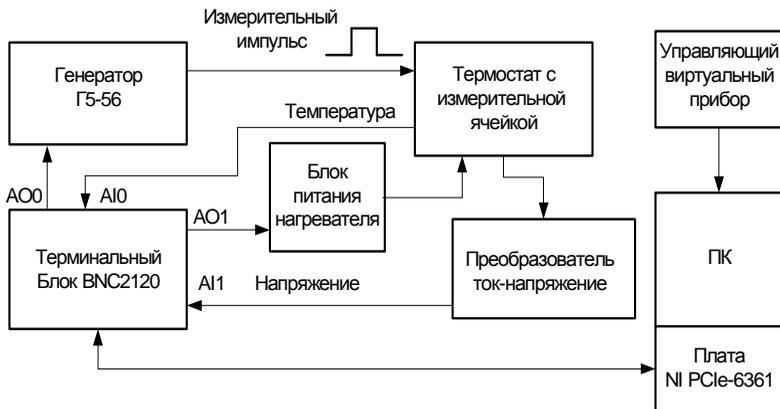


Рис. 2. Упрощенная структурная схема установки токовой РСГУ

экранированного кабеля через терминальный блок NI BNC2120.

Отличие такой установки от емкостной РСГУ заключается в том, что преобразователь «емкость – напряжение» заменен на преобразователь «ток – напряжение». Этот преобразователь представляет собой усилитель напряжения с низким входным сопротивлением и может быть выполнен на основе операционного усилителя.

Как уже говорилось, устройства на основе токовой РСГУ имеют определенные преимущества по сравнению с емкостной РСГУ. Кроме того, устройства на основе токовой РСГУ могут регистрировать релаксационные процессы с постоянной времени меньше 1 мкс. Здесь основным ограничивающим фактором является быстроедействие устройства селекции.

Разновидностью токовой РСГУ можно считать так называемую зарядовую РСГУ. Однако в зарядовой РСГУ производится дополнительная операция с тем же самым сигналом релаксации тока – интегрирование. Введение этой дополнительной операции привело к тому, что величина релаксации проинтегрированного сигнала не зависит от постоянной времени и пропорциональна заряду, прошедшему через структуру. С одной стороны, независимость величины релаксационного сигнала от постоянной времени является положительным приобретением зарядовой РСГУ, так как в этом случае высота пика не меняется от времени релаксации и в связи с этим упрощается расчет параметров глубоких уровней, но, с другой стороны, при прочих равных условиях в зарядовой РСГУ труднее избавиться от помехи, обусловленной обратным током утечки структуры.

В связи с тем, что зарядовая РСГУ исследует тот же сигнал, что и токовая РСГУ, чувствительность обоих методов одинакова.

Основные трудности в реализации токовой, а вследствие этого и зарядовой РСГУ, связаны, во-первых, с помехой, обусловленной перезарядкой барьерной емкости структуры, и, во-вторых, с помехой, обусловленной током утечки через обратносмещенный барьер.

Первая причина легко устраняется путем введения в схему ключей, через которые разряжается барьерная емкость, применения устройств селекции со взвешивающей функцией, равной нулю во время перезарядки емкости (то есть взвешивающая функция вырабатывается с определенной задержкой во времени), и т.д.

Сложнее обстоит дело с током утечки через обратносмещенную структуру. Если ток утечки не меняется с течением времени, то в случае токовой РСГУ помеха от него на выходной сигнал легко устраняется путем использования устройства селекции со взвешивающей функцией, исключающей влияние постоянной составляющей на вы-

ходной сигнал (например, с двухполярной взвешивающей функцией), или путем использования усилителя, не пропускающего постоянную составляющую сигнала (усилителя переменного напряжения).

В зарядовой РСГУ проинтегрированный ток утечки дает линейно возрастающий (или убывающий) сигнал. В этом случае труднее избавиться от помехи.

## 2. Выполнение лабораторной работы

Приступая к выполнению лабораторной работы следует изучить методическое описание к работе и основы теории РСГУ. Работа выполняется путем моделирования процессов получения спектров РСГУ на персональном компьютере (ПК). Процесс обработки спектров, их анализ и получение необходимой информации полностью соответствует реально выполняемым действиям по анализу экспериментально полученных спектров.

Программа моделирования и обработки спектров РСГУ запускается с рабочего стола двойным щелчком по ярлыку с названием RSGU\_st\_1.vi. После загрузки программы NI LabVIEW, на основе которой сформирована программа для выполнения лабораторной работы, на экране возникнет начальная лицезвая панель, показанная на рис.3.



Рис. 3. Начальная лицезвая панель лабораторной работы

Управление программой выполняется стандартными действиями кнопками мыши и клавиатуры как при работе с операционной системой Windows. Начать выполнение лабораторной работы следует с выбора материала образца, для этого нужно щелкнуть по кнопке «Выбор образца». Появится панель с выбором материала образца, показанная на рис.4. После выбора материала, например кремния, появится краткое описание характеристик выбранного материала (рис.5). После



Рис. 4. Часть лицевой панели выбора материала структуры

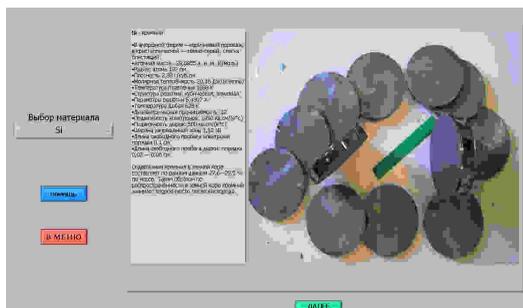


Рис. 5. Основные сведения о выбранном материале

щелчка по кнопке «далее» появляется панель с дополнительной информацией по выбранному полупроводниковому материалу (рис.6).

Действия кнопок «Назад» и «Далее» на этой панели интуитивно

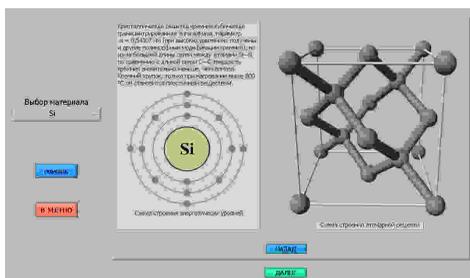


Рис. 6. Дополнительные сведения о выбранном материале

понятно понятно и в комментариях не нуждается. После щелчку по кнопке «Далее» происходит переход на панель выбора номера образца полупроводниковой структуры с конкретными значениями параметров глубоких уровней, предлагаемых для анализа (рис.7).



Рис. 7. Панель выбора номера образца для исследования

В этой панели при щелчке по кнопке «Далее» программа осуществляет переход к следующей панели «Анализ кривых РСГУ». На этой панели происходит построение спектра РСГУ. Построение спектров происходит достаточно медленно, но гораздо быстрее, чем в реальной исследовательской установке. Обычно для получения спектра РСГУ в реальной исследовательской установке может потребоваться несколько часов.

РСГУ-спектры получаются в результате корреляционной обработки сигналов релаксации емкости, тока или заряда. РСГУ-сигнал после корреляционной обработки описывается формулой:

$$R(\tau) = \int_0^T e(t, \tau) w(t) dt \quad (2.1)$$

где  $w(t)$  – весовая функция;

$T$  – время, в течение которого регистрируется сигнал релаксации емкости, тока или заряда;

$e(t, \tau)$  – входной сигнал, в общем случае представляющий собой экспоненту или сумму экспонент с добавкой шумовой составляющей. Весовая функция, использованная в этой лабораторной работе, показана на рис.8.

Построение спектра можно прервать в любое время, щелкнув по кнопке «Прекратить построение». При её использовании будет задан вопрос: «Если прервать построение спектров, то придется начинать

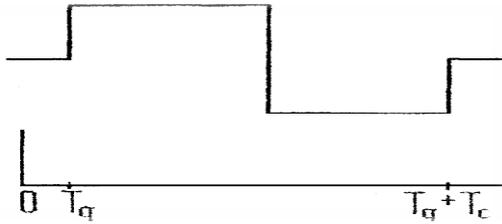


Рис. 8. Весовая функция двух импульсных интеграторов

сначала. Прервать?» и два варианта ответа «Да» и «Нет». Следует помнить, что в случае выбора варианта «Да» спектр придется строить заново. Для построения нового спектра следует вначале щелкнуть по кнопке «ВНИМАНИЕ! Перед построением следует очистить поле графика» и затем щелкнуть по кнопке «Заново». После построения спектра панель будет выглядеть как на рис.9. При необходимости можно поменять времена  $T_g$  и  $T_c$ , а так же количество отображаемых графиков и перестроить спектр.

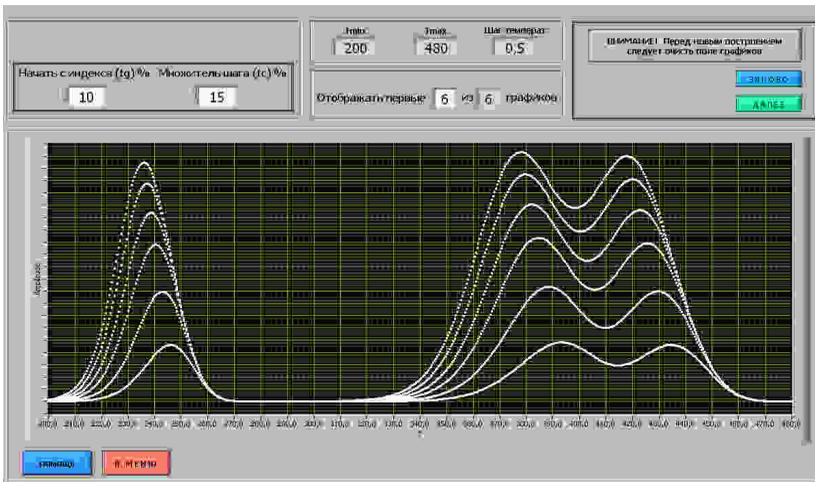


Рис. 9. Вид лицевой панели после построения спектра РСГУ

Для этого НЕОБХОДИМО нажать на кнопку «ВНИМАНИЕ! Перед новым построением следует очистить поле графиков», а затем кнопку «ЗАНОВО». Если же все построено верно, то после нажатия на кнопку «ДАЛЕЕ» программа переходит к режиму «Построение прямой Аррениуса». Часть этой панели, на которой отображается спектр, вер-



Рис. 10. Часть отображаемой лицевой панели со спектром РСГУ и курсорами

тикальный и горизонтальные курсоры показана на рис.10.

Для управления курсорами необходимо подвести к ним курсор мыши, который превращается в двунаправленные стрелочки и удерживая левую кнопку мыши переместить вертикальный или горизонтальный курсор в нужное место спектра. Необходимо подводить курсоры на вершину кривых и щелкать по кнопке "ОК" под словом Запись? Справа от этой кнопки имеется цифровой индикатор, показывающий количество оставшихся точек.

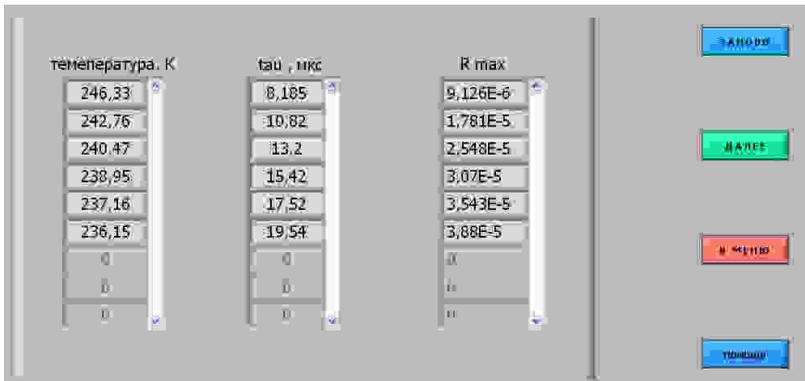


Рис. 11. Таблицы со значениями температуры и амплитуды максимумов спектра РСГУ

**Все пики необходимо измерять в одинаковой последовательности (либо начиная с верхнего пика, либо начиная с нижнего пика). В результате таких действий формируется массив данных для построения прямой Арениуса. После измерения значений всех вершин**

выводится панель с таблицей, внешний вид которой показан на рис.11.

Если всё было снято корректно, то следует переписать отображаемые значения и нажать "ДАЛЕЕ". В противном случае следует нажать кнопку "ЗАНОВО" и измерить значения температуры и амплитуды повторно для каждого пика. При измерении параметров нескольких групп пиков спектра (обычно одна группа рядом расположенных пиков характерна для одного ГУ) можно записать получившиеся значения от одной группы пиков, нажать кнопку "ЗАНОВО", измерить значения следующей группы пиков и записать их в тетрадь. При таком выполнении лабораторной работы следует не забыть потом "перейти далее" и записать значения для всех групп пиков, характерных для этого образца. Затем по щелчку на кнопке «Далее» программа переходит к отображению последней лицевой панели, показанной на рис.12.

В этих таблицах представлены все данные необходимые для того,

$m^*/m$	Ширина ОПЗ, мкм	Площадь контакта, $mm^2$	Кэфф. преобр.
1	1	0.1	$1E+8$

Температура, К	$t_0$ , мкс	$t_1$ , мкс	$t_2$ , мкс	Rmax
246,33	10	15	8,185	$9,126E-6$
242,76	10	30	10,82	$1,781E-5$
240,47	10	45	13,2	$2,548E-5$
238,95	10	60	15,42	$3,07E-5$
237,16	10	75	17,52	$3,543E-5$
236,15	10	90	19,54	$3,88E-5$
0	0	0	0	0
0	0	0	0	0

Длительность импульса, мкс	Количество отсчетов	Частота дискретизации, кГц
100	100	1000

Рис. 12. Окончательные данные, необходимые для выполнения лабораторной работы

чтобы сделать лабораторную работу. **Необходимо переписать их**, либо сделать скриншот (снимок экрана). Стоит отметить, что следующие значения одинаковы для всех пиков одного образца, а именно: отношение масс ( $m^*/m$ ), ширина ОПЗ, площадь контакта, коэффициент преобразования, длительность импульса, количество отсчетов, частота дискретизации.

Если более нет необходимости измерить другие пики спектра этого образца или спектры другого образца следует щелкнуть по кнопке

"ВЫХОД", в противном случае "В МЕНЮ", а затем либо "Построение прямой Аррениуса" при необходимости измерить значения другого пика спектра этого образца, либо "Выбор образца" при необходимости измерить спектр другого образца.

Далее следует обработать полученные данные. По полученным значениям максимумов пиков в программе MathCAD строится прямая Аррениуса, вид которой показан на рис.13. Программа для обработки MathCAD имеет ряд встроенных функций для вычисления регрессии. Обычно эти функции создают кривую или поверхность определенного типа, которая в некотором смысле минимизирует ошибку между собой и имеющимися данными. Функции отличаются, прежде всего, типом кривой или поверхности, которую они используют, чтобы аппроксимировать данные. Линейная регрессия позволяет построить линейную функцию, которая наилучшим образом приближает заданные данные к линейной зависимости. При этом обычно используется метод наименьших квадратов.

Прямая Аррениуса строится в координатах  $\log(1/\tau \cdot T^2)$  от  $10^3/T$ . Далее приведен образец решения построения прямой Аррениуса и вычисления необходимых значений в программе MathCAD.

Вначале заполняются 2 матрицы (в примере будут использованы значения 6 пиков). **Значение времени tau необходимо записывать в секундах.**

$$\text{tau} := \begin{pmatrix} \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \end{pmatrix} \quad T := \begin{pmatrix} \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

Для перемножения соответствующих значений матриц (первое значение первой матрицы с первым значением второй матрицы и т.д.) необходимо сделать следующие описание – количественное значение строк и столбцов в матрицах:

$$i := 0..5 \quad j := 0 \quad (2.3)$$

где  $i$  – количество строк,  $j$  – количество столбцов.

Далее, например, можно ввести промежуточное значение:

$$c_{i,j} := \text{tau}_{i,j} (T^2)_{i,j} \quad (2.4)$$

В формуле 2.4 промежуточная переменная «с», так же как и обозначения матриц, непременно должны быть со значениями индексов. Перейти к значению индекса можно с помощью клавиши «[». Далее находится десятичный логарифм формула (2.5) и производится аппроксимация методом наименьших квадратов формула (2.6) и (2.7).

$$y := \log\left(\frac{1}{c}\right) \quad (2.5)$$

$$a := \text{slope}(T, y) \quad (2.6)$$

$$b := \text{intercept}(T, y) \quad (2.7)$$

По формуле 2.8 строится прямая Аррениуса (рис.13).

$$x := a \cdot T + b \quad (2.8)$$

Рассчитать значение тангенса угла можно по формуле:

$$\text{tg} \alpha := \frac{\left| \begin{array}{c} x_{0,0} - x_{5,0} \\ \frac{10^3}{T_{0,0}} - \frac{10^3}{T_{5,0}} \end{array} \right|}{\left| \begin{array}{c} x_{0,0} - x_{5,0} \\ \frac{10^3}{T_{0,0}} - \frac{10^3}{T_{5,0}} \end{array} \right|} \quad (2.9)$$

Вычислив значение тангенса угла  $\alpha$  можно найти энергию активации глубокого уровня по формуле:

$$E_t = \frac{\text{tg} \alpha \cdot 10^3 \cdot k}{\lg(e)}, \quad (2.10)$$

где  $e$  – значение экспоненты ( $e \approx 2.71828$ ),  $k$  – постоянная Больцмана. Если значение  $k$  взять в эВ·К<sup>-1</sup>, то значение энергии активации глубокого уровня будет найдено в эВ.

Для нахождения сечение захвата необходимо найти значение ординаты при пересечении прямой Аррениуса и оси ординат (лучше всего это сделать с использованием подобия треугольников). После нахождения значения ординаты (зн. орд.), её следует подставить в следующую формулу:

$$S = \frac{h^3 \cdot \exp\left(\frac{\text{зн.орд.}}{\lg(e)}\right)}{16 \cdot \pi \cdot m \cdot k}, \quad (2.11)$$

где  $h$  – постоянная Планка,



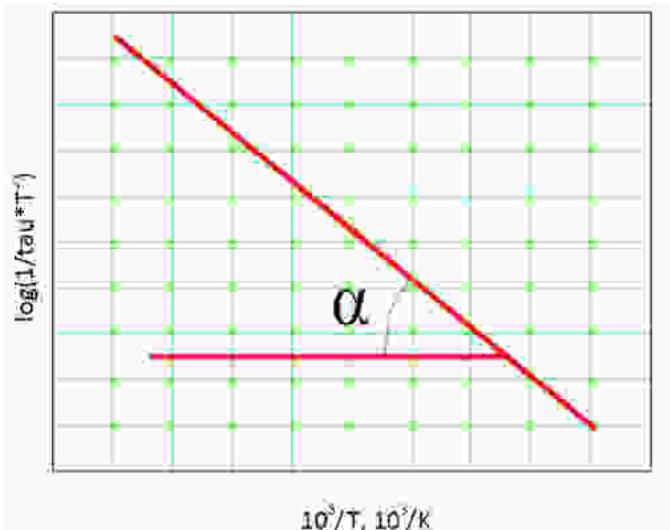


Рис. 13. Прямая Арениуса с обозначенным углом альфа

- Таблицы с результатами, полученными при анализе спектра для данного образца структуры.
- Окончательные значения результатов расчета.
- Выводы по расположению ГУ и предположения о веществах, создающих эти уровни.

#### 4. Библиографический список

1. Lang D.V. Deep level transient spectroscopy: A new method to characterize traps in semiconductors // J. Appl. Phys. V.45. No.7. 1974. p. 3023-3032.
2. Денисов А.А., Лактюшкин В.Н., Садофьев Ю.Г. Релаксационная спектроскопия глубоких уровней. Обзоры по электронной технике. Серия 7. Вып. 15(1141). 1985. 52 с.
3. [http://www.coolreferat.com/Метод\\_РСТГУ](http://www.coolreferat.com/Метод_РСТГУ). 12.04.2012
4. Кузнецов Н.И. Токовая релаксационная спектроскопия глубоких уровней (i-DLTS). <http://journals.ioffe.ru/ftp/1993/10/p1674-1679.pdf>. 05.04.2012

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №2

### ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛЬТ-ФАРАДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДИОДОВ ШОТТКИ

Цель работы: Изучение свойств барьерной емкости и расчет по экспериментальным данным электрических параметров диодов с контактом металл-полупроводник и профиля распределения концентрации свободных носителей заряда в базе диодной структуры.

#### 1. Краткие теоретические сведения

##### 1.1. Емкость барьера Шоттки

В зависимости от соотношения работ выхода (уровней Ферми) материалов и типа проводимости полупроводника, при контакте металла с полупроводником возможны четыре ситуации. При этом в двух ситуациях наблюдается возникновение обогащенного слоя, а в двух – обедненного и даже инверсного. Если получается обогащенный слой, то для носителей заряда при их движении из материала в материал не образуется потенциального барьера. Если же слой получается обедненный – потенциальный барьер есть. Этот барьер и получил название барьера Шоттки (диод Шоттки) [1, 2].

Форма такого барьера существенно отличается от формы барьеров с неметаллическими веществами. Самое главное – вершина барьера имеет треугольную форму, т. е. толщина его явно уменьшается при приближении энергии частиц к вершине. В результате этого появляется возможность туннельного перехода, вероятность которого повышается по мере приближения к вершине потенциального барьера.

На рис. 1 представлена типичная энергетическая диаграмма перехода металл-полупроводник *n*-типа в равновесном состоянии (без внешнего электрического поля). На этом же рисунке показано распределение носителей заряда. Поскольку электронов в металле намного

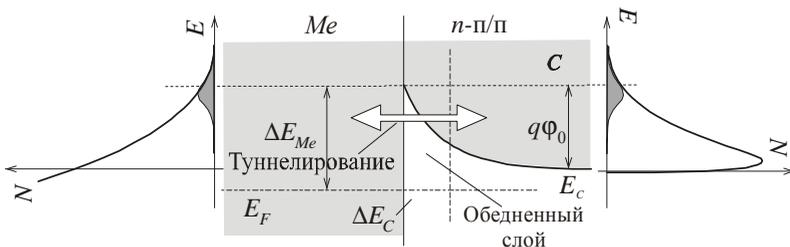


Рис. 1. Энергетическая диаграмма и концентрация носителей заряда в равновесном переходе металл-полупроводник

больше, мы видим только часть распределения.

В плоскости металлургического контакта здесь присутствует разрыв зон  $\Delta E_C$ ; потенциальных барьеров два и они разные по величине:  $\Delta E_{Me}$  – барьер для электронов металла,  $q\phi_0$  – для электронов полупроводника.  $E_F$  – уровень Ферми.

Чтобы рассчитать распределение электрического потенциала в месте контакта, необходимо решить уравнение Пуассона. В *предположении обеднения* (в обедненном слое вблизи металлургической границы отсутствуют носители заряда) заряд в обедненной области протяженностью  $\delta$  обусловлен зарядами ионизированных доноров  $N_D$ . В этом случае решение уравнения дает следующие результаты (рис. 4):

$$E = \frac{q}{2\varepsilon_s \varepsilon_0} N_D (\delta - x) \quad (1)$$

$$\phi = -\frac{q}{2\varepsilon_s \varepsilon_0} N_D (\delta - x)^2 + \phi_{п/п}, \quad (2)$$

где  $\varepsilon_s$  – диэлектрическая проницаемость полупроводника. Из уравнения (2) можно получить, что

$$\delta = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s \varepsilon_0}{qN_D} (\phi_0 - U)}, \quad (3)$$

где  $\phi_0$  – контактная разность потенциалов, а  $U$  – приложенное напряжение. Пространственный заряд в полупроводнике равен

$$Q_s = qN_D \delta \cdot S = S \sqrt{2\varepsilon_s \varepsilon_0 q N_D (\phi_0 - U)}, \quad (4)$$

где  $S$  – площадь перехода Шоттки.

