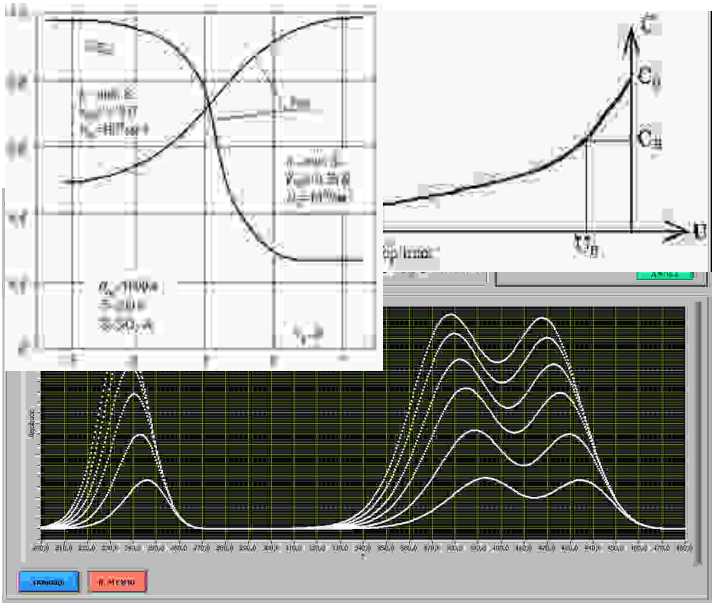
4651

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР ЭЛЕКТРОНИКИ

Методические указания
к лабораторным работам



Рязань 2012

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: Литвинов Владимир Георгиевич
Мальченко Сергей Иосифович
Рыбин Николай Борисович
Ермачихин Александр Валерьевич

Редактор Р.К. Мангутова
Корректор С.В. Макушина
Подписано в печать 17.10.12 Формат бумаги 60х84 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^+-n-переходе без ловушек с однородным распределением легирующих примесей в p^+-и n-областях толщина слоя объемного заряда W определяется соотношением [1, 2]

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

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

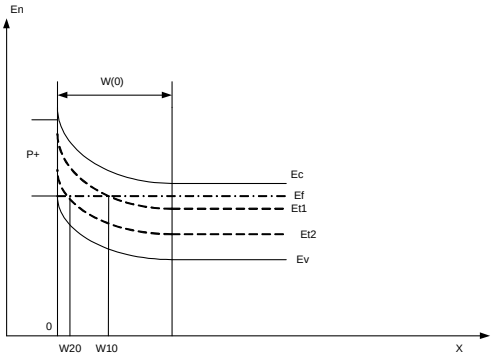
Емкость СОЗ равна $C = \frac{\varepsilon A}{W}$, где A – площадь перехода. Электрическое поле слоя объёмного заряда линейно изменяется с координатой, достигая максимальной величины $F_{\max} = \frac{eN_{DM}W}{\varepsilon}$ на границе раздела p^+-n-перехода. При этом электрическое поле уменьшается до 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

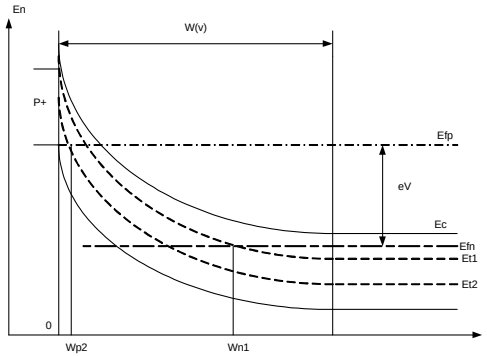
слое объемного заряда свободных носителей неоднородное электрическое поле приводит к быстрому их выносу из слоя объемного заряда (за время ~ 10^{-10} с), что практически исключает возможность повторного захвата их на глубоких уровнях.

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_{t1} и N_{t2}, энергетические уровни которых E_{t1} и E_{t2} 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_{t1} заполнен электронами для координат $x>W_{10}$, а уровень E_{t2} – 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_{t1} устанавливается с постоянной времени τ, которая называется временем релаксации заполнения уровня и определяется из выражения [2]

$$\tau_1 = r_1 \exp\left(\frac{E_c - E_{t1}}{kT}\right). \qquad (2)$$

Постоянная времени заполнения уровня E_{t2}

$$\tau_2 = r_2 \exp\left(\frac{E_{t2} - E_V}{kT}\right). \qquad (3)$$

Здесь r_1 и r_2 – коэффициенты, зависящие от параметров полупроводника и сечений захвата электронов на уровень E_{t1} и дырок на уровень E_{t2}.

Время релаксации заполнения не зависит от концентрации глубоких уровней, если $N_{DM} >> N_t$, и слабо зависит от величины электрического поля. Область заполнения уровня E_{t2} изменяется намного меньше, чем уровня E_{t1} ($W_{20}=W_{P2}$; $W_{n1}>>W_{10}$).

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 τ_1.

Емкость 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 емкость перехода

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

где $N_0=\int_0^{W_0}\frac{x}{W_0}N_{DM}(x)dx+\int_0^{W_{10}}\frac{x}{W_0}N_t(x)dx$.

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

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

где $N_{t0}=\int_0^{W_V'}\frac{x}{W_V'}N_{DM}(x)dx+\int_0^{W_{10}}\frac{x}{W_V'}N_t(x)dx$.

Стационарное значение ёмкости [2]

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

где $N_V=\int_0^{W_V}\frac{x}{W_V}N_{DM}(x)dx+\int_0^{W_{n1}}\frac{x}{W_V}N_t(x)dx$.

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 $N_t<<N_{DM}$, 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_t 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 $\tau = r \cdot \exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right)$. 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 α_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 пропускании 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 (емкостная РСГУ) или величины релаксации тока через переход (токовая РСГУ) с рядом заранее задаваемых постоянных време-

ни релаксации τ_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 τ_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_{ti} определяется соотношением [2]

$$\alpha_{ni} = \frac{1}{\tau_i} = \frac{\sigma_i < V_n > N_c}{g_i} \exp\left(-\frac{\Delta E_{ti}}{kT}\right), \qquad (7)$$

где σ_i - сечение захвата носителей; $< V_n >$ - 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 $\alpha_{ti}(T)$ линейна с наклоном, характеризующим величину E_{ti}. При изменении температуры образца и периодическом осуществлении процесса заполнения и опустошения ловушек регистрирующее устройство, настроенное на постоянную времени τ_1, зафиксирует пики сигнала двух ловушек соответственно при температурах T_{m1} и T_{m2}.

При настройке на постоянную времени τ_2 те же ловушки проявятся при температурах $T_{m1}^{'}$ и $T_{m2}^{'}$. Различие температур пиков для каждой ловушки при известных значениях τ_1 и τ_2 позволяет определить энергии термической активации рассматриваемых ГУ.

Сечения захвата носителей тока ловушками σ_i могут быть вычислены по известным величинам N_c, E_{ti} и $< V_n >$ 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 Δx, удаленном на расстояние x от границы p^+-n-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]

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

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

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

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 Δx на расстоянии x от границы раздела перехода, как ΔQ, тогда

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

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

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

Протекающий по внешней цепи заряд ΔQ_{ext} определяется как разность ΔQ и ΔQ_+:

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

При эмиссии дырок из полупроводника n-типа проводимости ситуация обратная: во внешней цепи регистрируется заряд ΔQ_+.

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

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

где α_n и α_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 $\left[N_t - n(t)\right]$. Временную зависимость $n(t)$ можно описать следующими соотношениями:

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

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

типа) полностью заполнены и

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

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

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

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 τ 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 Δx в полупроводниковых структурах $10^{14} – 10^{17}$ см$^{-3}$ емкостная РСГУ обнаруживает ловушки с минимальной концентрацией $10^{-9} – 10^{-12}$ см$^{-3}$. При использовании токовой РСГУ с малыми (~10 мкс) постоянными времени чувствительность достигает 10^8 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_{ti}, τ 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 $f >> \frac{1}{C}$) 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

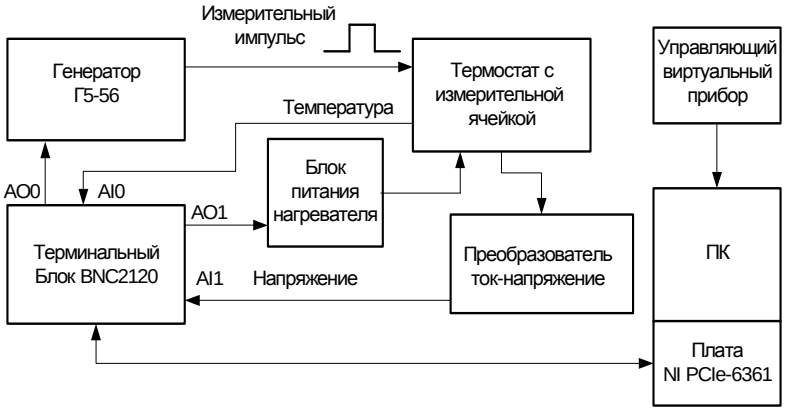


Рис. 2. Упрощенная структурная схема установки токовой РСГУ

экранированного кабеля через терминальной 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 быстродействие 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 лицевая панель, показанная на рис.3.

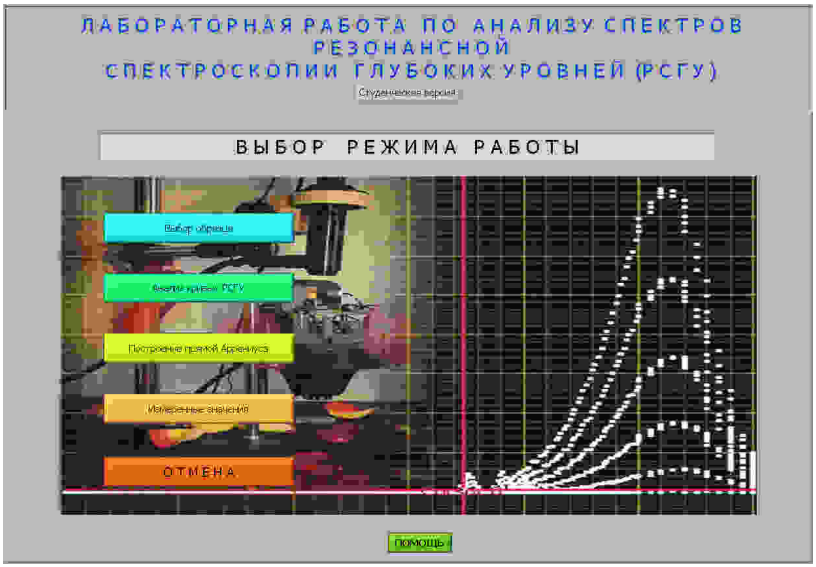


Рис. 3. Начальная лицевая панель лабораторной работы

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

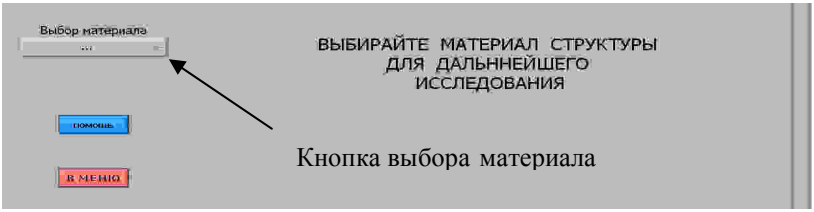


Рис. 4. Часть лицевой панели выбора материала структуры

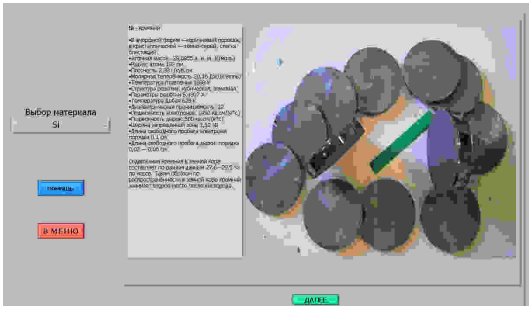


Рис. 5. Основные сведения о выбранном материале

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

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

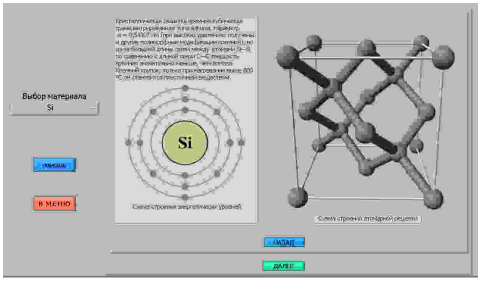


Рис. 6. Дополнительные сведения о выбранном материале

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).

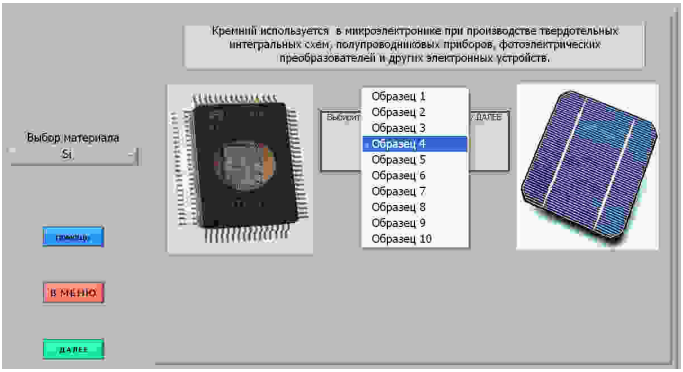


Рис. 7. Панель выбора номера образца для исследования

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:

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

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

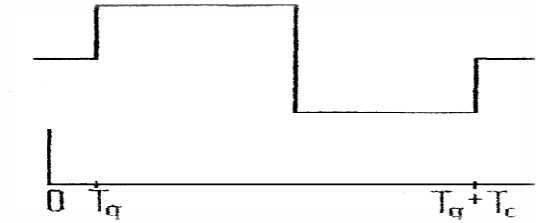


Рис. 8. Весовая функция двух импульсный интегратор

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 Tg и Tc, а так же количество отображаемых графиков и перестроить спектр.

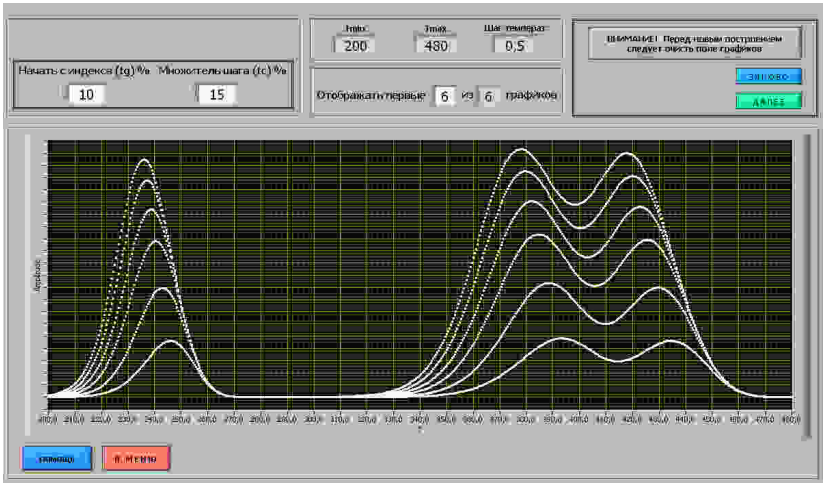


Рис. 9. Вид лицевой панели после построения спектра РСГУ

Для этого НЕОБХОДИМО нажать на кнопку «ВНИМАНИЕ! Перед новым построением следует очисть 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-

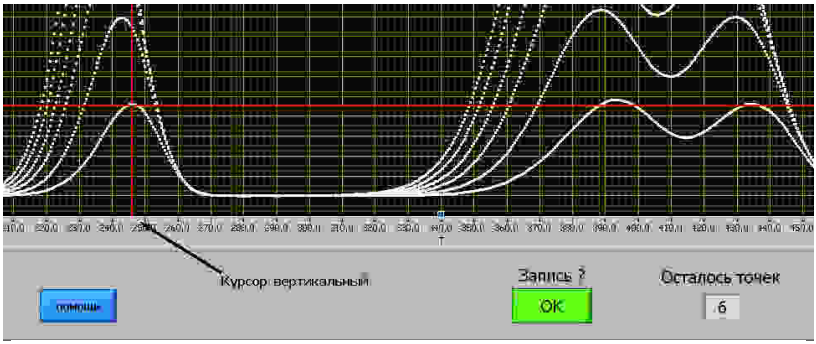


Рис. 10. Часть отображаемой лицевой панели со спектром РСГУ и курсорами

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.

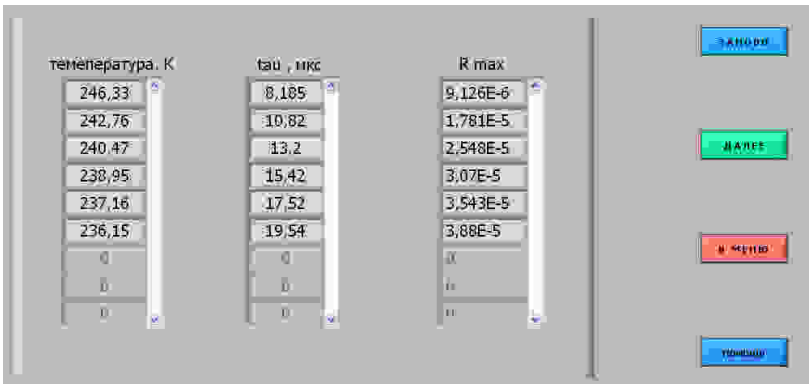


Рис. 11. Таблицы со значениями температуры и амплитуды максимумов спектра РСГУ

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,

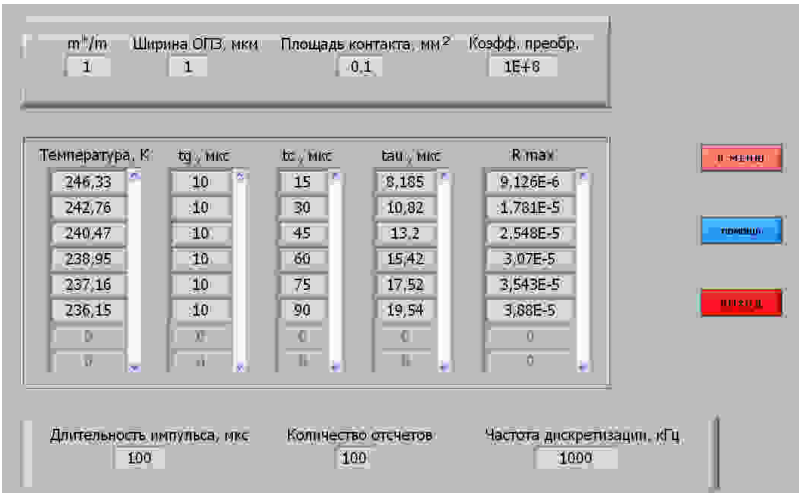


Рис. 12. Окончательные данные, необходимые для выполнения лабораторной работы

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.**

$$\text{tau} := \begin{pmatrix} \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \end{pmatrix} \qquad \text{T} := \begin{pmatrix} \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

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:

$$i := 0..5 \qquad j := 0 \tag{2.3}$$

где i – количество строк, j – количество столбцов.

Далее, например, можно ввести промежуточное значение:

$$c_{i,j} := tau_{i,j}\left(T^2\right)_{i,j} \tag{2.4}$$

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

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

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

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

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

$$x := a \cdot T + b \tag{2.8}$$

Рассчитать значение тангенса угла можно по формуле:

$$tg\alpha := \frac{\left|x_{0,0} - x_{5,0}\right|}{\left|\frac{10^3}{T_{0,0}} - \frac{10^3}{T_{5,0}}\right|} \tag{2.9}$$

Вычислив значение тангенса угла α можно найти энергию активации глубокого уровня по формуле:

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

где e – значение экспоненты ($e \approx 2.71828$), k – постоянная Больцмана. Если значение k взять в эВ·К$^{-1}$, 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:

$$S = \frac{h^2 \cdot \exp\left(\frac{2m \cdot орд.}{\lg(e)}\right)}{16 \cdot \pi \cdot m \cdot k}, \tag{2.11}$$

где h – постоянная Планка,

m – эффективная масса,
e – значение экспоненты ($e \approx 2.71828$),
k - постоянная Больцмана, в формуле (2.11) её значение берется только в Дж·К$^{-1}$, в отличии от формулы (2.10).

Так как площадь сечения захвата очень мала и достигает значение до 10^{-20} см^2, следует ввести в числитель множитель 10^{20}. Для получения рассчитанного значения сечения захвата **не забудьте ответ, полученный в программе MathCAD, поделить на 10^{20}**.

Для нахождения концентрации на глубоком уровне необходимо: значения R_{max},Tc и Tg, tau, ширина ОПЗ, площадь контакта, коэффициент преобразования, полученные ранее (рис.11).

Необходимо заполнить матрицы, показанные ниже (**времена tg и tc берутся в секундах**):

$$R := \begin{pmatrix} \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \end{pmatrix} \quad tg := \begin{pmatrix} \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \end{pmatrix} \quad tc := \begin{pmatrix} \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \\ \blacksquare \end{pmatrix} . \qquad (2.12)$$

Концентрация считается по следующей формуле (индексы так же обязательны, как и в формуле 2.4):

$$N_{i,j} := \frac{2\cdot(R)_{i,j}}{q\cdot w\cdot S\cdot kp}\cdot\exp\left(\frac{tg_{i,j}}{tau_{i,j}}\right)\cdot\left[1-\exp\left[\frac{(-tc)_{i,j}}{2\cdot tau_{i,j}}\right]\right]^{-2} \qquad (2.13)$$

где q – значение заряда электрона,
w – ширина ОПЗ,
S – площадь контакта,
kp – коэффициент преобразования.

После определения всех значений самое максимальное отбрасывается и находится среднее из оставшихся значений.

3. Содержание отчета

Отчет оформляется каждым студентом индивидуально и должен содержать:

- Название работы;
- Цель работы;
- Структурную схему установки РСГУ;
- Основные расчетные формулы;

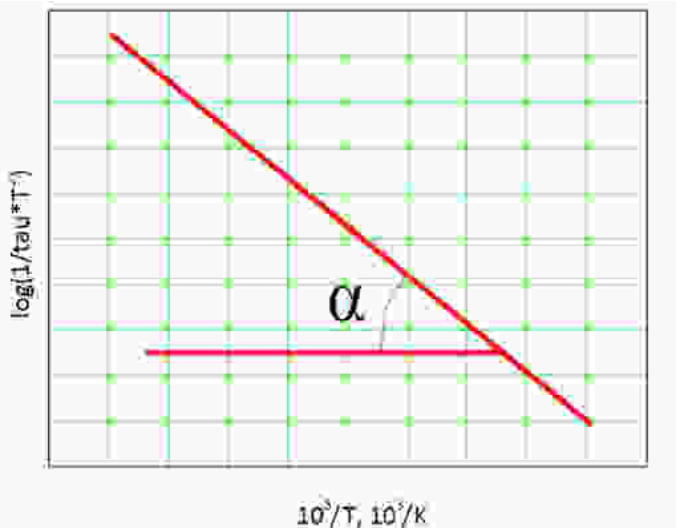


Рис. 13. Прямая Арениуса с обозначенным углом альфа

- 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_РСГУ. 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 ХАРАТЕРИСТИК 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

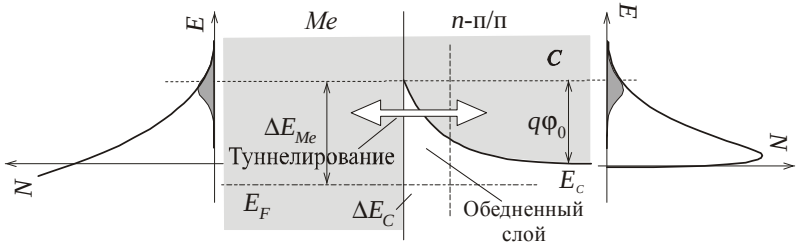


Рис. 1. Энергетическая диаграмма и концентрация носителей заряда в равновесном переходе металл-полупроводник

больше, мы видим только часть распределения.

В плоскости металлургического контакта здесь присутствует разрыв зон ΔE_C; потенциальных барьеров два и они разные по величине: ΔE_{Me} – барьер для электронов металла, $q\varphi_0$ – 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 δ обусловлен зарядами ионизированных доноров N_D. В этом случае решение уравнения дает следующие результаты (рис. 4):

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

$$\varphi = -\frac{q}{2\varepsilon_s\varepsilon_0} N_D(\delta - x)^2 + \varphi_{\text{п/п}} \ , \qquad (2)$$

где ε_s – диэлектрическая проницаемость полупроводника. Из уравнения (2) можно получить, что

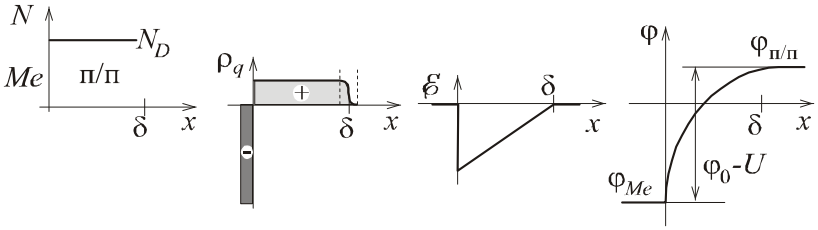
$$\delta = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s\varepsilon_0}{qN_D}(\varphi_0 - U)} \, , \qquad (3)$$

где φ_0 – контактная разность потенциалов, а U – приложенное напряжение. Пространственный заряд в полупроводнике равен

$$Q_s = qN_D\delta \cdot S = S\sqrt{2\varepsilon_s\varepsilon_0 qN_D(\varphi_0 - U)} \ , \qquad (4)$$

где S – площадь перехода Шоттки.

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



а б в г

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

$$C = S\sqrt{\frac{\varepsilon_s \varepsilon_0 q N_D}{2(\varphi_0 - U)}} = \frac{\varepsilon_s \varepsilon_0 S}{\delta} \qquad (5)$$

Выразим полное напряжение, приложенное к переходу, через емкость:

$$\varphi_0 - U = \frac{q\varepsilon_s \varepsilon_0 N_D S^2}{2C^2} \ . \qquad (6)$$

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 φ_0. На практике наиболее серьезная неточность возникает при определнии φ_0 по пересечению графика с осью напряжений, что же касается наклона кривой, то он обычно позволяет довольно точно определить концентрацию примеси. Эквивалентная схема диода Шоттки показана на рис. 3. Резистор *Rs* представляет собой сопротивление объема полупроводника (сопротивление базы), а *Rp* – нелинейное сопротивление собственно перехода Шоттки, зависящее от приложенного напряжения [3].

