

Учреждение образования  
«Брестский государственный университет имени А. С. Пушкина»

**В. А. Плетюхов, Н. Н. Сендер**

## **ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ ТЕЛ**

Электронный учебно-методический комплекс  
для магистрантов специальности 1-31 80 05 «Физика»

Брест  
БрГУ имени А. С. Пушкина  
2023

**ISBN 978-985-22-0602-0**

© УО «Брестский государственный  
университет имени А. С. Пушкина», 2023

Об издании – [1](#), [2](#)

1 – сведения об издании

УДК 539.21-026.661(075.8)

ББК 22.373я73

*Рекомендовано редакционно-издательским советом учреждения образования  
«Брестский государственный университет имени А. С. Пушкина»*

*Рецензенты:*

кафедра физики УО «Брестский государственный технический университет»

доцент кафедры математического анализа, дифференциальных уравнений  
и их приложений УО «Брестский государственный университет имени А. С. Пушкина»  
кандидат физико-математических наук, доцент **А. И. Басик**

**Плетюхов, В. А.**

Электрические свойства твердых тел [Электронный ресурс] :  
электрон. учеб.-метод. комплекс / В. А. Плетюхов, Н. Н. Сендер ; Брест.  
гос. ун-т им. А. С. Пушкина. – Брест : БрГУ, 2023. – Режим доступа:  
<http://rep.brsu.by/handle/123456789/9170>.

ISBN 978-985-22-0602-0.

В издании представлены необходимые теоретические (лекционный материал)  
и методические (задачи к практическим занятиям, вопросы для управляемой  
самостоятельной работы, итоговый тест и др.) материалы для освоения содержания  
дисциплины и подготовки к экзамену.

Адресуется магистрантам специальности 1-31 80 05 «Физика».

Разработано в PDF-формате.

**УДК 539.21-026.661(075.8)**

**ББК 22.373я73**

Текстовое учебное электронное издание

Системные требования:

тип браузера и версия любые; скорость подключения к информационно-  
телекоммуникационным сетям любая; дополнительные надстройки  
к браузеру не требуются.

© УО «Брестский государственный  
университет имени А. С. Пушкина», 2023

[ВПЕРЕД](#)

2 – производственно-технические сведения

- Использованное ПО: Windows 10, Microsoft Office 2019, Texstudio;
- ответственный за выпуск Ж. М. Селюжицкая, технический редактор Е. С. Мартынова, корректор А. А. Лясник, компьютерный набор и верстка В. А. Плетюхов;
- дата размещения на сайте: 04.07.2023;
- объем издания: 2,81 МБ;
- производитель: учреждение образования «Брестский государственный университет имени А. С. Пушкина», 224016, г. Брест, ул. Мицкевича, 28. Тел.: 8(0162) 21-70-55. E-mail: rio@brsu.brest.by.

[ВПЕРЕД](#)

**СОДЕРЖАНИЕ**

|  |     |
|--|-----|
| <a href="#">Введение</a> .....   | 5   |
| <a href="#">Содержание учебного материала</a> .....                                  | 7   |
| <a href="#">Учебно-методическая карта</a> .....                                      | 9   |
| <a href="#">Лекционный материал</a> .....  | 11  |
| <a href="#">1. Определение твердого тела. Кристаллы</a> .....                        | 11  |
| <a href="#">2. Физические модели твердых тел</a> .....                               | 19  |
| <a href="#">3. Поляризация диэлектриков</a> .....                                    | 30  |
| <a href="#">4. Сегнетоэлектрики. Пьезоэлектричество. Электреты</a> .....             | 39  |
| <a href="#">5. Техническое применение твердых диэлектриков</a> .....                 | 56  |
| <a href="#">6. Электрический ток в металлах</a> .....                                | 58  |
| <a href="#">7. Электрический ток в полупроводниках</a> .....                         | 69  |
| <a href="#">8. Контактные явления в металлах и полупроводниках</a> .....             | 83  |
| <a href="#">9. Поляризация диэлектриков в переменном электрическом поле</a> .....    | 100 |
| <a href="#">10. Поведение диэлектриков при высоких частотах</a> .....                | 109 |
| <a href="#">Задачи к практическим занятиям</a> .....                                 | 114 |
| <a href="#">Занятие 1</a> .....  | 114 |
| <a href="#">Занятие 2</a> .....  | 115 |
| <a href="#">Занятие 3</a> .....  | 116 |
| <a href="#">Занятие 4</a> .....  | 117 |
| <a href="#">Занятие 5</a> .....  | 118 |
| <a href="#">Перечень вопросов для управляемой самостоятельной работы (УСР)</a> ..... | 119 |
| <a href="#">Итоговый тест</a> .....  | 121 |
| <a href="#">Список рекомендуемой литературы</a> .....                                | 122 |