По определению, емкость – это скорость изменения заряда при изменении приложенного напряжения, т. е.

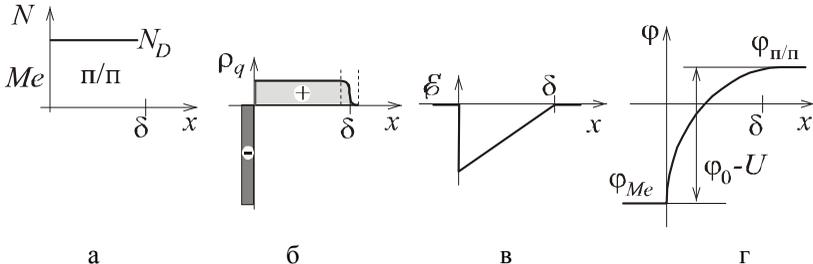


Рис. 2. Распределение примеси, заряда, напряженности электрического поля и потенциала в переходе Шоттки. (а) - распределение примеси; (б) - распределение заряда; (в) - распределение напряженности; (г) - распределение потенциала

$$C = S \sqrt{\frac{\epsilon_s \epsilon_0 q N_D}{2(\phi_0 - U)}} = \frac{\epsilon_s \epsilon_0 S}{\delta} \quad (5)$$

Выразим полное напряжение, приложенное к переходу, через емкость:

$$\phi_0 - U = \frac{q \epsilon_s \epsilon_0 N_D S^2}{2C^2} . \quad (6)$$

Это соотношение показывает, что график зависимости квадрата величины, обратной емкости, от напряжения смещения должен представлять прямую линию. Зная наклон этой линии, можно определить уровень легирования полупроводника  $N_D$ , а точка пересечения прямой с осью абсцисс дает значение  $\phi_0$ . На практике наиболее серьезная неточность возникает при определении  $\phi_0$  по пересечению графика с осью

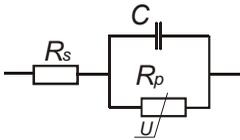


Рис. 3. Эквивалентная схема диода Шоттки

напряжений, что же касается наклона кривой, то он обычно позволяет довольно точно определить концентрацию примеси. Эквивалентная схема диода Шоттки показана на рис. 3. Резистор  $R_s$  представляет собой сопротивление объема полупроводника (сопротивление базы), а  $R_p$  – нелинейное сопротивление собственно перехода Шоттки, зависящее от приложенного напряжения [3].

Количественной характеристикой эффекта поля, характеризующей глубину проникновения поля в полупроводник, является дебаевская длина экранирования.

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon \epsilon_0 kT}{q N_D q}} , \quad (7)$$

где  $N_D$  – концентрация доноров.

Таким образом, по физическому смыслу дебаевская длина экранирования  $L_D$  соответствует среднему расстоянию, на которое проникает электрическое поле в полупроводник при малых уровнях возмущения [3].

## 1.2. Классификация адмиттансных методов измерений

*Адмиттанс* (admittance, или полная проводимость) – комплексная величина, характеризующая способность электрической цепи или прибора проводить ток под воздействием приложенного переменного напряжения данной частоты  $f$ . Для измерений адмиттанса используются RLC-метры (сопротивление – индуктивность – емкость), или измерители иммитанса [4].

*Иммитанс* – общее название для адмиттанса и импеданса (комплексного сопротивления). Уравновешивание измерительной схемы в приборе осуществляется одновременно по емкостной и активной составляющим адмиттанса  $Y$ :

$$Y = \frac{1}{Z} = G + jB, \quad G = \frac{1}{R}, \quad B = 2\pi fC$$

где  $G$  – активная часть адмиттанса – проводимость (conductance);  $B$  – емкостная часть (susceptance);  $R$  – сопротивление;  $C$  – емкость. Величина, обратная адмиттансу, – импеданс  $Z$ .

Адмиттанс полупроводникового прибора как активного элемента определяется его электронным спектром и поэтому зависит от температуры, приложенного к структуре напряжения и частоты измерительного сигнала.

В связи с этим существует ряд экспериментальных методов анализа свойств полупроводников, базирующихся на регистрации адмиттанса исследуемой структуры в зависимости от одного из вышеперечисленных параметров. Все адмиттансные методы условно с точки зрения кинетики процесса могут быть разделены:

- на квазистатические (метод вольт-фарадных характеристик), в них полагается отсутствие зависимости результатов измерения от частоты;
- на динамические (температурные или частотные спектры емкости и проводимости), когда измерения производят на определенной частоте и отклик системы является функцией частоты тестового сигнала;
- на нестационарные (изотермическая релаксация и емкостная спектроскопия переходных процессов, или DLTS). В этих режимах исследуется процесс возвращения системы к равновесию после резкого скачка приложенного к структуре смещения.

Заметим, что данная классификация методов спектроскопии адмиттанса довольно условна, так как, например, вольт-фарадные характеристики в эксперименте измеряются на определенной частоте и при исследовании с их помощью структур с глубокими центрами или квантовыми точками нельзя пренебрегать динамическими свойствами глубоких уровней [4].

### **1.3. Методы исследования вольт-фарадных характеристик полупроводниковых диодных структур**

Для измерения параметров полупроводниковых материалов в настоящее время используется большое количество разнообразных методов. Одним из них является метод *вольт-фарадных характеристик*.

Одной из отличительных черт этих методов является то, что исследуется не монолитный полупроводник, а структура на основе полупроводника, обладающая емкостью: металл–полупроводник, металл–диэлектрик–полупроводник (МДП-структура) или  $p-n$ -переход. С их помощью проводят измерения концентрации легирующих примесей, глубоких уровней и их характеристик, генерационного времени неравновесных носителей заряда, плотности поверхностных состояний и их распределения по энергиям [4].

Вольт-фарадные методы измерения параметров полупроводников основаны на определении зависимости емкости структуры, обусловленной наличием объемного заряда в приповерхностной области полупроводника, от приложенного к ней напряжения.

Для расчёта применяется приближение Мотта-Шоттки:

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2}{e\epsilon_0\epsilon_r N(x) A^2} (U_{\text{диф}} + U), \quad (8)$$

где  $A$  - площадь контакта Шоттки (или перехода);  $e$  - элементарный заряд;  $\epsilon_0$ ,  $\epsilon_r$  - диэлектрическая проницаемость вакуума и образца;  $U$  - приложенное обратное напряжение смещения;  $U_{\text{диф}}$  - диффузионный потенциал.  $N(x)$  - концентрация ионизированных доноров в обеднённом слое толщиной  $x$  или концентрация основных носителей заряда в той области материала, которая станет обеднённой после приложения напряжения смещения, находят дифференцированием уравнения (7) в обеднённом слое толщиной  $x$  по формуле

$$N(x) = \frac{C^3(U)}{e\epsilon_0\epsilon_r A^2} \left( \frac{dC(U)}{dU} \right) \quad (9)$$

Ширина области пространственного заряда и соответствующая толщина слоя  $x$ , определяются с помощью формулы конденсатора по измеряемой величине ёмкости

$$x = \frac{\epsilon_0\epsilon_r A}{C(U)}. \quad (10)$$

Приближение (9) содержит допущение о равенстве нулю длины Дебая  $L_D$ , что вносит погрешности в измерение. Возможности метода ограничены также и явлениями пробоя, т. к. максимально применимое напряжение ограничено напряжением пробоя полупроводника, зависящим от концентрации примеси. Максимальная глубина измерения определяется шириной области пространственного заряда при пробое. Наличие глубоких уровней в запрещённой зоне отрицательно влияет на результаты измерений профиля. Если концентрация уровней ловушек мала, и они распределены в очень узкой области, то этот метод

применим для их исследования. В уравнении (1.24) не учтено влияние тока, текущего через р-п переход или диод Шоттки, на результаты измерения. Основная часть тока определяется поверхностными токами утечки. Если измерения вести на переменном токе, то можно избежать ряда погрешностей для  $C^2$  от  $(U+U_{\text{диф}})$

Для однородного распределения примеси это прямая линия, угловой коэффициент которой пропорционален концентрации. Если распределение примеси не однородно по глубине, то угловой коэффициент полученной кривой для каждого отдельного значения диффузионного потенциала  $U_{\text{диф}}$  определяет концентрацию ионизированных примесей в обедненном слое малой толщины  $x$ , которая соответствует  $U_{\text{диф}}$ .

Одновременно на структуру могут оказывать влияние другие факторы, которые могут варьироваться при измерениях. К ним относятся воздействие на структуру внешнего фотоактивного излучения и ее нагревание по определенному закону. В первом случае емкость, возникающую за счет поглощения излучения, называют фотоемкостью, а во втором – термостимулированной емкостью.

Второй отличительной особенностью методов является наличие двух электрических сигналов, подаваемых на структуру. Первый – это постоянное напряжение (напряжение смещения), которое обеспечивает поддержку рабочей точки прибора, и второй – переменное напряжение малой амплитуды (измерительный сигнал), необходимое для измерения собственно емкости структуры.

В основе вольт-фарадных методов измерения лежит электронная теория приповерхностной области пространственного заряда и дифференциальной поверхностной емкости. Поэтому важным моментом измерительного процесса является понимание физических процессов, происходящих в полупроводниковых структурах, которые приводят к появлению емкости [4-6].

#### **1.4. Адмиттансная диагностика гетеропереходов и квантовых ям**

Типичная вольт-фарадная (C-V) характеристика полупроводниковой диодной структуры, содержащей несколько квантовых ям, приведена на рисунке 1. Каждое горизонтальное плато на ней соответствует наличию, в общем случае, гетероперехода, квантовой ямы (КЯ) или квантовой точки (КТ). Причина появления плато на C-V зависимости объясняется тем, что область объемного заряда, расширяясь с увеличением приложенного смещения, пересекает своей границей участки обогащения основными носителями заряда, которые возникают вблизи гетероперехода, квантовой ямы или квантовой точки [4].

Заряд, аккумулированный в квантовой яме, зависит от таких параметров, как разрыв зон на гетерогранице  $\Delta E$ , эффективной массы носителей и ширины квантовой ямы, которые, в свою очередь, определяют положение энергетических уровней и волновых функции локализованных состояний в квантовой яме. Поэтому анализ емкости, связанной с квантовой ямой, позволит определить все эти параметры. Вводится понятие емкостной спектроскопии квантоворазмерных состояний, когда, увеличивая напряжение обратного смещения на барьере Шоттки, заполненные электронами энергетические уровни в слое КЯ последовательно опустошаются при прохождении через уровень Ферми

Обычно для соотношения между емкостью и напряжением в диоде Шоттки или в резком несимметричном  $p$ - $n$ -переходе, содержащим гетеропереходы и квантоворазмерные слои, применяется формула для барьерной емкости

$$C = A \sqrt{\frac{q \varepsilon \varepsilon_0 n}{2(\varphi_k - V)}}. \quad (11)$$

Но, в отличие от объемного полупроводника, в данном случае под  $n$  скорее понимается концентрация подвижных носителей заряда, а не легирующей примеси. Здесь:  $\varepsilon$  – диэлектрическая проницаемость полупроводника,  $\varphi_k$  – величина встроенного потенциала,  $A$  – площадь образца,  $q$  – элементарный заряд [6].

Дифференцирование  $C$ - $V$ -зависимости в соответствии с формулой

$$n(d) = 2 \left[ \varepsilon \varepsilon_0 e A^2 \frac{d}{dV} \left( \frac{1}{C^2} \right) \right]^{-1} \quad (12)$$

позволяет получить профиль концентрации основных носителей заряда по глубине гетероструктуры. В формуле (11)  $d$  – ширина области объемного заряда, которая обычно определяется по формуле плоского конденсатора

$$d = \frac{\varepsilon \varepsilon_0 A}{C}. \quad (13)$$

Современная практика вольт-емкостных измерений наноразмерных структур однозначно доказывает, что емкостная спектроскопия оказывается чрезвычайно эффективной в профилировании наногетероструктур, демонстрируя селективность на уровне 1-2 нм, недостижимую для многих современных диагностических методов, включая электронно-зондовые. Если к тому же учесть умеренную стоимость емкостных мостов, то следует признать спектроскопию адмиттанса



Рис. 4. Структурная схема установки для исследования ВФХ

или вольт-фарадных характеристик доступным и очень эффективным методом нанодиагностики.

Современное развитие информационных технологий и измерительной техники позволяют реализовать исследование ВФХ с высокой точностью и практически полностью автоматизировать процесс их исследования. Структурная схема типичной установки для исследования ВФХ показана на рис. 4.

Исследуемый диод помещается в термостат, который позволяет поддерживать температуру в широких пределах. Общее управление осуществляется персональным компьютером (ПК) с установленным специализированным программным обеспечением. Программное обеспечение через стандартный интерфейс (например, RS-232, GPIB, USB) обеспечивает обмен информацией между регулятором температуры и измерителем иммитанса. Последний, как правило, имеет встроенный управляемый генератор синусоидального измерительного сигнала, управляемый источник напряжения смещения и измеритель RLC. Управление осуществляется устройством управления, которое изменяет частоту сигнала, напряжение смещения и производит измерение иммитанса диода по командам, переданным через интерфейс. Информация отображается на экране ПК и записывается в файл данных для дальнейшей обработки. В качестве измерителя иммитанса могут использоваться приборы таких известных зарубежных фирм как Agilent E4980A, или отечественные типа МНИПИ Е7-20 и т.п.

## 2. Выполнения лабораторной работы

Лабораторная работа проводится в виде виртуального эксперимента по исследованию ВФХ полупроводниковых диодов с использованием программы, установленной на персональном компьютере (ПК), в виде лабораторной автоматизированной установки, которая после выбора образца диода из предложенного списка строит его ВФХ и отображает ее на экране монитора.

Установка состоит из комбинаций приборов, объединенных общим управлением. Блок формирования напряжения обеспечивает изменение напряжения на выбранном из списка образце диодной структуры с начального, до максимального значения с шагом, которые устанавливаются оператором. Изменение этого напряжения происходит через временной интервал, также выставляемый оператором. Напряжение измеряется цифровым вольтметром с автоматической установкой пределов измерения. После изменения напряжения на структуре с некоторым временем задержки производится измерение емкости диода прибором «Фарадметр». Измеренные значения отображаются точкой на графическом мониторе в координатах емкость - напряжение. Полученную ВФХ можно записать в файл данных, путь к которому заранее определяется оператором. Этот файл данных можно обработать другими математическими пакетами прикладных программ.

При подготовке к работе необходимо изучить методические указания к лабораторной работе и затем получить у преподавателя задание. Для начала работы необходимо запустить файл «CV\_лабор» на Рабочем столе ПК. После чего на экране ПК появится окно, изображенное на рис. X,а. Оно отображает название выполняемой лабораторной работы и некоторые интуитивно понятные элементы управления. Лабораторная работа состоит **из двух частей**. В первой части работы исследуется вольт-фарадная характеристика (ВФХ) выбранного образца диодной структуры (см. рис. X,б), а **во второй части** произ-



а

б

Рис. 5. Внешний вид начальных окон лабораторной работы

водится обработка полученной ВФХ программой MathCAD для расчета высоты потенциального барьера и концентрации доноров и акцепторов в полупроводниковой структуре. Конкретный образец структуры выбирается в окне выбора образца (рис. X,б) щелчком левой кнопки мыши по соответствующей строке появившегося меню.

## 2.1. Исследование ВФХ полупроводниковой структуры

После щелчка по кнопке «К исследованию» открывается рабочее окно автоматизированной установки, показанное на рис. X. В этом окне отображаются измерительные приборы и элементы управления работой установки.

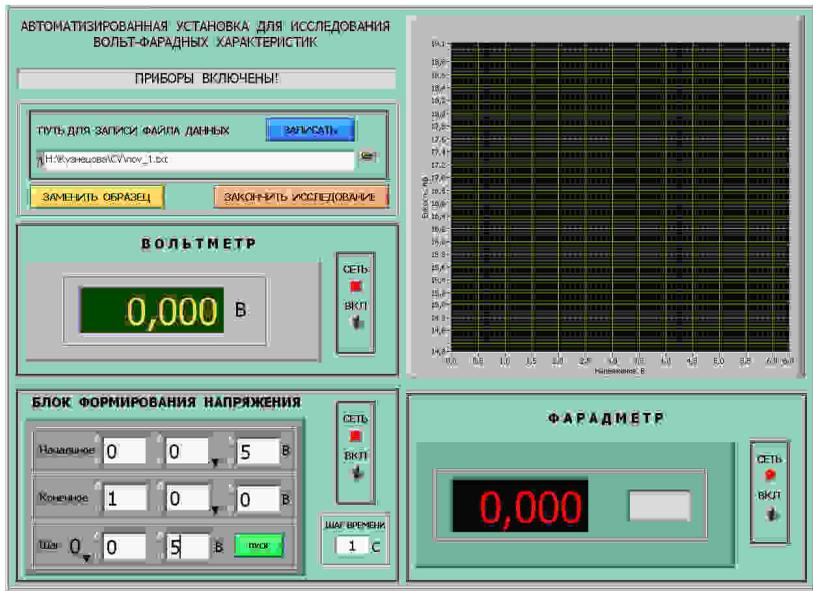


Рис. 6. Рабочее окно автоматизированной установки для исследования вольт-фарадных характеристик полупроводниковых структур

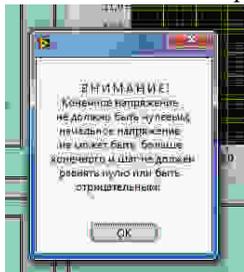
Необходимо включить приборы щелчком по тумблерам «Сеть». Если включены не все приборы, то отображается мигающая надпись «Включите приборы». Исследование ВФХ выбранного образца полупроводниковой структуры проводить в следующей последовательности:

1. На рабочем столе ПК сформировать пустой файл в формате \*.txt (например, **группаXXX.txt**). Рекомендуется воспользоваться стандартной программой «Блокнот» операционной системы Windows.

В этот файл будут сохранены полученные в лабораторной работе данные после исследования ВФХ выбранной диодной структуры.

2. Используя кнопку «Обзор» рядом с окном «Путь для записи файла данных» указать на файл (см. п. 1), в который будут занесены данные, полученные в лабораторной работе.

3. Установить необходимое начальное, конечное напряжение и шаг его изменения в «Блоке формирования напряжения», используя кнопки «Инкремент-декремент» рядом с цифровыми индикаторами на панели блока или прямым вводом в соответствующее окно значения,



набираемого с клавиатуры ПК. **Внимание!** При неправильном вводе данных на экране появляется сообщение о неверно введенных значениях (см. рисунок слева). В этом случае после щелчка по кнопке «OK» ввести новые данные.

4. Установить шаг времени в секундах, через которое будет происходить изменение напряжения на структуре и измерение значения емкости. Ввод данных осуществлять прямым набором с клавиатуры ПК после щелчка левой кнопкой мыши в окно.

5. Запустить процесс исследования ВФХ щелчком по кнопке «Пуск» на «Блоке формирования напряжения». Дождаться окончания исследования и сохранить полученные данные в выбранный файл щелчком по кнопке «Записать».

6. При необходимости провести измерения с другим образцом щелкнуть по кнопке «Заменить образец» и повторить весь процесс измерения, начиная с п. 1.

7. Закончив полный цикл измерений выключить все приборы и щелкнуть по кнопке «Закончить исследование».

## 2.2. Обработка ВФХ

Для обработки, полученной в первой части лабораторной работы ВФХ необходимо воспользоваться пакетом прикладных программ «MathCAD». Данные, сохраненные в первой части лабораторной работы в виде текстового файла требуют преобразования. Это связано с тем, что данные в нем представлены в формате с десятичной запятой, а программа MathCAD воспринимает данные в формате с десятичной точкой. Для этого в программе «Блокнот» следует открыть полученный файл и, используя меню «Правка» заменить запятую на точку во всем файле.

Пример обработки данных в программы MathCAD представлен ниже и позволяет произвести обработку полученных данных.