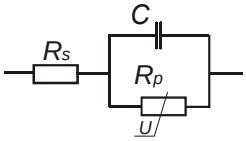


Рис. 3. Эквивалентная схема диода Шоттки

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

$$L_D = \sqrt{\frac{\varepsilon\varepsilon_0}{qN_D}\frac{kT}{q}} \ , \qquad (7)$$

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

Адмитта́нс (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*:

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

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:

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2}{e\varepsilon_0\varepsilon_r N(x) A^2}\left(U_{диф} + U\right), \qquad (8)$$

где A - площадь контакта Шоттки (или перехода); e - элементарный заряд; ε_0, ε_r - диэлектрическая проницаемость вакуума и образца; U - приложенное обратное напряжение смещения; $U_{диф.}$ - 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

$$N(x) = \frac{C^3(U)}{e\varepsilon_0\varepsilon_r A^2}\left(\frac{dC(U)}{dU}\right) \qquad (9)$$

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

$$x = \frac{\varepsilon_0\varepsilon_r A}{C(U)}\ . \qquad (10)$$

Приближение (9) содержит допущение о равенстве нулю длины Дебая $L_Д$, 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 p-n 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 $(U+U_{диф})$

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 $U_{диф}$ определяет концентрацию ионизированных примесей в обедненном слое малой толщины x, которая соответствует $U_{диф}$.

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 ΔE, 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

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

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

Дифференцирование C-V-зависимости в соответствии с формулой

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

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

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

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

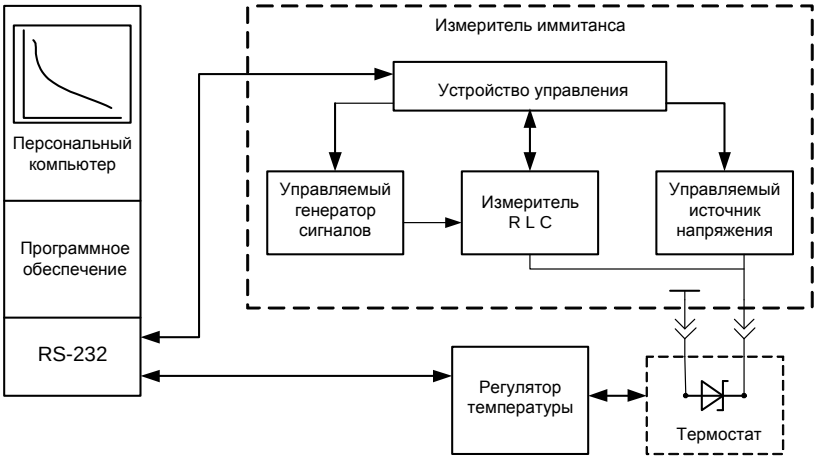


Рис. 4. Структурная схема установки для исследования ВФХ

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

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

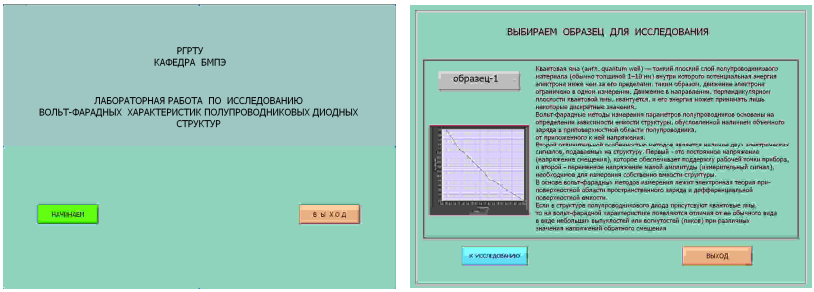
Исследуемый диод помещается в термостат, который позволяет поддерживать температуру в широких пределах. Общее управление осуществляется персональным компьютером (ПК) с установленным специализированным программным обеспечением. Программное обеспечение через стандартный интерфейс (например, RS-232, GPIB, 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 отображается 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. Х,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 структыры (см. рис. Х,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. Х,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. Х. В этом окне отображаются измерительные приборы и элементы управления работой установки.

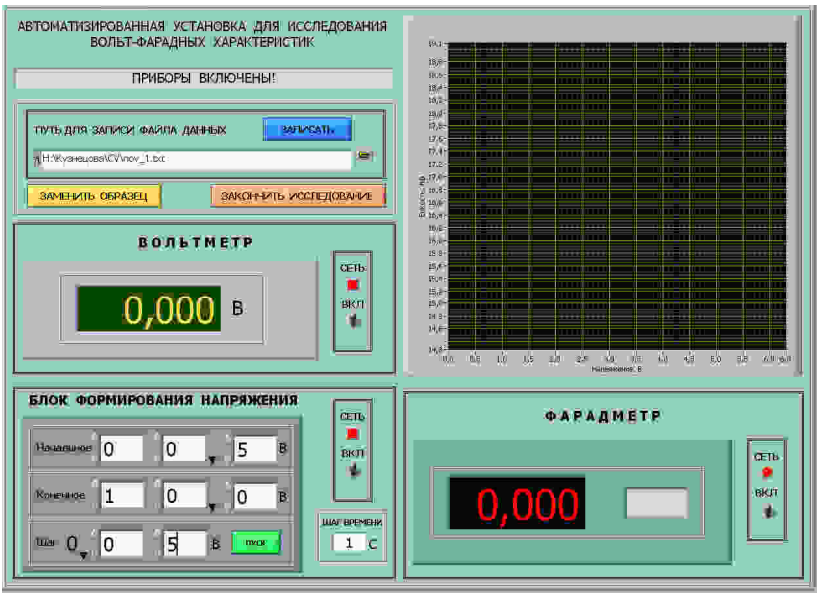


Рис. 6. Рабочее окно автоматизированной установки для исследования вольт-фарадных характеристик полупроводниковых структур

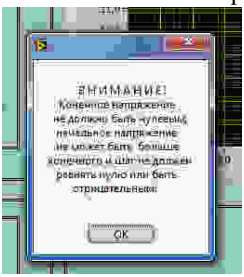
Необходимо включить приборы щелчком по тумблерам «Сеть». Если включены не все приборы, то отображается мигающая надпись «Включите приборы». Исследование ВФХ выбранного образца полупроводниковой структуры проводить в следующей последовательности:

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 «ОК» 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

$G := READPRN("F:\RGRTU\nov_1.txt")$

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 $\varepsilon 0 := 8.85 \cdot 10^{-12}$

Диэлектрическая проницаемость кремния $\varepsilon := 12.9$

Масса свободного электрона $m0 := 9.1 \cdot 10^{-31}$

Температура образца $T := 293$

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

Эффективная масса плотности состояний электрона в кремнии $mn := 0.067 m0$

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

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

Тепловой потенциал $\phi t := \dfrac{k \cdot T}{q}$

$\phi t = 0.025$

Индекс массива начинаем с нуля $ORIGIN := 0$

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

Готовим построение линейной функции

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

Определяем параметры линейной функции по точкам исходных данных

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

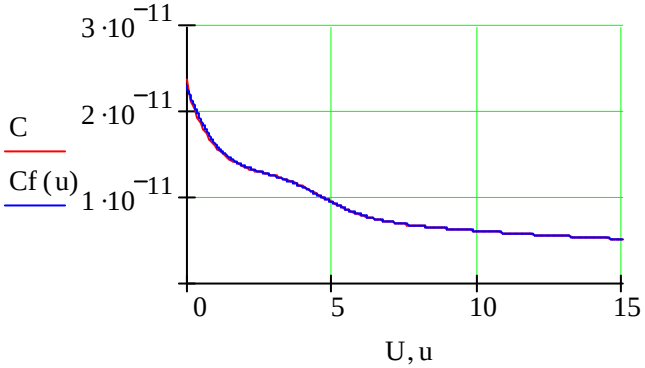
Формируем математическое выражение для исходных данных методом сглаживания

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

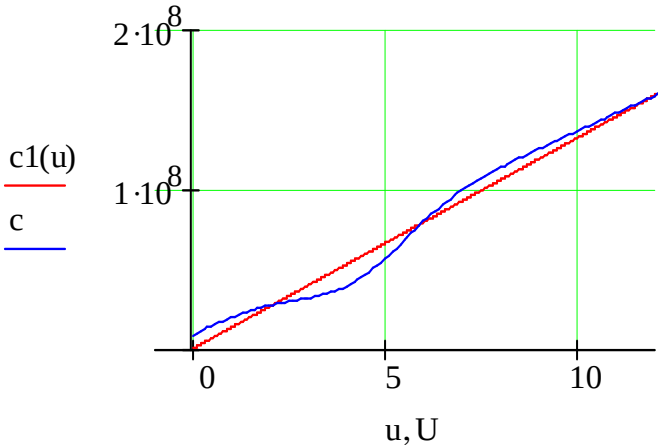
$Smu := supsmooth(U, C)\quad CF := pspline(U, Smu)$

$Cf(u) := interp(CF, U, Smu, u)$

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

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

Средняя концентрация свободных электронов

$$Nd := 2\cdot\frac{1}{q\cdot b\cdot\varepsilon\cdot\varepsilon 0}$$

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

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

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

$$\xi := \phi t\cdot\ln\left(\frac{Nc}{Nd}\right)$$

$$\xi = 0.099$$

Высота барьера

$$\phi b := |Ui| + \xi + \phi t$$

$$\phi b = 0.126$$

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

$$Smu := supsmooth(U, C)$$

$$CF := pspline(U, Smu)$$

$$Cf(u) := interp(CF, U, Smu, u)$$

Концентрация N в см$^{-3}$, глубина d в мкм

$$N(u) := 1.3\left|\frac{\left(\frac{Cf(u)}{S}\right)^3}{q\cdot\varepsilon\cdot\varepsilon 0\cdot\frac{d}{du}\frac{Cf(u)}{S}}\right|$$

$$d(u) := \frac{\varepsilon\cdot\varepsilon 0\cdot S}{Cf(u)}$$

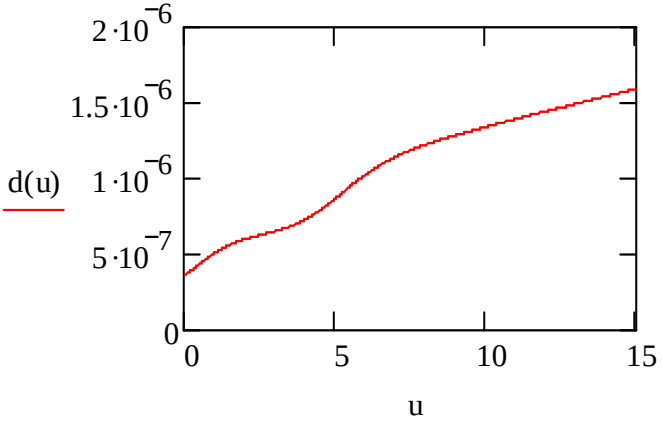
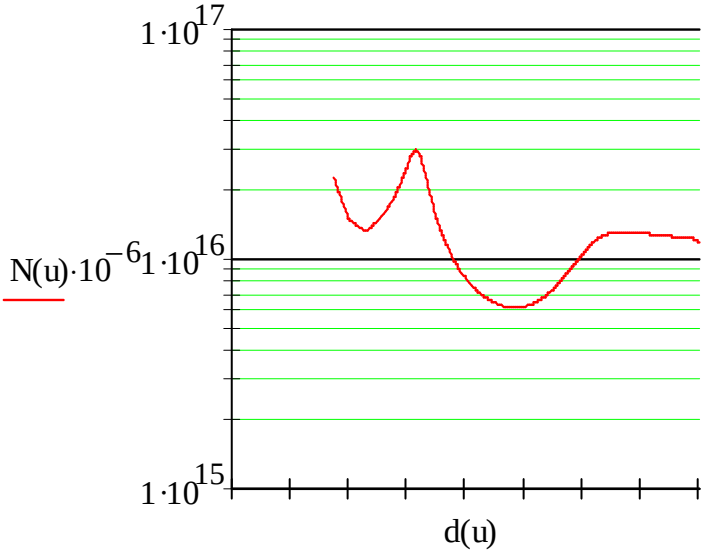


График зависимости N(d)



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 p-n переходах, используя методику, описанную в данной работе?

12. Что такое «квантовая яма»?

13. Какой будет зависимость емкости от обратного напряжения в случае плавного p-n перехода?

14. Что такое *адмитта́нс, 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. 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

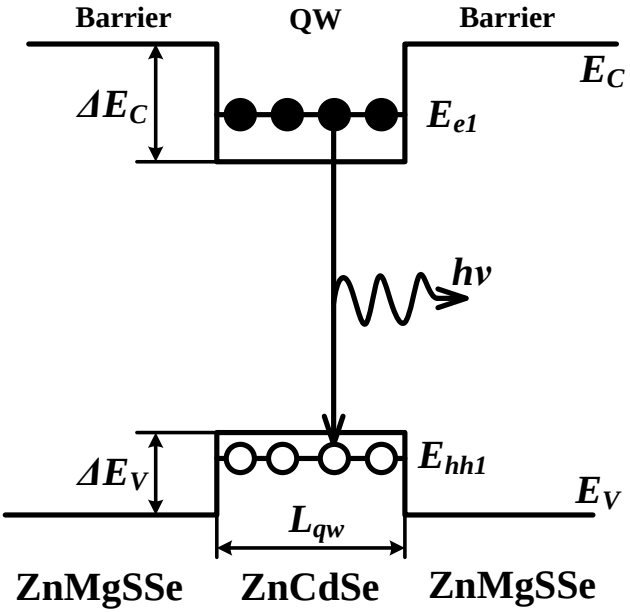
4941

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФИЗИКА НАНОСИСТЕМ

Методические указания
к лабораторным работам



Рязань 2015

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.

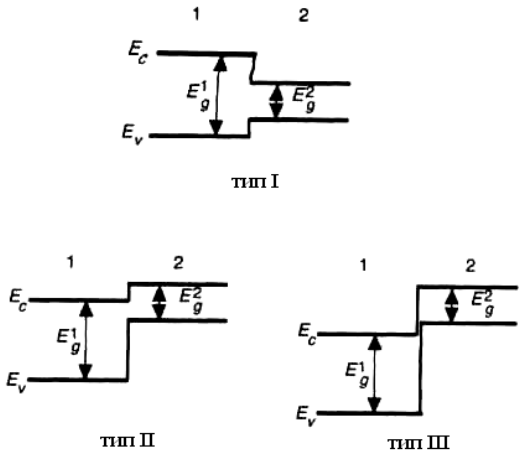


Рис. 1. Зонные диаграммы гетеропереходов трех типов, реализуемые в системе из двух полупроводников (1) и (2), обладающих шириной запрещённой зоны E^1_g и E^2_g соответственно

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 ε, работой выхода φ и электронным сродством χ [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).

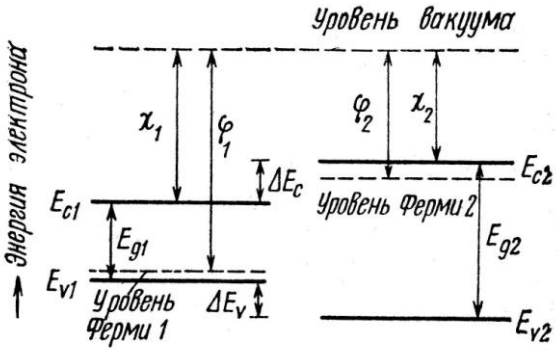


Рис. 2. Энергетическая диаграмма двух полупроводников [1]

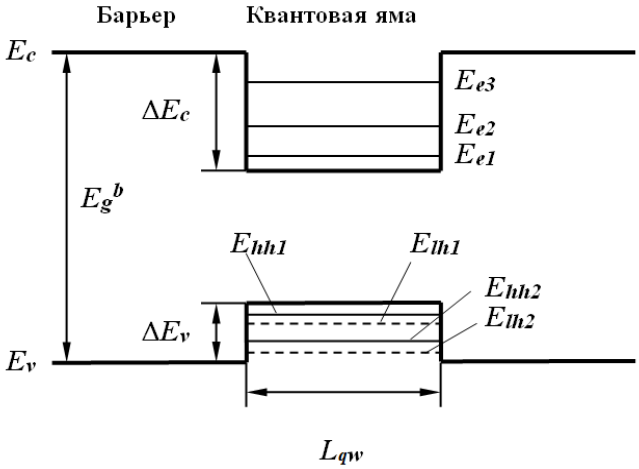


Рис. 3. Энергетическая диаграмма КРС с КЯ и зонной диаграммой I типа

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 ΔE_V и зоны проводимости ΔE_C воспользуемся правилом электронного сродства. Согласно правилу электронного сродства разрыв зоны проводимости при контакте двух различных ненапряженных полупроводников равен разности значений сродства к электрону:

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

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:

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

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

$$B=\frac{Z_e}{8\pi\varepsilon_0}\left[\left(\frac{1}{r_A}-\frac{1}{r_B}\right)^2(r_A+r_B)\exp\left(-sa_0\frac{\sqrt{3}}{8}\right)\right], \quad (3)$$

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 Δ_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	χ_c, эВ	C_{11}, 10^{10} Н/м^2	C_{12}, 10^{10} Н/м^2	a, эВ, или a_c и a_v	b, эВ	m_e	m_{lh}	m_{hh}	Δ_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 $Zn_xCd_{1-x}S$, ZnS_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:

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

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 ZnS_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

$$U = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le L_{qw} \\ \infty, & x > L_{qw},\ x < 0, \end{cases} \tag{5}$$

где L_{qw} – ширина потенциальной ямы.

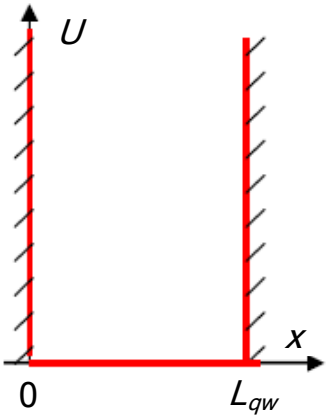


Рис. 4. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

Запишем уравнение Шредингера для одномерной потенциальной ямы:

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

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

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

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

После преобразований получим

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

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:

$$\psi(0) = \psi(L_{qw}) = 0. \tag{9}$$

Решение уравнения (4) будем искать в виде гармонической функции

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx\,. \tag{10}$$

Коэффициенты A и B в (10) находим из граничных условий (9):

$$\psi(0) = \mathrm{B} = 0,\ \psi(L_{qw}) = A\sin k\,L_{qw} = 0.$$

Амплитуда волны де Бройля $A \neq 0$, так как иначе нет вообще никаких решений, откуда получаем $\sin k\,L_{qw} = 0$,

$$k\,L_{qw} = \pm n\pi, \tag{11}$$

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

$$\psi_n(x) = A\sin\left(\frac{n\pi}{L_{qw}}x\right)\cdot \tag{12}$$

Решение (12) называют собственными функциями гамильтониана уравнения (6) при заданных граничных условиях (9).

Подставим выражение (11) в дисперсионное соотношение $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ и получим:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_{qw}^{\ 2}} n^2 . \qquad (13)$$

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

Амплитуду волновой функции A найдем из условия нормировки:

$$\int_0^{L_{qw}} |\psi(x)|^2 \, dx = A^2 \int_0^{L_{qw}} \sin^2\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right) dx = \frac{1}{2} A^2 \int_0^{L_{qw}} \left(1 - \cos\frac{2n\pi}{L_{qw}} x\right) dx = A^2 \frac{L_{qw}}{2} = 1 . \qquad (14)$$

Из условия (14) получаем

$$A = \sqrt{\frac{2}{L_{qw}}} .$$

Таким образом, собственные функции и значения энергии:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L_{qw}}} \sin\left(\frac{n\pi}{L_{qw}} x\right), \qquad (15)$$

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

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

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:

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_{qw}^{\ 2}} (2n+1) . \qquad (16)$$

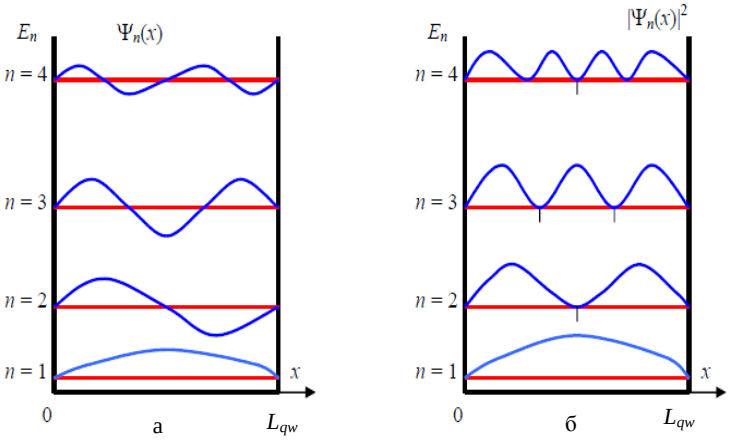


Рис. 5. Качественное изображение волновой функции (а) и квадрата ее модуля (б) в одномерной потенциальной яме

1.2. Одномерная потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим потенциальную яму конечной глубины U_0 (рис. 6).

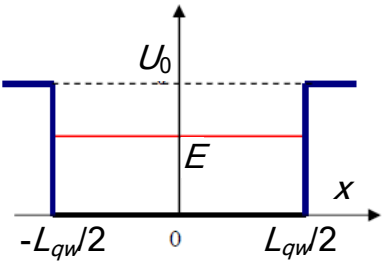


Рис. 6. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы со стенками конечной высоты

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

$$U(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{L_{qw}}{2} \le x \le \frac{L_{qw}}{2} \\ U_0, & x > \frac{L_{qw}}{2},\ x < -\frac{L_{qw}}{2}. \end{cases} \qquad (17)$$

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:

$$\frac{d^2\psi_1}{dx^2} + \frac{2m_1}{\hbar^2} E\psi_1 = 0. \qquad (18)$$

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

$$\psi_1(x) = A_1 \sin k_0^{'} x + B_1 \cos k_0^{'} x. \qquad (19)$$

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

$$\psi_2(x) = A_2 \sin k_0 x + B_2 \cos k_0 x. \qquad (20)$$

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:

$$1)\ -\frac{L_{qw}}{2} < x < \frac{L_{qw}}{2};\quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^2\psi_1 = 0;\quad k^2 = \frac{2m_1 E}{\hbar^2};\qquad (21)$$
$$\psi_1(x) = A\sin kx + B\cos kx;$$

$$2)\ |x| > \frac{L_{qw}}{2};\quad \frac{d^2\psi_2}{dx^2} - \alpha^2\psi_2 = 0;\quad \alpha^2 = \frac{2m_2}{\hbar^2}(U_0 - E);\qquad (22)$$
$$\psi_2(x) = Ce^{\alpha x} + Ce^{-\alpha x}.$$

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

$$\hat{P}\psi(x) = \lambda\psi(-x). \qquad (23)$$

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

$$\hat{P}\hat{P}\psi(x) = \lambda^2\psi(x) = \psi(x). \qquad (24)$$

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

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

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:

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

$$\psi_2(x) = \begin{cases} C\exp(-\alpha x),\ x > \dfrac{L_{qw}}{2}, \\ -C\exp(\alpha x),\ x < \dfrac{L_{qw}}{2}. \end{cases} \qquad (25)$$

В областях за пределами ямы бесконечно растущие решения не подходят, так как волновая функция не должна стремиться в бесконечность при $x \to \pm\infty$. В связи с этим физический смысл будут иметь только затухающие решения. Очевидно, что частица может проникать в барьерные слои на глубину ~ $1/\alpha$. Условия непрерывности волновой функции и ее производной на границе потенциальная яма – барьерный слой $x = L_{qw}/2$ позволяют найти амплитуды A и C:

$$\begin{cases} A\sin k\dfrac{L_{qw}}{2} = C\exp\left(-\alpha\dfrac{L_{qw}}{2}\right), \\ kA\cos k\dfrac{L_{qw}}{2} = -\alpha C\exp\left(-\alpha\dfrac{L_{qw}}{2}\right). \end{cases} \qquad (26)$$

Качественный вид решений (25) представлен на рис. 7.

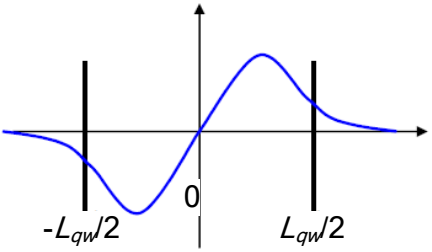


Рис. 7. Изображение волновой функции в яме конечной глубины

В системе (26) разделим верхнее уравнение на нижнее и получим трансцендентное уравнение:

$$tg\frac{kL_{qw}}{2}=-\frac{k}{\alpha},\qquad(27)$$
$$tg\left(\frac{L_{qw}}{2\hbar}\sqrt{2m_1E}\right)=-\sqrt{\frac{m_1E}{m_2(U_0-E)}}.$$

Из уравнения (27) определяют энергии уровней размерного квантования микрочастицы в потенциальной яме.

2. Четные состояния. Запишем волновые функции (21) и (22) для четных состояний:

$$\psi_1(x)=B\cos kx;$$
$$\psi_2(x)=D\exp(-\alpha|x|).\qquad(28)$$

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

$$\begin{cases} B\cos k\frac{L_{qw}}{2}=D\exp\left(-\alpha\frac{L_{qw}}{2}\right), \\ -kB\sin k\frac{L_{qw}}{2}=-\alpha D\exp\left(-\alpha\frac{L_{qw}}{2}\right). \end{cases}\qquad(29)$$

Из (29) получаем уравнение:

$$tg\frac{kL_{qw}}{2}=\frac{\alpha}{k},\qquad(30)$$
$$tg\left(\frac{L_{qw}}{2\hbar}\sqrt{2m_1E}\right)=\sqrt{\frac{m_2(U_0-E)}{m_1E}}.$$

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,... .

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 $U_0 > E$.