## ВВЕДЕНИЕ

Данный электронный учебно-методический комплекс подготовлен в соответствии с действующей учебной программой дисциплины «Электрические свойства твердых тел», утвержденной ректором БрГУ имени А. С. Пушкина 29.11.2019, рег. № УД-20-014-19 уч., а также в соответствии с требованиями образовательного стандарта ОСВО 1-31 80 05-2019, специальность 1-31 80 05 «Физика», утвержденного и введенного в действие постановлением Министерства образования Республики Беларусь от 26.06.2019 № 81, и учебного плана G-31-2-149/уч. от 30.05.2019.

ЭУМК «Электрические свойства твердых тел» предназначен для студентов второй ступени дневной формы получения образования по специальности 1-31 80 05 «Физика» со сроком обучения 1 год. Его цель состоит в более глубоком, чем это было на первой ступени получения образования, изучении электрических процессов в твердых диэлектриках, проводниках и полупроводниках, для последующего применения знаний в научной и практической деятельности.

Для достижения указанной цели предусматривается:

- освоение новых подходов к исследованию электрических свойств твердых тел с использованием современных методов физической диагностики в этой области;
- освоение физических основ технологий, базирующихся на электрических свойствах твердых тел;
- овладение методами математического моделирования процессов, происходящих в твердых телах при их взаимодействии с электрическими полями.

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

*Специальные компетенции:*

СК-7 Быть способным применять в науке и технике современные знания об электрических свойствах твердых тел.

Магистрант должен **знать**:

- основные соотношения, которые описывают физические процессы, происходящие при взаимодействии электрического поля с веществом;
- физические приборы и оборудование соответствующего профиля, принцип их работы;
- области применения электрофизики твердого тела в технике, промышленности, информационных технологиях;

**уметь**:

- применять физические законы для описания происходящих в твердых телах электрических процессов;

- получать новые знания, используя современные образовательные технологии;

- исследовать характер процессов, происходящих в твердых телах при наличии в них электрического поля;

**владеть:**

- терминологией в области электрофизики твердого тела;

- навыками работы на современных приборах;

- приемами построения математических моделей электрофизических процессов в твердых телах;

- навыками использования теоретических и экспериментальных знаний для решения различных задач.

В соответствии с учебной программой дисциплины «Электрические свойства твердых тел» ЭУМК рассчитан на 90 часов (общее количество), из которых 48 аудиторных часов: 20 часов лекционных, 10 часов практических занятий, 18 – управляемая самостоятельная работа. Дисциплина входит в модуль «Свойства твердых тел» и изучается во втором семестре.

Комплекс включает в себя:

- теоретический раздел (лекционный материал);

- практический раздел (задачи к практическим занятиям);

- раздел контроля знаний (итоговый тест);

- вспомогательный раздел.

## СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

### **1. Определение твердого тела. Кристаллы**

Понятие твердого тела, его основные свойства: кристаллическая структура и фиксированная температура плавления. Строение кристаллической решетки, силы связи в ней. Возникновение свободных электронов в металлических кристаллах. Электронный газ и его свойства.