Считывание данных из файла

$G := \text{READPRN} ("F:\text{RGRTU}\text{nov}_1.\text{txt} ")$

Назначение количества точек и выделение массива U и C

$i := 0..150$

$U_i := G_{i,0}$

$C_i := G_{i,1}$

$G =$

	0	1	2
0	0	23.905	
1	0.1	22.423	
2	0.2	21.207	
3	0.3	20.188	
4	0.4	19.32	
5	0.5	18.572	
6	0.6	17.92	
7	0.7	17.348	
8	0.8	16.841	
9	0.9	16.39	

$U =$

	0
0	0
1	0.1
2	0.2
3	0.3
4	0.4
5	0.5
6	0.6
7	0.7
8	0.8
9	0.9

$C =$

	0
0	23.905
1	22.423
2	21.207
3	20.188
4	19.32
5	18.572
6	17.92
7	17.348
8	16.841
9	16.39

Заряд электрона  $q := 1.6 \cdot 10^{-19}$

Диэлектрическая проницаемость вакуума  $\epsilon_0 := 8.85 \cdot 10^{-12}$

Диэлектрическая проницаемость кремния  $\epsilon := 12.9$

Масса свободного электрона  $m_0 := 9.1 \cdot 10^{-31}$

Температура образца  $T := 293$

Площадь диода (в скобках радиус диода)  $S := \frac{\pi \cdot (3 \times 10^{-4})^2}{4}$

Эффективная масса плотности состояний электрона в кремнии  $m_n := 0.067 m_0$

Постоянная Планка  $h := 6.62 \cdot 10^{-34}$

Постоянная Больцмана  $k := 1.38 \cdot 10^{-23}$

Тепловой потенциал  $\phi_t := \frac{k \cdot T}{q}$

$\phi_t = 0.025$

Индекс массива начинаем с нуля  $\text{ORIGIN} := 0$

Емкость в Фарадах  $C_i := C_i \cdot 10^{-12}$

Готовим построение линейной функции

для удельной емкости  $c_i := \frac{1}{\left(\frac{C_i}{S}\right)^2}$

Определяем параметры линейной функции по точкам исходных данных

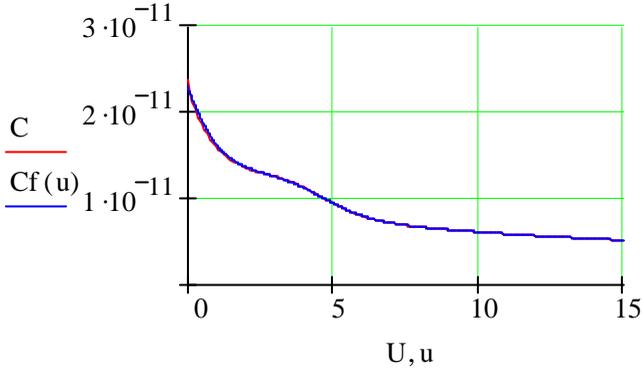
$a := \text{intercept}(U, c)$   $b := \text{slope}(U, c)$   $u := 0, 0.02 \dots 15$

Формируем математическое выражение для исходных данных методом сглаживания

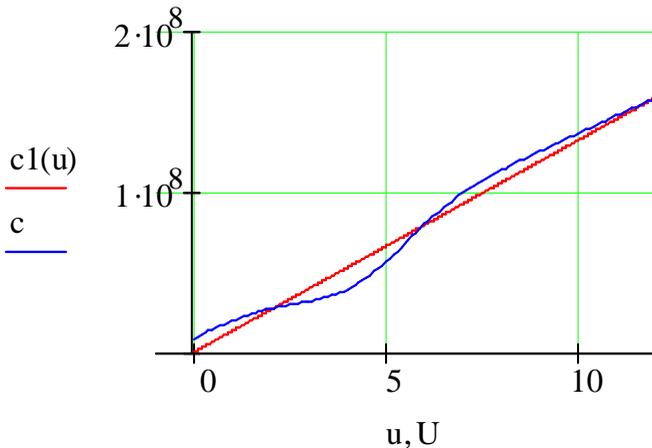
$a = 1.546 \times 10^4$   $b = 1.319 \times 10^7$   $c1(u) := b \cdot u + a$

$S_{mu} := \text{supsmooth}(U, C)$     $CF := \text{pspline}(U, S_{mu})$   
 $C_f(u) := \text{interp}(CF, U, S_{mu}, u)$

Построение графика  $C=F(U)$



Построение графика  $1/(C/S)^2=F(U)$  совместно с линеаризованной прямой



Напряжение  $U_i$ , соответствующее пересечению прямой с осью напряжений

$$U_i := \frac{-a}{b} \quad b = 1.319 \times 10^7 \quad U_i = -1.172 \times 10^{-3}$$

Средняя концентрация свободных электронов

$$N_d := 2 \cdot \frac{1}{q \cdot b \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_0}$$

$$N_d = 8.299 \times 10^{21}$$

$$N_c := 2 \cdot \left( \frac{2\pi \cdot m_n \cdot k \cdot T}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

$$N_c = 4.203 \times 10^{23}$$

$$\xi := \phi_t \cdot \ln \left( \frac{N_c}{N_d} \right)$$

$$\xi = 0.099$$

Высота барьера

$$\phi_b := |U_i| + \xi + \phi_t$$

$$\phi_b = 0.126$$

Сглаживание данных и получение профиля распределения концентрации мелких доноров по глубине базы диода

$$\underline{S_{mu}} := \text{supsmooth}(U, C)$$

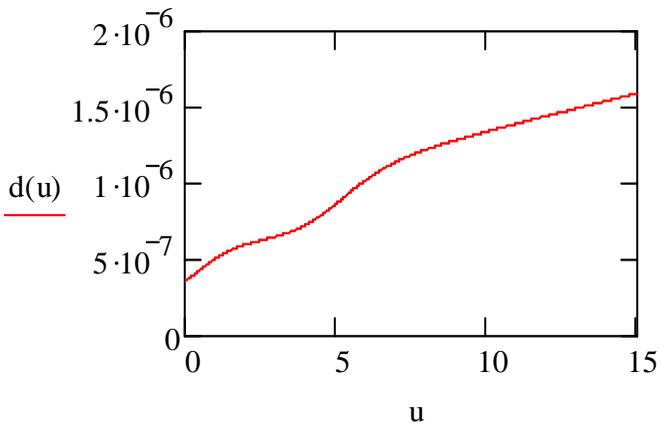
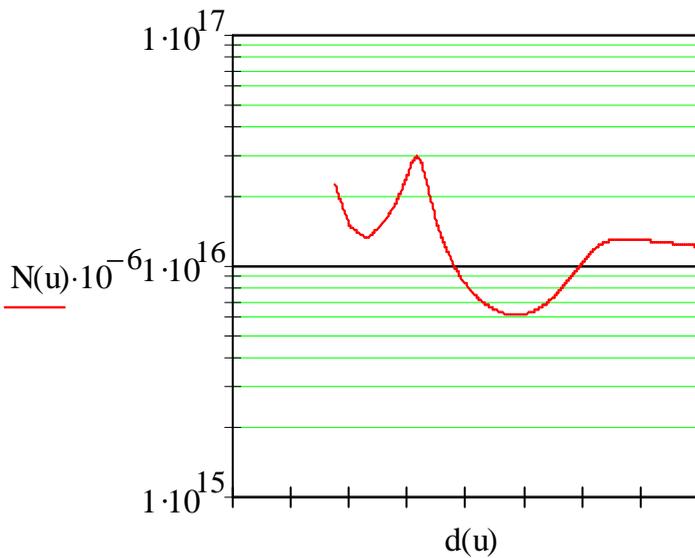
$$\underline{CF} := \text{pspline}(U, S_{mu})$$

$$\underline{Cf}(u) := \text{interp}(CF, U, S_{mu}, u)$$

Концентрация  $N$  в  $\text{см}^{-3}$ , глубина  $d$  в  $\mu\text{м}$

$$\underline{N}(u) := 1.3 \left| \frac{\left( \frac{Cf(u)}{S} \right)^3}{q \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot \frac{d}{du} \frac{Cf(u)}{S}} \right|$$

$$d(u) := \frac{\varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot S}{Cf(u)}$$

График зависимости  $N(d)$ 

Определяем длину Дебая

$$Ld := \left( \frac{\varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot k \cdot T}{q^2 \cdot Nd} \right)^{\frac{1}{2}}$$

$$Ld = 4.661 \times 10^{-8}$$

### 3. Последовательность выполнения работы

1. Получить у преподавателя задание на исследование конкретных образцов диодов в указанном диапазоне температур и напряжений смещения.

2. Для каждого из образцов диодов и значения температур построить ВФХ и сохранить ее в виде файла данных на рабочем столе в соответствии с пунктами 1 - 6 раздела 2.1 методического пособия.

3. Преобразовать данные из файла ВФХ, представленные в формате с десятичной запятой, в формат с десятичной точкой для использования его в программе MathCAD, как указано в разделе 2.2.

4. Рассчитать с использованием программы MathCAD по указанному в разделе 2.2 примеру основные параметры образцов диодов.

### 4. Содержание отчета

4.1. Отчет выполняется каждым студентом индивидуально.

4.2. Отчет должен содержать:

- название работы;
- цель работы;
- основные теоретические сведения;
- схемы измерения;
- полученные расчетные данные;
- необходимые графики, требуемые по заданию.

### 5. Вопросы для подготовки к защите лабораторной работы

1. Объясните возникновение обедненного слоя на границе p-n перехода.

2. При каких условиях образуется выпрямляющий контакт металл-полупроводник?

3. Что такое барьерная емкость p-n перехода и как она зависит от приложенного напряжения?

4. Нарисуйте зависимость  $1/C^2 = f(U_{обр})$  для диода Шоттки на однородно легированном полупроводнике.

5. Нарисуйте зависимость  $1/C^2 = f(U_{обр})$  для диода Шоттки на полупроводнике с линейным увеличением (уменьшением) концентрации примеси.

6. От чего зависит высота потенциального барьера диода Шоттки?

7. Как определить высоту потенциального барьера диода Шоттки по его C-V характеристики?

8. Какие требования предъявляются к полупроводниковым структурам, чтобы их можно было исследовать методом вольт-

фарадных характеристик?

9. Чем ограничена возможность измерения профиля концентрации примеси при ее резком изменении?

10. Объясните назначение блоков структурной схемы установки для исследования ВФХ.

11. Можно ли измерять профиль концентрации примеси в р-п переходах, используя методику, описанную в данной работе?

12. Что такое «квантовая яма»?

13. Какой будет зависимость емкости от обратного напряжения в случае плавного р-п перехода?

14. Что такое *адмиттанс*, *иммитанс*, *импеданс*?

### Библиографический список

1. Родерик Э.Х. Контакты металл-полупроводник. М.: Радио и связь, 1982. 209 с.

2. Зи С. Физика полупроводниковых приборов. М.: Мир. 1984. Т.1. 456 с.

3. Шалимов К.В. Физика полупроводников. М.: Энергоатомиздат, 1985. 390 с.

4. Зубков В.И. Диагностика полупроводников наногетероструктур методами спектроскопии адмитанса. СПб.: ООО «Техномедиа» / Изд-во «Элмор», 2007. 220 с.

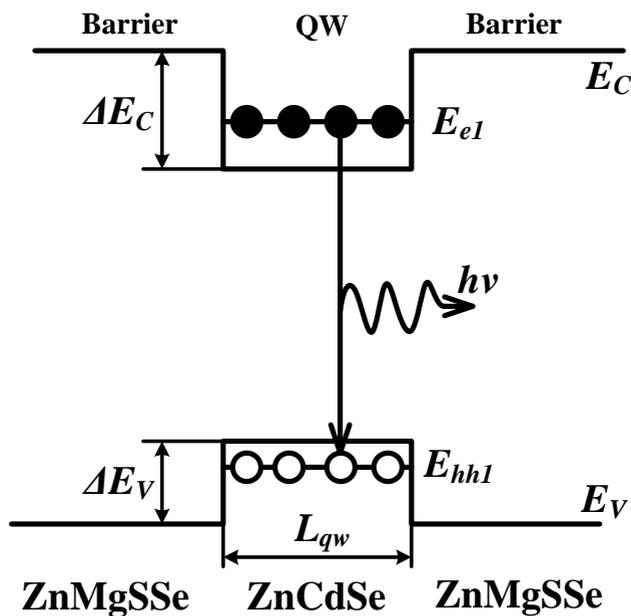
5. [http://kipr-margtu.ucoz.ru/410/3.Volt-faradnye\\_har-ki.doc](http://kipr-margtu.ucoz.ru/410/3.Volt-faradnye_har-ki.doc). 15.03.2012.

6. В. И. Мурыгин, А. У. Фаттахдинов, В. Б. Гундырев, Д. А. Локтев. Особенности зависимостей барьерной емкости диода от напряжения смещения и температуры. <http://applphys.vimi.ru/2006/2006-4/06-4-22.pdf>. 16.03.2012

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

### ФИЗИКА НАНОСИСТЕМ

Методические указания  
к лабораторным работам



УДК 621.315.592

Физика наносистем: методические указания к лабораторным работам / Рязан. гос. радиотехн. ун-т; сост.: В.Г. Литвинов, Н.Б. Рыбин, Н.В. Рыбина, А.В. Ермачихин, Д.С. Кусакин. Рязань, 2015. 24 с.

Содержат краткие теоретические сведения об эффекте размерного квантования, способах расчета разрывов разрешенных энергетических зон, моделирования зонных диаграмм гетероструктур, а также материалы для выполнения двух лабораторных работ по дисциплине “Физика наносистем”.

Предназначены для студентов дневного отделения направления 01.03.04.

Табл. 1. Ил. 9. Библиогр.: 8 назв.

*Гетероструктура, величина разрыва энергетической зоны, упругие напряжения, потенциальная яма, эффект размерного квантования*

Печатается по решению редакционно-издательского совета Рязанского государственного радиотехнического университета.

Рецензент: кафедра биомедицинской и полупроводниковой электроники (зав. кафедрой Т.А. Холомина)

#### Физика наносистем

Составители: Литвинов Владимир Георгиевич  
Рыбин Николай Борисович  
Рыбина Наталья Владимировна  
Ермачихин Александр Валерьевич  
Кусакин Дмитрий Сергеевич

Редактор Р.К. Мангутова  
Корректор С.В. Макушина

Подписано в печать 26.06.15. Формат бумаги 60×84 1/16.

Бумага писчая. Печать трафаретная. Усл. печ. л. 1,5.

Тираж 50 экз. Заказ

Рязанский государственный радиотехнический университет.

390005, Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

Редакционно-издательский центр РГРТУ.

**Лабораторная работа № 1**  
**ИЗУЧЕНИЕ ЭФФЕКТА РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ**  
**ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ**  
**ЯМАХ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ**

**Цель работы**

Изучение эффекта размерного квантования энергии электронов и дырок в потенциальных ямах в полупроводниковых гетероструктурах.

**1. Краткие теоретические сведения**

Возможны три типа зонной диаграммы полупроводникового гетероперехода (рис. 1), образующегося при контакте полупроводниковых материалов с разной шириной запрещенной зоны. Для зонной диаграммы I типа характерно полное перекрытие запрещенной зоны узкозонного полупроводника запрещенной зоной широкозонного полупроводника. При частичном перекрытии запрещенных зон на границе раздела полупроводниковых слоев гетеропереход обладает зонной диаграммой II типа. III тип зонной диаграммы соответствует случаю, когда зонные диаграммы контактирующих полупроводников не перекрываются.

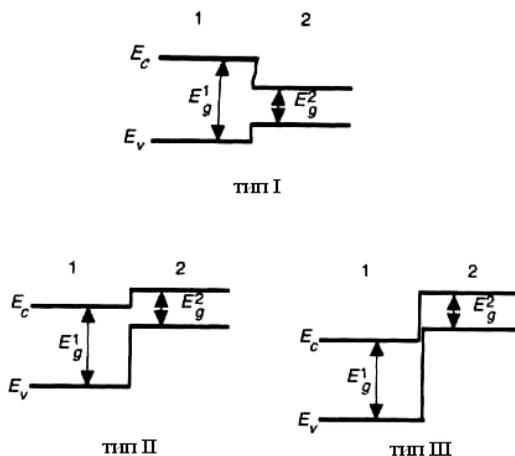


Рис. 1. Зонные диаграммы гетеропереходов трех типов, реализуемые в системе из двух полупроводников (1) и (2), обладающих шириной запрещенной зоны  $E_g^1$  и  $E_g^2$  соответственно

Для построения зонных диаграмм полупроводниковых гетероструктур используется несколько подходов, самым простым и наглядным из которых является правило электронного сродства или модель Андерсона (ПЭС). На рис. 2 представлены два изолированных полупроводника с различной шириной запрещенной зоны  $E_g$ , диэлектрической проницаемостью  $\epsilon$ , работой выхода  $\phi$  и электронным сродством  $\chi$  [1]. Электронное сродство представляет собой энергию, необходимую для удаления электрона со дна зоны проводимости за пределы действия любых диполей и сил изображения. Если вблизи поверхности есть изгиб зон, то электронное сродство определяется работой по удалению электрона непосредственно из-под поверхности, а не из глубины полупроводника.

Электронное сродство и энергия ионизации представляют собой работу по удалению электрона из полупроводника за пределы действия диполей и сил изображения, но с различных начальных уровней. Для электронного сродства начальная энергия отвечает дну зоны проводимости, для энергии ионизации (порога фотоэффекта) — вершине валентной зоны. В обоих случаях энергии зон берутся вблизи поверхности, а не в глубине объема. Для работы выхода начальной энергией является уровень Ферми.

Гетеропереходы используются для создания квантово-размерных структур (КРС), например с квантовыми ямами (КЯ). На основе гетеропереходов с зонной диаграммой I типа удается создать КРС с потенциальными ямами как для электронов, так и для дырок (рис. 3).

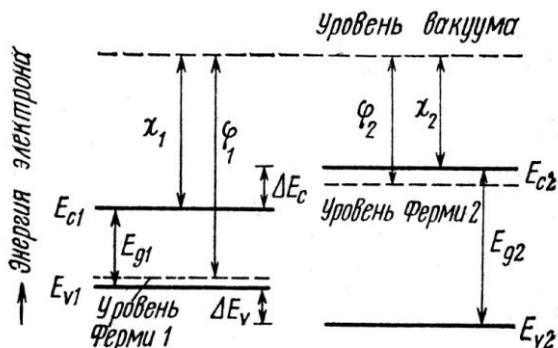


Рис. 2. Энергетическая диаграмма двух полупроводников [1]

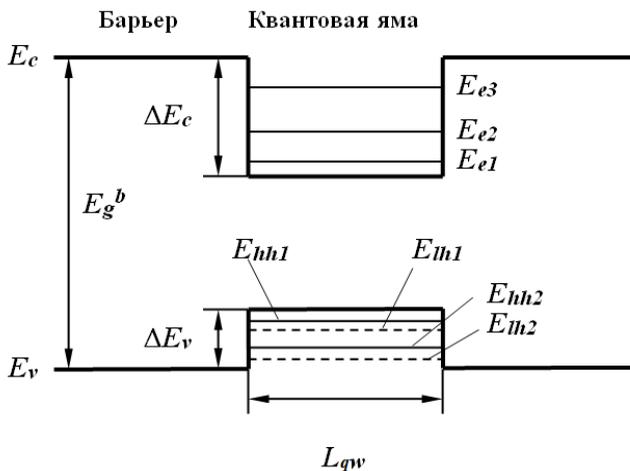


Рис. 3. Энергетическая диаграмма КРС с КЯ и зонной диаграммой I типа

На рис. 3 схематично показаны энергии размерного квантования электронов  $E_e$  в КЯ в зоне проводимости и для тяжелых и легких дырок  $E_{hh}$  и  $E_{lh}$  в КЯ в валентной зоне. Индекс  $qw$  относится к КЯ, а  $b$  – к более широкозонному барьерному слою. Для расчета энергий размерного квантования и оценки энергий излучательных переходов в КЯ необходимо знать глубину КЯ для носителей заряда (НЗ), которая определяется величиной разрыва зоны проводимости и валентной зоны. Для определения величин разрывов валентной  $\Delta E_V$  и зоны проводимости  $\Delta E_C$  воспользуемся правилом электронного сродства. Согласно правилу электронного сродства разрыв зоны проводимости при контакте двух различных ненапряженных полупроводников равен разности значений сродства к электрону:

$$\Delta E_c(x,y) = \chi_c^{qw}(x) - \chi_c^b(y), \quad (1)$$

где в качестве примера  $y$  и  $x$  – характеристики состава тройных твердых растворов полупроводниковых соединений, используемых для получения барьерных слоев и КЯ.

Для тройных соединений  $A_xB_{1-x}C$  (общий анион) или  $AB_yC_{1-y}$  (общий катион) зависимость ширины запрещенной зоны является

квадратичной функцией от содержания компонентов твердого раствора. Для рассматриваемых соединений получим:

$$\begin{aligned} E_{gqw}(x) &= E_{gAC} \cdot x + E_{gBC}(1-x) - B \cdot x(1-x), \\ E_{gb}(y) &= E_{gAB} \cdot y + E_{gAC}(1-y) - B \cdot y(1-y), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $E_{gAC}$ ,  $E_{gBC}$ ,  $E_{gAB}$  – ширины запрещенных зон полупроводниковых соединений AC, BC, AB (например, ZnS, CdS и ZnSe и т.д.) соответственно,  $B$  – параметр изгиба, характеризующий нелинейную зависимость ширины запрещенной зоны в кристалле от состава  $x$  или  $y$  и зависящий от свойств атомов, образующих твердый раствор.

Параметр  $B$  может быть рассчитан из соотношения

$$B = \frac{Z_e}{8\pi\epsilon_0} \left[ \left( \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} \right)^2 (r_A + r_B) \exp \left( -s a_0 \frac{\sqrt{3}}{8} \right) \right], \quad (3)$$

где  $Z_e$  – заряд замещаемого иона,  $a_0$  – постоянная кристаллической решетки соответствующего тройного соединения,  $s$  – постоянная экранирования,  $r_A$ ,  $r_B$  – ковалентные атомные радиусы. Формула (3) дает приближенное значение параметра  $B$ . Более точные значения параметра изгиба получают экспериментальным путем. Например, для расчета ширины запрещенной зоны параметр изгиба  $B$  составляет 0,60 эВ и 0,61 эВ при  $T=300$  К для  $Zn_xCd_{1-x}S$  и  $ZnS_ySe_{1-y}$  соответственно. Для Zn, Cd, S, Se, Te атомные радиусы составляют 122, 144, 105, 120, 138 пм соответственно.

Поскольку значения ширины запрещенной зоны бинарных соединений при  $T = 0$  К неизвестны, их можно рассчитать через температурный коэффициент ширины запрещенной зоны, т.е. как

$$E_g^{0K}(x) = E_g^{300K}(x) - 300K \cdot dE_g(x)/dT. \quad (4)$$

Знак “-” учитывает, что ширина запрещенной зоны со снижением температуры увеличивается.

Величины параметра кристаллической решетки  $a_0$ , ширины запрещенной зоны  $E_G$ , упругих постоянных  $C_{11}$  и  $C_{12}$ , деформационных потенциалов  $a$  и  $b$ , относительных эффективных масс электронов  $m_e$ ,

тяжелых  $m_{hh}$  и легких  $m_{lh}$  дырок, спинорбитального расщепления  $\Delta_0$  для ZnSe, CdSe, ZnTe и CdTe, ZnS, CdS (кубическая решетка) представлены в таблице.

### Основные параметры полупроводниковых соединений

Соединение	$a_0$ , Å, при 300 К	$E_G$ , эВ, $T=10$ К	$\chi_c$ , эВ	$C_{11}$ , $10^{10}$ Н/м <sup>2</sup>	$C_{12}$ , $10^{10}$ Н/м <sup>2</sup>	$a_c$ , эВ, или $a_c$ и $a_v$	$b$ , эВ	$m_e$	$m_{lh}$	$m_{hh}$	$\Delta_0$ , эВ
ZnSe	5,6676	2,821	4,09	8,26	4,98	-4,25	-1,2	0,16	0,15	0,6	0,43
CdSe	6,077	1,765	4,95	6,67	4,63	-3,664	-0,8	0,13	0,13	0,49	0,42
ZnTe	6,104	2,39	3,53	7,13	4,07	-5,48	-1,3	0,12	0,15	0,65	0,9
CdTe	6,48	1,59	4,28	5,62	3,94	-3,85	-1,15	0,1	0,1	0,4	0,9
ZnS	5,4093	3,84	3,90	10,67;	6,66	-4,09 2,31	-1,25	0,4			0,070
CdS	5,832	2,56	4,79	9,68	06,17	-2,579 1,45	-1,10	0,21			0,068

Соответствующие параметры, кроме ширины запрещенной зоны, для трехкомпонентных твердых растворов, например  $Zn_xCd_{1-x}S$ ,  $Zn_yS_ySe_{1-y}$ , с разным содержанием цинка  $x$  и серы  $y$  рассчитываются методом линейной интерполяции. Постоянная кристаллической решетки для соответствующего твердого раствора может быть найдена из следующих соотношений:

$$a_0^{qw}(x) = a_{0ZnS} \cdot x + a_{0CdS} \cdot (1-x); \quad a_0^b(y) = a_{0ZnS} \cdot y + a_{0ZnSe} \cdot (1-y),$$

где  $a_0^{qw}$  – параметр постоянной кристаллической решетки для материала квантовой ямы  $Zn_xCd_{1-x}S$ ,  $a_0^b$  – параметр постоянной кристаллической решетки для материала буферного или барьерного слоя  $Zn_yS_ySe_{1-y}$ .

#### 1.1. Одномерная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками

Рассмотрим микрочастицу, совершающую одномерное движение вдоль оси  $x$  в потенциальной яме, изображенной на рис. 4.

Математически одномерный потенциал записывается в виде

$$U = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L_{qw} \\ \infty, & x > L_{qw}, x < 0, \end{cases} \quad (5)$$

где  $L_{qw}$  – ширина потенциальной ямы.