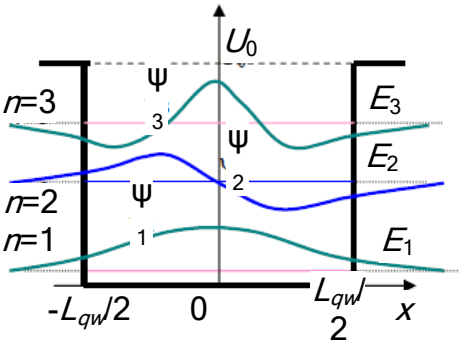


Рис. 8. Изображение волновых функций на трех нижних энергетических уровнях в яме конечной глубины

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. Наноэлектроника / 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]:

$$a_{\parallel} = \frac{a_0^{qw} G^{qw} L_{qw} + a_0^{b} G^{b} L_b}{G^{qw} L_{qw} + G^{b} L_b}, \tag{1}$$

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:

$$G^{i} = 2(C_{11}^{i} + 2C_{12}^{i})\left(1 - \frac{D^{i}}{2}\right), \tag{2}$$

$$D^{i} = 2\frac{C_{12}^{i}}{C_{11}^{i}}\cdot$$

Параметр решетки $a_{\perp}^{i}$ определяется как

$$a_{\perp}^{i} = a_0^{i}\left[1 - D^{i}\left(\frac{a_{\parallel}}{a_0^{i}} - 1\right)\right]. \tag{3}$$

Величину механической относительной деформации в слое определяют тензором деформации, диагональные компоненты которого равны

$$\varepsilon_{xx}^{i} = \frac{a_{\parallel}}{a_0^{i}} - 1,$$

$$\varepsilon_{yy}^{i} = \varepsilon_{xx}^{i},$$

$$\varepsilon_{zz}^{i} = \frac{a_{\perp}^{i}}{a_{0}^{i}} - 1. \qquad (4)$$

Относительная деформация ε 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 MOCVD), методом эпитаксии из молекулярных пучков (МПЭ или MBE). 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

$$\varepsilon_{\Delta T} = \int_{T_e}^{T_g} \left[\alpha^{i}(T) - \alpha^{j}(T)\right] dT, \qquad (5)$$

можно рассчитать вклад эффекта рассогласования ТКЛР в изменение зонной диаграммы квантово-размерной структуры. В формуле (5) α^{i} и α^{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.

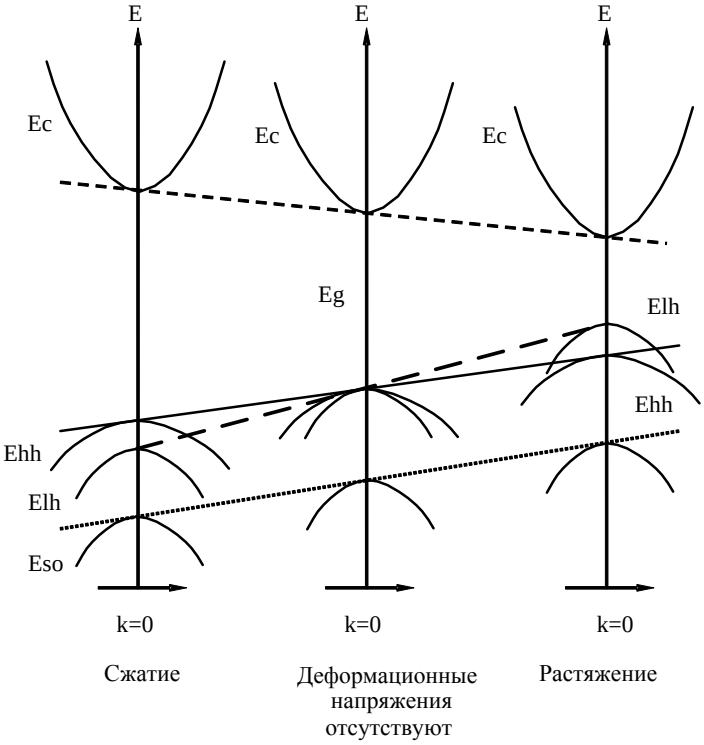
Величину относительной деформации, вызванной различием ТКЛР материалов, в слое КЯ можно определить, суммируя относительные деформации с учетом знаков от всех пар контактирующих слоев.

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 Г 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:

$$E_{v.av} = \frac{-\Delta_{0qw}}{3} - \left(E_{gqw} + \chi_c^{qw}\right). \qquad (6)$$

Изменение усредненного уровня валентной зоны из-за упругих напряжений равно

$$\Delta E_{v.av} = a_v \frac{\Delta\Omega}{\Omega}, \qquad (7)$$

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

$$E^S_{v.av} = E_{v.av} + \Delta E_{v.av}. \qquad (8)$$

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 $E^s_{v.av}$ равно

$$\Delta E_{vhh} = \frac{\Delta_{0qw}}{3} - \frac{1}{2}\delta E_{001}, \qquad (9)$$

где $\delta E_{001} = 2b_{qw}(\varepsilon_{qwzz} - \varepsilon_{qwxx})$.

Положение потолка подзоны легких дырок относительно $E^s_{v.av}$ определяется из выражения

$$\Delta E_{vlh} = \frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4}\delta E_{001} + \frac{1}{2}\left[\Delta_{0qw}{}^2 + \Delta_{0qw}\delta E_{001} + \frac{9}{4}\delta E_{001}{}^2\right]^{\frac{1}{2}}. \qquad (10)$$

Положение потолка спин-орбитально отщепленной валентной подзоны относительно $E^s_{v.av}$ будет

$$\Delta E_{v\Delta_{0qw}} = \frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4}\delta E_{001} - \frac{1}{2}\left[\Delta_{0qw}{}^2 + \Delta_{0qw}\delta E_{001} + \frac{9}{4}\delta E_{001}{}^2\right]^{\frac{1}{2}}. \qquad (11)$$

При наличии упругих напряжений сдвиг потолка валентной подзоны тяжелых дырок относительно потолка валентной зоны ненапряженной КЯ определяется из выражения

$$dE_{vhh} = E^{s}_{v.av} + \frac{\Delta_{0qw}}{3} - \frac{1}{2}\delta E_{001}. \qquad (12)$$

Соответственно сдвиг потолка валентной подзоны легких дырок относительно потолка валентной зоны ненапряженной КЯ будет

$$dE_{vlh} = E^{s}_{v.av} + \left[\frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4}\delta E_{001} + \frac{1}{2}\left[{\Delta_{0qw}}^{2} + \Delta_{0qw}\delta E_{001} + \frac{9}{4}{\delta E_{001}}^{2}\right]^{\frac{1}{2}}\right]. \qquad (13)$$

Для нахождения сдвига спин-орбитально отщепленной валентной подзоны относительно потолка валентной зоны ненапряженной КЯ нужно использовать выражение

$$dE_{v\Delta_{0qw}} = E^{s}_{v.av} + \left[\frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4}\delta E_{001} - \frac{1}{2}\left[{\Delta_{0qw}}^{2} + \Delta_{0qw}\delta E_{001} + \frac{9}{4}{\delta E_{001}}^{2}\right]^{\frac{1}{2}}\right]. \qquad (14)$$

В соответствии с правилом электронного сродства положение потолка валентной подзоны тяжелых дырок в КЯ относительно уровня вакуума при наличии упругих напряжений находится как

$$E_{vhh} = E^{s}_{v.av} + \frac{\Delta_{0qw}}{3} - \frac{1}{2}\delta E_{001} - \left(E_{gqw} + \chi_{c}^{qw}\right). \qquad (15)$$

Соответственно положение потолка валентной подзоны легких дырок относительно уровня вакуума равно

$$dE_{vlh} = E^{s}_{v.av} + \left[\frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4}\delta E_{001} + \frac{1}{2}\left[{\Delta_{0qw}}^{2} + \Delta_{0qw}\delta E_{001} + \frac{9}{4}{\delta E_{001}}^{2}\right]^{\frac{1}{2}}\right] -$$
$$-\left(E_{gqw} + \chi_{c}^{qw}\right). \qquad (16)$$

Положение потолка спин-орбитально отщепленной валентной подзоны относительно уровня вакуума определяется из выражения

$$dE_{vlh} = E^{s}_{v.av} + \left[\frac{-\Delta_{0qw}}{6} + \frac{1}{4}\delta E_{001} - \frac{1}{2}\left[{\Delta_{0qw}}^{2} + \Delta_{0qw}\delta E_{001} + \frac{9}{4}{\delta E_{001}}^{2}\right]^{\frac{1}{2}}\right] -$$
$$-\left(E_{gqw} + \chi_{c}^{qw}\right). \qquad (17)$$

Изменение положения края зоны проводимости также определяется через деформационный потенциал зоны проводимости a_c:

$$dE_c = a_c \frac{\Delta\Omega}{\Omega}. \qquad (18)$$

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 изменится 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.

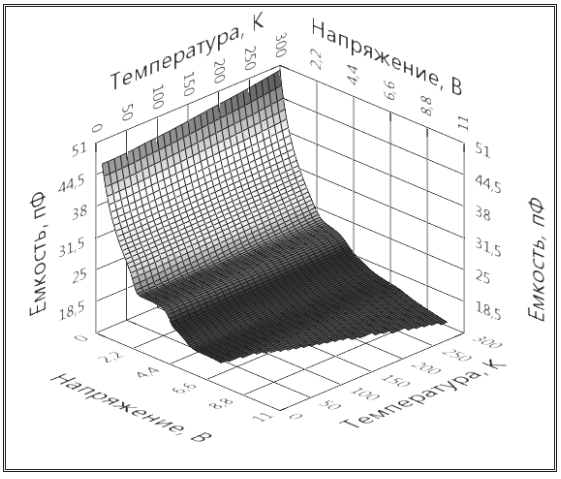
5205

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ФИЗИКА НАНОСИСТЕМ

Методические указания к лабораторным работам



Рязань 2017

УДК 621.315.592

Физика наносистем: методические указания к лабораторным работам / Рязан. гос. радиотехн. ун-т; сост.: В.Г. Литвинов, А.В. Ермачихин. -Рязань, 2017. -32 с.

Приведено описание двух лабораторных работ о методах диагностики, которые могут быть использованы для изучения полупроводниковых наносистем.

Предназначено для аудиторной работы студентов, изучающих дисциплину "Физика наносистем", “Фундаментальные основы физики наносистем”, “Применение наносистем в электронике” по направлению 11.04.04.

Табл. 2. Ил. 11. Библиогр.: 6 назв.

Полупроводники, диод Шоттки, вольт-амперная характеристика, вольт-фарадная характеристика

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

Рецензент: кафедра микро- и наноэлектроники Рязанского государственного радиотехнического университета (зав. кафедрой Т.А. Холомина)

Физика наносистем

Составители: Л и т в и н о в Владимир Георгиевич
Е р м а ч и х и н Александр Валерьевич

Редактор Р.К. Мангутова
Корректор С.В. Макушина
Подписано в печать 11.11.17. Формат бумаги 60×84 1/16.
Бумага писчая. Печать трафаретная. Усл. печ. л. 2,0.
Тираж 30 экз. Заказ
Рязанский государственный радиотехнический университет.
390005, Рязань, ул. Гагарина, 59/1.
Редакционно-издательский центр РГРТУ.

РАБОТА № 1

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИОДА ШОТТКИ МЕТОДОМ ВОЛЬТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

1. Цель работы

Исследование и определение параметров диодной структуры металл-полупроводник методом вольт-амперных характеристик.

2. Краткие теоретические сведения

2.1. Зонная диаграмма барьера Шоттки

Большинство элементов интегральной схемы соединяются друг с другом с помощью формирования контактов металл-полупроводник. Эти контакты могут быть выпрямляющими и невыпрямляющими.

На рис. 1 приведена в качестве примера энергетическая зонная диаграмма изолированных друг от друга металла (слева) и полупроводника n-типа проводимости (справа), где E_O – уровень вакуума; $q\varphi_M$ и $q\varphi_П$ – работы выхода из металла и полупроводника соответственно; q – элементарный заряд; φ – электрический потенциал; $E_O - E_F = q\varphi$; $\chi_C = E_O - E_C$ – сродство к электрону. Если $q\varphi_M > q\varphi_П$, то при контакте металла и полупроводника из-за различия в средних энергиях электроны из полупроводника будут переходить в металл. Перенос зарядов происходит до тех пор, пока не будет достигнуто равновесие и оба материала – металл и полупроводник не станут характеризоваться одинаковым положением уровня Ферми. При равновесии полупроводник, потерявший электроны, в

приконтактной области будет заряжен положительно относительно металла.

На рис. 2 показана энергетическая зонная диаграмма идеального контакта металл-полупроводник для случая, когда $q\varphi_M > q\varphi_П$. Из-за разности работ выхода на границе раздела металл – полупроводник со стороны металла возникает потенциальный барьер высотой $q\varphi_B$, а ширина слоя объемного заряда (СОЗ) в полупроводнике имеет размер x_n. За пределами x_n в полупроводнике концентрация полностью ионизированных мелких доноров N_D практически равна равновесной концентрации свободных электронов n.

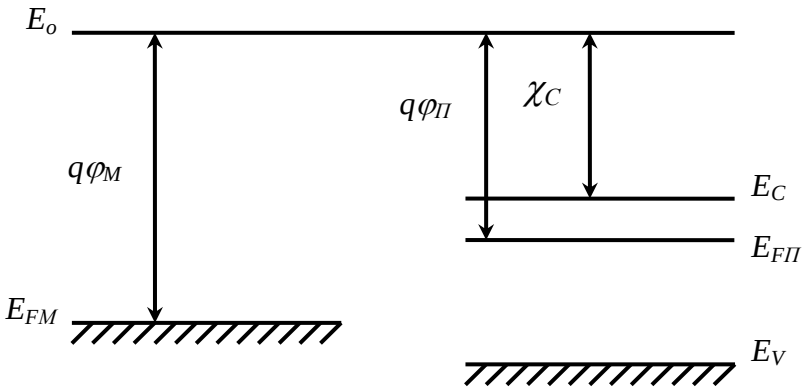


Рис. 1. Зонная диаграмма металла и полупроводника

Максимальная величина напряженности электрического поля E_{max} достигается у границы раздела металл-полупроводник и в соответствии с законом Гаусса равна

$$E_{\max} = -qN_D x_n / \varepsilon\varepsilon_o, \qquad (1)$$

где ε – относительная диэлектрическая проницаемость полупроводника; ε_o = 8,85·10^{-12} Ф/м – электрическая постоянная. Падение напряжения в СОЗ равно

$$U = -\frac{1}{2} E_{\max} x_n = \frac{q N_D x_n^2}{2\varepsilon\varepsilon_o}. \qquad (2)$$

Отсюда ширина СОЗ составляет

$$x_n = \sqrt{\frac{2\varepsilon\varepsilon_o \left(U_k - U - \frac{kT}{q} \right)}{q N_D}}, \qquad (3)$$

т.е. выражается тем же соотношением, что и для резкого p-n-перехода, где k – постоянная Больцмана; T – абсолютная температура. Слагаемое kT/q возникает за счет вклада в электрическое поле хвоста функции распределения основных носителей заряда. Из рис. 2 следует, что

$$U_k = \varphi_M - \varphi_П = \varphi_M - \frac{\chi_C}{q} - \frac{E_C - E_{Фn}}{q}. \qquad (4)$$

При нулевом смещении $U = U_k - kT/q$ и характеризует контактную разность потенциалов или диффузионный потенциал.

Пространственный заряд в полупроводнике, отнесенный к единице площади, равен

$$Q_n = q N_D x_n = \sqrt{2q\varepsilon\varepsilon_o N_D \left(U_k - U - \frac{kT}{q} \right)}. \qquad (5)$$

В неравновесном состоянии, т.е. при приложении прямого ($U_{пр}$) или обратного ($U_{обр}$) напряжения, высота потенциального барьера со стороны полупроводника уменьшается или увеличивается соответственно на величину приложенного напряжения (рис. 3). Снижение высоты потенциального барьера со стороны полупроводника при прямом смещении (положительный потенциал на металле) позволяет электронам, имеющим энергию, близкую к энергии, соответствующей положению дна зоны проводимости, перейти из полупроводника в металл.

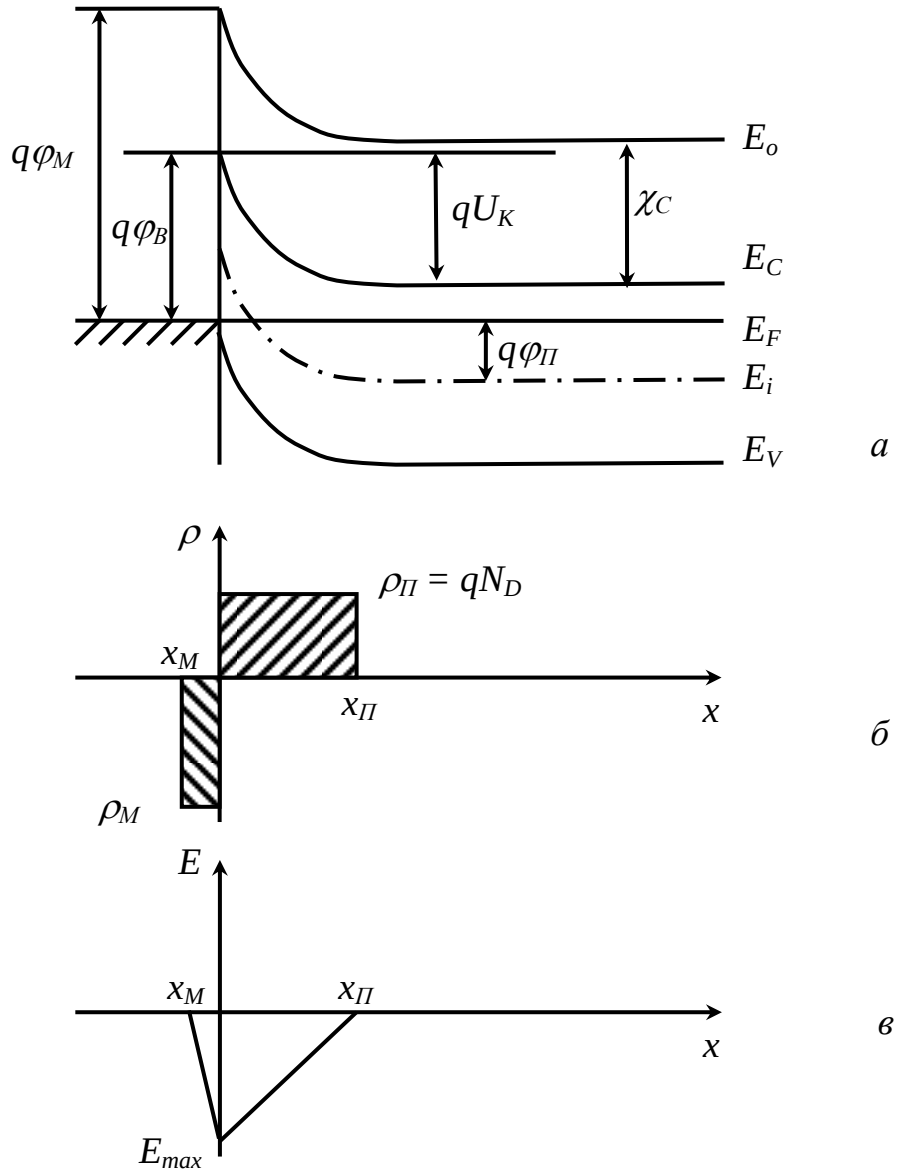


Рис. 2. Энергетическая зонная диаграмма контакта металл-полупроводник в равновесии (а); распределение заряда (б) и электрического поля (в); x_M и x_M – границы СОЗ в металле и полупроводнике соответственно

При обратном смещении падение напряжения на СОЗ увеличивается до $U_k + U - kT/q$ и ток определяется потоком

электронов из металла, которые смогут преодолеть потенциальный барьер $q\varphi_B$. Электрический ток в обратном направлении мал по сравнению с током, протекающим при прямом смещении. Электрическая удельная емкость СОЗ определяется выражением

$$C = \frac{\partial Q_n}{\partial U} = \frac{\partial \sqrt{2q\varepsilon\varepsilon_o N_D (U_k - U - \frac{kT}{q})}}{\partial U} = \sqrt{\frac{q\varepsilon\varepsilon_o N_D}{2(U_k - U - \frac{kT}{q})}} = \frac{\varepsilon\varepsilon_o}{x_n}. \qquad (6)$$

В координатах $1/C^2$ от обратного напряжения зависимость (6) представляет прямую линию, откуда можно определить U_k, а по наклону – уровень легирования полупроводника.

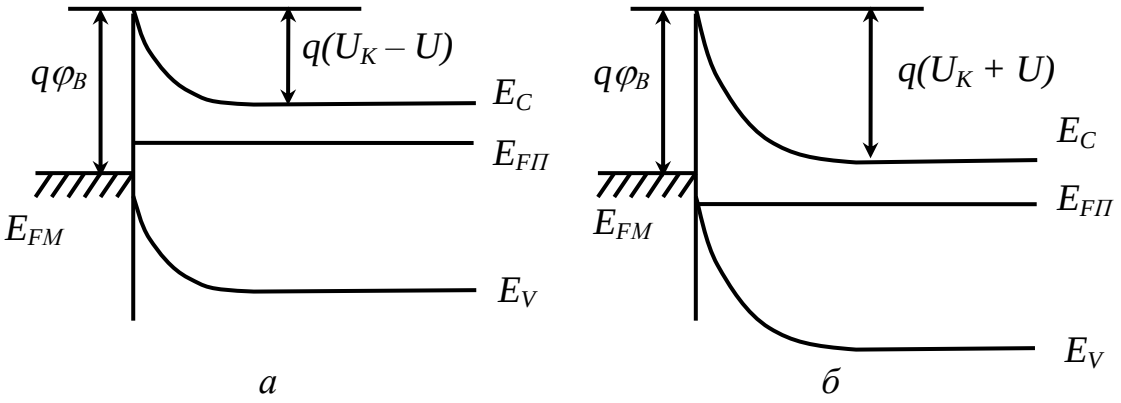


Рис. 3. Зонные диаграммы перехода металл-полупроводник: а – при прямом смещении; б – при обратном смещении

2.2. Вольт-амперная характеристика

Ток через контакт металл-полупроводник в равновесном состоянии определяется потоками электронов из полупроводника в

металл и из металла в полупроводник. Число электронов, достигающих барьер в секунду на единицу площади, равно vn, где v – скорость электронов. Плотности тока электронов, движущихся из полупроводника в металл:

$$j_{П} = qn_{П}v\exp\left[-\frac{q(\varphi_B - U)}{kT}\right], \qquad (7)$$

а из металла в полупроводник –

$$j_M = qn_M v\exp\left[-\frac{q\varphi_B}{kT}\right]. \qquad (8)$$

В приближении свободных электронов $v = \left(\frac{kT}{2\pi m^*}\right)^{1/2}$,

$$n_M = 2\left(\frac{2\pi m^* kT}{h^2}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{E_C - E_{Fn}}{kT}\right) = N_C\exp\left(-\frac{E_C - E_{Fn}}{kT}\right), \qquad (9)$$

где m^* – эффективная масса электрона; h – постоянная Планка; E_{Fn} – квазиуровень Ферми в полупроводнике n-типа.

Результирующий ток через контакт определится выражением

$$j = A^* T^2\exp\left(-\frac{q\varphi_B}{kT}\right)\left[\exp\left(\frac{qU}{kT}\right)-1\right] = j_o\left[\exp\left(\frac{qU}{kT}\right)-1\right], \qquad (10)$$

где $A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3}$ – эффективная постоянная Ричардсона с учетом эффективной массы электрона для термоэлектронной эмиссии в пренебрежении рассеянием на оптических фононах и квантовомеханическим отражением; A^*/A = 2,1 для контакта алюминий-кремний n-типа для направления <100>; $A = 1{,}2\cdot10^6$ А/м^{2}К^2 – постоянная Ричардсона для свободных электронов в вакууме. В реальных диодах вольт-амперная

характеристика (ВАХ) отличается от идеальной, аппроксимируется выражением

$$j = j_o\left[\exp\left(\frac{qU}{\eta kT}\right)-1\right], \qquad (11)$$

где η = 1…2 – коэффициент идеальности, который находится экспериментально.

В работах Шоттки показано, что в СОЗ при напряженности электрического поля 10^6…10^7 В/м следует учитывать процессы диффузии и дрейфа носителей заряда. Для электронов получается

$$j_n = q\left(n\mu_n E + D_n\frac{dn}{dx}\right). \qquad (12)$$

В результате выражение для тока через контакт металл-полупроводник приводится к виду

$$j = j_s\left[\exp\left(\frac{qU}{kT}\right)-1\right], \qquad (13)$$

где

$$j_s = \frac{q^2 D_n N_C}{kT}\sqrt{\frac{2q(U_k - U)N_D}{\varepsilon\varepsilon_o}}\exp\left(-\frac{q\varphi_B}{kT}\right); \qquad (14)$$

D_n – коэффициент диффузии электронов; N_C – эффективная плотность состояний в зоне проводимости.

Из выражения (14) следует, что j_s зависит от напряжения. Шоттки показал, что φ_B снижается на величину $\Delta\varphi = \sqrt{\frac{qE}{4\pi\varepsilon\varepsilon_o}}$ силами изображения. Увеличение обратного тока с ростом обратного напряжения связано с генерацией носителей заряда в СОЗ широкозонных полупроводников. Кроме того, при увеличении обратного смещения рост тока связан с увеличением объема СОЗ и

ростом туннельной составляющей тока даже для умеренно легированных полупроводников. ВАХ диода Шоттки с учетом паразитного сопротивления квазиэлектронейтральной области базы полупроводника $R_{\text{п}}$ имеет вид

$$I = A^{*}T^{2}S\exp\left(-\frac{\varphi_B}{\varphi_T}\right)\left[\exp\left(\frac{U - IR_{П}}{\eta\varphi_T}\right) - 1\right], \qquad (15)$$

где S – площадь контакта Шоттки; $\varphi_T = \dfrac{kT}{q} = 0{,}026$ В при $T = 300$ К.

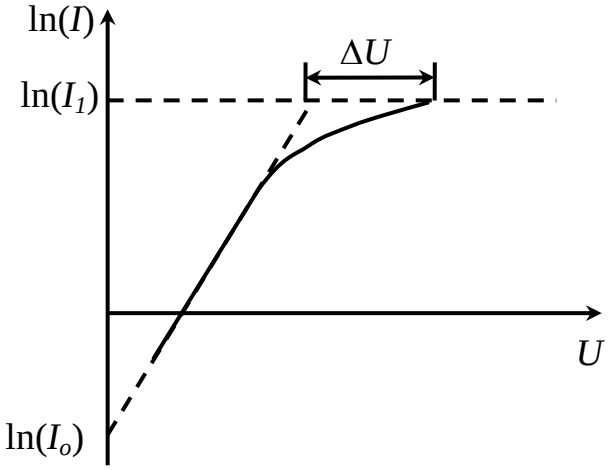


Рис. 4. Прямая ветвь ВАХ контакта Шоттки

Сопротивление $R_{\text{п}}$ можно рассчитать по отклонению реальной зависимости тока от напряжения от идеализированной, полученной экстраполяцией линейного участка прямой ветви ВАХ в полулогарифмическом масштабе (рис. 4). Тогда сопротивление $R_{\text{п}} = \Delta U/I_1$. При изготовлении контакта Шоттки между полупроводником и металлом часто возникает туннельно-прозрачный слой окисла, влияющий на высоту барьера и на ВАХ. Такие диоды имеют коэффициент идеальности η обычно более 1, а при обратном смещении эффективная высота потенциального барьера для

свободных носителей заряда уменьшается и обратная ветвь ВАХ не имеет участка насыщения.