### **2. Физические модели твердых тел**

Модель потенциальной ямы Шоттки. Зонная модель. Проводники, полупроводники, диэлектрики в зонной модели. Уровень Ферми. Эффективная масса электрона. Работа выхода. Вольта-потенциал и гальвани-потенциал.

### **3. Поляризация диэлектриков**

Упругая и ориентационная (дипольная) поляризация диэлектриков. Связь поляризации с напряженностью макроскопического поля. Вектор электрической индукции. Влияние диполя на напряженность микрополя. Уравнение Клаузиуса – Моссотти.

### **4. Сегнетоэлектрики. Пьезоэлектричество. Электреты**

Определение сегнетоэлектриков, феноменологическое описание свойств. Теория сегнетоэлектрических явлений. Антисегнетоэлектричество. Основные сведения о пьезоэлектриках. Объяснение пьезоэлектрического эффекта. Способы изготовления, методы измерения и свойства электретов. Объяснение свойств электретов.

### **5. Техническое применение твердых диэлектриков**

Использование диэлектриков в конденсаторах. Запоминающие элементы. Электромеханические преобразователи энергии. Звукосниматели, микрофоны, ультразвуковые датчики. Кварцевые генераторы частоты, кварцевые часы.

### **6. Электрический ток в металлах**

Основные положения классической электронной теории твердых металлов. Формула Друде. Элементы квантовой теории электропроводности металлических проводников. Природа электрического сопротивления. Зависимость сопротивления от температуры. Сверхпроводимость.

### **7. Электрический ток в полупроводниках**

Механизм собственной проводимости полупроводников. Электронная и дырочная проводимости. Температурная зависимость собственной проводимости. Примесная проводимость. Полупроводники  $p$ - и  $n$ -типа. Решеточная модель примесной проводимости. Зонная модель примесной проводимости полупроводников.

### **8. Контактные явления в металлах и полупроводниках**

Явления в контакте металл – проводник  $p$ -типа, металл – проводник  $n$ -типа. Контакт полупроводник – вакуум. Явления в  $p - n$ -переходе в отсутствие тока,  $p - n$ -переход как выпрямитель. Полупроводниковые диоды, транзисторы, тиристоры.

### **9. Поляризация диэлектриков в переменном электрическом поле**

Явления, имеющие место при поляризации диэлектриков в переменном электрическом поле. Поляризация при частотах, используемых в технике. Время релаксации. Потери мощности.

### **10. Поведение диэлектриков при различных частотах**

Временные характеристики упругой поляризации диэлектриков в переменном электрическом поле. Связь диэлектрической проницаемости с дисперсией. Поглощение энергии при резонансных частотах.

## УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА

| Номер раздела, темы                               | Название раздела, темы, перечень изучаемых вопросов      | Количество аудиторных часов |                      |           | Средства обучения (оборудование, учебно-наглядные пособия и др.) | Формы контроля |
|---|--|-----------------------------|----------------------|-----------|--|----------------|
|   |  | Лекции                      | Практические занятия | УСР       |  |                |
| <b>Электрические свойства твердых тел (48 ч.)</b> |  | <b>20</b>                   | <b>10</b>            | <b>18</b> |  | <b>Экзамен</b> |
| 1   | <b>Основы теории строения вещества</b>                   |                             | 4                    | 10        |  |                |
| 1.1   | Резерфордовская модель атома. Теория Бора                |                             |                      | 2         |  | Реферат        |
| 1.2   | Квантово-механическая теория атома. Уравнение Шредингера |                             | 2                    | 2         |  | Реферат        |
| 1.3   | Периодическая система элементов Менделеева               |                             |                      | 2         |  | Реферат        |
| 1.4   | Строение молекул и их спектры                            |                             |                      | 2         |  | Реферат        |
| 1.5   | Электронный газ в кристаллах, критерий вырождения        |                             | 2                    | 2         |  | Реферат        |
| 2   | <b>Строение твердых тел</b>                              | <b>4</b>                    |                      |           |  |                |
| 2.1   | Определение твердого тела. Кристаллы                     | 2                           |                      |           | Мульти-медийный проектор   | Устный опрос   |
| 2.2   | Физические модели твердых тел                            | 2                           |                      |           | Мульти-медийный проектор   | Устный опрос   |
| 3   | <b>Электрические свойства диэлектриков</b>               | <b>6</b>                    |                      |           |  |                |
| 3.1   | Поляризация диэлектриков                                 | 2                           |                      |           | Мульти-медийный проектор   | Устный опрос   |
| 3.2   | Сегнетоэлектрики. Пьезоэлектричество. Электреты          | 2                           |                      |           | Мульти-медийный проектор   | Устный опрос   |
| 3.3   | Технические применения твердых диэлектриков              | 2                           |                      |           | Мульти-медийный проектор   | Устный опрос   |
| 4.  | <b>Явления переноса в твердых телах</b>                  | <b>6</b>                    |                      |           |  |                |
| 4.1   | Электрический ток в металлах                             | 2                           |                      |           | Мульти-медийный проектор   | Устный опрос   |

|          |  |          |   |          |                          |              |
|----------|--|----------|---|----------|--------------------------|--------------|
| 4.2      | Электрический ток в полупроводниках  | 2        | 2 |          | Мульти-медийный проектор | Устный опрос |
| 4.3      | Контактные явления в металлах и полупроводниках                                | 2        |   |          | Мульти-медийный проектор | Устный опрос |
| <b>5</b> | <b>Термоэлектрические, термомагнитные и оптические явления в твердых телах</b> |          |   | <b>8</b> |                          |              |
| 5.1      | Термоэлектродвижущая сила  |          | 2 | 2        |                          | Реферат      |
| 5.2      | Эффект Холла   |          |   | 2        |                          | Реферат      |
| 5.3      | Поглощение света. Фотопроводимость   |          |   | 2        |                          | Реферат      |
| 5.4      | Явление в сильных электрических полях  |          |   | 2        |                          | Реферат      |
| <b>6</b> | <b>Диэлектрики в переменном поле</b>   | <b>4</b> |   |          |                          |              |
| 6.1      | Поляризация диэлектриков в переменном электрическом поле                       | 2        |   |          | Мульти-медийный проектор | Устный опрос |
| 6.2      | Поведение диэлектриков при высоких температурах                                | 2        | 2 |          | Мульти-медийный проектор | Устный опрос |

## ЛЕКЦИОННЫЙ МАТЕРИАЛ

### 1. Определение твердого тела. Кристаллы

Твердое тело характеризуется *кристаллическим строением*, т. е. его молекулы находятся в определенных, геометрически упорядоченных положениях. Второе определение твердого тела, причинно связанное с первым, заключается в том, что у твердых тел существует фиксированная *температура плавления*, при которой жидкая и твердая фазы находятся в равновесии. Для обоих определений твердого тела и его многих свойств несущественно, состоит ли твердое тело из одного кристалла (т. е. представляет собой монокристалл) или из большего числа микроскопически малых кристаллов, т. е. имеет поликристаллическую структуру, какой обычно обладают металлы при использовании обычных методов выплавки и обработки. Если отдельные кристаллы расположены не беспорядочно, а определенным образом ориентированы относительно друг друга, то говорят о текстуре (например, о волокнистой текстуре). Для получения монокристаллов применяют специальные методы, которые обычно заключаются в том, что кристалл вытягивается с постоянной скоростью из расплава.