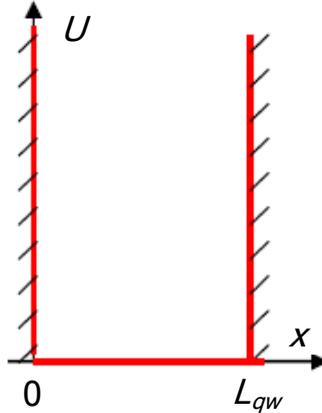


Рис. 4. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

Запишем уравнение Шредингера для одномерной потенциальной ямы:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + U\psi = E\psi, \quad (6)$$

где  $\hat{H}$  – оператор Гамильтона,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m$  – эффективная масса микрочастицы,  $U$  – потенциальная энергия микрочастицы,  $E$  – полная энергия микрочастицы,  $\psi$  – волновая функция.

Для области  $0 < x < L_{qw}$   $U = 0$ , поэтому

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi. \quad (7)$$

После преобразований получим

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (8)$$

где  $k$  – волновое число,  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ .

Решение вне потенциальной ямы не существует, так как  $U = \infty$  и микрочастица не может покинуть потенциальную яму. В связи с этим имеем граничные условия:

$$\psi(0) = \psi(L_{qw}) = 0. \quad (9)$$

Решение уравнения (4) будем искать в виде гармонической функции

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx. \quad (10)$$

Коэффициенты  $A$  и  $B$  в (10) находим из граничных условий (9):

$$\psi(0) = B = 0, \quad \psi(L_{qw}) = A\sin kL_{qw} = 0.$$

Амплитуда волны де Бройля  $A \neq 0$ , так как иначе нет вообще никаких решений, откуда получаем  $\sin kL_{qw} = 0$ ,

$$kL_{qw} = \pm n\pi, \quad (11)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Полученное условие приводит к выводу о квантовании уровней энергии микрочастицы в потенциальной яме. С учетом сказанного получается решение уравнения (4) в виде

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L_{qw}}x\right). \quad (12)$$

Решение (12) называют собственными функциями гамильтониана уравнения (6) при заданных граничных условиях (9).

Подставим выражение (11) в дисперсионное соотношение

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ и получим:}$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_{qw}^2} n^2. \quad (13)$$

Таким образом, микрочастица, находящаяся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, имеет дискретный спектр энергии.

Амплитуду волновой функции  $A$  найдем из условия нормировки:

$$\int_0^{L_{qw}} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^{L_{qw}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right) dx = \frac{1}{2} A^2 \int_0^{L_{qw}} \left(1 - \cos\frac{2n\pi}{L_{qw}} x\right) dx = A^2 \frac{L_{qw}}{2} = 1. \quad (14)$$

Из условия (14) получаем

$$A = \sqrt{\frac{2}{L_{qw}}}.$$

Таким образом, собственные функции и значения энергии:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L_{qw}}} \sin\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right), \quad (15)$$

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L_{qw}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right),$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_{qw}^2} n^2.$$

На рис. 5 представлены качественные изображения волновой функции и квадрата ее модуля, наложенные на дискретные уровни энергии.

Расстояния между соседними уровнями энергии растут линейно в зависимости от номера уровня:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_{qw}^2} (2n+1). \quad (16)$$

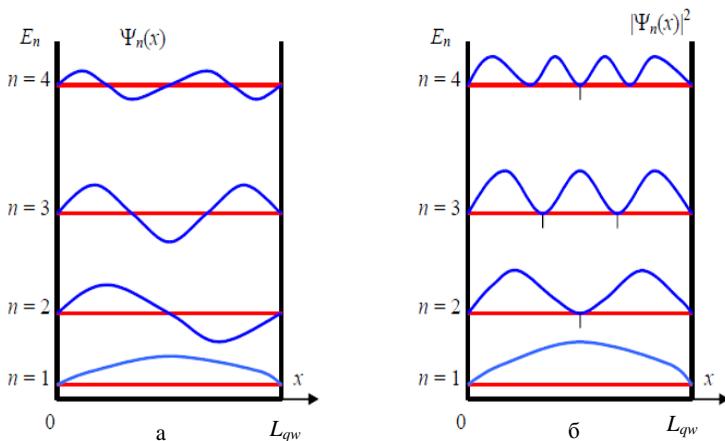


Рис. 5. Качественное изображение волновой функции (а) и квадрата ее модуля (б) в одномерной потенциальной яме

## 1.2. Одномерная потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим потенциальную яму конечной глубины  $U_0$  (рис. 6).

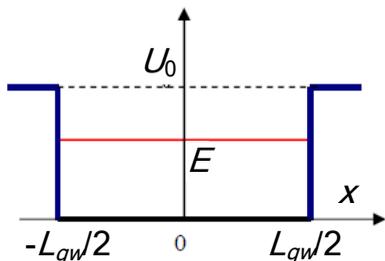


Рис. 6. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы со стенками конечной высоты

Пусть начало координат  $x = 0$  находится в центре ямы:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{L_{qw}}{2} \leq x \leq \frac{L_{qw}}{2} \\ U_0, & x > \frac{L_{qw}}{2}, x < -\frac{L_{qw}}{2}. \end{cases} \quad (17)$$

Рассмотрим отдельно решения уравнения Шредингера внутри и вне ямы, а затем объединим их, воспользовавшись условиями непрерывности волновой функции и ее первой производной на стенках ямы.

Пусть энергия микрочастицы  $E > U_0$ . Это соответствует непрерывному спектру энергии, поскольку микрочастица пролетает над потенциальной ямой и может иметь любую энергию. Для области внутри ямы запишем уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2} E\psi_1 = 0. \quad (18)$$

Введем волновое число  $k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_1 E}$ ,  $m_1$  – эффективная масса микрочастицы в яме. Решения для ямы ищем в виде

$$\psi_1(x) = A_1 \sin k_0 x + B_1 \cos k_0 x. \quad (19)$$

В барьерных слоях уравнение Шредингера примет вид

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2} (E - U_0)\psi_2 = 0.$$

Число  $k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_2(E - U_0)}$ , где  $m_2$  – эффективная масса микрочастицы в барьерном слое, и решения для областей вне потенциальной ямы находятся в виде

$$\psi_2(x) = A_2 \sin k_0 x + B_2 \cos k_0 x. \quad (20)$$

Далее объединяем (“сшиваем”) решения (19) и (20) на границах потенциальной ямы  $x = \pm \frac{L_{qw}}{2}$ , приравнивая волновые функции и их первые производные. Из полученных уравнений определяем амплитуды  $A_1, B_1, A_2, B_2$  для любых величин  $k_0$ , что означает наличие непрерывного энергетического спектра микрочастицы, пролетающей над потенциальной ямой.

Рассмотрим теперь случай, когда микрочастица находится внутри потенциальной ямы, т.е. для микрочастицы выполняется условие  $E < U_0$ .

В этом случае наблюдается дискретный спектр разрешенных значений энергии микрочастицы. Рассмотрим области внутри ямы и в барьерных слоях, для которых запишем соответствующие уравнения Шредингера и их решения:

$$1) -\frac{L_{qw}}{2} < x < \frac{L_{qw}}{2}; \quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 = 0; \quad k^2 = \frac{2m_1E}{\hbar^2}; \quad (21)$$

$$\psi_1(x) = A \sin kx + B \cos kx;$$

$$2) |x| > \frac{L_{qw}}{2}; \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \alpha^2\psi_2 = 0; \quad \alpha^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2}(U_0 - E); \quad (22)$$

$$\psi_2(x) = C e^{\alpha x} + C e^{-\alpha x}.$$

Для удобства введем оператор четности  $\hat{P}$  такой, что

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(-x). \quad (23)$$

Собственные числа оператора четности получаются при повторном действии оператора на выражение (19), после чего получается исходная волновая функция:

$$\hat{P}\hat{P}\psi(x) = \lambda^2\psi(x) = \psi(x). \quad (24)$$

Из (24) получаются значения собственных чисел  $\lambda = \pm 1$ . Считается, что когда  $\lambda = 1$ , то имеет место “четное состояние”, а когда  $\lambda = -1$  – “нечетное состояние”.

Оператор четности коммутирует с гамильтонианом в уравнении Шредингера. Действительно,  $U(x) = U(-x)$ , поэтому

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0.$$

Это означает, что четность и энергия одновременно могут иметь определенные значения, поэтому все получающиеся состояния имеют определенную четность: они либо четные, либо нечетные.

1. Нечетные состояния. Запишем волновые функции (21) и (22) для нечетных состояний:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A \sin kx ; \\ \psi_2(x) &= \begin{cases} C \exp(-\alpha x), & x > \frac{L_{qw}}{2}, \\ -C \exp(\alpha x), & x < \frac{L_{qw}}{2}. \end{cases} \end{aligned} \quad (25)$$

В областях за пределами ямы бесконечно растущие решения не подходят, так как волновая функция не должна стремиться в бесконечность при  $x \rightarrow \pm \infty$ . В связи с этим физический смысл будут иметь только затухающие решения. Очевидно, что частица может проникать в барьерные слои на глубину  $\sim 1/\alpha$ . Условия непрерывности волновой функции и ее производной на границе потенциальная яма – барьерный слой  $x = L_{qw}/2$  позволяют найти амплитуды  $A$  и  $C$ :

$$\begin{cases} A \sin k \frac{L_{qw}}{2} = C \exp\left(-\alpha \frac{L_{qw}}{2}\right), \\ kA \cos k \frac{L_{qw}}{2} = -\alpha C \exp\left(-\alpha \frac{L_{qw}}{2}\right). \end{cases} \quad (26)$$

Качественный вид решений (25) представлен на рис. 7.

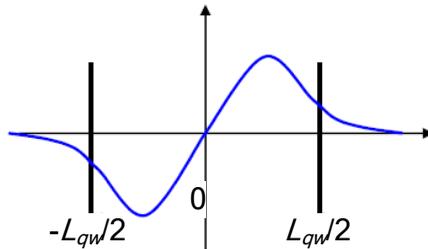


Рис. 7. Изображение волновой функции в яме конечной глубины

В системе (26) разделим верхнее уравнение на нижнее и получим трансцендентное уравнение:

$$\operatorname{tg} \frac{kL_{qw}}{2} = -\frac{k}{\alpha}, \quad (27)$$

$$\operatorname{tg} \left( \frac{L_{qw}}{2\hbar} \sqrt{2m_1 E} \right) = -\sqrt{\frac{m_1 E}{m_2(U_0 - E)}}.$$

Из уравнения (27) определяют энергии уровней размерного квантования микрочастицы в потенциальной яме.

2. Четные состояния. Запишем волновые функции (21) и (22) для четных состояний:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= B \cos kx; \\ \psi_2(x) &= D \exp(-\alpha|x|). \end{aligned} \quad (28)$$

Запишем условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на границе ямы  $x = L_{qw}/2$ , из которых можно найти амплитуды  $B$  и  $D$ :

$$\begin{cases} B \cos k \frac{L_{qw}}{2} = D \exp\left(-\alpha \frac{L_{qw}}{2}\right), \\ -kB \sin k \frac{L_{qw}}{2} = -\alpha D \exp\left(-\alpha \frac{L_{qw}}{2}\right). \end{cases} \quad (29)$$

Из (29) получаем уравнение:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \frac{kL_{qw}}{2} &= \frac{\alpha}{k}, \quad (30) \\ \operatorname{tg} \left( \frac{L_{qw}}{2\hbar} \sqrt{2m_1 E} \right) &= \sqrt{\frac{m_2(U_0 - E)}{m_1 E}}. \end{aligned}$$

Из уравнения (30) определяют энергии уровней размерного квантования микрочастицы в потенциальной яме, соответствующие четным состояниям.

Число уровней в одномерной потенциальной яме с конечной глубиной является конечным, но при этом всегда существует хотя бы одно связанное состояние. При малой глубине и ширине ямы в ней имеется только один уровень – четный. Четные и нечетные уровни появляются по очереди, причем вначале четные. Уровни энергии  $E_n$  в спектре нумеруются главными квантовыми числами  $n = 1, 2, 3, \dots$

Причем нечетным значениям  $n$  соответствуют четные состояния, а четным  $n$  - нечетные.

Качественное поведение волновых функций низших состояний показано на рис. 8. Возводя в квадрат эти волновые функции, получаем плотность вероятности нахождения частицы в яме. Важно отметить, что частица может некоторое время существовать в классически запрещенной зоне, где  $U_0 > E$ .

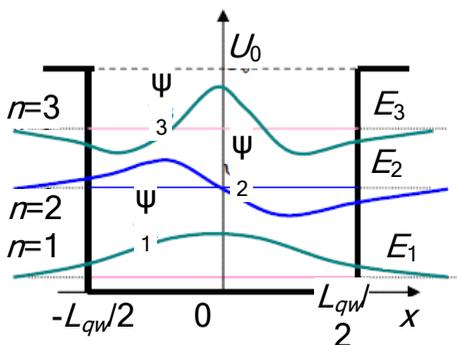


Рис. 8. Изображение волновых функций на трех нижних энергетических уровнях в яме конечной глубины

## 2. Последовательность выполнения работы

1. Изучите теоретическую часть работы.
2. Получите задание у преподавателя.
3. В программе “MathCAD” или в аналогичной программе по вышеприведенным формулам проведите следующие расчеты:
  - а) ширины запрещенной зоны материала КЯ или КЯ и барьерного слоя;
  - б) величины разрыва зоны проводимости и валентной зоны;
  - в) энергии состояний электронов, тяжелых и легких дырок в КЯ.
4. Определите количество энергетических уровней размерного квантования, помещающихся в КЯ.
5. Нарисуйте в масштабе полученную зонную диаграмму с уровнями размерного квантования электронов и дырок.
6. Проанализируйте полученные результаты.

### 3. Содержание отчета

1. Цель работы, краткие теоретические сведения.
2. Результаты расчетов.
3. Выводы по полученным результатам.

### Контрольные вопросы

1. Расскажите про квантово-размерные эффекты.
2. Напишите основные уравнения, описывающие поведение микрочастицы, находящейся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
3. Напишите основные уравнения, описывающие поведение микрочастицы, находящейся в потенциальной яме конечной глубины.
4. Поясните разницу между четными и нечетными решениями уравнения Шредингера.
5. Поясните, как получить выражение для нормированной волновой функции в случае нахождения микрочастицы в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками.
6. Проанализируйте, что происходит с квадратом модуля волновой функции при увеличении номера энергетического уровня размерного квантования.
7. Получите выражение для нормированной волновой функции, соответствующей микрочастице, находящейся на  $n$ -м ( $n$  – по указанию преподавателя) уровне размерного квантования в потенциальной яме конечной глубины.
8. Каким образом можно определить ширину запрещенной зоны трехкомпонентного полупроводникового соединения?
9. Для чего используют трехкомпонентные полупроводниковые соединения?
10. В чем состоит различие квантово-размерного эффекта для тяжелых и легких дырок?
11. Расскажите про области применения и приведите примеры материалов для получения квантово-размерных гетероструктур с зонной диаграммой I, II и III типа.

### **Библиографический список**

1. Шарма Б.Л., Пурохит Р.К. Полупроводниковые гетероструктуры. М.: Советское радио, 1979. 228 с.
2. Нанoeлектроника / В.Е. Борисенко, А.И. Воробьева, Е.А. Уткина. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009. 223 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. 3. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2001. 804 с.
4. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974. 342 с.

### **Лабораторная работа № 2**

## **ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКУЮ ЗОННУЮ ДИАГРАММУ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ С КВАНТОВОЙ ЯМОЙ**

### **Цель работы**

**Изучение влияния упругих напряжений на энергетическую зонную диаграмму полупроводниковой гетероструктуры с квантовой ямой.**

### **1. Краткие теоретические сведения**

Одной из особенностей изучаемых гетероструктур является наличие в квантово-размерных слоях деформаций, обусловленных остаточными напряжениями как из-за несоответствия параметров кристаллической решетки материалов слоев, так и из-за различия температурных коэффициентов линейного расширения (ТКЛР).

Рассмотрим деформационные напряжения в слоях, обусловленные различием постоянных кристаллической решетки материалов слоев. Будем полагать, что квантово-размерная структура является псевдоморфной, т.е. толщина слоя, образующего квантовую яму, не превышает некоторого критического значения, при котором происходит релаксация упругих напряжений.

В диапазоне составов, когда постоянная решетки КЯ больше постоянной решетки барьерного слоя, в плоскости эпитаксиального

роста слой КЯ будет испытывать деформацию сжатия, в направлении эпитаксиального роста – деформацию растяжения, а барьерные слои - деформацию растяжения в плоскости эпитаксиального слоя. Упругие напряжения в эпислое приводят к изменению ширины запрещенной зоны, положения краев зоны проводимости и валентной зоны и, следовательно, к изменению глубины КЯ.

Тензор деформации в напряженной гетероструктуре с КЯ будет определяться через постоянную решетки вдоль направления эпитаксиального роста слоев ( $a_{\parallel}$ ) и две постоянные решетки в направлении, перпендикулярном к направлению роста ( $a_{\perp}^i$ , где  $i$  – индекс, указывающий на материал квантовой ямы либо барьерного слоя). Постоянная решетки  $a_{\parallel}$  определяется соотношением [1]:

$$a_{\parallel} = \frac{a_0^{qw} G^{qw} L_{qw} + a_0^b G^b L_b}{G^{qw} L_{qw} + G^b L_b}, \quad (1)$$

где  $G$  - деформационные модули;  $L_{qw}$  – толщина КЯ;  $L_b$  – толщина барьерного слоя,  $a_0$  – постоянная решетки при отсутствии упругой деформации. Деформационные модули определяются через упругие постоянные  $C$ :

$$G^i = 2(C_{11}^i + 2C_{12}^i) \left( 1 - \frac{D^i}{2} \right), \quad (2)$$

$$D^i = 2 \frac{C_{12}^i}{C_{11}^i}.$$

Параметр решетки  $a_{\perp}^i$  определяется как

$$a_{\perp}^i = a_0^i \left[ 1 - D^i \left( \frac{a_{\parallel}}{a_0^i} - 1 \right) \right]. \quad (3)$$

Величину механической относительной деформации в слое определяют тензором деформации, диагональные компоненты которого равны

$$\varepsilon_{xx}^i = \frac{a_{\parallel}}{a_0^i} - 1,$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_{yy}^i &= \varepsilon_{xx}^i, \\ \varepsilon_{zz}^i &= \frac{a_{\perp}^i}{a_0^i} - 1.\end{aligned}\quad (4)$$

Относительная деформация  $\varepsilon$  будет равна сумме диагональных компонентов тензора деформации.

К возникновению упругих механических напряжений в эпитаксиальных слоях также будет приводить различие ТКЛР. Обычно квантово-размерную структуру получают методами эпитаксиального роста – методом парофазной эпитаксии из металлоорганических соединений (ПФЭМОС или МOCVD), методом эпитаксии из молекулярных пучков (МПЭ или МВЕ). На монокристаллической подложке вначале выращивается буферный слой, а затем на этом слое выращиваются барьерные слои и слои одной или нескольких квантовых ям. Буферный слой предотвращает влияние подложки, его толщина может выбираться по разным критериям. Толщины слоев в квантово-размерной части структуры стараются выбирать такими, чтобы упругие напряжения не релаксировали или были скомпенсированы. В этом случае достигается минимальная концентрация дислокаций несоответствия, существенно влияющая на оптические свойства структуры. После завершения эпитаксиального роста полученная структура охлаждается, и из-за рассогласования ТКЛР материалов подложки и выращенных слоев из разных материалов последние деформируются неодинаково.

Используя выражение для относительной деформации в эпитаксиальной пленке, вызванной рассогласованием ТКЛР контактирующих слоев

$$\varepsilon_{\Delta T} = \int_{T_e}^{T_g} [\alpha^i(T) - \alpha^j(T)] dT, \quad (5)$$

можно рассчитать вклад эффекта рассогласования ТКЛР в изменение зонной диаграммы квантово-размерной структуры. В формуле (5)  $\alpha^i$  и  $\alpha^j$  – ТКЛР эпитаксиальной пленки и подложки соответственно,

величины  $T_g$  – температура роста пленки,  $T_e$  – температура, при которой осуществляется эксперимент со структурой.

Упругие напряжения в структуре с одной КЯ (конфигурация подложка – буферный барьерный слой – слой КЯ – барьерный покровный слой), обусловленные различием ТКЛР, будут иметь две составляющие. Первая составляющая возникает из-за разницы ТКЛР материалов подложки и буферного слоя, а вторая – из-за разницы ТКЛР материалов буферного слоя, который является барьерным слоем, и КЯ.

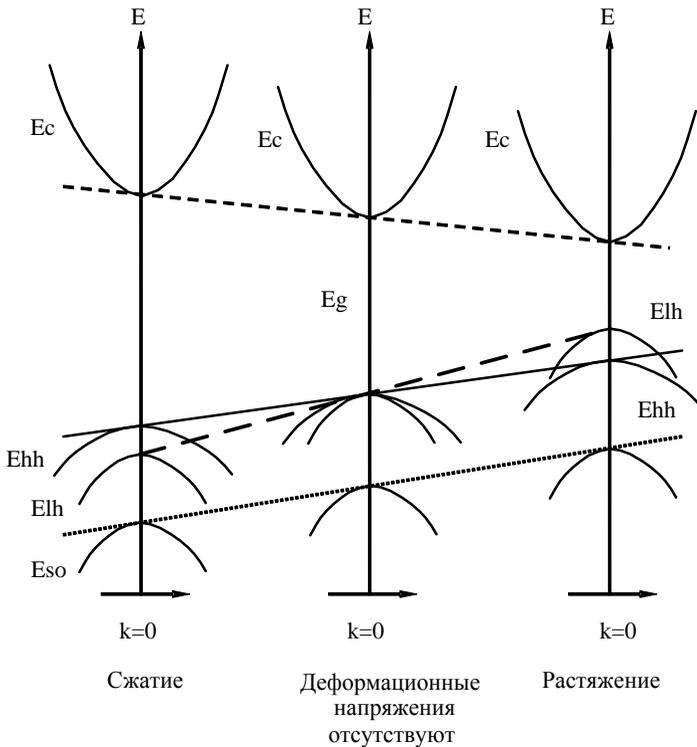
Величину относительной деформации, вызванной различием ТКЛР материалов, в слое КЯ можно определить, суммируя относительные деформации с учетом знаков от всех пар контактирующих слоев.

Упругую деформацию, обусловленную рассогласованием постоянных кристаллических решеток материалов, можно разложить на изотропную и одноосную составляющие, влияние которых на зонную структуру полупроводников имеет различный характер. Изотропная составляющая деформации сдвигает по энергии зону проводимости и валентную зону относительно их равновесных положений. В точке  $\Gamma$  в зоне Бриллюэна энергетические зоны в прямозонных полупроводниках  $A2B6$  или  $A3B5$  имеют некоторые особенности. Низшие зоны проводимости в этих полупроводниковых соединениях имеют  $s$ -симметрию и поэтому не изменяются под воздействием одноосных напряжений. Под воздействием одноосного деформационного потенциала валентная зона расщепляется (см. рисунок) на подзону тяжелых и легких дырок.

Положения потолка валентных подзон легких и тяжелых дырок на рисунке обозначены как  $E_{lh}$  и  $E_{hh}$  соответственно,  $E_c$  соответствует дну зоны проводимости, а  $E_{so}$  – положению потолка валентной подзоны, смещенной за счет спин-орбитального взаимодействия.