3. Описание методики измерения ВАХ диода Шоттки

Вольт-амперная характеристика диода Шоттки описывается выражением (15). Зависимость ln(I) от напряжения при прямом смещении (плюс на аноде) должна представлять собой прямую линию за исключением области, где $U < 3\varphi_{\text{Т}}$. Эта прямая при экстраполяции до U = 0 В определяет lnI_{o}, и с помощью формулы (10) можно рассчитать высоту барьера $\varphi_{\text{В}}$, если известна постоянная Ричардсона A^*. Высоту барьера можно определять и по обратной ВАХ, построив ln(I) от некоторой подходящей функции напряжения. Если отсутствие насыщения тока обусловлено снижением барьера из-за сил изображения, то ln(I) линейно зависит от $|-U|^{1/4}$. Экстраполировав прямую к U = 0 В, можно определить I_{o} и $\varphi_{\text{В}}$. Определение высоты барьера по ВАХ является надежным только в том случае, когда коэффициент идеальности близок к единице. Коэффициент идеальности рассчитывается по прямой ветви ВАХ:

$$\eta = \frac{U}{\varphi_T[\ln(I) - \ln(I_o)]}. \qquad (16)$$

Исследование ВАХ осуществляется на установке, показанной на рис. 5. Испытуемый диод помещается в измерительную ячейку, подключенную к электрометру с встроенным источником напряжения Keithley 6517B.

Управление работой электрометра и экспериментом осуществляется по интерфейсу GPIB с персонального компьютера в среде графического инженерного программирования LabVIEW или

вручную с помощью кнопок управления на лицевой панели прибора. В начале эксперимента необходимо установить пределы изменения напряжения, шаг изменения напряжения смещения, указать имя файла, в который будет осуществляться запись данных для последующего анализа ВАХ.

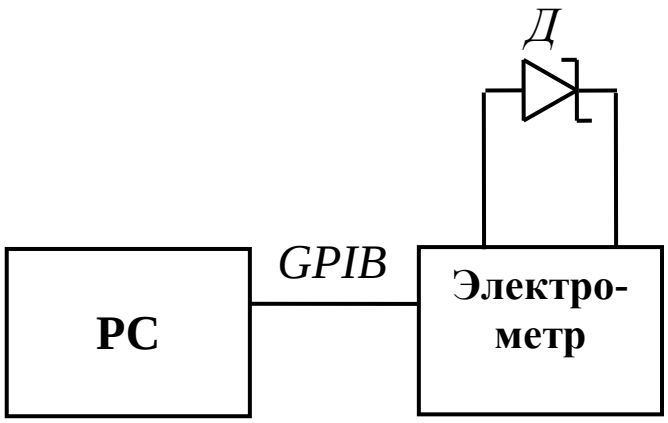


Рис. 5. Схема для измерения ВАХ диода Шоттки

4. Задание по работе

1. Измерить ВАХ диода при прямом смещении диода. Данные занести в табл. 1.

Таблица 1

ВАХ диода при прямом смещении

$I_{пр}$, А									
$U_{пр}$, В									

2. Измерить ВАХ диода при обратном смещении. Данные занести в табл. 2.

Таблица 2

ВАХ диода при обратном смещении

$I_{обр}$, А						
$U_{обр}$, В						

3. Построить прямую и обратную ветви ВАХ в различных координатах, чтобы сделать выводы о возможном механизме токопрохождения.

4. Построить зависимость ln(I) от напряжения для прямой ветви ВАХ. Определить I_0, экстраполируя зависимость ln(I) от напряжения к U = 0 В. Определить высоту барьера $\varphi_{\text{В}}$ по формуле (10).

5. Определить коэффициент идеальности.

6. Определить паразитное последовательное сопротивление квазиэлектронейтральной базы $R_{\text{п}}$ (если это представляется возможным, особенно в случае исследования мощных диодов).

7. Построить зависимость тока от обратного напряжения и ln($I_{обр}$) от $U_{обр}^{1/4}$. Определить высоту потенциального барьера по обратной ветви ВАХ.

8. Построить зонную диаграмму для исследуемого контакта по результатам измерений и расчетов. Ширина запрещенной зоны кремния 1,12 эВ, потенциал Ферми для полупроводника n-типа $(E_{\text{Fn}} - E_{\text{i}})/q = \varphi_{\text{T}} \ln(N_{\text{д}}/n_{\text{i}})$. Принять $n = N_{\text{д}}$, $n_{\text{i}} = 1{,}5 \cdot 10^{16}$ м$^{-3}$ при 300 К.

9. Воспользовавшись пакетом прикладных программ MathCAD, обработать измеренные ВАХ и осуществить расчет параметров диода Шоттки на ПЭВМ. Ниже приведен пример расчета и моделирования ВАХ.

10. Самостоятельно, пользуясь контрольными вопросами, изучить материал, изложенный в рекомендованной литературе.

5. Пример расчета высоты потенциального барьера и коэффициента идеальности по прямой ветви ВАХ диода Шоттки в программе MathCAD

Количество точек i := 1..6 ORIGIN := 1

Ток *I* в амперах, напряжение *U* в вольтах (вводим только те значения, которые соответствуют линейному участку ВАХ):

$$U = \begin{bmatrix} 0.2 \\ 0.3 \\ 0.4 \\ 0.5 \\ 0.6 \\ 0.7 \end{bmatrix}, \quad I = \begin{bmatrix} 0.6 \cdot 10^{-6} \\ 1.9 \cdot 10^{-5} \\ 1.3 \cdot 10^{-4} \\ 8 \cdot 10^{-3} \\ 8.1 \cdot 10^{-2} \\ 5.8 \cdot 10^{-1} \end{bmatrix}.$$

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

φ_T := 0.026 эВ

Площадь диода S := $1 \cdot 10^{-5}$ $м^2$

Модифицированная постоянная Ричардсона

A := $2.1 \cdot 1.2 \cdot 10^{6}$ $А/м^2 \cdot К^2$

Температура T := 300 К

Проведение линеаризации ВАХ на рис. 6 методом наименьших квадратов:

lnI_i := $\ln(I_i)$

lnI_o := intercept(U, lnI) b := slope(U, lnI)

u := 0.1 , 0.2 .. 0.8

lnI_o = –19.617 – точка пересечения прямой с вертикальной осью логарифма токов

b = 28.024 – угол наклона прямой

Уравнение ВАХ:

$lni(u) := b \cdot u + lnI_o$

Коэффициент идеальности $\eta := \frac{1}{\varphi_T} \cdot \frac{1}{b}$

$\eta := 1.372$

Высота барьера $\varphi_B := (\ln(S \cdot A \cdot T^2) - lnI_o) \cdot \varphi_T$

$\varphi_B := 0.891$ эВ

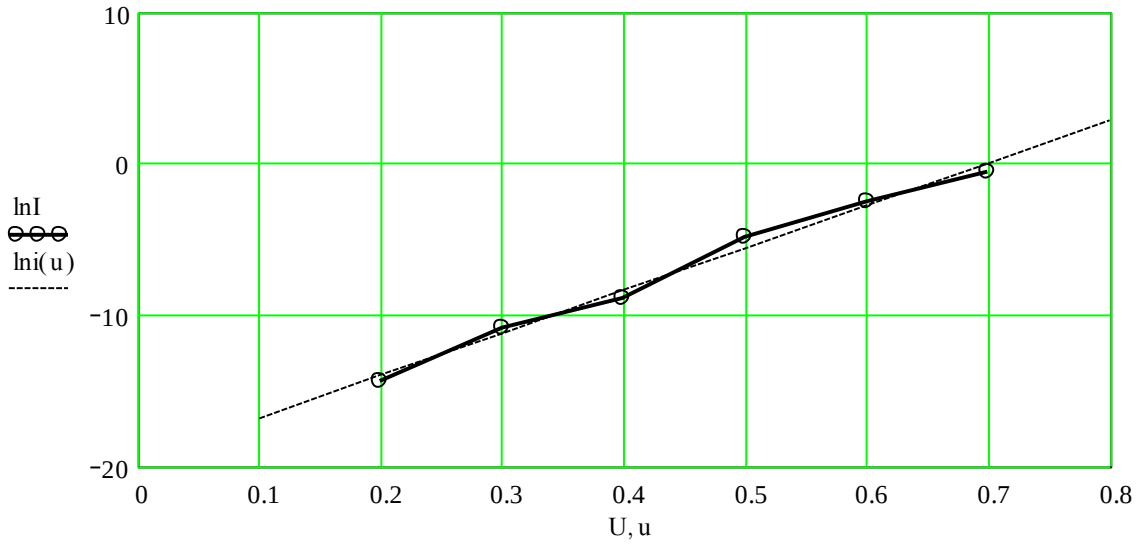


Рис. 6. Экспериментальная и линеаризированная вольт-амперные характеристики диода Шоттки при прямом смещении

Содержание отчета

1. Наименование, цель работы.

2. Краткие теоретические сведения.

3. Схема измерительной установки.

4. Результаты измерений и вычислений в виде таблиц и графиков.

5. Анализ полученных данных, их сравнение с данными, приведенными в литературе.

Контрольные вопросы

1. Как меняется работа выхода из полупроводника $q\varphi_П$ при увеличении уровня легирования?

2. Нарисовать зонную диаграмму для контакта меди и *n*-кремния ($q\varphi_M$ = 4,5 эВ, $q\varphi_П$ = 4,25 эВ).

3. Нарисовать зонную диаграмму для контакта алюминия и *p*-кремния в равновесном состоянии и при обратном смещении.

4. Нарисовать зонную диаграмму для контакта алюминий – n^+ – *n*-кремний.

5. Как на основе контакта металл-полупроводник получить омический контакт?

6. Пояснить, как влияет тонкая диэлектрическая прослойка на высоту барьера φ_B в контакте Шоттки. Нарисовать зонную диаграмму такого контакта.

7. Как зависит глубина обедненного слоя от уровня легирования полупроводника?

8. Объясните физические основы теории термоэлектронной эмиссии для объяснения токопереноса носителей заряда в барьере Шоттки.

9. Объясните физические основы диффузионной теории токопереноса носителей заряда в барьере Шоттки.

10. Объясните физические основы теории термоэлектронной эмиссии – диффузии для объяснения токопереноса носителей заряда в барьере Шоттки.

11. Объясните, какие параметры диода Шоттки и каким образом можно определить из ВАХ.

12. Объясните температурную зависимость ВАХ диода Шоттки.

13. Объясните, какими достоинствами и недостатками обладают реальные диоды Шоттки по сравнению с диодами на основе p-n-перехода.

Библиографический список

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

2. Маллер Р., Кейминс Т. Элементы интегральных схем. М.: Мир, 1989. 630 с.

РАБОТА № 2
ИССЛЕДОВАНИЕ БАРЬЕРНОЙ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛ-ПОЛУПРОВОДНИК МЕТОДОМ ВОЛЬТ-ФАРАДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

1. Цель работы

Изучение свойств электрической барьерной емкости структуры металл-полупроводник и методов измерения и анализа вольт-фарадных характеристик для определения концентрации легирующей примеси в полупроводнике.

2. Краткие теоретические сведения

Приборы на основе контакта металл-полупроводник в настоящее время широко применяются при производстве и интегральных схем, и дискретных полупроводниковых приборов. Основной особенностью этих приборов является монополярная проводимость и, как следствие, более широкий диапазон рабочих

частот (большее быстродействие) по сравнению с диодами на основе *p*-*n*-перехода.

На рис. 1 представлена упрощенная энергетическая зонная диаграмма выпрямляющего контакта металл-полупроводник (полупроводник *n*-типа), когда работа выхода электронов из металла больше работы выхода электронов из полупроводника. В результате осуществления тесного контакта между полупроводником и металлом происходит интенсивный обмен электронами, при этом основной поток электронов направлен из полупроводника в металл, так как работа выхода из полупроводника меньше. Следовательно, поверхность металла будет заряжаться отрицательно, а поверхность полупроводника – положительно и между металлом и полупроводником возникнет контактная разность потенциалов φ_K, которая будет стремиться уравновесить поток электронов. За счет возникновения контактной разности потенциалов уровень Ферми в полупроводнике опускается до совпадения с уровнем Ферми в металле (только при тесном контакте).

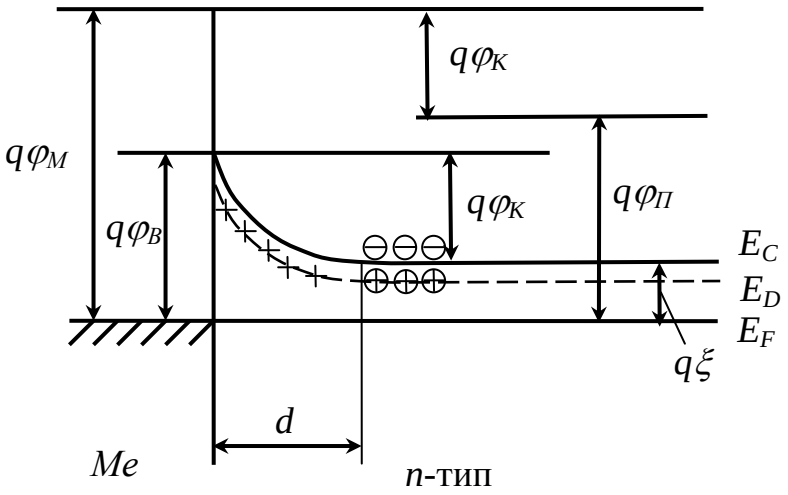


Рис. 1. Энергетическая диаграмма выпрямляющего контакта металл-полупроводник

Возникновение контактной разности потенциалов эквивалентно увеличению работы выхода из полупроводника в металл на величину $q\varphi_K$, где q – элементарный заряд. Поэтому $q\varphi_K$ в равновесном состоянии определяется как разность термодинамических работ выхода $q\varphi_K = q(\varphi_M - \varphi_П)$.

В приповерхностном слое полупроводника толщиной d образуется обедненный основными носителями заряда слой (запирающий) с гораздо более высоким электрическим сопротивлением, в котором практически отсутствуют электроны, а положительный заряд обусловлен положительно заряженными атомами доноров. Энергетические зоны полупроводника изгибаются вверх. Обычно контактная разность потенциалов лежит в интервале $\varphi_K \approx$ (0,3-1) В, заряд свободных электронов в обедненной области равен нулю и объемный положительный заряд доноров постоянен. Поэтому величина этого заряда подсчитывается так же, как для резкого *p*-*n*-перехода. В связи с этим толщина обедненного слоя и величина барьерной емкости могут быть определены по формулам для резкого *p*-*n*-перехода. В этом случае электрическое поле на границе раздела, обусловленное только зарядом на нескомпенсированных донорах, можно рассчитать:

$$E_{\max}^2 = \frac{2q}{\varepsilon\varepsilon_o}\left[N_D\left(U_K - U - \frac{kT}{q}\right) + \frac{kT}{q}\exp\left(-\frac{q(U_K - U)}{kT}\right)\right],$$

где N_D – концентрация мелких доноров; U – напряжение; U_K – контактная разность потенциалов или диффузионный потенциал.

При $U > 3kT/q$ вторым слагаемым в скобках можно пренебречь:

$$E_{\max}^2 = \frac{2qN_D}{\varepsilon\varepsilon_o}\left(U_K - U - \frac{kT}{q}\right).$$

По теореме Гаусса заряд ионизированной донорной примеси, приходящийся на единицу площади, или удельный заряд можно рассчитать как

$$Q_d = \varepsilon\varepsilon_o E_{\max} = \left(2q\varepsilon\varepsilon_o N_D\right)^{1/2}\left(U_K - U - kT/q\right)^{1/2}.$$

Отсюда удельная электрическая барьерная емкость диода Шоттки определяется как

$$C = \frac{\partial Q}{\partial U} = \left(\frac{q\varepsilon\varepsilon_o N_D}{2}\right)^{1/2}\left(U_K - U - \frac{kT}{q}\right)^{-1/2}.$$

При обратном смещении диода Шоттки выражение для удельной барьерной емкости можно записать как

$$C = \left(\frac{q\varepsilon\varepsilon_o N_D}{2}\right)^{1/2}\left(U_K + U_{обр} - \frac{kT}{q}\right)^{-1/2}.$$

Из этого выражения следует, что зависимость $1/C^2 = f(U_{обр})$ должна быть прямой с наклоном $2/(q\varepsilon\varepsilon_o N_D)$ (рис. 2) и отсекать отрезок на оси напряжений U_i, равный $(\varphi_B - \xi - kT/q)$. Следовательно, высота потенциального барьера Шоттки может быть найдена из выражения

$$\varphi_B = U_i + \xi + kT/q. \qquad (1)$$

Величина ξ – расстояние от уровня Ферми в электронейтральной части полупроводника до дна зоны проводимости определяется из выражения

$$\xi = \frac{kT}{q}\ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right), \qquad (2)$$

где N_C – эффективная плотность состояний в зоне проводимости. Для кремния она составляет $2{,}2\cdot10^{19}(T/300)^{3/2}$ см$^{-3}$, а для германия – $5\cdot10^{19}(T/300)^{3/2}$ см$^{-3}$. Концентрацию доноров полупроводника можно определить из зависимости $1/C^2 = f(U_{\text{обр}})$ как

$$N_D = \frac{2}{q\varepsilon\varepsilon_o S^2}\left(-\frac{1}{d\left(1/C^2\right)/dU}\right), \qquad (3)$$

где S – площадь диода Шоттки.

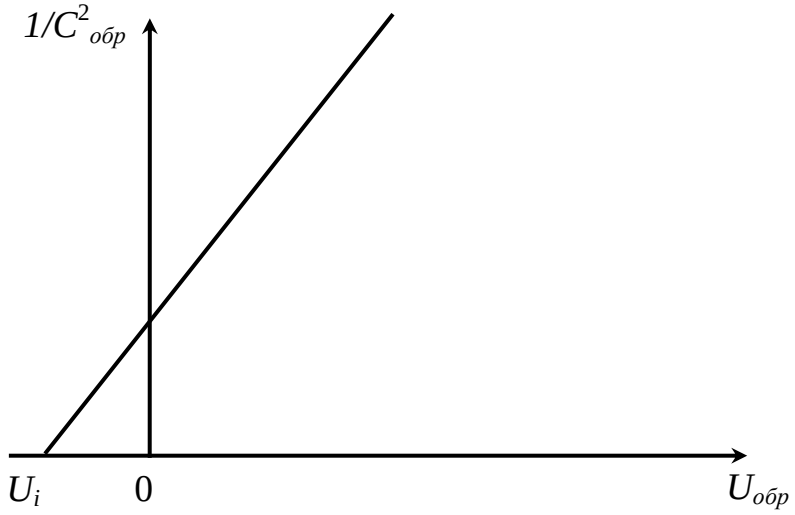


Рис. 2. Типичная зависимость *1/C2* = *f*($U_{обр}$) для диода Шоттки, изготовленного из однородно легированного полупроводника

Подчеркнем, что соотношение (1) получено на основе больцмановской статистики и справедливо только для невырожденных полупроводников. В случае вырожденного полупроводника в выражении для высоты барьера необходимо заменить *kT/q* на +2|ξ|/5, где ξ в этом случае величина отрицательная (уровень Ферми в зоне проводимости).

В случае неоднородного распределения доноров по толщине полупроводника выражение для электрической барьерной емкости диода Шоттки остается таким же, как и для однородного полупроводника. Однако величина N_D соответствует концентрации доноров на краю обедненной области. Следовательно, при изменении

напряжения смещения (изменении толщины обедненного слоя d) наклон зависимости $1/C^2 = f(U_{обр})$ будет меняться. Этот результат широко используют для определения профиля легирования полупроводников. При этом толщина области пространственного заряда, т.е. координата x для зависимости $N_D = f(x)$, определяется из формулы для емкости плоского конденсатора

$$d(U) = \frac{\varepsilon\varepsilon_o S}{C(U)}, \qquad (4)$$

координате x ставится в соответствие толщина СОЗ d.

По измеренным C-V зависимостям в приближении обедненного слоя получают профиль распределения концентрации $N(d)$, поставив в соответствие величине [1]

$$N(U) = -\frac{(C/S)^3}{q\varepsilon\varepsilon_0 \dfrac{d(C/S)}{dU}} \qquad (5)$$

величину $d(U)$, вычисленную по формуле (4). Таким образом, получается зависимость $N(d)$.

Следует отметить, что этот метод имеет ограничения при измерении профиля легирования примесей с очень большими градиентами концентрации и ее низким средним значением. Выражение (3) справедливо в случае электронейтральности объема полупроводника за обедненной областью. В случае резкого скачка концентрации примесей в этой области образуется дипольный слой, вызывающий изгиб зон, как в p-n-переходе. Тогда при определении профиля концентрации будем иметь в результате не распределение концентрации примеси $N_D(x)$, а распределение концентрации электронов, так как здесь $n_0 \neq N_D$. На зависимости концентрации примесей от толщины обедненного слоя будем иметь переходную

область, приблизительно равную длине Дебая $L_D = (\varepsilon\varepsilon_o kT/q^2 n_0)^{1/2}$, а не скачок концентрации примесей.

Кроме того, на корректность определения высоты потенциального барьера и концентрации примесей влияет наличие промежуточного слоя на границе раздела металл-полупроводник, а также наличие примесей и дефектов структуры, приводящих к образованию глубоких энергетических уровней в запрещенной зоне полупроводника.

Если промежуточный слой очень тонок, так что заполнение поверхностных состояний, существующих на границе раздела диэлектрик-полупроводник, определяется положением уровня Ферми в металле, то выражение барьерной емкости определяется так же, как и для тесного контакта. При этом наклон зависимости $1/C^2 = f(U_{\text{обр}})$ также определяется концентрацией доноров, но выражение для высоты потенциального барьера усложняется. Здесь уже необходимо учитывать плотность поверхностных состояний и диэлектрическую проницаемость промежуточного слоя. При увеличении толщины промежуточного слоя ошибка в определении величины барьера возрастает, получается несколько завышенный результат. При больших толщинах промежуточного слоя нарушается линейность зависимости $1/C^2 = f(U_{\text{обр}})$, в этом случае зависимость $C = f(U)$ определяется как для МДП-структур.

Под глубокими уровнями обычно понимают локализованные электронные состояния в объеме полупроводника, расположенные так далеко от дна зоны проводимости либо потолка валентной зоны, что при комнатной (или другой) температуре они остаются неионизированными. В этом смысле они отличаются от “мелких” акцепторов и доноров, которые при данной температуре

ионизированы полностью. Если энергетическое положение такого уровня меняется относительно положения уровня Ферми, то его заполнение носителями заряда также будет меняться. Это как раз и наблюдается в слое объемного заряда, где зоны изогнуты. При изменении заполнения уровня изменяется его зарядовое состояние и изменяется емкость структуры. Изгиб зон в обедненной области зависит от напряжения смещения, следовательно, зарядовое состояние глубокого уровня будет также зависеть от него. Это приводит к сложной зависимости емкости от напряжения – нарушается линейность зависимости $1/C^2 = f(U_{\text{обр}})$. Кроме того, барьерная емкость в данном случае будет зависеть и от температуры, и от частоты измерительного сигнала. Это влияние глубоких энергетических уровней на барьерную емкость используют в специальных методах для определения концентрации примесей, дающих глубокие уровни, и энергии ионизации глубоких центров. К таким методам следует отнести спектроскопию полной проводимости или адмиттанса, релаксационную спектроскопию глубоких уровней. При наличии достаточной концентрации глубоких центров, сравнимой по порядку величины с концентрацией основных носителей заряда, зависимость $1/C^2 = f(U_{\text{обр}})$ становится нелинейной, а определение высоты потенциального барьера и концентрации мелких доноров (акцепторов в случае полупроводника *p*-типа) из измерений барьерной емкости диодов Шоттки значительно затрудняется.

3. Описание лабораторной установки для измерения вольт-фарадной харктеристики диода Шоттки

Адмитта́нс (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 или измерители иммитанса.

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

$$Y = 1/Z = G + jB;\ G = 1/R;\ B = 2\pi fC,$$

где *G* – активная часть адмиттанса – проводимость (conductance); *B* – емкостная часть (susceptance); *R* – электрическое сопротивление; *C* – электрическая 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 лабораторной работе используется RLC-метр Agilent E4980A с встроенным источником напряжения постоянного смещения 0 – 40 В для измерения зависимости электрической емкости от обратного смещения, частоты. Для измерения температурной зависимости *C-f-U* характеристик RLC-метр подключен к измерительной ячейке, помещенной в гелиевый криостат замкнутого типа Janis CCS-400/204N. Принцип действия измерительной установки состоит в том, что исследуемый образец включается в

измерительную цепь RLC-метра. На образец подаются постоянное напряжение смещения и тестовый измерительный синусоидальный сигнал малой амплитуды. Частота тестового сигнала выбирается в диапазоне 1 кГц – 2 МГц. При подаче обратного смещения на диодную структуру толщина СОЗ увеличивается, ее электрическая емкость уменьшается. Амплитуда тестового сигнала составляет 30 мВ, что соответствует условиям измерения дифференциальной емкости полупроводниковых структур в состоянии, близком к термодинамическому равновесию. Амплитуда измерительного сигнала обычно выбирается менее $2kT/q$.

Выбор частоты измерительного сигнала обусловлен несколькими требованиями:

1) необходимо получить максимальную чувствительность установки к изменению емкости;

2) необходимо исключить или уменьшить влияние заряда ионизированных глубоких энергетических уровней на измеряемую величину барьерной емкости;

3) уменьшить влияние паразитного сопротивления квазиэлектронейтральной базы диода на результаты измерений.

При повышении частоты измерительного сигнала до 10 и более мегагерц имеется возможность значительно увеличить чувствительность к изменению емкости и уменьшить влияние глубоких центров на результаты измерения емкости. Чем выше частота измерительного сигнала, тем выше вероятность того, что зарядовое состояние глубоких центров не будет успевать следовать за тестовой частотой и, следовательно, не будет изменения емкости. С другой стороны, на высоких частотах значительно увеличивается влияние последовательно включенного паразитного сопротивления

базы диодов. Так, уже при частоте измерительного сигнала 3 МГц и удельном сопротивлении полупроводника 5 Ом·см это влияние сказывается на результатах измерений. Соответственно, чем выше частота и больше удельное сопротивление базы, тем больше возрастает погрешность измерения реактивной составляющей сопротивления RC-цепи, состоящей из активного сопротивления базы R и электрической барьерной емкости C. На высоких частотах активное сопротивление базы становится намного больше реактивного сопротивления, образованного барьерной емкостью ($R >> 1/2\pi fC$, где f – частота тестового сигнала).