Величины сдвигов краев зон из-за упругой деформации определяются соответственно через деформационные потенциалы зоны проводимости ( $a_c$ ) и валентной зоны ( $a_v$ ), которые являются составляющими изотропного деформационного потенциала:  $a = a_c + a_v$ . Одноосная составляющая приводит к расщеплению валентной зоны на подзоны тяжелых и легких дырок. Соответствующую величину расщепления определяют через одноосный деформационный потенциал

(b). Рассмотрим энергетические параметры напряженной гетероструктуры, а именно материала, образующего КЯ.



Зонная диаграмма прямозонного полупроводника со структурой цинковой обманки в случае действия упругих механических напряжений

Вначале рассчитывается усредненный уровень потолка валентной зоны в ненапряженном слое КЯ:

$$E_{v.av} = \frac{-\Delta_{0qw}}{3} - (E_{gqw} + \chi_c^{qw}). \quad (6)$$

Изменение усредненного уровня валентной зоны из-за упругих напряжений равно

$$\Delta E_{v.av} = a_v \frac{\Delta \Omega}{\Omega}, \quad (7)$$

где  $\frac{\Delta \Omega}{\Omega} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$  - относительное изменение объема элементарной ячейки слоя КЯ.

В результате положение усредненного уровня потолка валентной зоны напряженной структуры будет

$$E_{v.av}^S = E_{v.av} + \Delta E_{v.av}. \quad (8)$$

Индекс “s” соответствует наличию упругих напряжений.

Для деформаций, действующих в направлении [001], положения потолков валентных зон тяжелых и легких дырок рассчитываются с учетом величины  $E_{v.av}$ .

Положение потолка валентной зоны тяжелых дырок в КЯ относительно  $E_{v.av}^S$  равно

$$\Delta E_{vhh} = \frac{\Delta_{0qw}}{3} - \frac{1}{2} \delta E_{001}, \quad (9)$$

где  $\delta E_{001} = 2b_{qw}(\varepsilon_{qwzz} - \varepsilon_{qwx})$ .

Положение потолка подзоны легких дырок относительно  $E_{v.av}^S$  определяется из выражения

$$\Delta E_{vhh} = \frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4} \delta E_{001} + \frac{1}{2} \left[ \Delta_{0qw}^2 + \Delta_{0qw} \delta E_{001} + \frac{9}{4} \delta E_{001}^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (10)$$

Положение потолка спин-орбитально отщепленной валентной подзоны относительно  $E_{v.av}^S$  будет

$$\Delta E_{v\Delta_{0qw}} = \frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4} \delta E_{001} - \frac{1}{2} \left[ \Delta_{0qw}^2 + \Delta_{0qw} \delta E_{001} + \frac{9}{4} \delta E_{001}^2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (11)$$

При наличии упругих напряжений сдвиг потолка валентной подзоны тяжелых дырок относительно потолка валентной зоны ненапряженной КЯ определяется из выражения

$$dE_{vhh} = E_{v.av}^s + \frac{\Delta_{0qw}}{3} - \frac{1}{2} \delta E_{001}. \quad (12)$$

Соответственно сдвиг потолка валентной подзоны легких дырок относительно потолка валентной зоны ненапряженной КЯ будет

$$dE_{vlh} = E_{v.av}^s + \left[ \frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4} \delta E_{001} + \frac{1}{2} \left[ \Delta_{0qw}^2 + \Delta_{0qw} \delta E_{001} + \frac{9}{4} \delta E_{001}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (13)$$

Для нахождения сдвига спин-орбитально отщепленной валентной подзоны относительно потолка валентной зоны ненапряженной КЯ нужно использовать выражение

$$dE_{v\Delta_{0qw}} = E_{v.av}^s + \left[ \frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4} \delta E_{001} - \frac{1}{2} \left[ \Delta_{0qw}^2 + \Delta_{0qw} \delta E_{001} + \frac{9}{4} \delta E_{001}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right]. \quad (14)$$

В соответствии с правилом электронного сродства положение потолка валентной подзоны тяжелых дырок в КЯ относительно уровня вакуума при наличии упругих напряжений находится как

$$E_{vhh} = E_{v.av}^s + \frac{\Delta_{0qw}}{3} - \frac{1}{2} \delta E_{001} - (E_{gqw} + \chi_c^{qw}). \quad (15)$$

Соответственно положение потолка валентной подзоны легких дырок относительно уровня вакуума равно

$$dE_{vlh} = E_{v.av}^s + \left[ \frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4} \delta E_{001} + \frac{1}{2} \left[ \Delta_{0qw}^2 + \Delta_{0qw} \delta E_{001} + \frac{9}{4} \delta E_{001}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right] - (E_{gqw} + \chi_c^{qw}). \quad (16)$$

Положение потолка спин-орбитально отщепленной валентной подзоны относительно уровня вакуума определяется из выражения

$$dE_{vlh} = E_{v.av}^s + \left[ \frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4} \delta E_{001} - \frac{1}{2} \left[ \Delta_{0qw}^2 + \Delta_{0qw} \delta E_{001} + \frac{9}{4} \delta E_{001}^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right] - (E_{gqw} + \chi_c^{qw}). \quad (17)$$

Изменение положения края зоны проводимости также определяется через деформационный потенциал зоны проводимости  $a_c$ :

$$dE_c = a_c \frac{\Delta\Omega}{\Omega} . \quad (18)$$

## 2. Последовательность выполнения работы

1. Изучите теоретическую часть работы.
2. Получите задание у преподавателя.
3. В программе “MathCAD” или в аналогичной программе по вышеприведенным формулам проведите следующие расчеты:
  - а) ширины запрещенной зоны материала КЯ или КЯ и барьерного слоя;
  - б) величины разрыва зоны проводимости и валентной зоны без учета упругих напряжений;
  - в) сдвигов краев разрешенных энергетических зон из-за упругих напряжений в КЯ и величин разрывов разрешенных энергетических зон;
  - г) положения уровней размерного квантования тяжелых, легких дырок, электронов с учетом упругих напряжений.
4. Нарисуйте в масштабе полученную зонную диаграмму с уровнями размерного квантования электронов и дырок с учетом и без упругих напряжений (воспользоваться результатами ЛР № 1).
5. Проанализируйте полученные результаты.

## 3. Содержание отчета

1. Цель работы, краткие теоретические сведения.
2. Результаты расчетов.
3. Выводы по полученным результатам.

## Контрольные вопросы

1. Расскажите о причинах возникновения упругих напряжений в гетероструктурах.
2. Назовите виды деформаций. К каким результатам они приводят?
3. Что такое тензор деформации? Как определяются его компоненты?

4. Изобразите зонные диаграммы прямозонного полупроводника в случае действия упругих механических напряжений и при их отсутствии.

5. Как изменятся положения уровней размерного квантования в квантовой яме в напряженной гетероструктуре?

6. Какие существуют способы компенсации упругих напряжений в квантово-размерных слоях?

7. Что происходит в тонкопленочных структурах при релаксации упругих напряжений?

8. Каким образом можно использовать упругие напряжения для получения квантово-размерных структур?

### **Библиографический список**

1. Van de Walle C.G. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. P. 1871-1883.

2. Van der Merve J.H. Interfacial misfit and bonding between oriented films and their substrates // Single Crystal Films. McMilan. N.Y. 1964. P. 139-163.

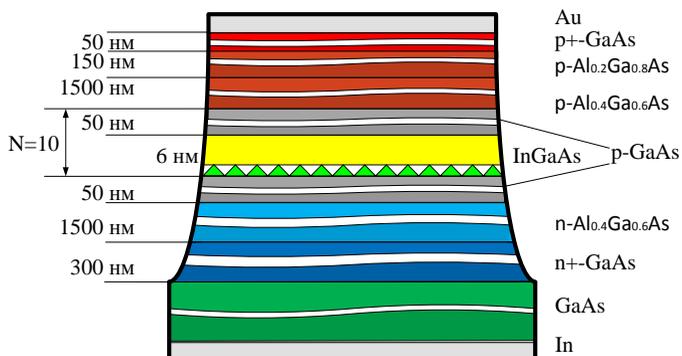
3. Най Дж. Физические свойства кристаллов. М.: Изд-во иностранной литературы, 1960. 386 с.

4. Пинтус С.М., Стенин С.И., Торопов А.И., Труханов Е.М. Морфологическая стабильность и механизмы роста гетероэпитаксиальных пленок. Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 1986. 32 с.

В.Г. ЛИТВИНОВ

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ  
ФИЗИКИ НАНОСИСТЕМ

Учебное пособие



УДК 621.315.592

Фундаментальные основы физики наносистем: учеб. пособие / В.Г. Литвинов; Рязан. гос. радиотехн. ун-т.-Рязань, 2017.-48 с.

Приведены краткие теоретические сведения о квантово-размерных наносистемах.

Предназначено для аудиторной и самостоятельной работы студентов, изучающих дисциплину "Физика наносистем", "Фундаментальные основы физики наносистем", "Применение наносистем в электронике" по направлению 11.04.04.

Ил. 21. Библиогр.: 8 назв.

*Наноструктура, гетероструктура, квантовая яма, квантовая проволока, квантовая точка*

Печатается по решению редакционно-издательского совета Рязанского государственного радиотехнического университета.

Рецензент: кафедра микро- и наноэлектроники Рязанского государственного радиотехнического университета (зав. кафедрой Т.А. Холомина)

Л и т в и н о в Владимир Георгиевич

Фундаментальные основы физики наносистем

Редактор Н.А. Орлова

Корректор С.В. Макушина

Подписано в печать 27.11.17. Формат бумаги 60×84 1/16.

Бумага писчая. Печать трафаретная. Усл. печ. л. 3,0.

Тираж 30 экз. Заказ

Рязанский государственный радиотехнический университет.

390005, Рязань, ул. Гагарина, 59/1.

Редакционно-издательский центр РГРТУ.

© Рязанский государственный  
радиотехнический университет, 2017

## Введение

Физика полупроводников последних 20 лет – это физика полупроводниковых квантоворазмерных гетероструктур (наноструктур). В наноструктурах движение носителей заряда ограничено в одном или более направлениях, что ведет к кардинальному изменению энергетического спектра носителей заряда, фононов и возникновению целого ряда новых интересных физических явлений.

Наноструктуры – фундамент для создания новых перспективных приборов, таких как лазеры, фотоприемники, быстродействующие модуляторы излучения и т.д.

Важнейшее достоинство наноструктур – это возможность управлять свойствами системы, изменяя геометрические размеры и конфигурацию квантоворазмерной части структуры. Открывается широкая возможность конструирования параметров структур, энергетического спектра носителей заряда и фононов и, следовательно, оптических и электрических свойств наноструктур [1].

Физика наноструктур – быстроразвивающаяся область науки, однако соответствующая литература издается в основном за рубежом, а в России – в ограниченном количестве. Настоящая работа посвящена описанию основных видов гетероструктур и особенностей размерного квантования носителей заряда в структурах с квантовыми ямами, проволоками и точками.

### 1. Гетероструктуры: основные понятия

Рассмотрим основные, сложившиеся к настоящему моменту, понятия в низкоразмерной физике полупроводников. Среди квантоворазмерных структур выделяют следующие виды (в скобках указаны названия и их сокращения на английском языке) [1]:

- квантовые ямы (quantum wells, QW);
- квантовые проволоки (quantum wires, quantum well wires, QWWs);
- квантовые точки (quantum dots, QDs);

- множественные квантовые ямы (multi quantum wells, MQW);
- сверхрешетки (superlattices, SLs);
- двух- и трехбарьерные резонансно-туннельные структуры (double- and triple-barrier resonance-tunneling structures);
- одиночная квантовая яма (single quantum well, SQW);
- двойная квантовая яма (double quantum well);
- антиоточки (antidots);
- дельта-легированные структуры ( $\delta$ -doped structures);
- квантовые микрорезонаторы (quantum microcavities);
- фотонные кристаллы (photonic crystals);
- гетероструктуры I, II и III типов (type-I, type-II and type-III heterostructures) на рис.1-3;
- пористые полупроводниковые материалы;
- фуллерены, нанокластеры, нанотрубки, наноконтакты и т.д.

Наноструктуры различаются по квантовым состояниям для соответствующих частиц и их комплексов:

- размерно-квантованные состояния свободных носителей заряда (НЗ) и экситонов (quantum dimensional states);
- подзоны и минизоны для НЗ (minibands);
- размерно-квантованные интерфейсные фононы, оптические фононы и акустические фононы с ломаным спектром (folded acoustic phonons);
- двумерный магнитный полярон;
- композитные фермионы и краевые состояния в квантовом эффекте Холла и т.д.

## **2. Классические гетероструктуры**

Идея использования гетероструктур в микроэлектронике возникла на заре ее развития. В. Шокли в своем первом патенте [2], связанном с транзисторами на p-n-переходах, для повышения эффективности инжекции предложил использовать широкозонный эмиттер.

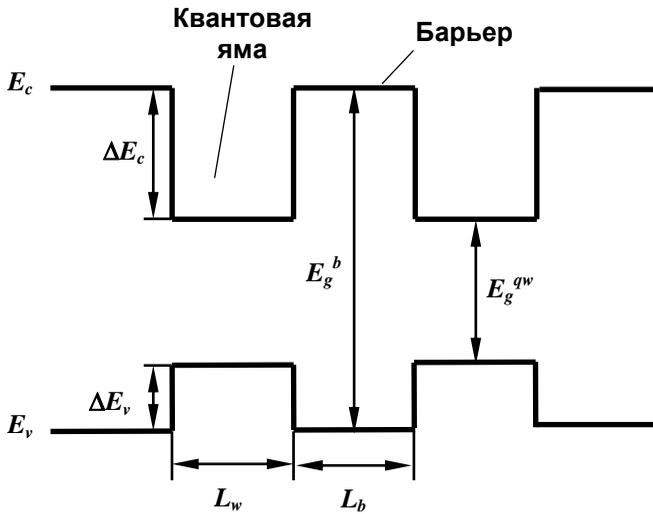


Рис. 1. Зонная диаграмма квантоворазмерной структуры, имеющей конфигурацию I типа

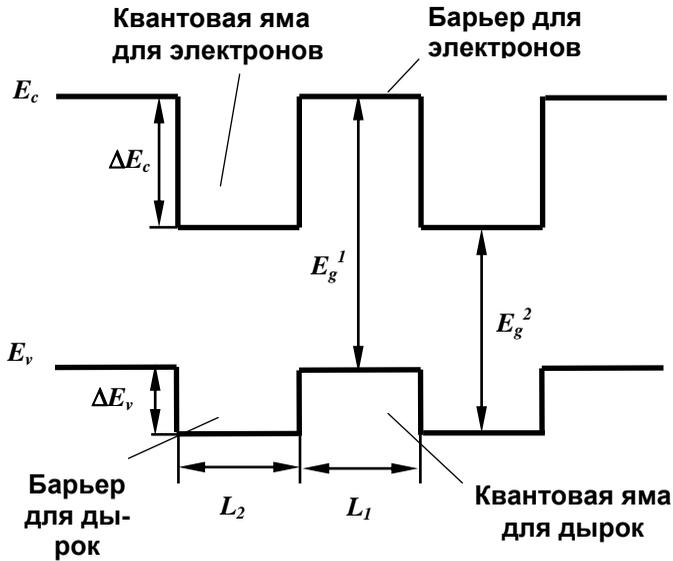


Рис. 2. Зонная диаграмма квантоворазмерной структуры, имеющей конфигурацию II типа

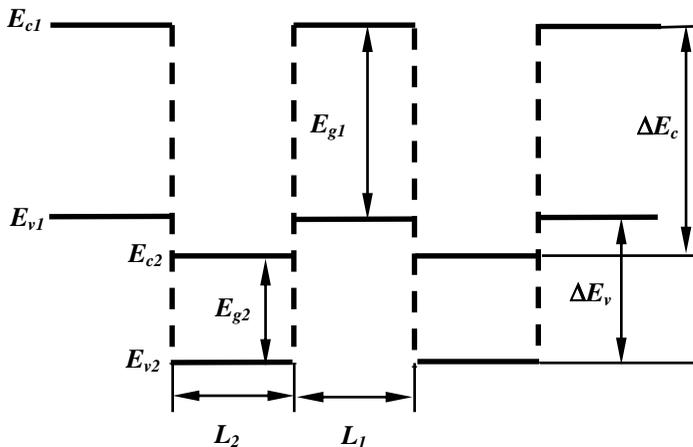


Рис. 3. Зонная диаграмма квантоворазмерной структуры, имеющей конфигурацию III типа

В [3] Ж. Алферовым кратко сформулированы результаты развития классических гетероструктур в России и за рубежом.

1. Фундаментальные физические явления (рис. 4):

- односторонняя инжекция;
- сверхинжекция;
- диффузия во встроенном электрическом поле;
- электронное ограничение;
- оптическое ограничение;
- эффект широкозонного окна;
- диагональное туннелирование через гетерограницу.

### 3. Гетероструктуры с квантовыми ямами

#### 3.1. Основные разновидности и физические явления

Реализация высококачественных гетероструктур (с резкими гетерограницами) стала возможной благодаря развитию методов

эпитаксиального выращивания с прецизионным контролем толщины, планарности, состава и т.д. Один из методов – метод эпитаксии из молекулярных пучков (МПЭ), другой – метод газофазной эпитаксии из паров металлоорганических соединений (МОС ГФЭ) [3].

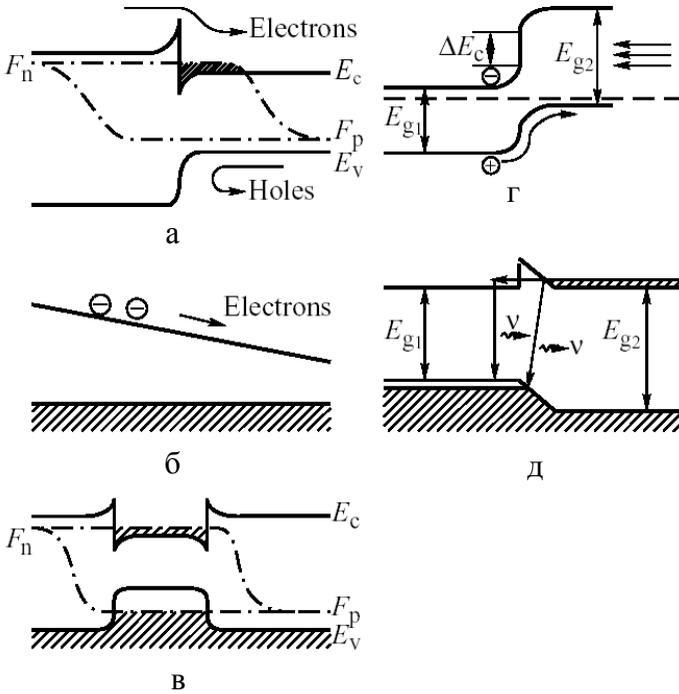


Рис. 4. Основные физические явления в классических гетероструктурах [3]: а – односторонняя инжекция и сверхинжекция; б – диффузия во встроенном электрическом поле; в – электронное и оптическое ограничение; г – эффект широкозонного окна; д – диагональное туннелирование через гетерограницу

Фундаментальные физические явления в гетероструктурах с квантовыми ямами (КЯ):

– двумерный электронный и дырочный электронный газ;

- ступенчатый вид функции плотности состояний для носителей заряда (НЗ), находящихся в квантовой яме;
- квантовый эффект Холла;
- дробный квантовый эффект Холла;
- существование экситонов при комнатной температуре вследствие их большой энергии связи;
- резонансное туннелирование в структурах с двойным барьером и в сверхрешетках;
- определение энергетического спектра НЗ выбором потенциала (высоты барьера) и встроенных упругих напряжений;
- стимулированное излучение при резонансном туннелировании в сверхрешетках;
- псевдоморфный рост напряженных структур.

Важнейшие направления для применений гетероструктур с квантовыми ямами:

- достижение меньших значений порогового тока, большее дифференциальное усиление, более слабая температурная зависимость порогового тока в лазерах с квантовыми ямами по сравнению с лазерами на основе классических гетероструктур;
- инфракрасные квантовые каскадные лазеры;
- лазеры с квантовой ямой, ограниченной короткопериодной сверхрешеткой;
- оптимизация электронного и оптического ограничения и характеристик волновода в полупроводниковых лазерах;
- транзисторы с двумерным электронным газом;
- резонансно-туннельные диоды;
- высокоточные стандарты сопротивлений;
- электрооптические модуляторы и приборы на основе эффекта электропоглощения;
- инфракрасные фотодетекторы, работающие в окнах прозрачности атмосферы, на основе эффекта поглощения между уровнями размерного квантования.

Важные технологические особенности:

- необходимость использования технологий с низкими скоростями роста;
- применение метода субмонослойного выращивания;
- подавление распространения дислокаций несоответствия в процессе эпитаксиального роста;

– резкое увеличение разнообразия материалов для гетероструктур.

Рассмотрим некоторые примеры распространенных гетеропар:  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ,  $\text{CdTe}/\text{Cd}_{1-x}\text{MnTe}$ ,  $\text{InAs}/\text{AlSb}$ ,  $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}/\text{ZnS}_y\text{Se}_{1-y}$ ,  $\text{ZnSe}/\text{BeTe}$ ,  $\text{ZnSe}/\text{GaAs}$ ,  $\text{AlGaInP}/\text{GaInP}$ ,  $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}_{1-y}\text{C}_y$  и т.д., где  $x$ ,  $y$  или  $1-x$ ,  $1-y$  означают долю атомов одного сорта в узлах кристаллической решетки или какой-либо из подрешеток.

Гетеропереход I типа (рис. 1) образует, например, пара  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ , II типа –  $\text{InAs}/\text{AlSb}$  или  $\text{ZnSe}/\text{BeTe}$  (рис. 2) и, наконец, III типа (рис. 3) –  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  [1].

Двойной гетеропереход I типа  $B/A/B$  представляет собой структуру с одиночной квантовой ямой, если ширина запрещенной зоны в материале  $A$  меньше, чем для материала  $B$ , т.е.  $E_{gA} < E_{gB}$ , или структуру с одиночным барьером, если  $E_{gA} > E_{gB}$ . В первом случае внутренний слой  $A$  образует потенциальную яму, в которой происходит размерное квантование электронных и дырочных состояний. Во втором случае слой  $A$  образует барьер для электронов и дырок. Двойной гетеропереход II типа является структурой с квантовой ямой для одного типа НЗ и одновременно структурой с одиночным барьером для другого типа НЗ. Используя в качестве композиционного материала  $A$  твердый раствор и изменяя его состав в процессе эпитаксиального роста, можно создавать потенциальные ямы необходимой формы – треугольные, параболические и др.

Развитием однобарьерной структуры являются двух- и трехбарьерные структуры, т.е. одиночная или двойная квантовые ямы, отделенные барьерами конечной ширины от полубесконечных слоев с меньшей шириной запрещенной зоны [1]. Продолжением структуры с одиночной квантовой ямой является структура с двумя или целым набором квантовых ям (MQW). С точки зрения электронных свойств каждая из этих ям является изолированной, однако наличие многих ям сказывается на оптических свойствах.

Периодическая структура с квантовыми ямами, разделенными не очень широкими барьерами, называется сверхрешеткой [1]. Термин “сверхрешетка” используется тогда, когда НЗ – электрон или дырка – может туннелировать из одной ямы в дру-

гую и длина свободного пробега этого НЗ вдоль оси роста превышает период структуры  $d = a + b$ , где  $a$  – ширина ямы, а  $b$  – ширина барьерного слоя. В результате взаимодействия волновых функций НЗ в различных ямах энергетические уровни размываются в минизоны.

Длина свободного пробега для электронов и дырок может существенно различаться, например, из-за разных эффективных масс. Поэтому одна и та же периодическая структура может обладать как всеми свойствами сверхрешетки для одного вида НЗ, например электронов, так как у них, как правило, меньше эффективная масса, так и MQW структурой (структурой с набором изолированных ям) для другого вида НЗ – дырок. Последние также могут перемещаться вдоль оси роста, однако это движение носит некогерентный характер, представляет собой цепочку некогерентных туннельных прыжков между соседними ямами.

Рассмотрим классификацию полупроводниковых сверхрешеток [1]. Композиционные сверхрешетки (compositional SLs) – это сверхрешетки, у которых чередующиеся слои выращены из разных материалов. Первоначально для создания квантовых ям и сверхрешеток подбирались гетеропары с близкими постоянными решеток  $a_0$ . Сверхрешетка называется согласованной или ненапряженной, если относительное рассогласование постоянных решеток  $\Delta a_0/a_0 \ll 0,01$  (lattice-matched SLs). Совершенствование технологии эпитаксиального роста позволило получить бездислокационные сверхрешетки при заметном рассогласовании постоянных решеток. В таких сверхрешетках возникают внутренние упругие напряжения, приводящие к изменению положения краев энергетических зон. Это так называемые напряженные сверхрешетки (strained SLs). Композиционные сверхрешетки могут быть I или II типа, легированными, однородно или селективно легированными.

Кроме композиционных сверхрешеток, образованных периодическим изменением состава, существуют сверхрешетки, получаемые модулированным легированием донорной и/или акцепторной примесью. Такие сверхрешетки называются легированными. Например, легированной сверхрешеткой является *nipi*-структура на основе  $n$ -GaAs/ $p$ -GaAs [1]. Имеются также спиновые сверхрешетки, в которых часть слоев содержит маг-

нитные примеси или ионы, например CdTe/CdMnTe. Спиновые сверхрешетки со значительным содержанием магнитных ионов называют также композиционными полумагнитными сверхрешетками.

Наряду с периодическими сверхрешетками создают и исследуют апериодические сверхрешетки. Примером апериодической сверхрешетки является решетка Фибоначчи, у которой толщины слоев  $A$  и  $B$  изменяются по закону  $a_j = G_j a_0$ ,  $b_j = G_{j-1} b_0$ , а числа  $G_j$  задаются начальными значениями  $G_0 = G_1 = 1$  и рекуррентным соотношением  $G_j = G_{j-1} + G_{j-2}$  ( $j \geq 2$ ).

## 3.2. Размерное квантование электронных состояний в квантовых ямах

### 3.2.1. Прямоугольная квантовая яма

#### 3.2.1.1. Одномерная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками

Рассмотрим микрочастицу, совершающую одномерное движение вдоль оси  $x$  в потенциальной яме, изображенной на рис. 5.

Математически одномерный потенциал записывается в виде

$$U = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L_{qw} \\ \infty, & x > L_{qw}, x < 0, \end{cases} \quad (1)$$

где  $L_{qw}$  – ширина потенциальной ямы.

Запишем уравнение Шредингера для одномерной потенциальной ямы:

$$\hat{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta\psi + U\psi = E\psi, \quad (2)$$

где  $\hat{H}$  – оператор Гамильтона,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m$  – эффективная масса микрочастицы,  $U$  – потенциальная энергия микрочастицы,  $E$  – полная энергия микрочастицы,  $\psi$  – волновая функция.

Для области  $0 < x < L_{qw}$   $U = 0$ , поэтому

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi. \quad (3)$$

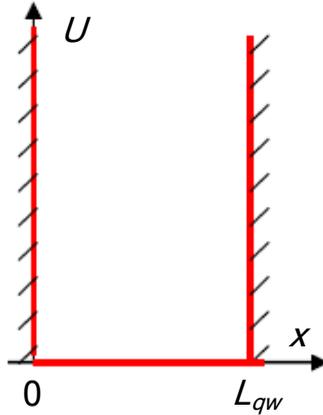


Рис. 5. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

После преобразований получим

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0, \quad (4)$$

где  $k$  – волновое число,  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ .

Решение вне потенциальной ямы не существует, так как  $U = \infty$  и микрочастица не может покинуть потенциальную яму. В связи с этим имеем граничные условия:

$$\psi(0) = \psi(L_{qw}) = 0. \quad (5)$$

Решение уравнения (4) будем искать в виде гармонической функции

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx. \quad (6)$$

Коэффициенты  $A$  и  $B$  в (6) находим из граничных условий (5):

$$\psi(0) = B = 0, \quad \psi(L_{qw}) = A \sin k L_{qw} = 0.$$

Амплитуда волны де Бройля  $A \neq 0$ , так как иначе нет вообще никаких решений, откуда получаем  $\sin(kL_{qw}) = 0$ ,

$$k L_{qw} = \pm n\pi, \quad (7)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Полученное условие приводит к выводу о квантовании уровней энергии микрочастицы в потенциальной яме. С учетом сказанного получается решение уравнения (4) в виде

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right). \quad (8)$$

Решение (8) называют собственными функциями гамильтониана уравнения (2) при заданных граничных условиях (5).

Подставим выражение (7) в дисперсионное соотношение  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  и получим:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_{qw}^2} n^2. \quad (9)$$

Таким образом, микрочастица, находящаяся в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками, имеет дискретный спектр энергии.

Амплитуду волновой функции  $A$  найдем из условия нормировки:

$$\int_0^{L_{qw}} |\psi(x)|^2 dx = A^2 \int_0^{L_{qw}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right) dx = \frac{1}{2} A^2 \int_0^{L_{qw}} \left(1 - \cos \frac{2n\pi}{L_{qw}} x\right) dx = A^2 \frac{L_{qw}}{2} = 1. \quad (10)$$

Из условия нормировки (10) получаем  $A = \sqrt{\frac{2}{L_{qw}}}$ .

Таким образом, собственные функции и значения энергии:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L_{qw}}} \sin\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right), \quad (11)$$

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{L_{qw}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right),$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_{qw}^2} n^2.$$

На рис. 6 представлены качественные изображения волновой функции и квадрата ее модуля, наложенные на дискретные уровни энергии.

Расстояния между соседними уровнями энергии растут линейно в зависимости от номера уровня:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_{qw}^2} (2n+1). \quad (12)$$

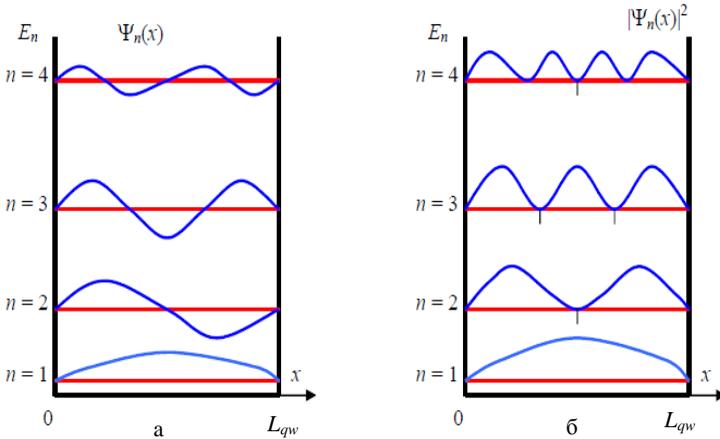


Рис. 6. Качественное изображение волновой функции (а) и квадрата ее модуля (б) в одномерной потенциальной яме

### 3.2.1.2. Одномерная потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим потенциальную яму конечной глубины  $U_0$  (рис. 7).

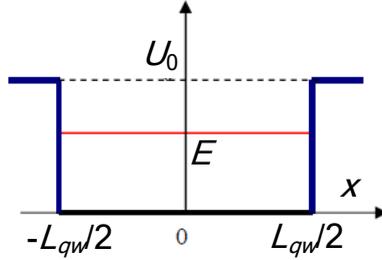


Рис. 7. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы со стенками конечной высоты

Пусть начало координат  $x = 0$  находится в центре ямы:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{L_{qw}}{2} \leq x \leq \frac{L_{qw}}{2} \\ U_0, & x > \frac{L_{qw}}{2}, x < -\frac{L_{qw}}{2}. \end{cases} \quad (13)$$

Рассмотрим отдельно решения уравнения Шредингера внутри и вне ямы, а затем объединим их, воспользовавшись условиями непрерывности волновой функции и ее первой производной на стенках ямы.

Пусть энергия микрочастицы  $E > U_0$ . Это соответствует непрерывному спектру энергии, поскольку микрочастица пролетает над потенциальной ямой и может иметь любую энергию. Для области внутри ямы запишем уравнение Шредингера:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2} E\psi_1 = 0. \quad (14)$$

Введем волновое число  $k_0 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_1 E}$ ,  $m_1$  – эффективная масса микрочастицы в яме. Решения для ямы ищем в виде

$$\psi_1(x) = A_1 \sin k_0 x + B_1 \cos k_0 x. \quad (15)$$

В барьерных слоях уравнение Шредингера примет вид

$$\frac{d^2\psi_2}{dx^2} + \frac{2m_2}{\hbar^2}(E - U_0)\psi_2 = 0.$$

Число  $k_0 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m_2(E - U_0)}$ , где  $m_2$  – эффективная масса микрочастицы в барьерном слое, и решения для областей вне потенциальной ямы находятся в виде

$$\psi_2(x) = A_2 \sin k_0 x + B_2 \cos k_0 x. \quad (16)$$

Далее объединяем (“сшиваем”) решения (15) и (16) на границах потенциальной ямы  $x = \pm \frac{L_{qw}}{2}$ , приравнивая волновые функции и их первые производные. Из полученных уравнений определяем амплитуды  $A_1, B_1, A_2, B_2$  для любых величин  $k_0$ , что означает наличие непрерывного энергетического спектра микрочастицы, пролетающей над потенциальной ямой.

Рассмотрим теперь случай, когда микрочастица находится внутри потенциальной ямы, т.е. для микрочастицы выполняется условие  $E < U_0$ .

В этом случае наблюдается дискретный спектр разрешенных значений энергии микрочастицы. Рассмотрим области внутри ямы и в барьерных слоях, для которых запишем соответствующие уравнения Шредингера и их решения:

$$1) -\frac{L_{qw}}{2} < x < \frac{L_{qw}}{2}; \quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 = 0; \quad k^2 = \frac{2m_1E}{\hbar^2}; \quad (17)$$

$$\psi_1(x) = A \sin kx + B \cos kx;$$

$$2) |x| > \frac{L_{qw}}{2}; \quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \alpha^2\psi_2 = 0; \quad \alpha^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2}(U_0 - E); \quad (18)$$

$$\psi_2(x) = C e^{\alpha x} + C e^{-\alpha x}.$$

Для удобства введем оператор четности  $\hat{P}$  такой, что

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(-x). \quad (19)$$

Собственные числа оператора четности получаются при повторном действии оператора на выражение (15), после чего получается исходная волновая функция:

$$\hat{P}\hat{P}\psi(x) = \lambda^2\psi(x) = \psi(x). \quad (20)$$

Из (20) получаются значения собственных чисел  $\lambda = \pm 1$ . Считается, что когда  $\lambda = 1$ , то имеет место “четное состояние”, а когда  $\lambda = -1$  – “нечетное состояние”.

Оператор четности коммутирует с гамильтонианом в уравнении Шредингера. Действительно,  $U(x) = U(-x)$ , поэтому

$$[\hat{P}, \hat{H}] = 0.$$

Это означает, что четность и энергия одновременно могут иметь определенные значения, поэтому все получающиеся состояния имеют определенную четность: они либо четные, либо нечетные.

1. Четные состояния. Запишем волновые функции (17) и (18) для четных состояний:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= B \cos kx ; \\ \psi_2(x) &= D \exp(-\alpha|x|). \end{aligned} \quad (21)$$

Запишем условия непрерывности волновой функции и ее первой производной на границе ямы  $x = L_{qw}/2$ , из которых можно найти амплитуды  $B$  и  $D$ :

$$\begin{cases} B \cos k \frac{L_{qw}}{2} = D \exp\left(-\alpha \frac{L_{qw}}{2}\right), \\ -kB \sin k \frac{L_{qw}}{2} = -\alpha D \exp\left(-\alpha \frac{L_{qw}}{2}\right). \end{cases} \quad (22)$$

Из (22) получаем уравнение:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \frac{kL_{qw}}{2} &= \frac{\alpha}{k}, \\ \operatorname{tg} \left( \frac{L_{qw}}{2\hbar} \sqrt{2m_1 E} \right) &= \sqrt{\frac{m_2(U_0 - E)}{m_1 E}}. \end{aligned} \quad (23)$$

Из уравнения (23) определяют энергии уровней размерного квантования микрочастицы в потенциальной яме, соответствующие четным состояниям.

1. Нечетные состояния. Запишем волновые функции (17) и (18) для нечетных состояний:

$$\psi_1(x) = A \sin kx ;$$

$$\psi_2(x) = \begin{cases} C \exp(-\alpha x), & x > \frac{L_{qw}}{2}, \\ -C \exp(\alpha x), & x < \frac{L_{qw}}{2}. \end{cases} \quad (24)$$

В областях за пределами ямы бесконечно растущие решения не подходят, так как волновая функция не должна стремиться в бесконечность при  $x \rightarrow \pm \infty$ . В связи с этим физический смысл будут иметь только затухающие решения. Очевидно, что частица может проникать в барьерные слои на глубину  $\sim 1/\alpha$ . Условия непрерывности волновой функции и ее производной на границе потенциальная яма – барьерный слой  $x = L_{qw}/2$  позволяют найти амплитуды  $A$  и  $C$ :

$$\begin{cases} A \sin k \frac{L_{qw}}{2} = C \exp\left(-\alpha \frac{L_{qw}}{2}\right), \\ kA \cos k \frac{L_{qw}}{2} = -\alpha C \exp\left(-\alpha \frac{L_{qw}}{2}\right). \end{cases} \quad (25)$$

Качественный вид решений (24) представлен на рис. 8.

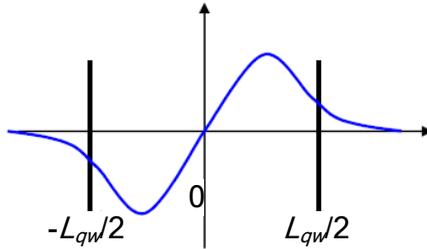


Рис. 8. Изображение волновой функции в яме конечной глубины

В системе (25) разделим верхнее уравнение на нижнее и получим трансцендентное уравнение:

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \frac{kL_{qw}}{2} &= -\frac{k}{\alpha}, \\ \operatorname{tg} \left( \frac{L_{qw}}{2\hbar} \sqrt{2m_1 E} \right) &= -\sqrt{\frac{m_1 E}{m_2 (U_0 - E)}}. \end{aligned} \quad (26)$$

Из уравнения (26) определяют энергии уровней размерного квантования микрочастицы в потенциальной яме.

Число уровней в одномерной потенциальной яме с конечной глубиной является конечным, но при этом всегда существует хотя бы одно связанное состояние. При малой глубине и ширине ямы в ней имеется только один уровень – четный. Четные и нечетные уровни появляются по очереди, причем вначале четные. Уровни энергии  $E_n$  в спектре нумеруются главными квантовыми числами  $n = 1, 2, 3, \dots$ . Причем нечетным значениям  $n$  соответствуют четные состояния, а четным  $n$  – нечетные.

Качественное поведение волновых функций низших состояний показано на рис. 9. Возводя в квадрат эти волновые функции, получаем плотность вероятности нахождения частицы в яме. Важно отметить, что частица может некоторое время существовать в классически запрещенной зоне, где  $U_0 > E$ .

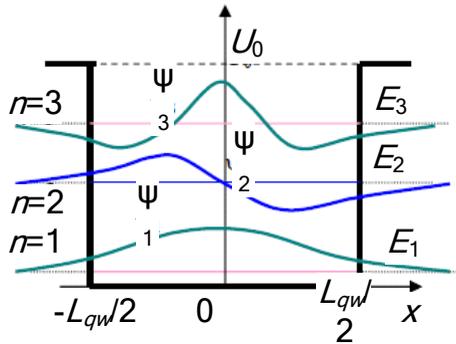


Рис. 9. Изображение волновых функций на трех нижних энергетических уровнях в яме конечной глубины

### 3.2.2. Двойная квантовая яма

Рассмотрим квантовые расстояния в двух близко расположенных ямах (рис. 10). Эта модель неоднократно обсуждалась как в теоретических, так в экспериментальных работах [4]. Высота  $U$  и ширина барьера, разделяющего ямы, таковы, что волновые функции могут перекрываться и, следовательно, между ямами возможны туннельные переходы.

Обсудим сначала характер энергетического спектра двойной ямы. При нулевой разности потенциалов, когда обе симметричные ямы имеют общий электрохимический потенциал, энергетические уровни располагаются парами, причем расстояние между ними определяется прозрачностью барьера. Положение каждой пары приблизительно соответствует энергетическим уровням отдельной ямы. С ростом разности потенциалов между ямами все энергетические уровни понижаются, что иллюстрирует рис. 10 (положение дна левой ямы считается неизменным).

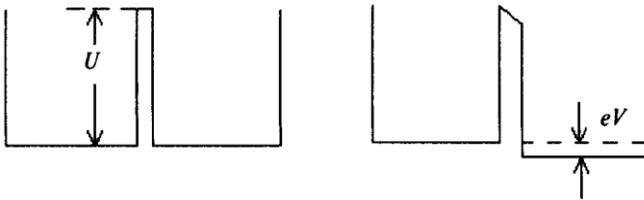


Рис. 10. Потенциальный рельеф двойной квантовой ямы при отсутствии и при наличии внешнего электрического поля

Из рис. 11 видно, что скорость понижения уровней немонотонно зависит от разности потенциалов  $eV$ : при приближении уровня  $E_{n+1}$  к  $E_n$  эти уровни начинают “отталкиваться”, причем скорость понижения  $E_{n+1}$  уменьшается. Стационарные волновые функции изменяются при этом следующим образом: с понижением уровня число осцилляций функций  $\psi$  в левой яме уменьшается, а в правой – увеличивается. В частности, когда второй и третий уровни максимально сближаются, функция основного состояния  $\psi_1$  локализована в основном в правой яме, что видно на рис. 12.

Функции  $\psi_2$  и  $\psi_3$  не имеют нулей в левой яме, осциллируют с одинаковым периодом, причем в каждой точке имеют противоположные знаки (численный анализ показал, что аналогично ведет себя любая пара функций  $\psi_n$  и  $\psi_{n+1}$  всякий раз, когда соответствующие уровни сближаются).

В [4] представлены результаты численного моделирования динамики квантовых состояний двойной ямы. Предполагалось,

что между ямами имеется разность потенциалов, причем напряжение падает в основном на разделяющем ямы барьере. Рассмотрим эволюцию начальных состояний в яме. Пусть при  $t = 0$  электрон находился в левой яме и его волновая функция имела вид

$$\psi(x,0) = \sqrt{2/L} \sin(\pi x/L), \quad (27)$$

а в правой яме была равна нулю ( $L$  – ширина ямы).

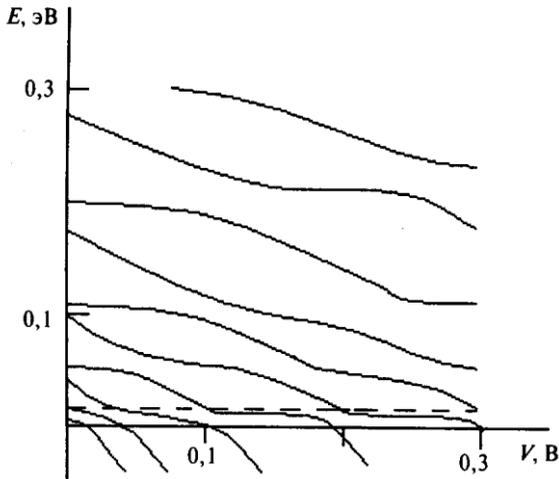


Рис. 11. Зависимость энергетического спектра двойной квантовой ямы от разности потенциалов [4]

Когда при определенном значении разности потенциалов второй и третий уровни совпадут, обе функции  $\psi_2$  и  $\psi_3$  в левой яме будут по форме близки к (27), а в правой – иметь различные знаки (см. рис. 12, б). Если пренебречь всеми остальными состояниями, то решение нестационарной задачи можно записать как

$$\psi(x,t) = [\psi_2 \exp(-iE_2 t/\hbar) + \psi_3 \exp(-iE_3 t/\hbar)]. \quad (28)$$

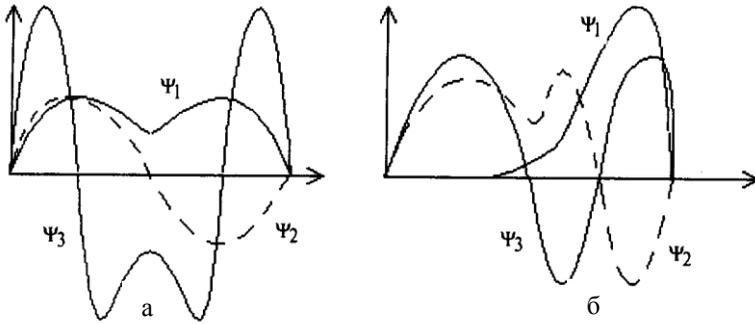


Рис. 12. Волновые функции трех квантовых состояний в двойной потенциальной яме: а – разность потенциалов равна нулю; б – разность потенциалов соответствует максимальному сближению уровней [4]

Вычисляя плотность вероятности  $|\psi(x,t)|^2$ , нетрудно убедиться, что электрон будет осциллировать, переходя из одной ямы в другую с частотой, равной  $(E_3 - E_2)/\hbar$ . В то же время при произвольном значении разности потенциалов вклад в разложение (28) дают все состояния, и электрон не может полностью перейти из начального состояния типа (27) в соседнюю яму.

Двойная яма, разделенная потенциальным барьером, может рассматриваться как простейший электронный прибор – диод. Действительно, при изменении разности потенциалов туннельный ток в такой структуре будет возрастать всякий раз, когда заселенные уровни одной ямы располагаются против незаселенных уровней другой ямы. В результате вольт-амперная характеристика такого диода будет представлять собой ряд пи-

ков, на каждом из которых находится участок отрицательного дифференциального сопротивления.