Функциональная схема измерительного аппаратно-программного комплекса представлена на рис. 3. Наличие широкого диапазона рабочих частот, минимальная погрешность и высокая надежность выгодно отличают модель E4980A от других аналогичных измерителей. Также к достоинствам прибора можно отнести его надежность и простоту в использовании. Для автоматизации аппаратно-программного комплекса использовались интерфейсная шина общего назначения IEEE-488 (GPIB) и программа LabVIEW.

Применение четырехвыводной парной конфигурации измерительных выводов обеспечивает снижение погрешности измерений по сравнению с двухвыводной конфигурацией.

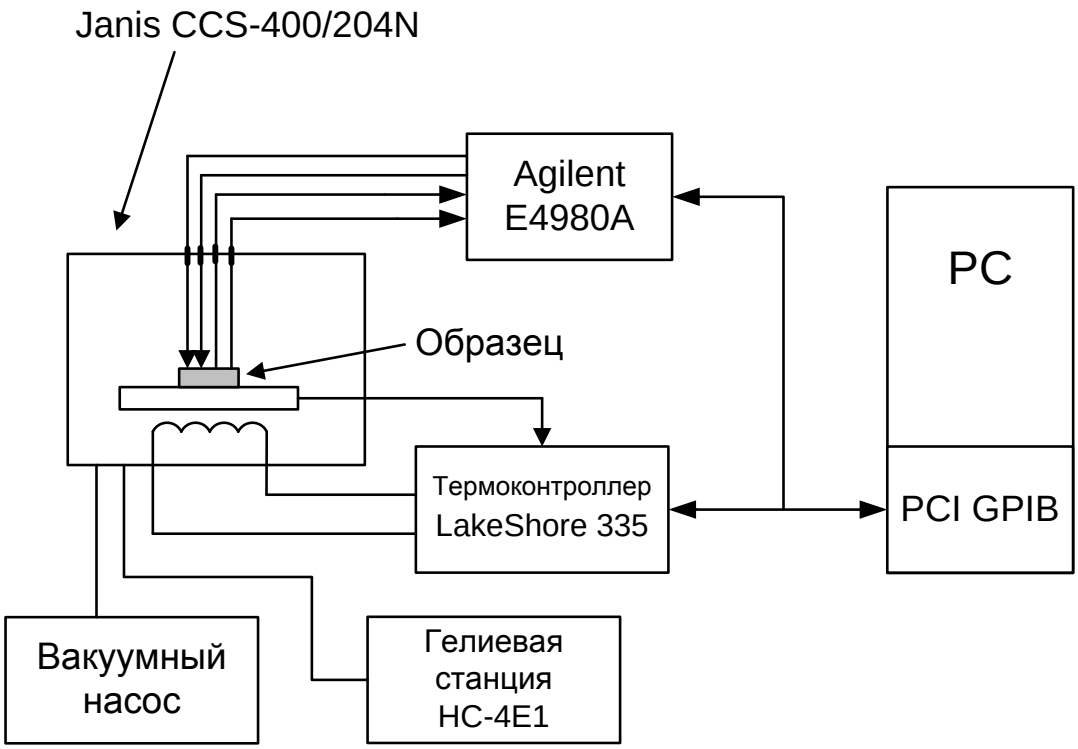


Рис. 3. Схема аппаратно-программного комплекса для измерения вольт-фарадных характеристик

Вакуумный насос необходим для того, чтобы при охлаждении образца не выпадал иней, образующийся при кристаллизации водяного пара. Термоконтроллер LakeShore 335 служит для управления изменением температуры образца. Точность поддержания температуры в данной измерительной установке достигает 10 мК. Гелиевая станция является частью холодильника, работающего по термодинамическому циклу Гиффорда – Макмагона.

4. Порядок выполнения работы

1. Проверить правильность включения приборов согласно функциональной схеме.

2. Включить последовательно все приборы установки. Прогреть приборы в течение 15 минут.

3. Получить задание у преподавателя: образец, частоты тестового сигнала, величины температуры, диапазон напряжений.

4. Поместить исследуемый образец в измерительную ячейку и подключить его к измерительной схеме.

5. По указанию преподавателя запустить программу на ЭВМ в среде инженерного графического программирования LabView. В открывшемся окне виртуального прибора установить температуру проведения измерений, диапазон и шаг изменения напряжения смещения на образце, число усреднений, указать имя файла, в который будут записываться данные.

6. Построить зависимость $1/C^2 = f(U_{обр})$, проанализировать полученную зависимость.

7. Используя представленные выше формулы и выражения, рассчитать высоту потенциального барьера и профиль концентрации мелкой легирующей примеси. Полученную величину φ_B занести в отчет, сравнить эту величину с литературными данными, построить график зависимости рассчитанной концентрации мелкой легирующей примеси в базе исследованного диода Шоттки $N_D = f(d)$. Все расчеты рекомендуется выполнить с помощью пакета прикладных программ “MathCAD”. Пример программы для обработки полученных в лабораторной работе экспериментальных данных представлен ниже.

8. Написать выводы по работе.

9. Пользуясь контрольными вопросами, самостоятельно изучить материал, изложенный в литературных источниках.

5. Пример программы для обработки экспериментальных данных

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

Диэлектрическая проницаемость вакуума

$\varepsilon_o := 8.85 \cdot 10^{-14}$ Ф/см

Диэлектрическая постоянная кремния

$\varepsilon := 11.9$

Тепловой потенциал при комнатной температуре $\varphi_T := 0.026$ эВ

Площадь диода $S := 1 \cdot 10^{-1}$ см^2

Температура образца $T :=300$ К

Эффективная масса плотности состояний электрона в кремнии”

$m_n = 1.08 m_o$, $m_o = 9.1 \cdot 10^{-31}$ кг – масса свободного электрона

Постоянная Планка $h = 6.62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с

ORIGIN := 1 количество экспериментальных точек $i := 0 .. 30$

Напряжение U в вольтах, емкость C в пикофарадах

$C_i := C_i \cdot 10^{-12}$ Ф

Нахождение удельной емкости в минус 2-й степени

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

$$U := \begin{bmatrix} 13.8 \cdot 10^{-3} \\ 21.8 \cdot 10^{-3} \\ 29.1 \cdot 10^{-3} \\ 54.3 \cdot 10^{-3} \\ 82.2 \cdot 10^{-3} \\ 126 \cdot 10^{-3} \\ 195 \cdot 10^{-3} \\ 231 \cdot 10^{-3} \\ 322 \cdot 10^{-3} \\ 397 \cdot 10^{-3} \\ 524 \cdot 10^{-3} \\ 839 \cdot 10^{-3} \\ 1.12 \\ 1.458 \\ 1.84 \\ 2.42 \\ 2.95 \\ 3.44 \\ 4.02 \\ 4.32 \\ 5.28 \\ 5.95 \\ 7.11 \\ 9.67 \\ 10.18 \\ 14.92 \\ 19.4 \\ 25.1 \\ 30.2 \\ 34.8 \\ 38.2 \end{bmatrix} \quad C := \begin{bmatrix} 1000 \\ 1000 \\ 1000 \\ 1000 \\ 1000 \\ 1000 \\ 1000 \\ 1000 \\ 974 \\ 938 \\ 885 \\ 785 \\ 720 \\ 662 \\ 595 \\ 550 \\ 511 \\ 481 \\ 451 \\ 433 \\ 401 \\ 379 \\ 348 \\ 290 \\ 281 \\ 225 \\ 191 \\ 172 \\ 156 \\ 142 \\ 136 \end{bmatrix}$$

Определение средней концентрации мелких доноров и высоты барьера

$a := intercept(U, c)$ $b := slope(U, c)$

Задаем пределы изменения обратного напряжения

$u := 0 .. 38$ В

$a = 1.076 \cdot 10^{15}$ $b = 1.377 \cdot 10^{16}$

Функция, линеаризующая зависимость $1/C^2 = f(U)$ (см. рис. 4)

$c1 := b \cdot u + a$

Напряжение, соответствующее пересечению прямой с осью напряжений

$U_i := -\frac{a}{b}$ $U_i := -0.078$ В

Средняя концентрация свободных электронов по толщине СОЗ

$N_D := 2 \cdot \frac{1}{qb\varepsilon\varepsilon_o}$, $N_D = 8.6 \cdot 10^{14}$ см$^{-3}$

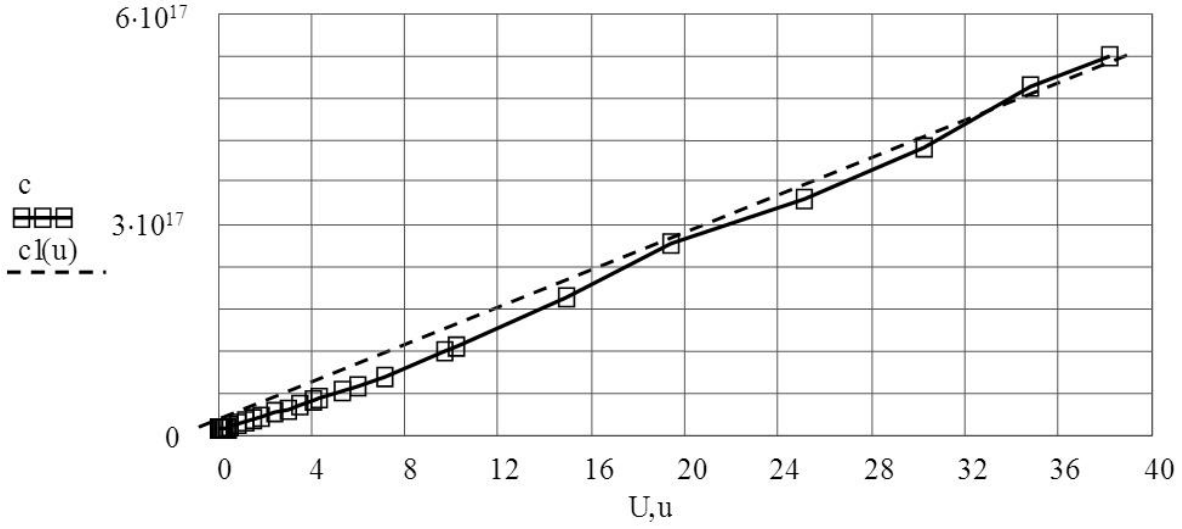


Рис. 4. Экспериментальная и усредненная зависимость $1/C^2 = f(U)$

$N_C = 2\left(\frac{2\pi m_n m_o kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$ $\xi := \varphi_T \cdot ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right)$

Приближенно считаем, что $\Delta\varphi = 0$

Высота барьера $\varphi_B := |U_i| + \xi + \varphi_T$, $\varphi_B = 0.368$ эВ

Сглаживание данных с помощью специальной функции пакета MathCAD и получение профиля распределения концентрации мелких доноров по глубине базы диода:

smu := supsmooth(*U, C*)

Преобразование сглаженного массива в функцию с помощью сплайнов:

CF := pspline(*U, smu*), *Cf*(*u*) := *interp*(*CF, U, smu, u*)

Концентрация N в см$^{-3}$, глубина d в мкм

Начало отсчета – граница раздела металл-полупроводник. В приближении обедненного слоя имеем

$$N(u) = -\frac{\left(Cf(u)/S\right)^3}{q\varepsilon_0 \dfrac{d\left(Cf(u)/S\right)}{du}}, \quad d(u) = \frac{\varepsilon_o S}{Cf(u)}$$

Строим график зависимости $N(d)$ (рис. 5).

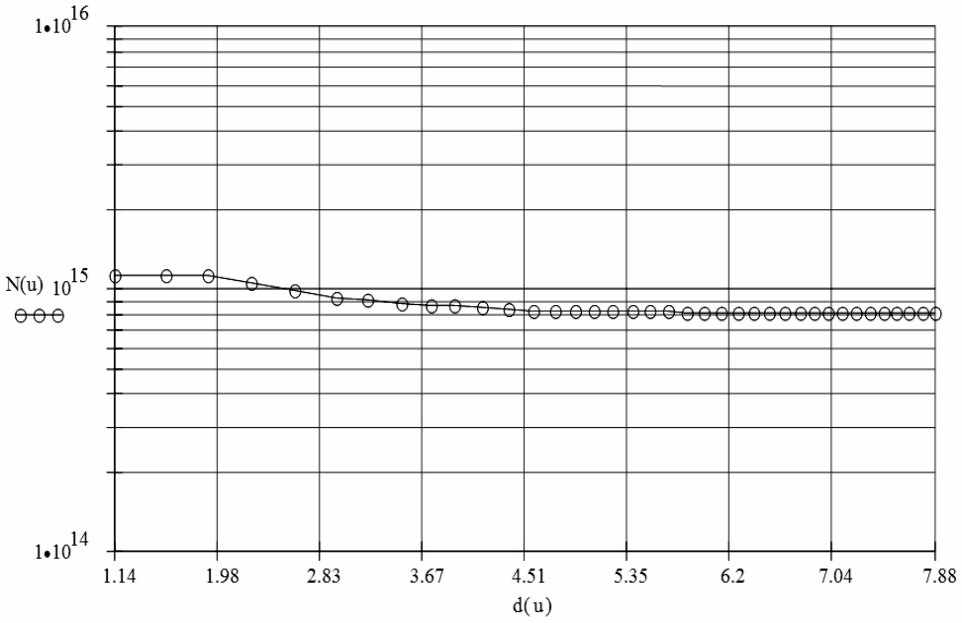


Рис. 5. Распределение концентрации мелкой примеси по глубине базы диода Шоттки

Определение длины Дебая

$L_D = (\varepsilon\varepsilon_o kT/q^2 N_D)^{1/2}$

Контрольные вопросы

1. При каких условиях образуется выпрямляющий контакт металл-полупроводник (диод Шоттки)?

2. Поясните, как образуется омический контакт.

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

4. Как определить высоту потенциального барьера Шоттки по его C-V-характеристике?

5. Выведите выражение (5).

6. Что такое эффект Шоттки?

7. Оцените величину понижения потенциального барьера Шоттки из-за эффекта Шоттки для исследованного в данной работе образца.

8. Какие предъявляются требования 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. Можно ли измерять профиль концентрации примеси в *p*-*n*-переходах, используя методику, описанную в данной работе?

11. Пояснить физический смысл всех используемых в работе величин.

12. Какой будет зависимость емкости от обратного напряжения в случае плавного *p*-*n*-перехода?

13. Какие допущения используются при решении уравнения Пуассона при выводе основных соотношений для толщины СОЗ, барьерной емкости контакта Шоттки?

14. Расскажите, какие методы измерения электрической емкости полупроводниковых барьерных структур рекомендуются ГОСТ 18986.4-73.

15. Расскажите про способ измерения электрической емкости, реализованный в приборе Agilent E4980A.

Библиографический список

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

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

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

4. ГОСТ 18986.4-73 Диоды полупроводниковые. Методы измерения емкости.

5. Прецизионный измеритель LCR Agilent E4980A. Руководство для пользователя. 5-е изд. Agilent Technologies, июль 2007.158 с.; http://www.keysight.com/ru/pd-715495-pn-E4980A/precision-lcr-meter-20-hz-to-2-mhz?pm=PL&nid=-34124.536908436&cc=RU&lc=rus

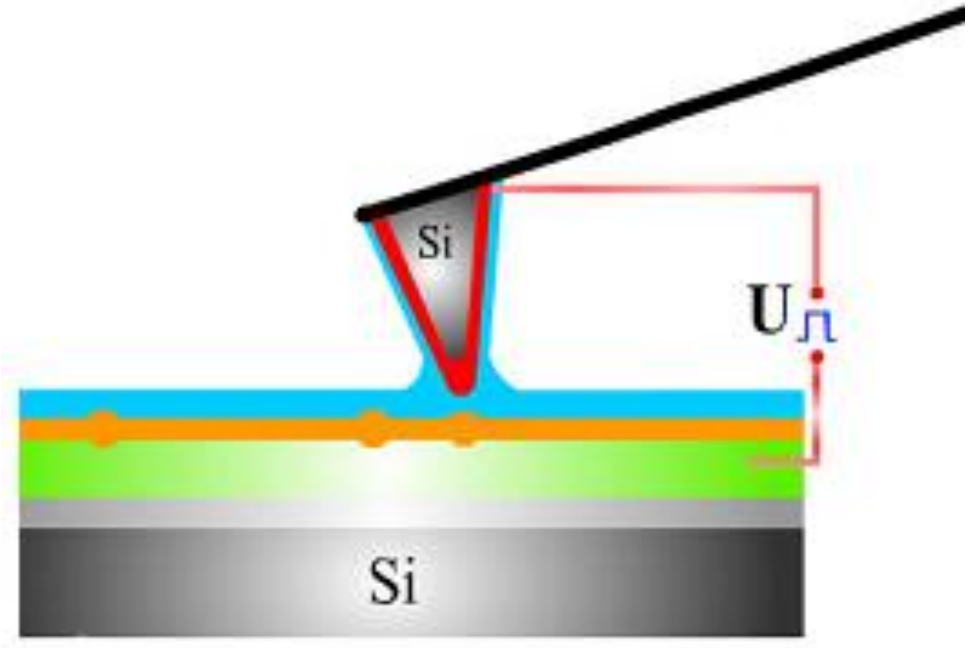
4432

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ РАДИОТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

ЗОНДОВЫЕ МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ И СТРУКТУР ЭЛЕКТРОНИКИ

Методические указания к лабораторным работам



Рязань 2011

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 λ, где λ – 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 развертки, подающий напряжения на пьезодвигатели x и y, обеспечивающие сканирование зонда в горизонтальной плоскости; 5 - электронный датчик, детектирующий величину локального взаимодействия между зондом и образцом; 6 - компаратор, сравнивающий текущий сигнал в цепи датчика *P(t)* с изначально заданным 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).

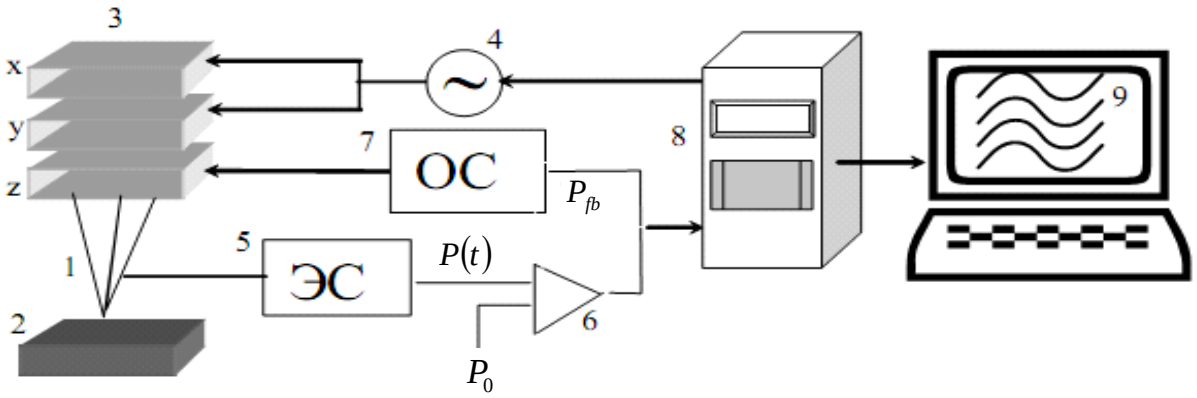


Рис. 1.1. Общая схема сканирующего зондового микроскопа

При работе прибора образец движется в плоскости XY (рис.1.2) построчно таким образом, что кончик иглы постепенно проходит над всей заданной площадью образца с шагом Δ. Этот процесс называется сканированием.

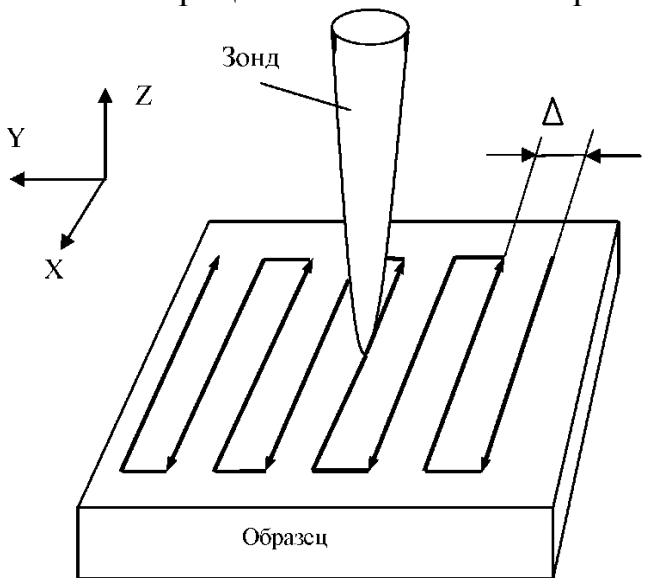
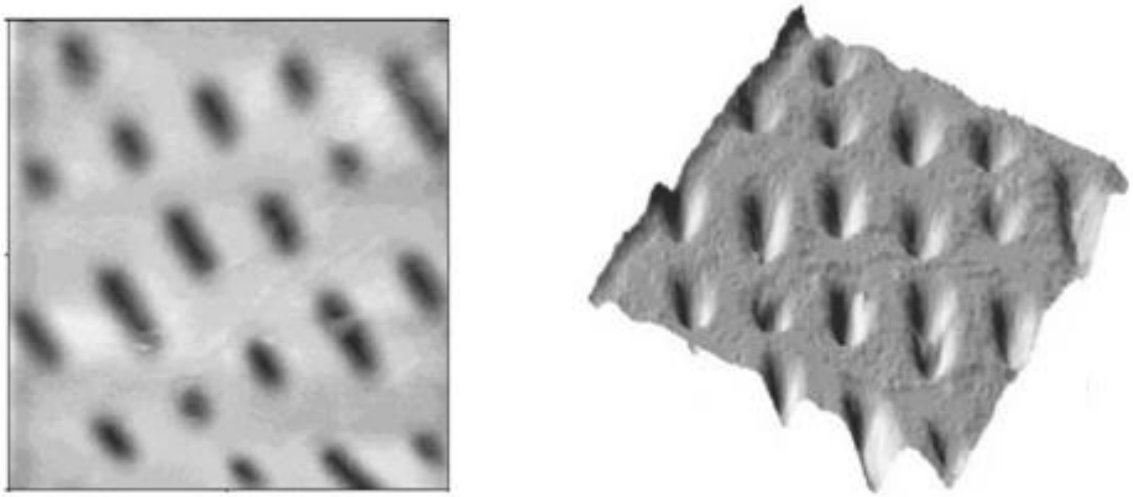


Рис. 1.2. Принцип сканирования

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 удается подчеркнуть мелкомасштабные неровности рельефа. Также средствами компьютерной обработки и графики реализуются масштабирование и вращение 3D СЗМ изображений (рис.1.3).



а *б*

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.

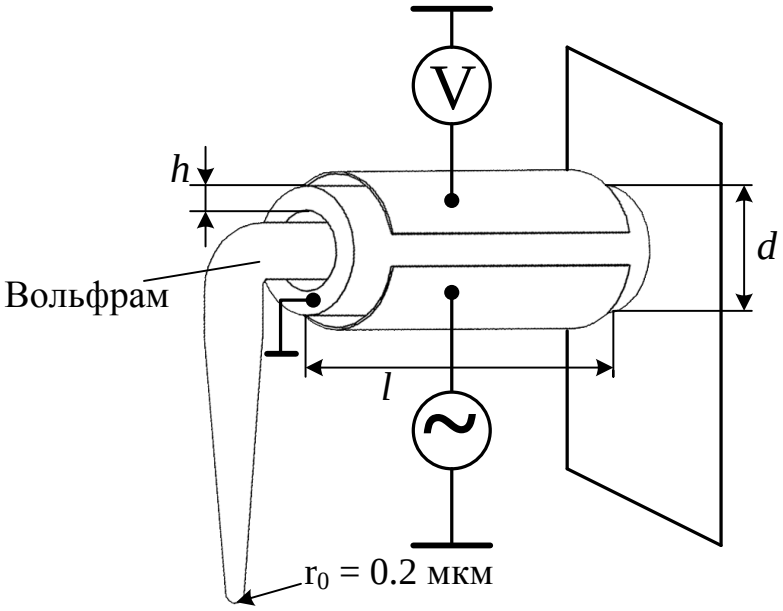
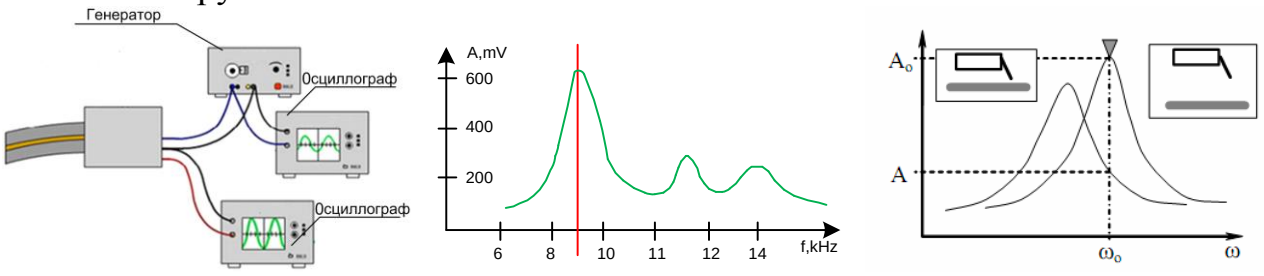


Рис. 1.4. Конструкция универсального датчика прибора NanoEducador

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 ω_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.



а б в

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.

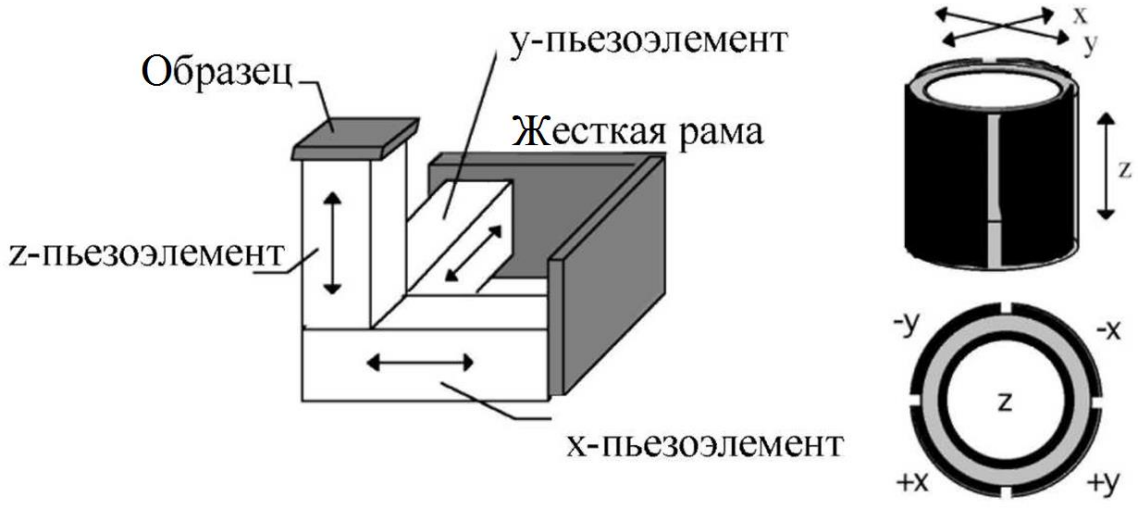
Работа большинства пьезоэлектрических двигателей, применяемых в современных СЗМ, основана на использовании обратного пьезоэффекта, который заключается в изменении размеров пьезоматериала под действием электрического поля.

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).



а 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.

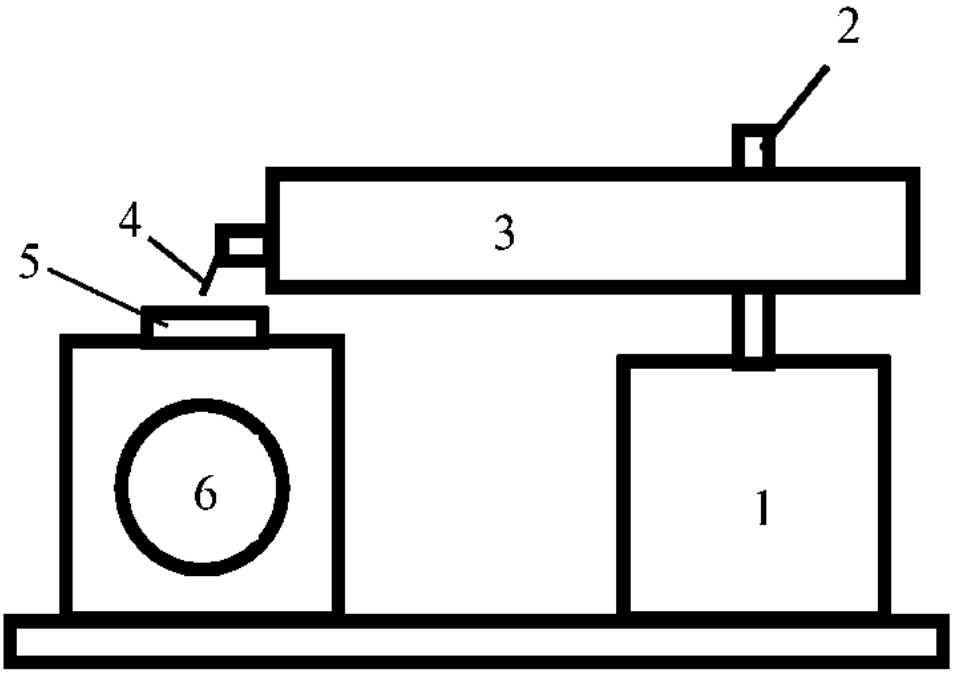


Рис. 1.7. Схема механизма подвода зонда к поверхности образца

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.

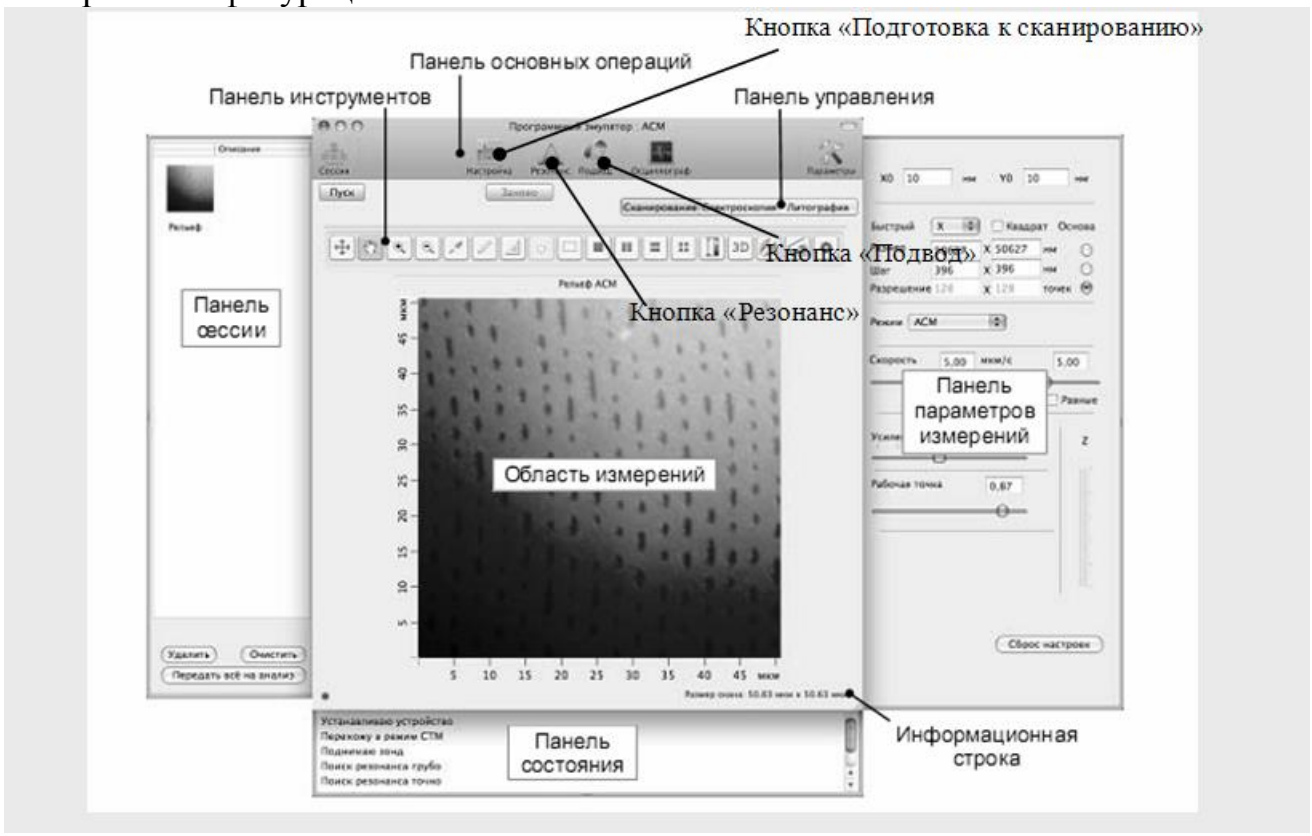


Рис. 1.8. Главное окно программы NanoEducator

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).

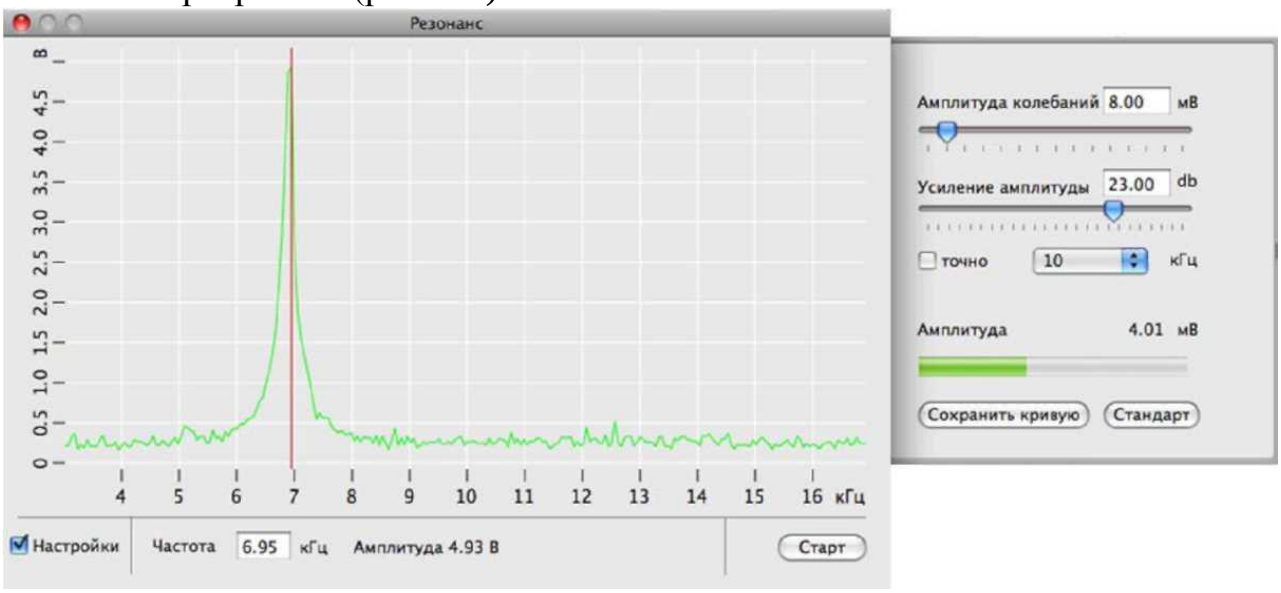


Рис. 1.9. Окно «Резонанс»

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, открывающейся 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 дальнодействующих сил Ван-дер-Ваальса.

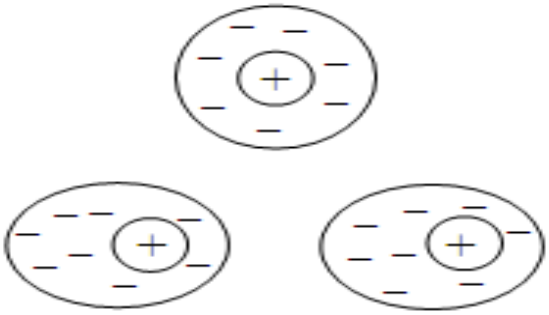


Рис. 2.1. Притяжение двух атомов благодаря силам Ван-дер-Ваальса

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.

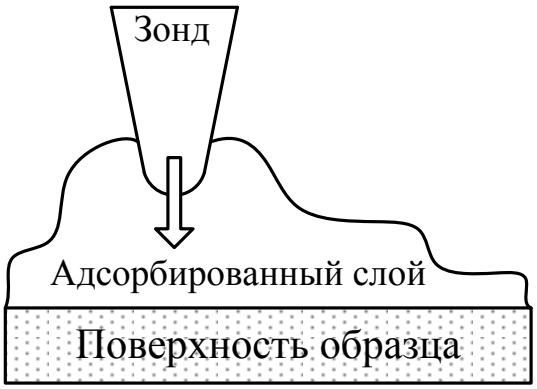


Рис. 2.2. Притяжение зонда к поверхности за счет капиллярных сил

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:

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

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



Рис. 2.3. Зависимость силы $\boldsymbol{F}$ взаимодействия между атомами от расстояния $\boldsymbol{R}$

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 ω_0:

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

где m – масса системы зонд-кантилевер.

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

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

где ω – частота вынуждающих колебаний пьезодрайвера, $z(t)$ – расстояние зонд-образец в момент времени t, z_0 – расстояние зонд-образец при нулевой амплитуде колебаний, Δz – 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 τ соотношением:

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

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 ω и амплитудой возбуждения $\Delta z \neq \neq 0$.

Амплитуда стационарных колебаний зонда равна:

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

Сдвиг фазы φ колебаний свободного конца кантилевера относительно закрепленного определяется выражением:

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

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).

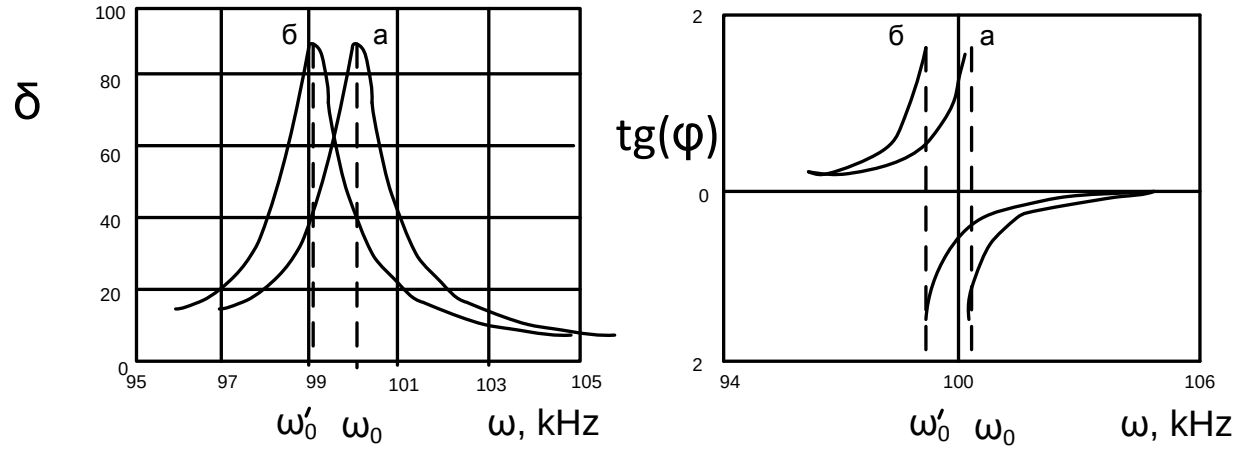


Рис. 2.4. Зависимость амплитуды δ и фазы φ колебаний зонда вдали от поверхности (а) и при приближении к поверхности образца (б)

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:

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

Так как частота вынуждающих колебаний кантилевера поддерживается постоянной и равной ω_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).

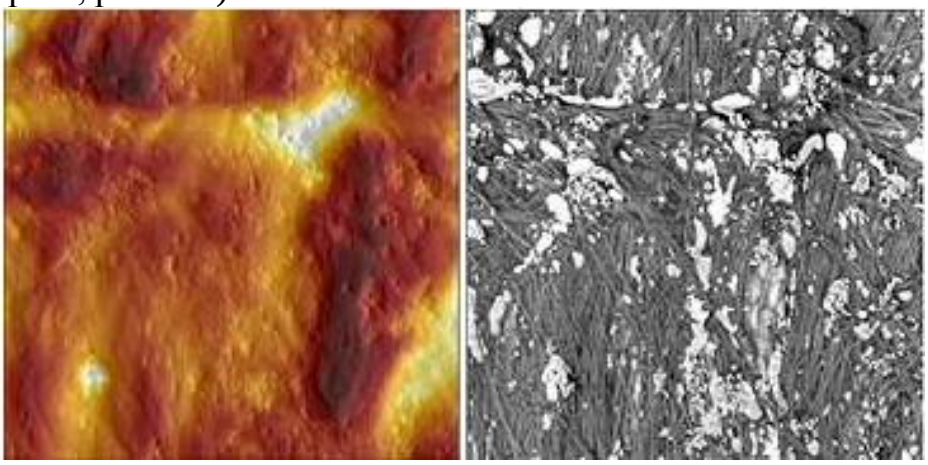


Рис. 2.5. Топография (слева) и фазовое изображение (справа) поверхности трехкомпонентной системы полимеров

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.

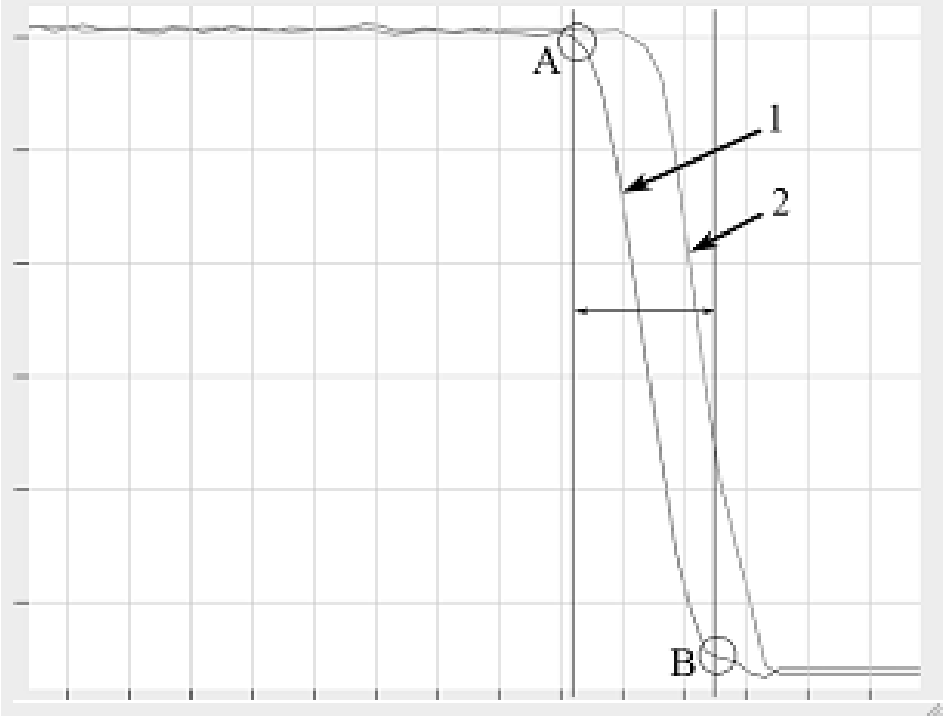


Рис. 2.6. Осциллограмма окна режима «Спектроскопия»: 1 – кривая, полученная при приближении зонда к образцу; 2 – кривая, полученная при отдалении зонда от образца

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 (≤ 1В) 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.

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



Рис. 3.1. Условная схема туннельного перехода

Однако для микрочастицы этот вывод несправедлив: вследствие соотношения неопределенностей фиксация частицы внутри барьера делает неопределенным ее импульс Δp. 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 λ составляет несколько межатомных расстояний. Если ширина барьера ***d*** меньше или равна λ, 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 φ.

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 $(eV << \varphi)$, то величина туннельного тока I_T пропорциональна приложенному напряжению:

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

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.

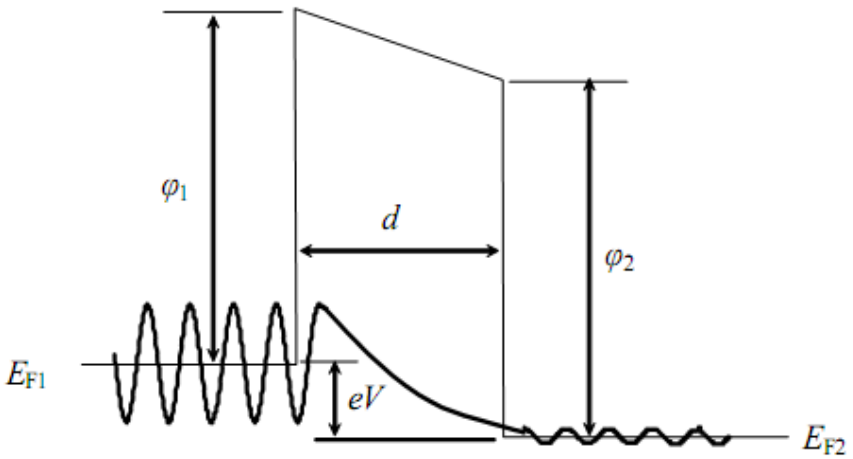


Рис. 3.2. Зонная диаграмма туннельного контакта двух проводников и огибающие волновые функции электронов в металле и в барьере в приближении эффективной массы

Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) – система образец + игла, к которым 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.

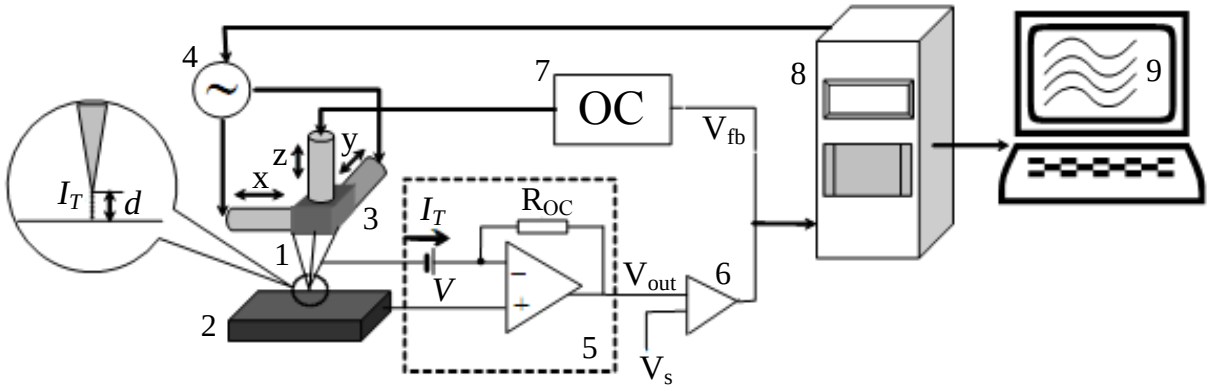


Рис. 3.3. Схема сканирующего туннельного микроскопа: 1 – зонд; 2 – образец; 3 – пьезоэлектрические двигатели x, y, z; 4 – генератор развертки x, y; 5 – туннельный сенсор; 6 – компаратор; 7 – электронная цепь обратной связи; 8 – компьютер; 9 – изображение z(x,y)

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/см²), 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.

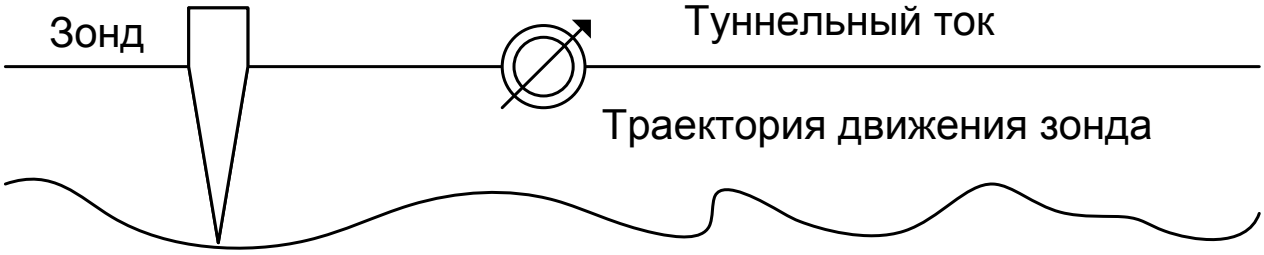


Рис. 3.4. Режим постоянного тока

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 $(5\text{-}10)\cdot 10^{-10}$м будут приводить к разрушению кончика зонда.

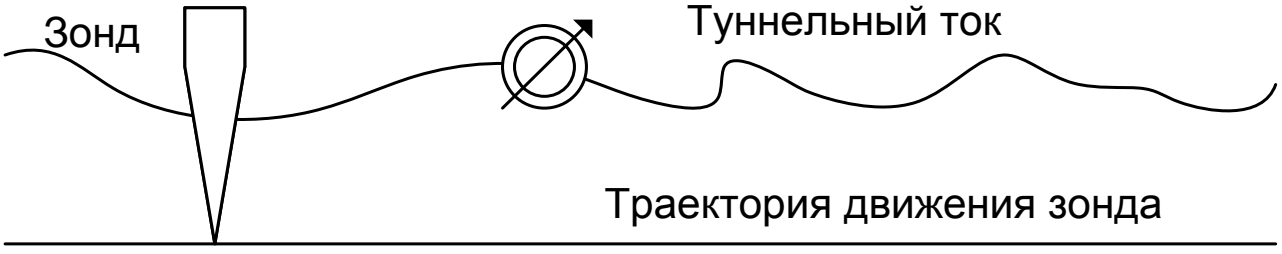


Рис. 3.5. Режим постоянной высоты

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.

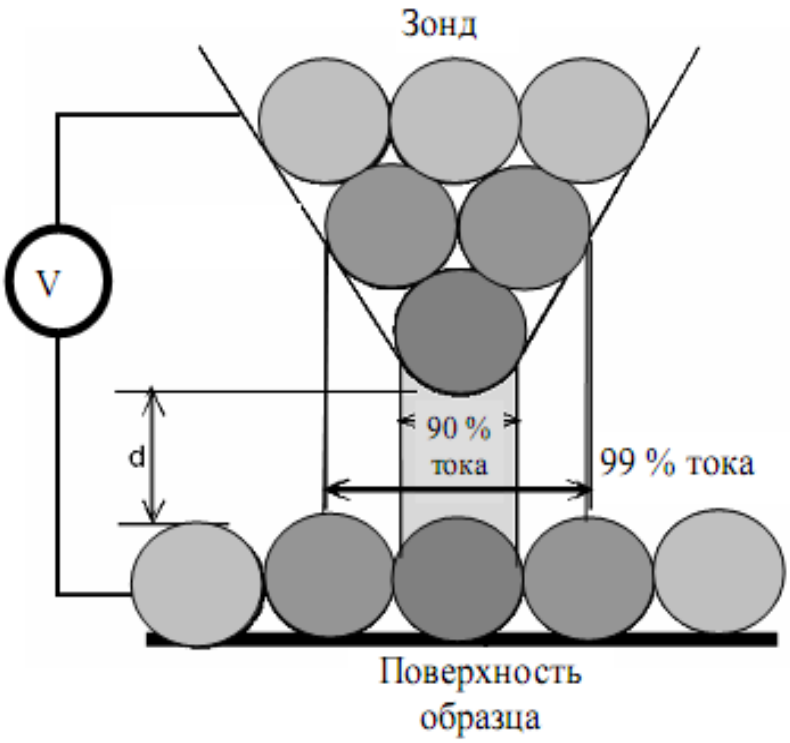


Рис. 3.6. Принцип регистрации туннельного тока

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.

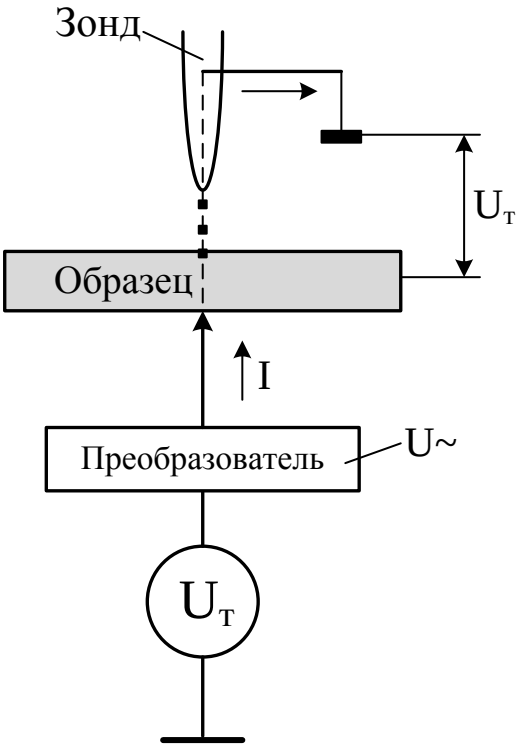


Рис. 3.7. Схематическое изображение взаимодействия кончика иглы с образцом

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 ÷ -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 нанолаборатории (ЗНЛ) NTEGRA и получение изображения поверхности высокоориентированного пиролитического графита (HOPG) 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.