### 3.2.3. Треугольная квантовая яма

В физике микроструктур часто рассматривается модель треугольной ямы [4]. Будем считать, что в области  $x > 0$  электрон движется в однородном электрическом поле, а в начале координат ( $x = 0$ ) находится бесконечно высокая отражающая стенка, т.е.

$$V(x) = \begin{cases} |q|Ex & \text{при } x > 0; \\ \infty & \text{при } x \leq 0, \end{cases} \quad (29)$$

где  $q$  – заряд электрона,  $E$  – напряженность электрического поля. Стационарное уравнение Шредингера в поле (9)

$$\left( \frac{p_x^2}{2m} + qEx \right) \Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x), \quad (30)$$

где  $p_x$  – проекция импульса;  $E_n$  – энергия  $n$ -го уровня энергии;  $\Psi_n(x)$  – волновая функция, соответствующая  $n$ -му энергетическому уровню, имеет два независимых решения. Решением, которое удовлетворяет граничному условию  $\Psi(\infty) = 0$ , является функция Эйри

$$\Psi_n(x) = CAi \left[ \left( \frac{2m|q|E}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left( x - \frac{E_n}{m|q|E} \right) \right], \quad (31)$$

где  $C$  – нормировочная константа. Закон квантования энергии находится из условия:

$$\Psi_n(0) = Ai \left[ - \left( \frac{2m|q|E}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{E_n}{qE} \right] = 0. \quad (32)$$

Корни функции Эйри  $\alpha_k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) определяют дискретные уровни энергии в треугольной яме

$$E_n = \left( \frac{|q|^2 E^2 \hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \alpha_{n+1}, \quad (33)$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

Энергия основного состояния ( $\alpha_1 \approx 2,34$ ):

$$E_0 \approx 1,86 \left( \frac{|q|^2 E^2 \hbar^2}{m} \right)^{1/3}. \quad (34)$$

На рис. 13 можно видеть собственные функции, соответствующие первым шести уровням энергии. При больших  $n$  для расчета волновых функций и энергетического спектра можно воспользоваться квазиклассическим приближением, которое для уровней энергии треугольной ямы дает следующую асимптотическую формулу:

$$E_n = \left( \frac{\hbar^2}{2m} \right)^{1/3} \left[ \frac{3\pi |q| E}{2} \left( n + \frac{3}{4} \right) \right]^{-2/3}. \quad (35)$$

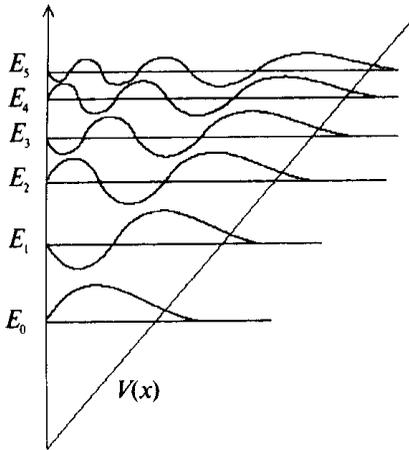


Рис. 13. Квантовые состояния в треугольной яме

### 3.2.4. Энергетический спектр сверхрешеток

Сверхрешетками (СР) согласно [6] принято называть твердотельные структуры, в которых на электроны или дырки помимо периодического потенциала кристаллической решетки действует дополнительный потенциал, также периодический, но с периодом, значительно превышающим постоянную решетки.

Наличие такого потенциала существенно изменяет электронный энергетический спектр структуры, благодаря чему СР приобретают ряд специфических свойств, отсутствующих у однородных образцов.

Физические свойства СР определяются их электронным спектром. Последний должен находиться из решения уравнения Шредингера, содержащего как основной потенциал кристаллической решетки  $V_o(z)$ , так и дополнительный периодический потенциал  $V_{SL}(z)$ . Решить такое уравнение в общем случае практически невозможно. Задача существенно упрощается благодаря тому факту, что период  $V_{SL}$  значительно превышает постоянную решетки кристалла, а его амплитуда, как правило, меньше амплитуды  $V_o$ . Благодаря этому энергетические зоны, существовавшие в кристалле до наложения  $V_{SL}$ , под действием последнего существенно искажутся лишь вблизи краев, где закон дисперсии можно считать квадратичным и использовать для вычисления энергетического спектра СР приближение эффективной массы. В этом приближении уравнение Шредингера приобретает вид (2). При этом предполагается, что энергетические зоны исходного кристалла невырожденные, а эффективная масса – изотропная. Так как  $V_{SL}$  периодичен, то к уравнению (2) применимы все основные выводы теории зонной структуры. Волновая функция имеет блоховский вид, а спектр носит зонный характер и определяется номером зоны  $s$  и волновым вектором  $k$ . Получающиеся зоны представляют собой дальнейшее, более мелкое дробление энергетических зон основного кристалла вблизи их краев и поэтому часто называются минизонами. Волновой вектор  $k$  определяется в пределах первой минизоны Бриллюэна –  $\pi/d \leq k \leq \pi/d$ , где  $d$  – период СР.

В зависимости от характера периодичности  $V_{SL}$  СР можно разделить на одно-, двух- и трехмерные. Ограничимся рассмотрением одномерных СР. Энергетический спектр таких СР резко анизотропен. Потенциал  $V_{SL}$  не зависит от  $x$  и  $y$ , поэтому движение носителей заряда в плоскости  $xy$  остается свободным:

$$E = E_{\perp} + E_z = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m} + E_z(k_z), \quad (36)$$

а минизонный характер носит лишь часть спектра  $E_z(k_z)$ , связанная с движением вдоль оси СР. Спектр  $E_z(k_z)$  представляет собой ряд не перекрывающихся друг другом минизон. Экстремумы их могут находиться только в центре или на краях минизоны Бриллюэна. С ростом номера минизоны ее ширина растет, а расстояния до соседних минизон (запрещенные минизоны) убывают. Минизоны можно условно поделить на подбарьерные и надбарьерные.

Подбарьерными называют минизоны с энергией, меньшей, чем максимальное значение  $V_{SL}$ . Они образуются из локализованных состояний в минимумах потенциала  $V_{SL}$ . Эти минизоны имеют малую ширину, определяемую туннельной прозрачностью барьеров, и могут быть описаны в приближении сильной связи:

$$E_z(k_z) = E_s - \Delta_s \cos(k_z d), \quad (37)$$

где  $s = 1, 2, \dots, s_0$  – номер подбарьерной минизоны,  $E_s$  – уровни в одиночной потенциальной яме,  $\Delta_s$  – ширина минизоны с номером  $s$ .  $E_s$  возрастает при росте амплитуды или уменьшении периода  $V_{SL}$ , ширина минизон  $\Delta_s$  экспоненциально падает при увеличении периода, число подбарьерных минизон  $s_0$  определяется мощностью потенциала  $mAd^2/\hbar^2$  ( $A$  – амплитуда потенциала  $V_{SL}$ ).

Надбарьерные минизоны представляют собой широкие участки с обычным квадратичным спектром, разделенные узкими запрещенными зазорами.

Рассмотрим особенности, отличающие реальные СР от описанной идеальной модели.

Во-первых, при искусственном изготовлении СР, как правило, не удастся выдержать идеальную периодичность потенциала  $V_{SL}$ . Сильные отклонения от периодичности могут привести к нарушению минизонного характера спектра, т.е. к локализации носителей в одном из минимумов  $V_{SL}$ .

Во-вторых, рассеяние носителей приводит к неопределенности в их энергии  $\sim \hbar/\tau$  ( $\tau$  – время релаксации). Если  $\tau$  достаточно мало, то минизонная структура спектра будет неразличима. Чтобы этого не было, длина свободного пробега должна удовлетворять условию

$$l \gg d. \quad (38)$$

В периодических структурах, где указанное условие не выполняется, носители “не чувствуют” периодического потенциала и минизоны не образуются.

Условие (38) эквивалентно требованию  $\hbar/\tau \ll E_{s+1} - E_s$ . Для подбарьерных минизон в рамках этого условия возможны два различных случая: классический  $\hbar/\tau \ll |\Delta_s|$  и квантовый  $\hbar/\tau > |\Delta_s|$ . В квантовом случае мы не имеем права считать, что СР обладает минизонным спектром вида (37), а должны говорить о системе дискретных уровней, уширенных за счет столкновений.

### 3.2.5. Туннельный эффект

Туннелирование (tunneling) означает перенос частицы через область, ограниченную потенциальным барьером, высота которого больше полной энергии данной частицы, или проникновение в эту область. Такой эффект невозможен с точки зрения классической механики, однако имеет место для квантовых частиц, которым присущ корпускулярно-волновой дуализм. Волновые свойства квантовых частиц приводят и к другому, аномальному с точки зрения классической механики, эффекту – надбарьерному отражению. Основные закономерности этих явлений рассмотрены ниже.

Взаимодействие квантовых частиц с различными потенциальными барьерами в одномерном пространстве  $z$  и соответствующее изменение волновой функции микрочастицы  $\psi(z)$  и  $|\psi(z)|^2$  иллюстрирует рис. 14.

Согласно классической механике частица с энергией  $E < U_0$ , движущаяся слева направо, то есть приближающаяся к потенциальному барьеру, отразится от него и начнет двигаться в обратном направлении. Если же  $E > U_0$ , то частица продолжит движение в прежнем направлении. В квантовой механике картина иная.

На языке квантовой механики движение частицы в одномерном потенциальном поле  $U(z)$  описывается уравнением Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + U(z)\psi(z) = E\psi(z), \quad (39)$$

где  $m$  – масса частицы,  $\psi(z)$  – ее волновая функция,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $U(z)$  – потенциальная энергия,  $E$  – полная энергия микрочастицы. Движению микрочастицы ставится в соответствие распространение волны де Бройля (далее – волны), описываемой функцией  $\psi(z)$ .

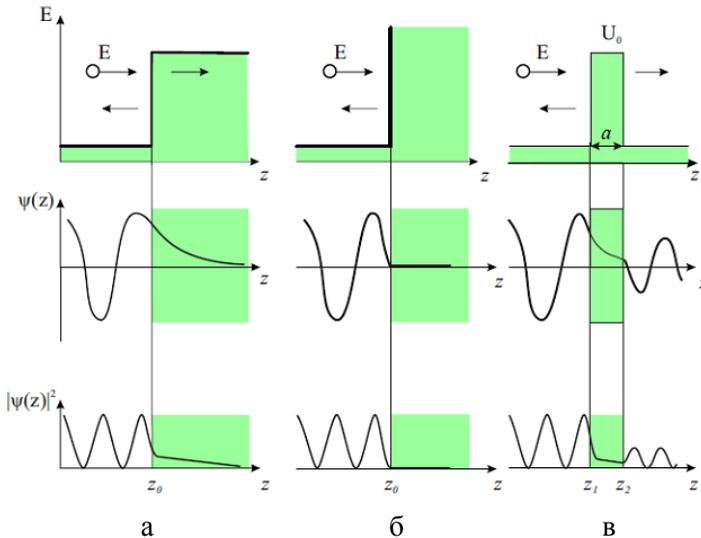


Рис. 14. Особенности взаимодействия квантовой микрочастицы с полной энергией  $E$ : а – со ступенчатым барьером конечной высоты  $U_0$ ; б – с бесконечно высоким потенциальным барьером; в – с прямоугольным барьером высотой  $U_0$  и шириной  $a$

Если энергия квантовой частицы больше высоты ступенчатого барьера ( $E > U_0$ ), то в области перед потенциальным барье-

ром, где  $U(z) = 0$ , решение уравнения Шредингера для частицы с импульсом  $k_1 = (1/\hbar)\sqrt{2mE}$  имеет вид суперпозиции двух волн:

$$\psi = A' \exp(ik_1 z) + B \exp(-ik_1 z), \quad (40)$$

где  $A'$ ,  $B$  – константы или амплитуды волн де Бройля,  $i$  – мнимая единица. Волновую функцию обычно нормируют таким образом, что  $A' = 1$ .

Первый член в (40) соответствует падающей на барьер волне де Бройля, движущейся вдоль оси  $z$  слева направо. Второй член описывает отраженную волну де Бройля, движущуюся вдоль оси  $z$  в противоположном направлении.

При  $z \rightarrow \infty$  волновая функция прошедшей над потенциальным барьером частицы имеет асимптотический вид:

$$\psi = A \exp(ik_2 z), \quad (41)$$

где  $k_2 = (1/\hbar)\sqrt{2m(E-U_0)}$ . Плотность потока в падающей волне пропорциональна  $k_1$ , в отраженной –  $k_1|B|^2$ , а в прошедшей –  $k_2|A|^2$ .

Коэффициент прохождения частицы через границу потенциального барьера, определяемый как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей волне, равен:

$$D(E) = \frac{k_2}{k_1} |A|^2. \quad (42)$$

Коэффициент отражения частицы от потенциального барьера, определяемый отношением плотности отраженного потока к плотности падающего потока, равен:

$$R(E) = |B|^2 = 1 - \frac{k_2}{k_1} |A|^2. \quad (43)$$

Очевидно, что  $R(E) = 1 - D(E)$ . Постоянные  $A$  и  $B$ , определяемые из условия непрерывности волновой функции и ее первой производной при  $z = z_0$ , равны:

$$A = \frac{2k_1}{k_1 + k_2}, B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}. \quad (44)$$

В соответствии с (44) коэффициенты отражения и прохождения равны:

$$R(E) = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2, \quad D(E) = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}. \quad (45)$$

Из выражения (45) следует, что при  $E = U_0$  ( $k_2 = 0$ ) коэффициент отражения  $R$  обращается в единицу, а коэффициент прохождения – в нуль. С ростом энергии частицы коэффициент отражения уменьшается и стремится к нулю при  $E \rightarrow \infty$ , так как  $R \approx (U_0/4E)^2$  при  $E \gg U_0$ .

Если квантовая частица движется над прямоугольным потенциальным барьером высотой  $U_0$  и конечной толщиной  $a = z_2 - z_1$ , то решение уравнения Шредингера для каждой из трех областей имеет вид:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= A_1 \exp(ik_1 z) + B_1 \exp(-ik_1 z), \quad z < z_1, \\ \psi_2 &= A_2 \exp(ik_2 z) + B_2 \exp(-ik_2 z), \quad z_1 < z < z_2, \\ \psi_3 &= A_3 \exp(ik_1 z) + B_3 \exp(-ik_1 z), \quad z > z_2, \end{aligned} \quad (46)$$

где волновые векторы  $k_1$  и  $k_2$  определены выше, а  $A_1, B_1, A_2, B_2, A_3, B_3$  – амплитуды волн де Бройля. В выражениях (46) члены  $A_1 \exp(ik_1 z)$  и  $B_1 \exp(-ik_1 z)$  описывают соответственно падающую и отраженную волны, а  $A_3 \exp(-ik_1 z)$  – прошедшую волну. Примем для удобства, что  $A_1 = 1$ , а амплитуды  $B_1, A_2, B_2, A_3$  определяются из условий непрерывности волновой функции и ее первой производной в точках  $z = z_1$  и  $z = z_2$ . Амплитуда  $B_3 = 0$ , так как отраженная волна в третьей области отсутствует.

Коэффициент прохождения частицы в данном случае определяется как  $D(E) = |A_3|^2$ , что приводит к выражению:

$$D(E) = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2) \sin^2(ak^2) + 4k_1^2 k_2^2}. \quad (47)$$

Максимум коэффициента прохождения ( $D(E) = 1$ ) достигается для частиц с энергиями:

$$E = U_0 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, \quad \text{где } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (48)$$

При других значениях энергии наблюдается частичное отражение падающих на барьер частиц. Таким образом, из квантовой теории следует, что даже в случае, когда энергия падающей

на потенциальный барьер частицы больше высоты этого барьера, коэффициент ее отражения может быть отличен от 0. Этим квантовая частица отличается от классической, для которой никакого отражения в подобной ситуации быть не может.

Рассмотрим теперь другой практически важный случай, когда квантовая частица взаимодействует с прямоугольным потенциальным барьером шириной  $a$ , высота которого больше ее энергии ( $E < U_0$ ). Классическая частица не может пройти через такой барьер. Она будет отражаться в так называемых классических точках поворота. Точка поворота (turning point) – это точка с координатой  $x$ , в которой кинетическая энергия частицы обращается в нуль, то есть ее полная энергия  $E$  равна  $U(x)$ . Для прямоугольного барьера точки поворота совпадают с координатами его границ (точки  $z_1$  и  $z_2$  на рис. 14, в). Достигнув точки поворота, частица меняет направление своего движения и начинает двигаться в обратном направлении.

Для квантовой частицы решение уравнения Шредингера в каждой из трех областей (перед, внутри и за барьером) имеет вид:

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \exp(ik_1z) + B_1 \exp(-ik_1z), z < z_1, \\ \psi_2 &= A_2 \exp(-\zeta z) + B_2 \exp(\zeta z), z_1 < z < z_2, \\ \psi_3 &= A_3 \exp(ik_1z), z > z_2, \end{aligned} \quad (49)$$

где волновой вектор  $k_1$  определяется выражением, приведенным выше,  $\zeta = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}$ ,  $A_2, A_3, B_1, B_2$  – константы.

В выражениях (49) члены  $\exp(ik_1z)$  и  $\exp(-ik_1z)$  описывают падающую и отраженную волну соответственно, а  $A_3 \exp(ik_1z)$  – волну, прошедшую через барьер. Существование прошедшей через барьер волны, отвечающей квантовой частице с энергией меньше высоты барьера, называют туннельным эффектом. Для его количественного описания используют коэффициент туннельной прозрачности барьера, под которым понимают модуль отношения плотности потока частиц, прошедших через барьер,

к плотности потока падающих частиц. В нашем случае этот коэффициент равен:

$$D(E) = \frac{4k_1^2 \zeta^2}{(k_1^2 + \zeta^2)^2 \operatorname{sh}^2(a\zeta) + 4k_1^2 \zeta^2}. \quad (50)$$

Если выполняется условие  $a\zeta \gg 1$ , то выражение для коэффициента туннельной прозрачности примет вид:

$$D(E) = D_0 \exp\left(-\frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}\right), \quad (51)$$

где  $D_0 = \frac{16E(U_0 - E)}{U_0^2}$ . В расчетах обычно принимают  $D_0 = 1$ .

Если рассматривать потенциальный барьер произвольной формы, то коэффициент прозрачности будет:

$$D(E) \cong \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{2m(U(z) - E)} dx\right), \quad (52)$$

где точки поворота  $z_1$  и  $z_2$  зависят от вида функции  $U(z)$  и определяются из условия  $E = U(z_1) = U(z_2)$ . Коэффициент отражения в этом случае также определяется из выражения  $R(E) = 1 - D(E)$ . Туннельный эффект был положен в основу создания целого ряда методов исследования материалов и полупроводниковых приборов.

## 4. Гетероструктуры с квантовыми проволоками и точками

### 4.1. Основные разновидности и физические явления

Квантовые проволоки и точки привлекли внимание ученых в 80-х годах XX столетия. В квантовых ямах происходит ограничение НЗ только в одном направлении, перпендикулярном к слоям. НЗ могут двигаться в плоскости слоя квантовой ямы или барьерного слоя. В квантовых проволоках НЗ ограничены уже в двух направлениях и могут свободно перемещаться только в одном направлении – вдоль оси проволоки. В квантовых точках,

иногда называемых “искусственными атомами”, НЗ ограничены во всех направлениях и обладают полностью дискретным энергетическим спектром [3, 7].

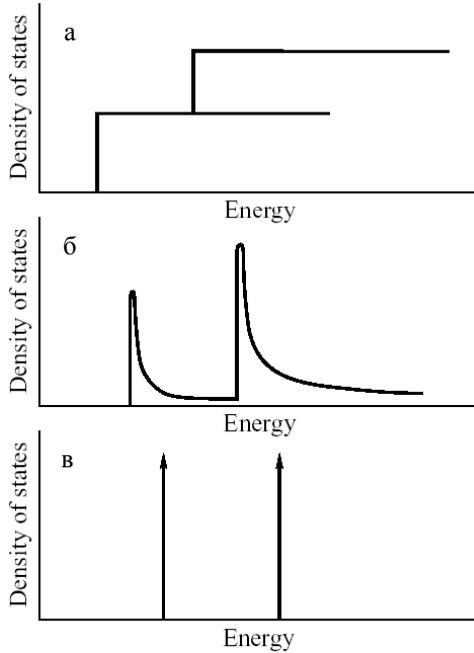


Рис. 15. Схематичное изображение функций плотности состояний для структур с КЯ (а), КП (б) и КТ (в) [3]

Функции плотности состояний для КЯ, квантовых проволок (КП) и квантовых точек (КТ) схематично показаны на рис. 15, а, б и в соответственно.

Фундаментальные физические явления в гетероструктурах с квантовыми проволоками и точками:

– одно- и нульмерный электронный газ;

- для квантовых проволок функция плотности состояний с острыми максимумами;
- для квантовых точек функция плотности состояний типа  $\delta$ -функций;
- увеличение энергии связи экситона.

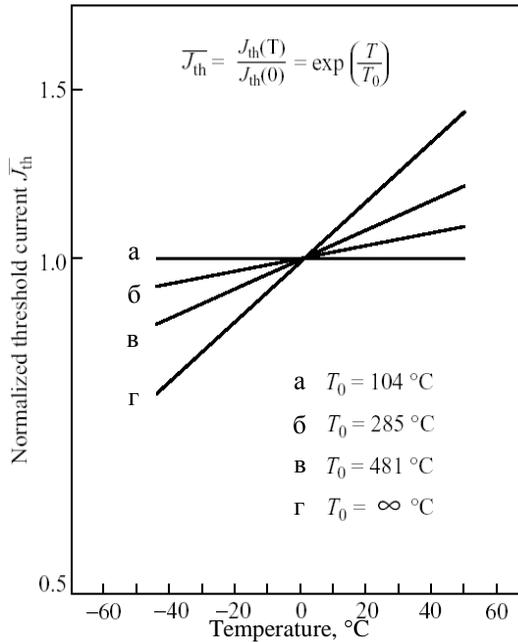


Рис. 16. Нормированные температурные зависимости порогового тока для лазеров на основе: объемных кристаллов (а), КЯ (б), КП (в) и КТ (г) [3]

Важнейшие направления для применения в производстве полупроводниковых приборов:

- уменьшенное значение порогового тока лазера (рис. 16) и увеличенное дифференциальное усиление, уменьшенная температурная зависимость порогового тока для КП, температурная

стабильность порогового тока для КТ, дискретный спектр усиления и возможность получения рабочих характеристик, подобных характеристикам твердотельных или газовых лазеров;

- более высокий коэффициент модуляции в электрооптических модуляторах;

- возможность создания одноэлектронных приборов;

- перспективные возможности для создания полевых транзисторов с улучшенными характеристиками.

Технологические особенности гетероструктур с КП и КРТ:

- применение для роста эффектов самоорганизации;

- эпитаксиальный рост в V-канавках;

- литография высокого разрешения и травление структур с квантовыми ямами.

## 4.2. Требования, предъявляемые к квантовым точкам

### 4.2.1. Минимальный размер

Нижний предел для размера КТ определяется размером, при котором хотя бы один электронный уровень существует в КТ [5]. Этот критический размер  $d_{\min}$  существенно зависит от величины разрыва зоны проводимости  $\Delta E_c$  на гетерогранице КТ – барьерный слой. В сферической КТ хотя бы один энергетический уровень для электронов существует, если  $\Delta E_c$  превышает величину

$$\Delta E_c^* = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{\pi}{d_{\min}} \right)^2 \equiv E_1^{QW}, \quad (53)$$

где  $m_e^*$  – эффективная масса электрона и  $E_1^{QW}$  – первый уровень размерного квантования в прямоугольной КЯ с бесконечными стенками и шириной  $d_{\min}$  [7].