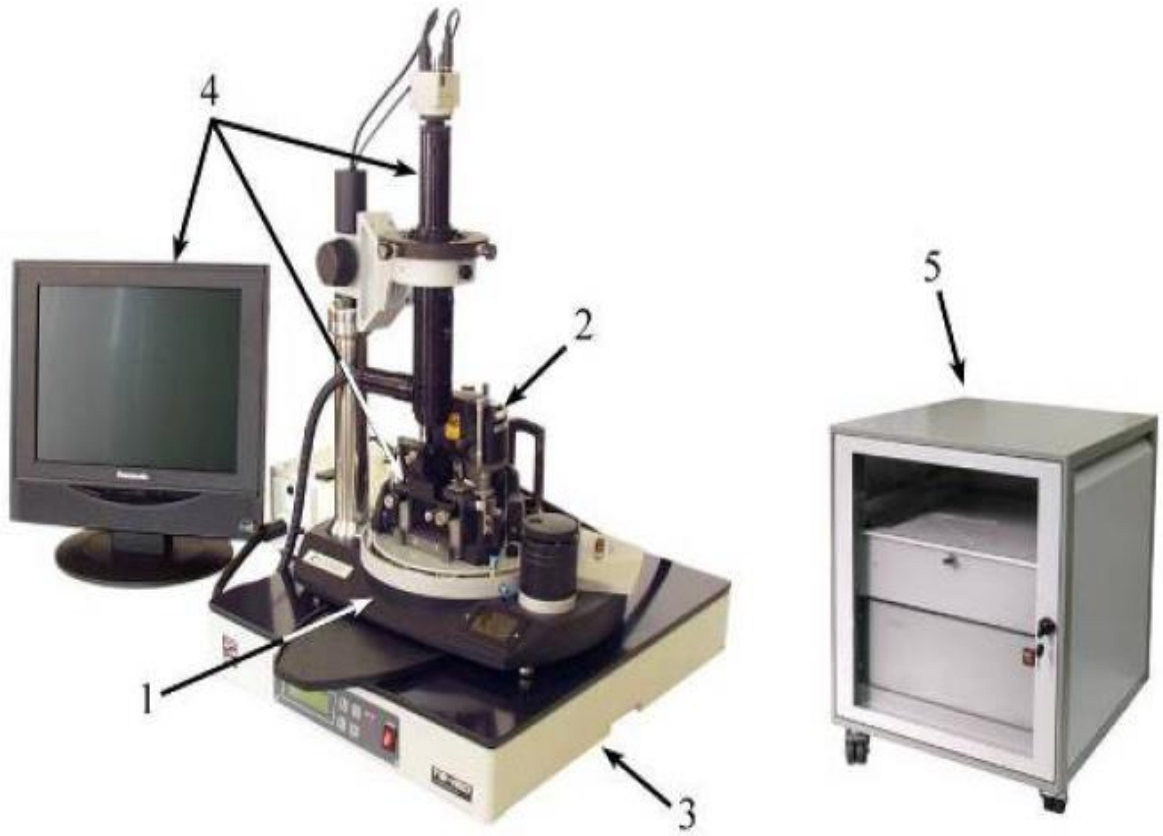


Рис. 4.1. Зондовая нанолаборатория NTEGRA: 1 – базовый блок; 2 – измерительная головка; 3 – система виброизоляции; 4 – система видеонаблюдения; 5 – система управления

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 удается 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.

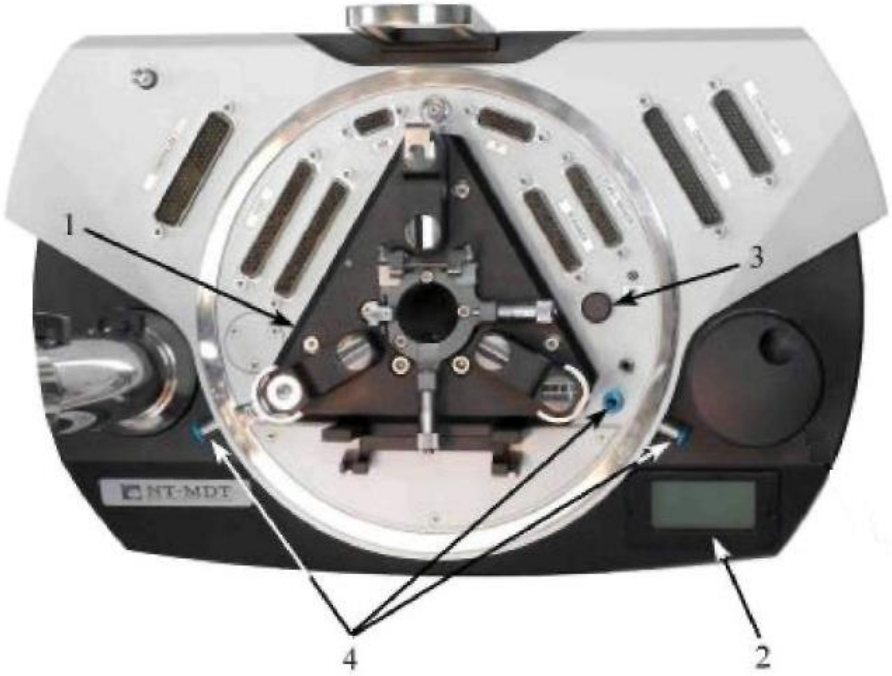
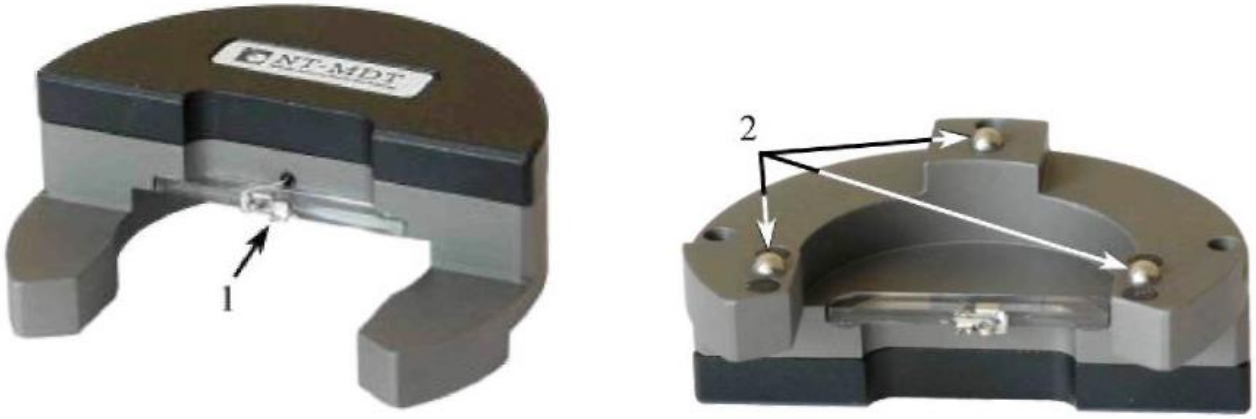


Рис. 4.2. Основные элементы базового блока: 1 - сменное основание; 2 - ЖК-дисплей; 3 - датчик температуры и влажности; 4 - штуцеры

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.



а б

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).

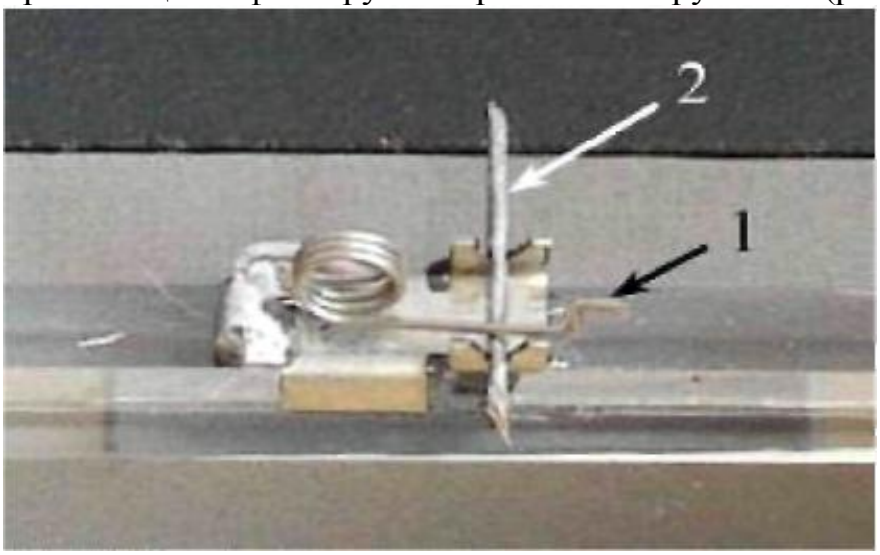


Рис. 4.4. Держатель зондового датчика: 1- прижимная пружина; 2 – зонд

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.

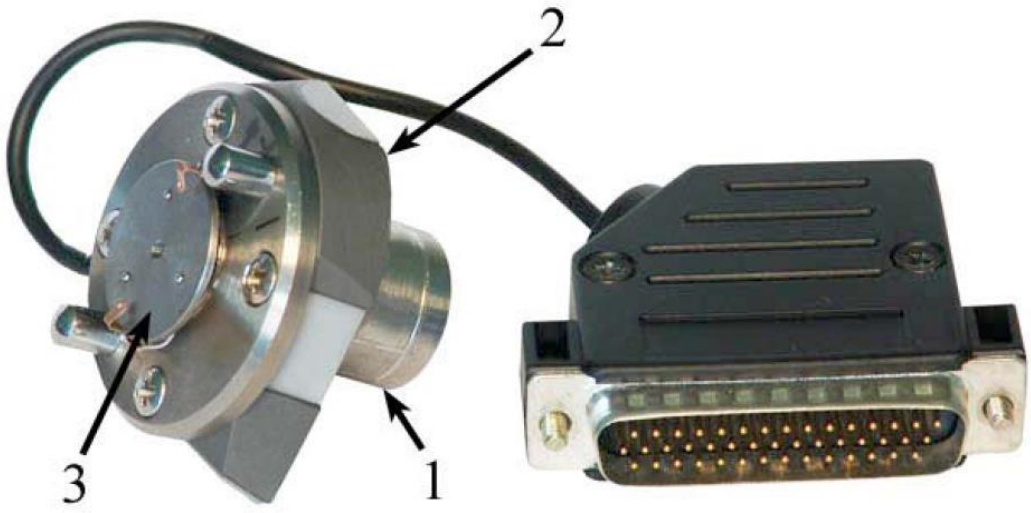


Рис. 4.5. Сканер без датчиков: 1 – защитный кожух трубки сканера; 2 – каретка; 3 – предметный столик

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

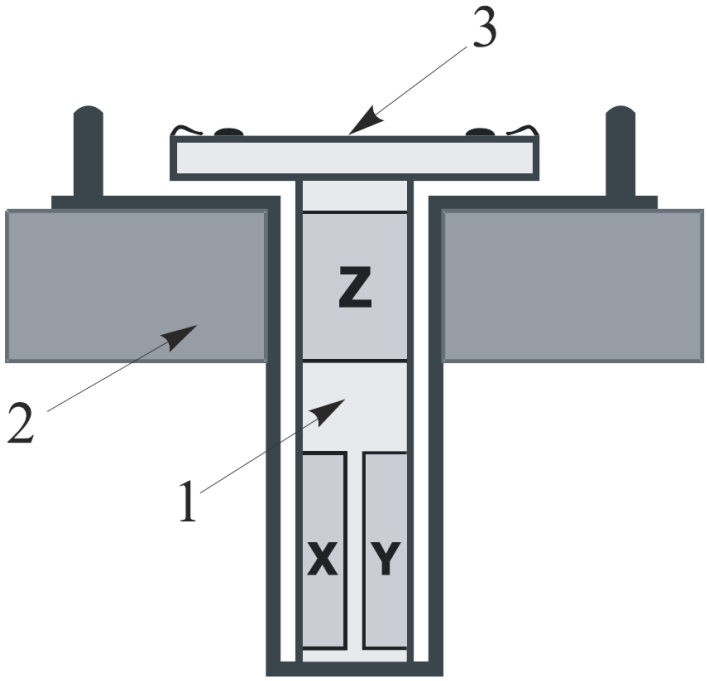


Рис. 4.6. Устройство сканера: 1 – пьезокерамическая трубка сканера; 2 – каретка; 3 – предметный столик

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.

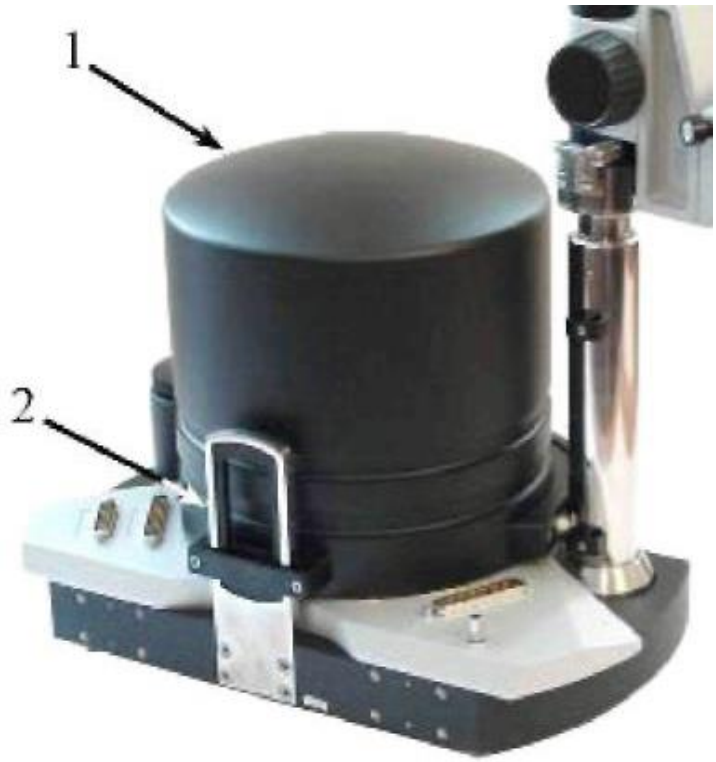


Рис. 4.7. Защитный колпак установлен на базовый блок: 1 - защитный колпак; 2 – рамка

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:

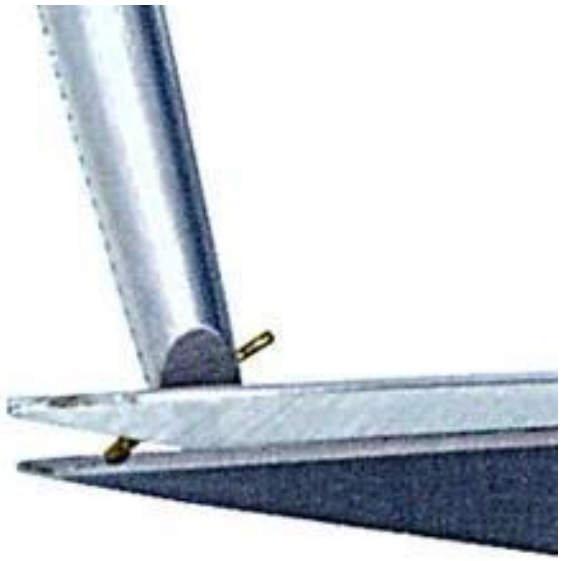
- путем обрезки кончика проволоки ножницами;

- с помощью электрохимического травления.

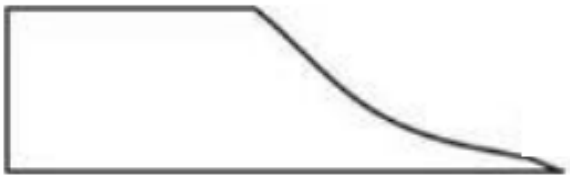
Самая простая методика приготовления СТМ-зонда заключается в обрезке кончика проволоки ножницами. Полученные таким образом зонды имеют радиус кривизны острия менее 10 нм.

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:

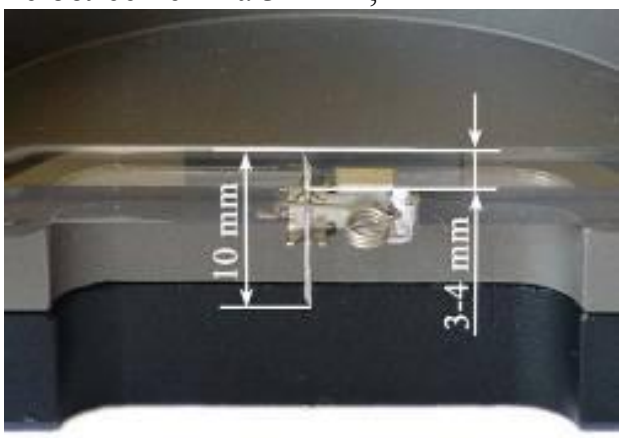
1) переверните СТМ-головку вверх опорами и поставьте на ровную поверхность;

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».

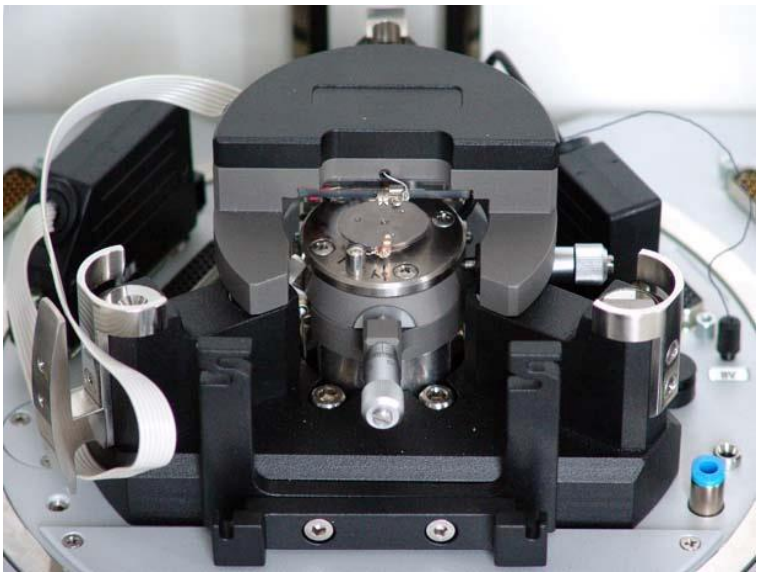
2.4. Центрирование сканера

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**):

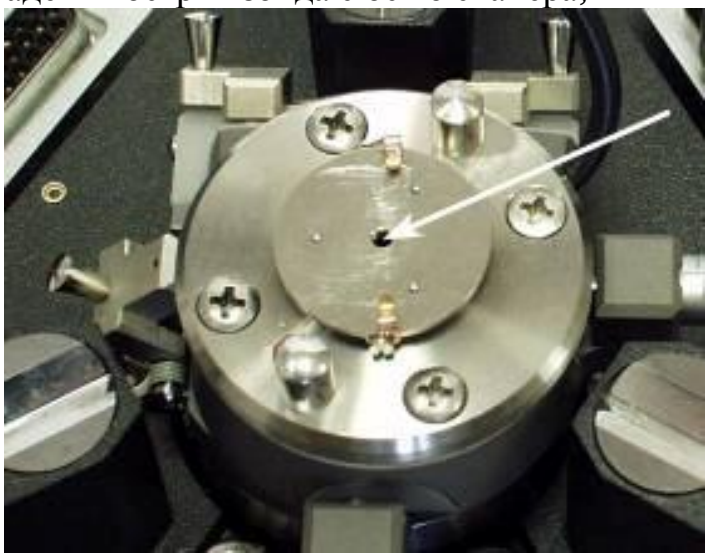


2) установите измерительную головку опорами в посадочные гнезда сменного основания:



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:

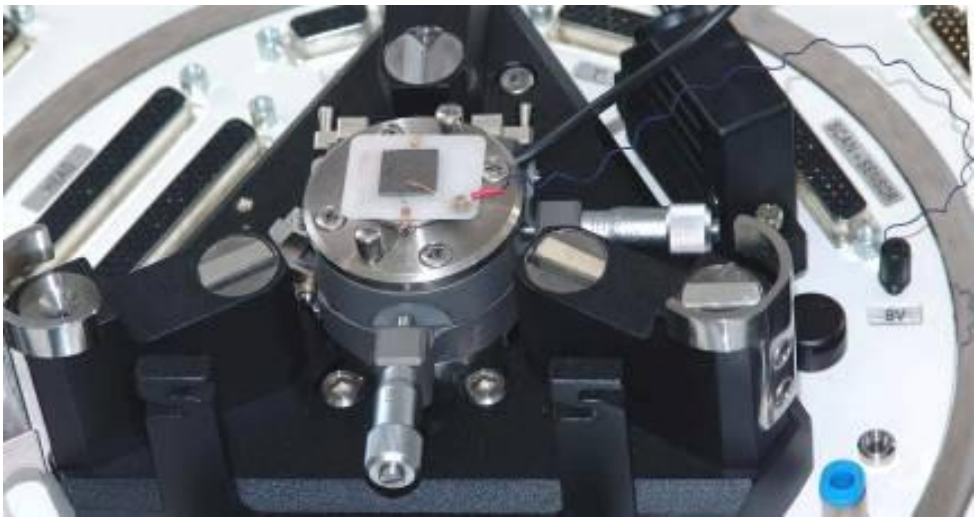


Процедура подготовки образца:

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).



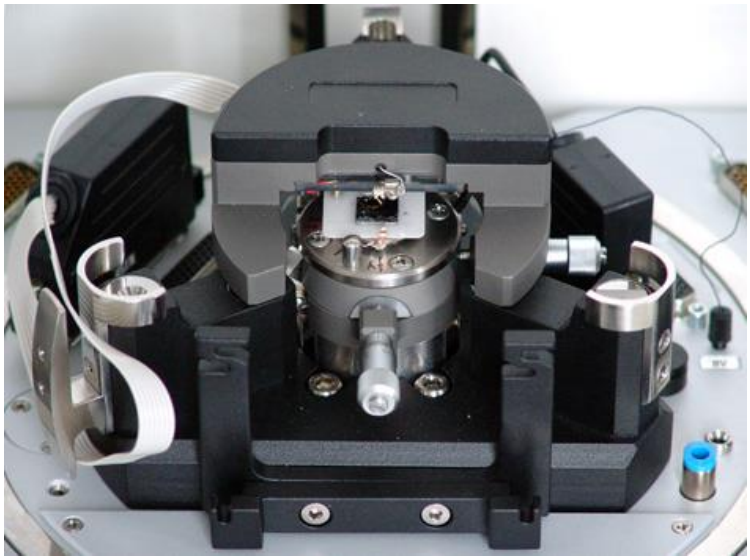
4. Пинцетом поверните контактную пружину для подачи туннельного напряжения и зафиксируйте её на краю образца так, чтобы центр образца оставался свободным.
5. Установите подложку с образцом на предметный столик, вдвигая сбоку под прижимные клипсы. Подложка вставляется таким образом, чтобы пружинный контакт 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 **BV** 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:





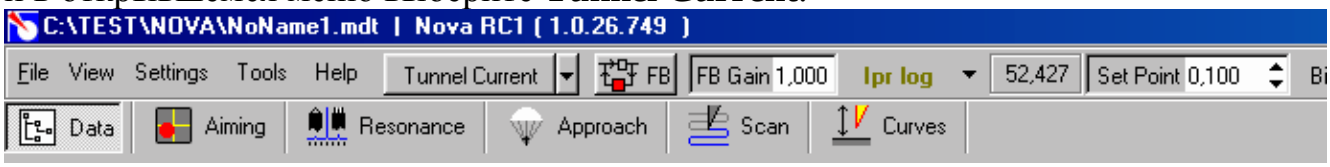
3. Поднесите колпак к штативу так, чтобы пластиковые вставки на ручке 1 колпака упирались в штатив, а прорезь в ручке 2 была расположена над рамкой базового блока.
4. Наденьте колпак так, чтобы рамка попала в прорезь. При этом пластиковые вставки должны скользить по штативу.





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

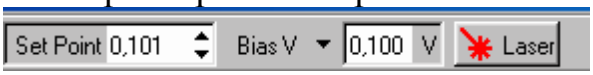
1. Откройте окно **Approach (**закладка **Approach** на панели закладок основных операций):



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.

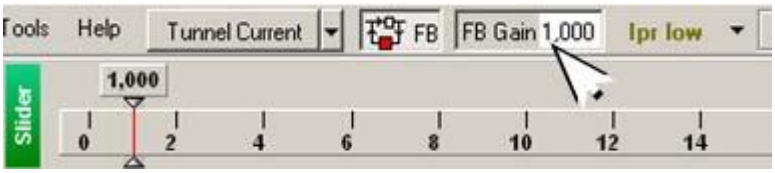


4. Запустите процедуру подвода, щелкнув на кнопке **Landing**.

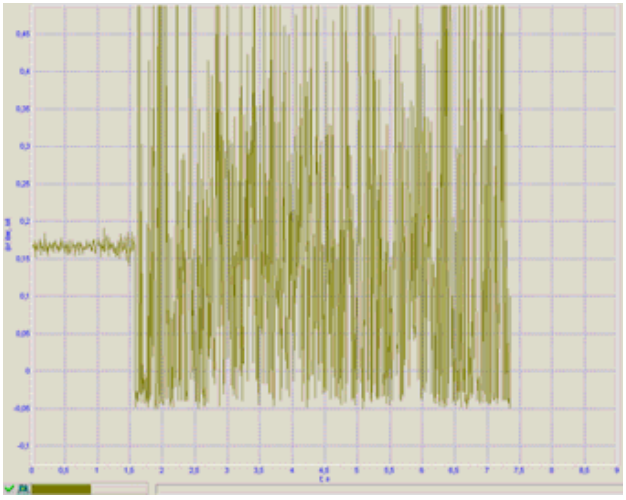
5. После появления сообщения об окончании подвода щёлкните на кнопке ОК и переходите к следующему шагу.

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:



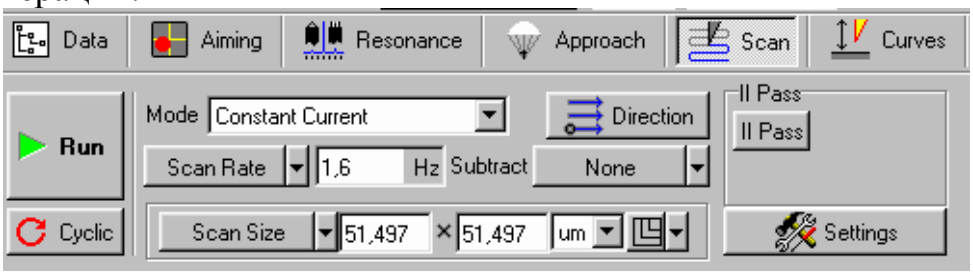
2. Определите значение коэффициента **FB Gain**, при котором начинается генерация. Начало генерации регистрируется по резкому увеличению переменной составляющей сигнала **IprLow**:



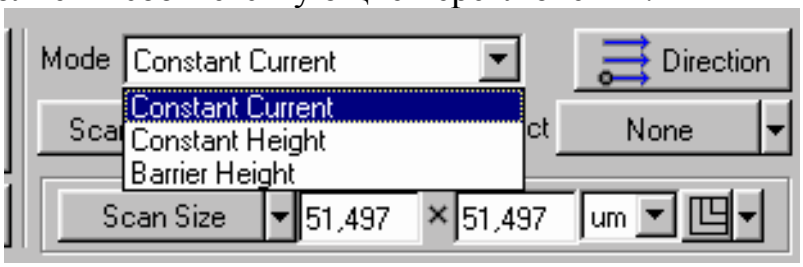
3. Уменьшая параметр **FB Gain**, установите в качестве рабочей величины значение, равное 0.6-0.7 от значения **FB Gain**, при котором начинается генерация сигнала **IprLow**.

3.6. Установка параметров сканирования

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

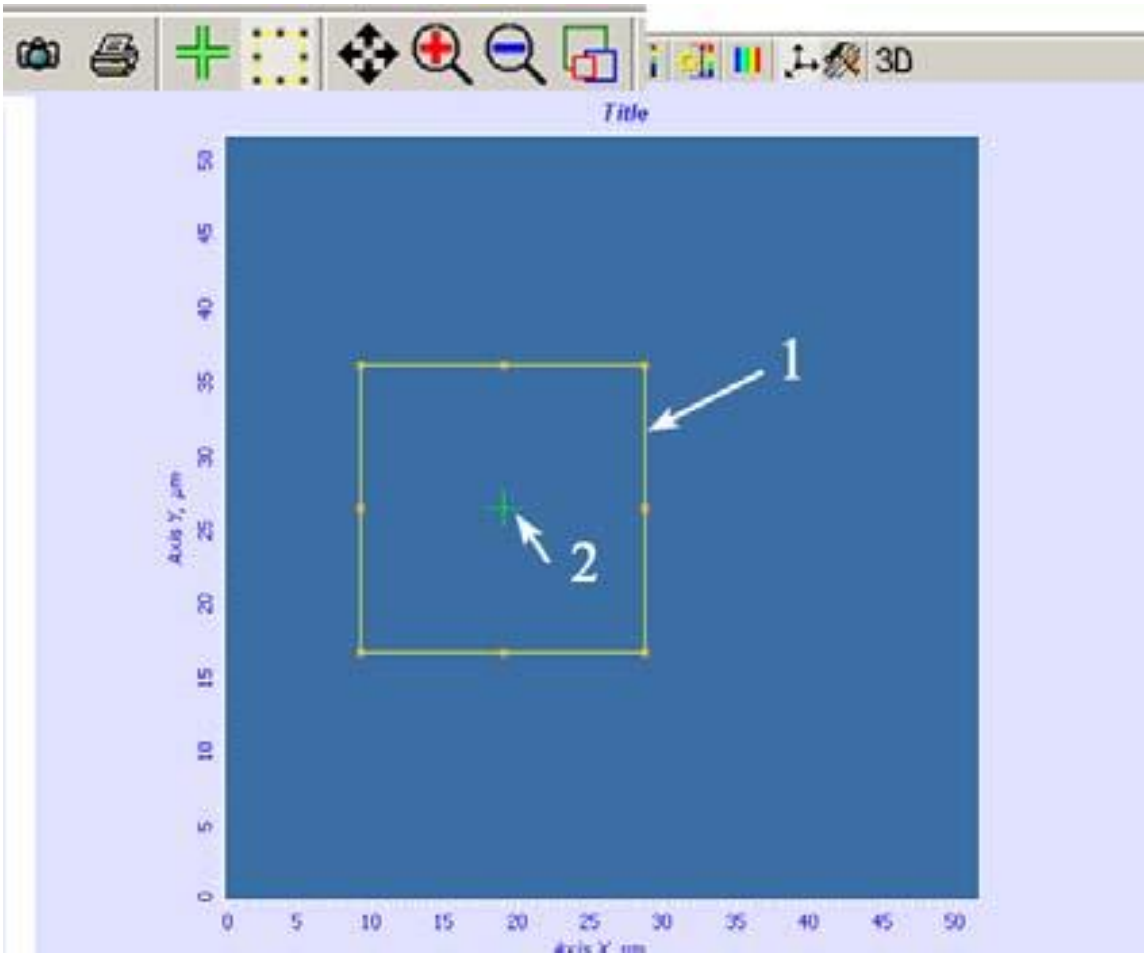


2. Установите СЗМ-метод. Для этого щелкните на окне-индикаторе **Mode** и в открывшемся меню выберите **Constant Current**. При этом в приборе автоматически будут выполнены соответствующие переключения:

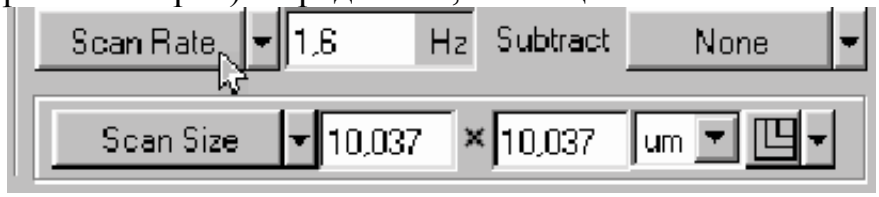


3. Для задания области сканирования выполните следующие действия.

- 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

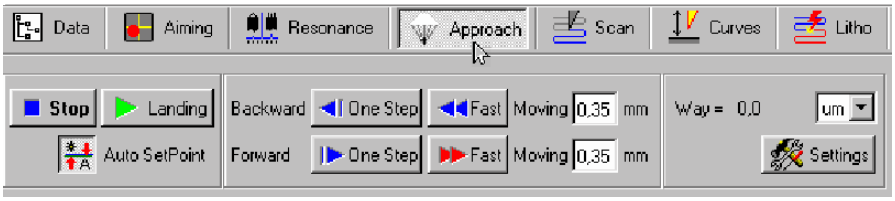
После того как выполнены подготовительные операции, произведен подвод зонда к образцу, выбрана рабочая точка, установлены параметры сканирования, можно начинать сканирование поверхности образца.

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:

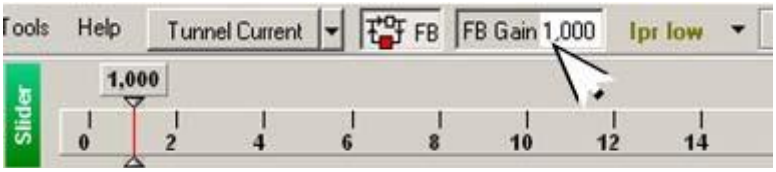


2. Щелкнуть дважды по окну-индикатору параметра **Moving** для **Backward**.

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.

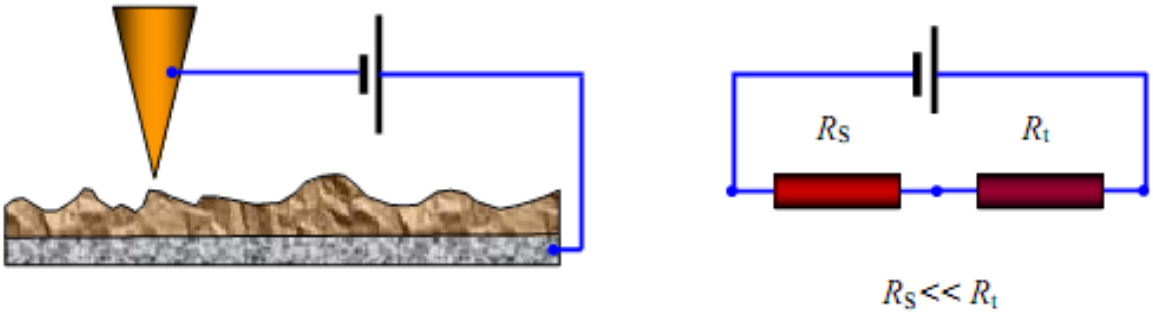
Лабораторная работа № 5
РАБОТА СКАНИРУЮЩЕГО ЗОНДОВОГО МИКРОСКОПА NANOEDUCATOR В РЕЖИМЕ ИЗМЕРЕНИЯ ВОЛЬТ-АМПЕРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

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).



а *б*

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:

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

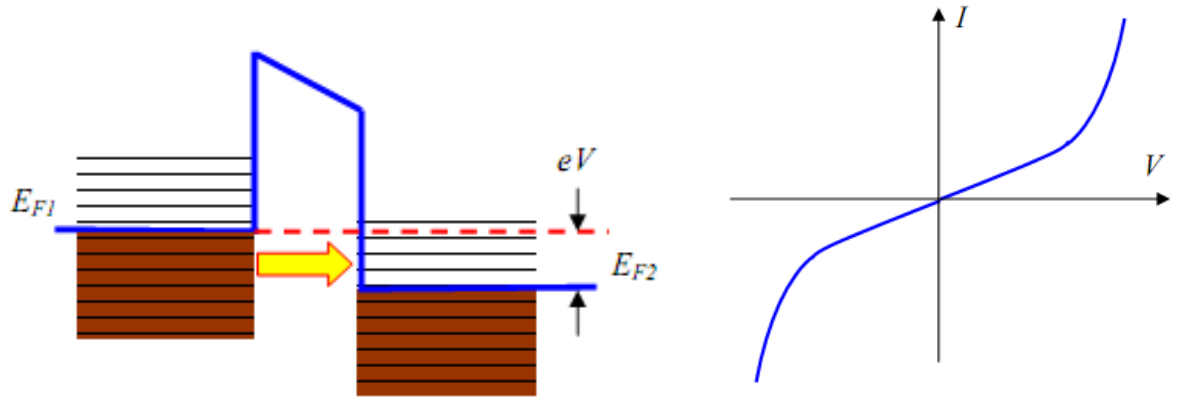
В этом случае зависимость туннельного тока от напряжения определяется в основном плотностью состояний в энергетическом спектре образца. На практике величину $\rho_s(E)$ оценивают по величине производной туннельного тока по напряжению:

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

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.



а *б*

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:

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

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.

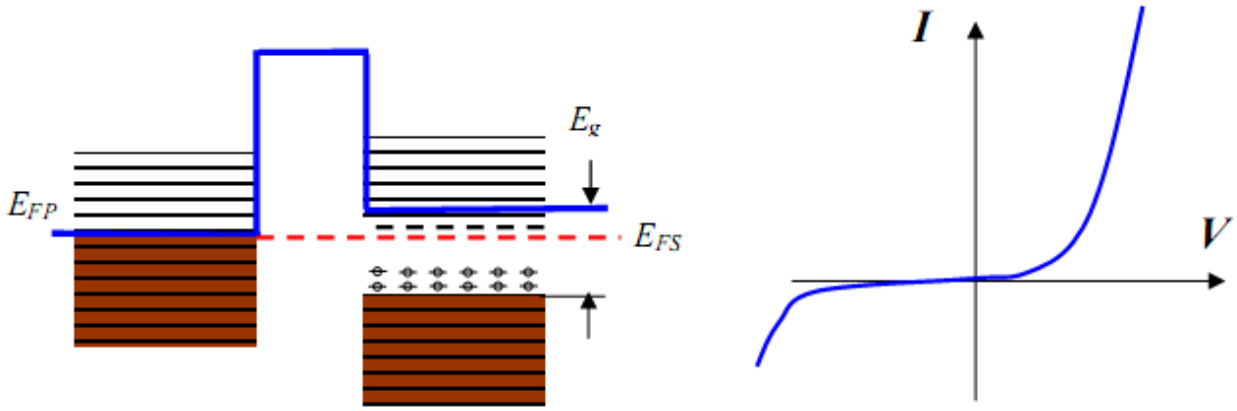


Рис. 5.3. Энергетическая диаграмма (а) и характерный вид вольт-амперной характеристики туннельного контакта металл-полупроводник (б)

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.

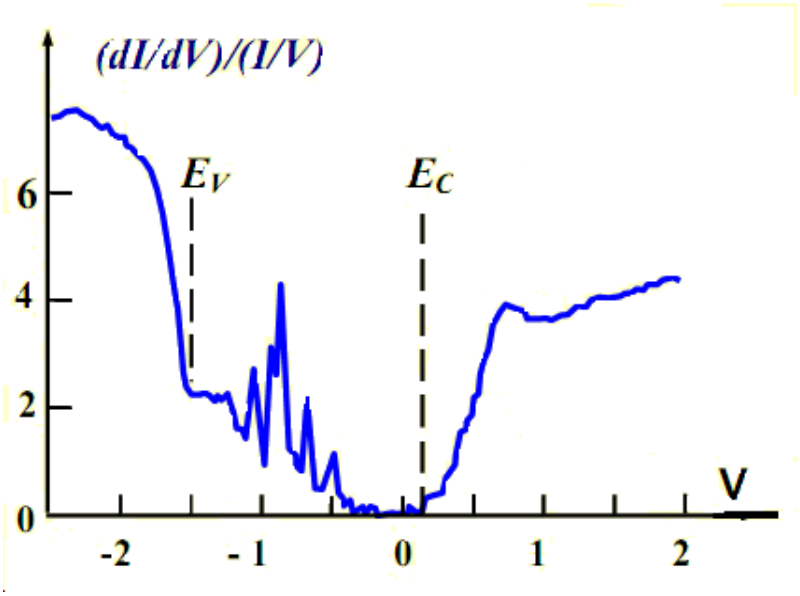


Рис. 5.4. СТМ спектр поверхности кристалла n-GaAs

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*

(В-А). 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

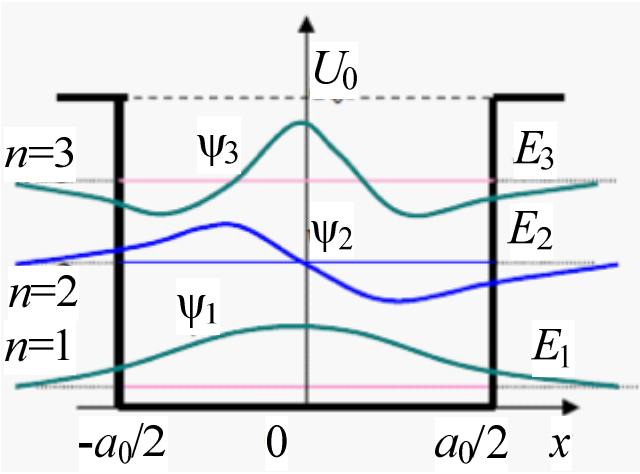
4764

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: Литвинов Владимир Георгиевич
Рыбин Николай Борисович
Рыбина Наталья Владимировна
Ермачихин 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.

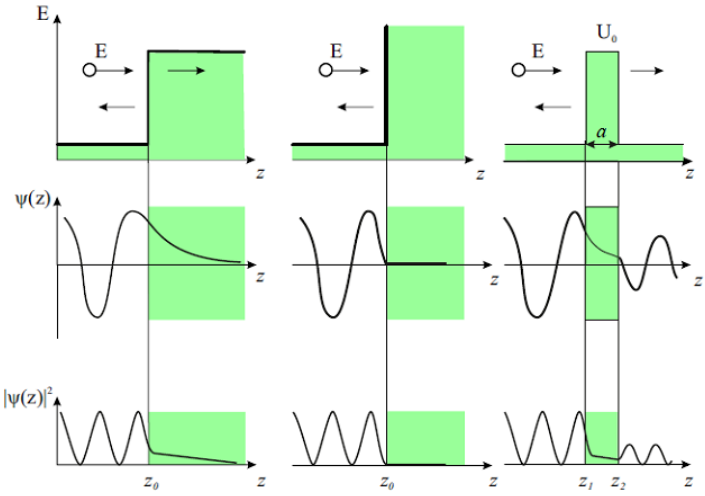
Взаимодействие квантовых частиц с различными потенциальными барьерами в одномерном пространстве z и соответствующее изменение волновой функции микрочастицы $\psi(z)$ и $|\psi(z)|^2$ иллюстрирует рис. 1.

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:

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

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 $\psi(z)$.



а б в

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:

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

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

$$\psi = A \exp(ik_2 z), \tag{3}$$

где $k_2 = (1/\hbar)\sqrt{2m(E - U_0)}$. Плотность потока в падающей волне пропорциональна k_1, в отраженной – $k_1 \left|B\right|^2$, а в прошедшей – $k_2 \left|A\right|^2$. Коэффициент прохождения частицы через границу потенциального барьера, определяемый как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей волне, равен:

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

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

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

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 $E \to \infty$, так как $R \approx (U_0/4E)^2$ при $E >> U_0$.

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:

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

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 $A_1\exp(ik_1z)$ и $B_1\exp(-ik_1z)$ описывают соответственно падающую и отраженную волны, а $A_3\exp(-ik_1z)$ – 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 $D(E) = \left|A_3\right|^2$, 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:

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

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:

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

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

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

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:

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

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 φ_P и образца φ_S. При качественном рассмотрении барьер можно считать прямоугольным с эффективной высотой, равной средней работе выхода материалов:

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

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, φ^* – средняя работа выхода электрона, $\hbar$ – постоянная Планка. При приложении к туннельному контакту разности потенциалов V между зондом и образцом появляется туннельный ток (рис. 3).

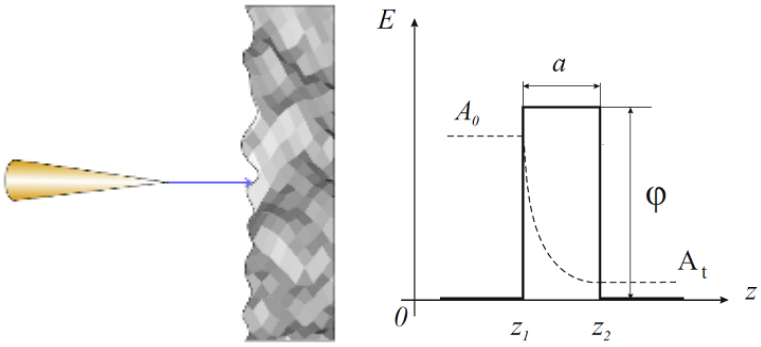


Рис. 2. Схема туннелирования электронов через потенциальный барьер в туннельном микроскопе

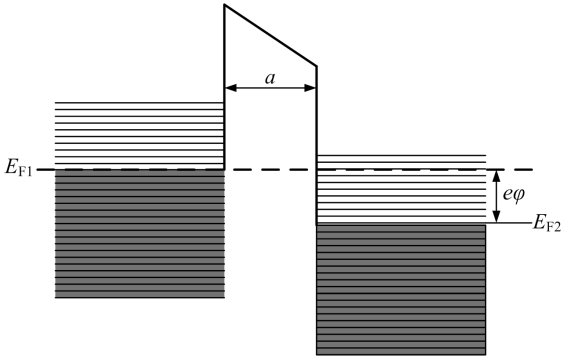


Рис. 3. Энергетическая диаграмма туннельного контакта двух металлов [2]

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:

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

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:

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

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

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

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 Å^{-1}, так что при изменении a на ~1 Å 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]:

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

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, $m^*=m/m_0$	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, φ^*, эВ	Ширина пот. барьера, a, нм	Работа выхода, φ^*, 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. Наноэлектроника / В.Е. Борисенко, А.И. Воробьева, Е.А. Уткина. М.: Бином. 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.

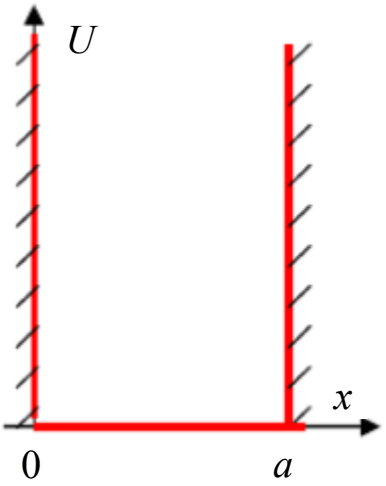


Рис. 1. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

Математически одномерный потенциал записывается в виде:

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

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, ψ – 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, $k^2 = \dfrac{2mE}{\hbar^2}$.

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):

$$\psi(0) = \mathrm{B} = 0,\ \psi(a) = A\sin ka = 0.$$

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

$$ka = \pm n\pi, \tag{7}$$

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

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

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

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

$$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2. \tag{9}$$

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

Амплитуду волновой функции A найдем из условия нормировки:

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

Из условия (10) получаем:

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

Таким образом, собственные функции и значения энергии:

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

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

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

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:

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

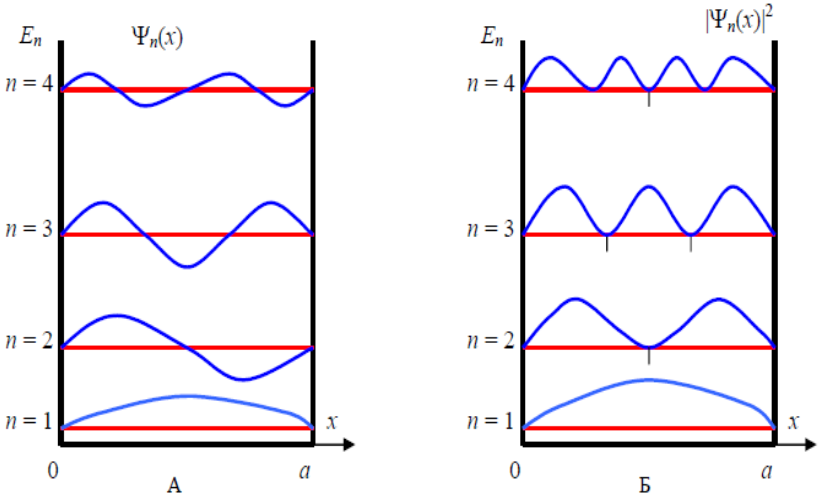


Рис. 2. Качественное изображение волновой функции (а) и квадрата ее модуля (б) в одномерной потенциальной яме

1.2. Одномерная потенциальная яма конечной глубины

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

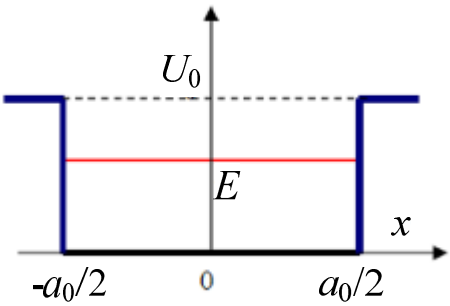


Рис. 3. Схематичное изображение одномерной потенциальной ямы со стенками конечной высоты

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

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

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:

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

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:

$$\psi_1(x) = A_1 \sin k_0^{'} x + B_1 \cos k_0^{'} x \,. \qquad (15)$$

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:

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

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:

$$1)\quad -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2};\quad \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + k^{\,2}\psi_1 = 0;\quad k^{\,2} = \frac{2m_1 E}{\hbar^2};$$
$$\psi_1(x) = A\sin kx + B\cos kx; \qquad (17)$$

$$2)\ \begin{array}{l} |x| > \dfrac{a}{2};\quad \dfrac{d^2\psi_2}{dx^2} - \alpha^2\psi_2 = 0;\quad \alpha^2 = \dfrac{2m_2}{\hbar^2}(U_0 - E); \\ \psi_2(x) = Ce^{\alpha x} + Ce^{-\alpha x}. \end{array} \tag{18}$$

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

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

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

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

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:

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

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:

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

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

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

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

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

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

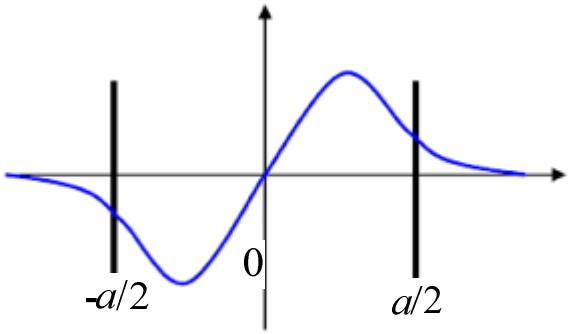


Рис. 4. Изображение волновой функции в яме конечной глубины

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

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

$$tg\left(\frac{a}{2\hbar}\sqrt{2m_1E}\right) = -\sqrt{\frac{m_1E}{m_2(U_0 - E)}}\ .$$

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

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

$$\psi_1(x) = B\cos kx \ ;$$

$$\psi_2(x) = D\exp\left(-\alpha|x|\right). \tag{24}$$

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

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

Из (25) получаем уравнение:

$$tg\frac{ka}{2} = \frac{\alpha}{k} \ ; \tag{26}$$

$$tg\left(\frac{a}{2\hbar}\sqrt{2m_1E}\right) = \sqrt{\frac{m_2(U_0 - E)}{m_1E}} \ .$$

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 нумеруется главными квантовыми числами n = 1, 2, 3,... . 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 $U_0 > E$.

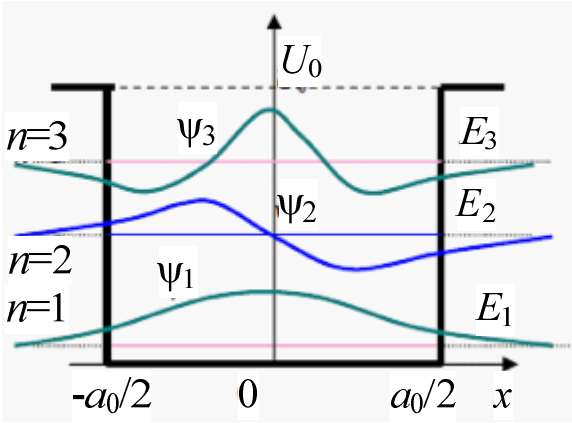


Рис. 5. Изображение волновых функций на трех нижних энергетических уровнях в яме конечной глубины

2. Последовательность выполнения работы

1. Изучите теоретическую часть работы.

2. Выберете 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	06	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. Наноэлектроника / 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.

Оператор ЭДО ООО "Компания "Тензор"

ДОКУМЕНТ ПОДПИСАН ЭЛЕКТРОННОЙ ПОДПИСЬЮ

ПОДПИСАНО **ФГБОУ ВО "РГРТУ", РГРТУ,** Литвинов Владимир Георгиевич, Заведующий кафедрой МНЭЛ **02.11.26** 16:55 (MSK) Простая подпись