Если величина разрыва зоны проводимости 0,3 эВ например, для системы GaAs/Al<sub>0,4</sub>Ga<sub>0,6</sub>As, то диаметр КТ должен быть не меньше 40 Å. Эта величина, строго говоря, является абсолютным нижним пределом для размера КТ, поскольку для КТ несколько большего размера энергетический зазор между электронным уровнем в КТ и электронным уровнем в материале матрицы, т.е. в барьере, будет весьма мал, и при конечных температурах тепловой выброс НЗ из КТ может привести к их опустошению. Для системы InAs/AlGaAs величина  $\Delta E_c$  существенно больше, однако эффективная масса электрона меньше, поэтому критические размеры КТ оказываются такими же, как и для системы GaAs/AlGaAs.

#### 4.2.2. Максимальный размер

Расстояние между энергетическими уровнями в КТ может стать сопоставимым с тепловой энергией  $kT$ , при этом возрастает заселенность более высоких энергетических уровней. Для КТ условие, при котором заселением более высоких энергетических уровней можно пренебречь, записывается как [7]:

$$kT \leq \frac{1}{3} (E_2^{QD} - E_1^{QD}), \quad (54)$$

где  $E_1^{QD}$ ,  $E_2^{QD}$  – энергии первого и второго уровней размерного квантования соответственно. Иными словами, в случае сферической или кубической КТ преимущества размерного квантования могут быть полностью реализованы, если

$$kT \leq E_1^{QD}. \quad (55)$$

Верхний предел для размера КТ оказывается около 120 Å для системы GaAs/AlGaAs и 200 Å для системы InAs/AlGaAs из-за существенно меньшей эффективной массы электрона во втором случае. Эффективная масса дырок велика по сравнению с

эффективной массой для электронов, поэтому эффективное квантование дырок требует еще меньших размеров.

### 4.2.3. Структурное совершенство

Структуры с КТ для применений в оптоэлектронных приборах не должны содержать дислокаций и точечных дефектов, кроме этого, гетерограницы должны обладать низкой скоростью поверхностной рекомбинации. Указанные условия делают предпочтительными методы прямого получения КТ [7]. Плотные массивы КТ ( $\sim 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ) необходимы для реализации модалного усиления в лазерах. Исключительные параметры структур с КТ могут быть реализованы лишь в том случае, если КТ как можно более однородны по составу, форме и размерам.

## 4.3. Размерное квантование электронных состояний в квантовых проволоках и точках

### 4.3.1. Проволоки с прямоугольным сечением $a_x \times a_y$

Для случая бесконечно высоких барьеров огибающая волновой функции НЗ имеет вид [1]:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp(ik_z z) V(x, y), \quad (56)$$

где  $V(x, y) = V_{n_x}(x, a_x) V_{n_y}(y, a_y)$ ,  $L$  – длина проволоки,  $1/\sqrt{L}$  – нормировочный коэффициент,  $k_z$  – волновой вектор, характеризующий свободное движение вдоль главной оси проволоки;

$$V_n(x, a) = \sqrt{\frac{2}{a}} \begin{cases} \cos \frac{nx}{a} & \text{при нечетном } n; \\ \sin \frac{nx}{a} & \text{при четном } n, \end{cases} \quad (57)$$

где  $n = 0, 1, 2, \dots$

Для энергии НЗ в состоянии с волновым вектором  $k$  имеем:

$$E = \frac{\hbar^2}{m^w} \left[ k^2 + \left( \frac{n_x \pi}{a_x} \right)^2 + \left( \frac{n_y \pi}{a_y} \right)^2 \right]. \quad (58)$$

### 4.3.2. КТ в форме прямоугольного параллелепипеда $a_x \times a_y \times a_z$

Приведем выражения для огибающей волновой функции и энергии электрона для случая бесконечно высоких барьеров:

$$\Psi(\vec{r}) = V_{n_x}(x, a_x) V_{n_y}(y, a_y) V_{n_z}(z, a_z),$$

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^w} \sum_{j=x,y,z} \left( \frac{n_j}{a_j} \right)^2. \quad (59)$$

### 4.3.3. Сферические КТ радиусом $R$

Основное состояние обладает сферической симметрией и в случае барьеров конечной высотой  $V$  описывается волновой функцией:

$$\Psi(\vec{r}) = C r^{-1} \begin{cases} \sin(kr) & n\pi r \leq R; \\ \sin[k \operatorname{Re.xp}(-\chi(r-R))] & n\pi r \geq R, \end{cases} \quad (60)$$

где  $C$  – нормировочный коэффициент;

$$k = (2m^w E / \hbar^2)^{1/2}; \quad \chi = [2m^b (V - E) / \hbar^2]^{1/2}. \quad (61)$$

Энергия размерного квантования  $E$  удовлетворяет уравнению

$$1 - kR \operatorname{tg}(kR) = \frac{m^w}{m^b} (1 + \chi R). \quad (62)$$

#### 4.3.4. Цилиндрические КП

В случае барьеров конечной высоты огибающая волновой функции для основного состояния выражается через функции Бесселя  $J_0(x)$  и  $K_0(x)$ :

$$\Psi(\vec{r}) = \begin{cases} CJ_0(kr) \text{ при } r \leq R; \\ DK_0(\chi r) \text{ при } r \geq R, \end{cases} \quad (63)$$

где  $D = C J_0(kR)/K_0(\chi R)$ .

### 5. Плотность состояний в системах с пониженной размерностью газа носителей заряда

#### 5.1. Плотность состояний 2D электронов

Рассмотрим расчет плотности электронных состояний в низкоразмерных структурах (рис. 17). Прежде всего, вычислим плотность состояний 2D электронов, находящихся в одной подзоне размерного квантования. Сначала определим число состояний, у которых энергия меньше  $E$ . Будем считать, что собственные функции – это плоские волны, нормированные по площади образца  $S$ :

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp \frac{i}{\hbar} (p_x x + p_y y), \quad (64)$$

а спектр – изотропный и квадратичный:

$$E - E_n = p^2 / (2m). \quad (65)$$

Воспользовавшись циклическими граничными условиями для функций (64)  $\psi(x, y) = \psi(x + L_x, y)$  и  $\psi(x, y) = \psi(x, y + L_y)$ , определим разрешенные значения компонентов проекций импульса  $p_x = \frac{2\pi\hbar}{L_x} n_1$ ,  $p_y = \frac{2\pi\hbar}{L_y} n_2$ , где  $n_1$  и  $n_2$  - целые числа. Площадь

в пространстве  $p_x, p_y$ , приходящаяся на одно состояние, будет равна

$$(2\pi\hbar)^2 / L_x L_y = (2\pi\hbar)^2 / S. \quad (66)$$

Все состояния с энергией меньше  $E$  лежат внутри круга радиусом  $p = \sqrt{2m(E - E_n)}$ . Разделив площадь этого круга на площадь, приходящуюся на одно состояние, найдем полное число состояний с энергией меньше  $E$ :

$$N(E) = 2 \frac{\pi p^2 S}{(2\pi\hbar)^2} = \frac{mS(E - E_n)}{\pi\hbar^2}. \quad (67)$$

В данном случае учитывается, что каждое состояние двукратно вырождено по спину. Плотность состояний, определяемую как число состояний на единичный интервал энергии и на единицу площади в  $n$ -й подзоне размерного квантования, определим как:

$$D_n(E) = \frac{1}{S} \frac{dN(E)}{dE} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \Theta(E - E_n), \quad (68)$$

где функция  $\Theta(E - E_n)$  равна 1 или 0 соответственно при  $E > E_n$  и  $E < E_n$ . Полученная двумерная плотность состояний является константой для всех энергий, превышающих  $E_n$ . Полная плотность состояний нескольких подзон  $D_{2D}(E)$ , измеряемая в  $\text{эВ}^{-1}\text{м}^{-2}$ , является ступенчатой функцией энергии:

$$D_{2D}(E) = \sum_n D_n(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_n), \quad n = 1, 2, \dots$$

Ступени (рис. 12) находятся в точках  $E = E_n$ ; при больших энергиях  $D_{2D}(E)$  стремится к плотности 3D электронов  $D_{3D}(E)$  (электронов, находящихся в объемных монокристаллах), которая пропорциональна  $\sqrt{E}$  [8].

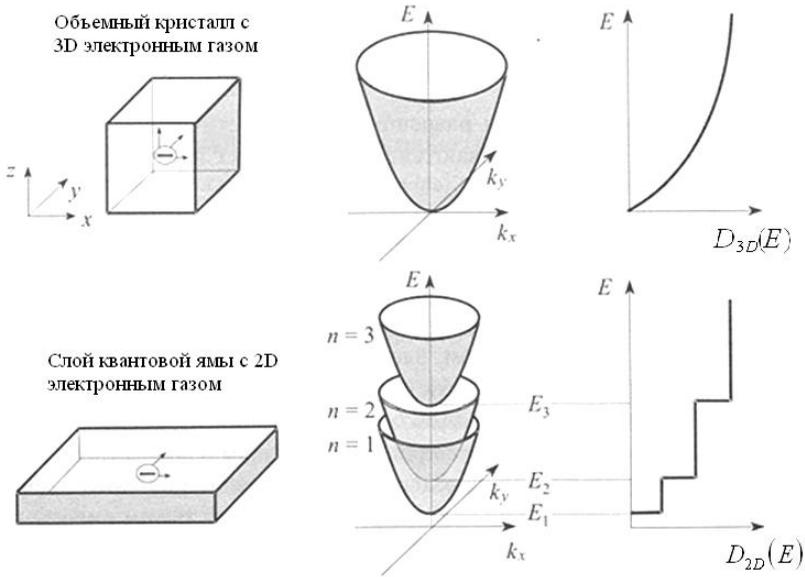


Рис. 17. Квантоворазмерная структура с ограничением движения электронов в одном измерении (слой квантовой ямы) и ее энергетическая диаграмма в сравнении с объемной трехмерной структурой без ограничения движения носителей заряда

## 5.2. Плотность состояний 1D электронов

Рассмотрим плотность состояний в квантовой проволоке длиной  $L_z$ , где электрон свободно движется только в одном направлении  $z$ . Пространство импульсов в данном случае тоже одномерно [4]. Полное число состояний с импульсом, не превышающим  $|p_z|$ , найдем, разделив  $2p_z$  на интервал в импульсном пространстве, приходящийся на одно квантовое состояние:

$$N(p_z) = 2 \frac{2p_z}{2\pi\hbar/L_z}. \quad (69)$$

Первый множитель 2 в правой части уравнения учитывает двукратное вырождение по спину. Выражая  $p_z$  в (35) через энергию в подзоне  $E_{n,m}(p_z) = E_{n,m} + p_z^2 / (2m^*)$ , где  $n, m = 1, 2, \dots$ , находим полное число состояний с энергией меньше  $E$ :

$$N(E) = \frac{2L_z}{\pi\hbar} \sqrt{2m^*(E - E_{nm})}. \quad (70)$$

Плотность состояний (на единицу длины) определяется так:

$$D_{n,m}(E) = \frac{dN(E)}{dE} \frac{1}{L_z} = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar \sqrt{E - E_{n,m}}}. \quad (71)$$

Из (71) видно, что одномерная плотность состояний имеет особенности на нижних границах подзон  $E_{nm}$  и убывает с ростом  $E$  по закону  $E^{-1/2}$ . Плотность состояний в квантовой проволоке определяется суммированием плотностей состояний по всем подзонам:

$$D_{1D}(E) = \sum_{n,m} D_{n,m}(E) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{E - E_{n,m}}}, \quad n, m = 1, 2, \dots$$

График зависимости плотности состояний одномерной наноструктуры представлен на рис. 18.

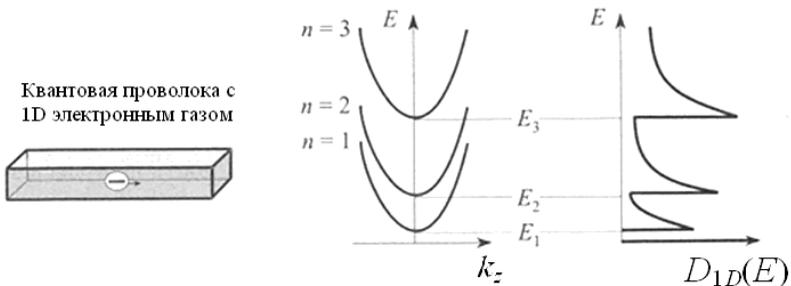


Рис. 18. Квантоворазмерная структура с ограничением движения электронов в двух измерениях (квантовая проволока) и ее энергетическая диаграмма

### 5.3. Плотность состояний 0D электронов

Как говорилось выше, в квантовых точках электроны ограничены во всех направлениях и обладают полностью дискретным энергетическим спектром (рис. 19). Выражение для плотности состояний для нульмерного (0D) электронного газа имеет вид [1]:

$$D(E) = 2\delta[E - E_n]. \quad (72)$$

Таким образом, плотность состояний в квантовой точке представляет собой набор изолированных пиков, уширенных с учетом конечности времени жизни электрона на уровнях размерного квантования.

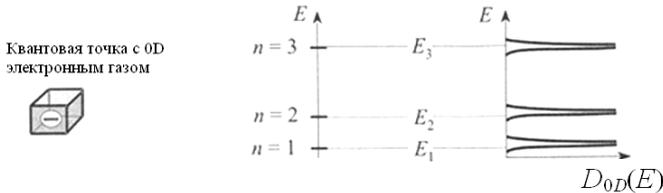


Рис. 19. Квантоворазмерная структура с ограничением движения электронов во всех направлениях (квантовая точка) и ее энергетическая диаграмма

### 5.4. Плотность состояний 2D электронов в квантующем магнитном поле

Спектр 2D электронного газа является полностью дискретным, т.е.  $E_n = \hbar\omega_c(n+1/2)$  [4]. Иными словами, спектр собственных значений двумерного уравнения Шредингера для 2D электронного газа, находящегося в квантующем магнитном поле, тот же, что и спектр гармонического осциллятора. Роль частоты осциллятора играет циклотронная частота  $\omega_c = qH/(mc)$ , где  $H$  – напряженность магнитного поля,  $c$  – скорость света. Плотность состояний как функция энергии представляет собой

ряд  $\delta$ -образных (дельта-образных) пиков. Учитывая, что кратность вырождения магнитных уровней

$$N_0 = 1cm^2 \frac{H}{\phi_0}, \quad (73)$$

где  $\phi_0 = c\hbar/q$  – квант магнитного потока, множитель перед  $\delta$ -функцией в выражении плотности состояний определяется соотношением  $qH/(2\pi c\hbar)$ . Плотность состояний при этом

$$D(E) = \frac{qH}{2\pi c\hbar} \delta[E - \hbar\omega_c(n + 1/2)]. \quad (74)$$

Зависимость  $D(E)$  для двумерного электронного газа в квантующем магнитном поле показана на рис. 20.

Приведенные выражения для одно-, дву- и нульмерной электронной плотности состояний получены без учета электронного рассеяния. В реальных образцах ступени двумерной плотности состояний, особенности одномерной плотности состояний и  $\delta$ -образные особенности нульмерной плотности состояний будут частично размыты, а в “сильно несовершенных” образцах с дефектами кристаллической структуры и примесями – полностью подавлены.

Вследствие соотношения неопределенностей для энергии и времени энергетический уровень электрона, испытывающего рассеяние, имеет конечную ширину  $\hbar/\tau_p$ , где  $\tau_p$  – время жизни электрона в одном квантовом состоянии, или время релаксации импульса. Для того чтобы дискретный характер спектра и особенности плотности состояний сохранялись, необходимо выполнить следующее условие:

$$E_{n+1} - E_n > \frac{\hbar}{\tau_p}. \quad (75)$$

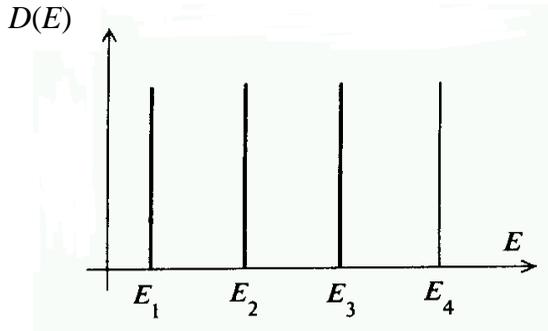


Рис. 20. Плотность состояний 2D электронов в квантующем магнитном поле

Иначе говоря, расстояние между дискретными уровнями должно превышать уширение, определяемое соотношением неопределенностей для энергии и времени. Так как рассчитать время релаксации  $\tau_p$  не так просто, на практике его можно оценить, выразив через экспериментально измеренную подвижность  $\mu$ , связанную с временем релаксации соотношением  $\mu = q\tau_p/m$  [4].

Выполнение условия (75) также необходимо для того, чтобы особенности плотности состояний в магнитном поле были наблюдаемыми. В последнем случае это условие записывается в форме

$$\hbar\omega_{\tilde{N}} > \frac{\hbar}{\tau_p}. \quad (76)$$

Отметим, что условие (76) совпадает по форме с классическим условием сильного магнитного поля  $\omega_c\tau_p > 1$ , которое означает, что за время одного оборота в магнитном поле электрон не испытывает рассеяния.

Для экспериментального обнаружения различных кинетических и термодинамических эффектов квантования необходимо также, чтобы температура была не слишком высока. Это означает, что тепловой разброс энергий  $k_B T$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана, должен быть меньше расстояния между уровнями дискретного спектра:

$$E_{n+1} - E_n > k_B T. \quad (77)$$

В квантовых магнитных полях последнее условие имеет вид:

$$\hbar \omega_c > k_B T. \quad (78)$$

### **5.5. Плотность состояний и статистика носителей в сверхрешетках**

Выражения, описывающие статистические свойства носителей в СР, носят иной характер, нежели в однородных полупроводниках, так как анизотропный минизонный характер энергетического спектра приводит к специфическому виду функции плотности состояний  $D(E)$  в СР. Рассмотрим основные особенности этой функции [6].

Полный энергетический спектр СР не содержит новых запрещенных зон в полном смысле этого слова, т.е. областей, где  $D(E) = 0$ . Однако зависимость  $E_z(k_z)$  содержит запрещенные области, и полная энергия электрона  $E$  может лежать в этих областях лишь за счет двумерного движения в плоскости  $x_y$ , сохранившего свой непрерывный спектр. Поскольку плотность состояний для двумерного движения не зависит от энергии, то в указанных областях кривая  $D(E)$  будет горизонтальной, а при энергиях, соответствующих разрешенным минизонам, будет носить возрастающий характер, соответствующий трехмерному движению [6].

Качественно вид  $D(E)$  в СР приведен на рис. 21 [6]. Там же изображена функция плотности состояний в полупроводнике без СР. С ростом энергии электрона влияние периодического

потенциала СР на его спектр ослабевает и обе кривые сближаются.

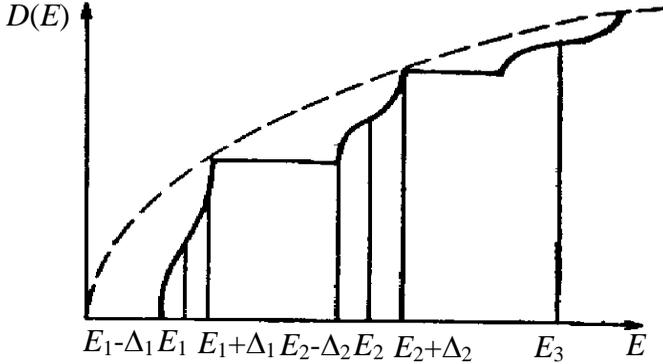


Рис. 21. Плотность электронных состояний в СР. Штриховая линия соответствует плотности состояний в однородном полупроводнике

Концентрация НЗ в СР ведется по стандартной формуле [6]:

$$n = \int \frac{D(E)dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)}. \quad (79)$$

Из (79) получают условие того, что носители заполняют только одну минизону:

$$kT \ll E_2 - E_1, \quad n < \frac{m(E_2 - E_1)}{\pi \hbar^2 d}. \quad (80)$$

Взяв типичные для СР значения  $E_2 - E_1 = 0,1$  эВ,  $m = 0,1m_0$ ,  $d = 10$  нм, получим, что это условие выполняется при температурах, вплоть до комнатной, и концентрациях, меньших чем  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ .

Вычисление (79) в общем виде весьма затруднительно, однако задача упрощается, если газ носителей считать двумерным. Условие двумерности имеет вид [6]:

$$|\Delta_s| \ll \max \left\{ E_F, kT, \frac{\hbar}{\tau} \right\} \quad (81)$$

и выполняется довольно часто из-за узости подбарьерных минизон. При выполнении условия (47) можно считать электроны равномерно распределенными по ширине минизон и полагать при вычислениях  $\Delta_s = 0$ . Тогда для одной заполненной минизоны (80) имеем [6]:

$$n = \frac{mkT}{\pi\hbar^2 d} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_1}{kT} \right) \right]. \quad (82)$$

Из (82) можно получить критерий невырожденности [6]:

$$\frac{\pi\hbar^2 dn}{mkT} \ll 1. \quad (83)$$

Условие (83) является менее жестким, чем условие невырожденности в трехмерном случае. Иначе говоря, в СР с одной заполненной минизонной вырождение наступает при больших концентрациях носителей, чем в исходном кристалле.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Воробьев Л.Е., Ивченко Е.Л., Фирсов Д.А., Шалыгин В.А. Оптические свойства наноструктур. СПб.: Наука, 2001. 188 с.
2. Shokley W. US Patent 2569347, September 25. 1951.
3. Алферов Ж.И. История и будущее полупроводниковых гетероструктур // Физика и техника полупроводников. 1998. Т.31 №1. С.3-18.
4. Демиховский В.Я., Вугальтер Г.А. Физика квантовых низкоразмерных структур. М.: Логос, 2000. 248 с.
5. Bastard G., Brum J.A. Electronic state in semiconductor

heterostructures // IEEE J. Quantum Electronics. 1986. V. 22. P. 1625-1631.

6. Шик А.Я. Сверхрешетки – периодические полупроводниковые структуры // Физика и техника полупроводников. 1974. Т.8 №10. С.1841-1864.

7. Леденцов Н.Н., Устинов В.М., Щукин В.А., Копьев П.С., Алферов Ж.И., Бимберг Д. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры // Физика и техника полупроводников. 1998. Т.32 №4. С.385-410.

8. Орешкин П.Т. Физика полупроводников и диэлектриков. М.: Высш. школа, 1977. 448 с.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	1
1. Гетероструктуры: основные понятия.....	1
2. Классические гетероструктуры.....	2
3. Гетероструктуры с квантовыми ямами.....	4
3.1. Основные разновидности и физические явления....	4
3.2. Размерное квантование электронных состояний в квантовых ямах.....	9
4. Гетероструктуры с квантовыми проволоками и точками.....	30
4.1. Основные разновидности и физические явления....	30
4.2. Требования, предъявляемые к квантовым точкам....	33
4.3. Размерное квантование электронных состояний в квантовых проволоках и точках.....	35
5. Плотность состояний в системах с пониженной размерностью газа носителей заряда.....	37
5.1. Плотность состояний 2D электронов.....	37
5.2. Плотность состояний 1D электронов.....	39
5.3. Плотность состояний 0D электронов .....	41
5.4. Плотность состояний 2D электронов в квантующем магнитном поле.....	41
5.5. Плотность состояний и статистика носителей в сверхрешетках.....	44
Библиографический список.....	46