Если кристаллическая структура отсутствует, а молекулы, образующие тело, расположены в пространстве совершенно беспорядочно, то говорят об *аморфном* состоянии. Аморфное тело нельзя рассматривать как твердое тело, хотя по некоторым свойствам такие тела (например, стекло) близки к типичным твердым телам, даже к металлам (прочность, хрупкость).

Строение кристалла можно описать как упорядоченное пространственное расположение точек, образующих так называемую кристаллическую решетку. Эти точки могут быть заняты атомами, ионами или атомными комплексами. Для определения положения узлов решетки целесообразно действовать следующим образом: сначала введем систему координат, оси которой ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ) образуют друг с другом углы  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ . На каждой оси определим единичный вектор (орт.). Эти векторы имеют длину  $a$ ,  $b$  и  $c$ . Откладывая многократно единичный вектор по какой-либо одной из осей, мы получим *прямую*. Откладывая эти векторы в плоскости, определяемой двумя осями координат, получим *плоскость решетки*; наконец, проводя аналогичное построение в пространстве, получим *пространственную решетку*. Объем, ограниченный единичными векторами  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , называют *элементарной ячейкой*. Из этих элементарных ячеек и состоит вся кристаллическая решетка.

Исходя из этих основных положений, можно показать, что существует семь кристаллических систем, которые различаются величиной единичных векторов и углов между осями координат (таблица 1.1).

Таблица 1.1 – Основные характеристики семи кристаллических систем

| Наименование      | Величина единичных векторов $a, b, c$ | Углы между осями $\alpha, \beta, \gamma$          |
|-------------------|---------------------------------------|---|
| 1. Трикоинная     | $a, b, c$ любые                       | любые, но не $90^\circ$                           |
| 2. Моноклинная    | $a, b, c$ любые                       | $\alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ |
| 3. Ромбическая    | $a, b, c$ любые                       | $\alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$              |
| 4. Тетрагональная | $a = b, c$ любое                      | $\alpha = \gamma = \beta = 90^\circ$              |
| 5. Тригональная   | $a = b = c$                           | $\alpha = \gamma = \beta \neq 90^\circ$           |
| 6. Гексагональная | $a = b, c$ любое                      | $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$   |
| 7. Кубическая     | $a = b = c$                           | $\alpha = \gamma = \beta \neq 90^\circ$           |

Данные, приведенные в таблице 1.1 и на рисунке 1.1, позволяют получить представление о геометрических соотношениях в элементарных ячейках различного типа.

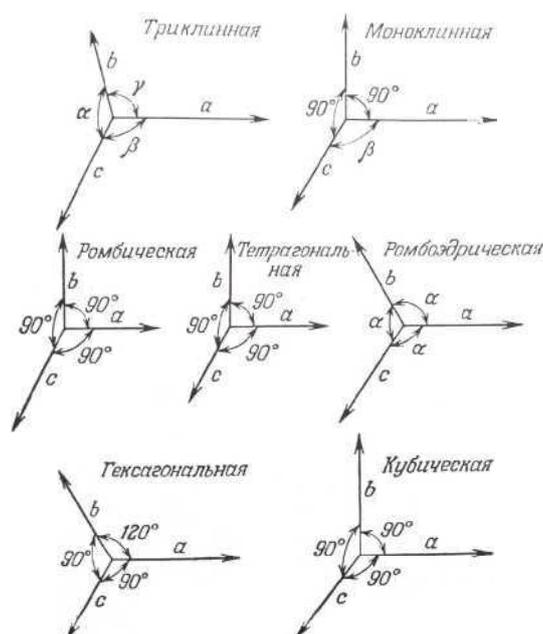


Рисунок 1.1 – Элементарные ячейки семи основных кристаллических систем

Длины единичных векторов  $a, b$  и  $c$  элементарной ячейки (постоянные решетки) могут быть с очень высокой точностью (до  $10^{-6}$ ) определены рентгенографически. Так же хорошо могут быть измерены углы  $\alpha, \beta, \gamma$ . Постоянные решеток в большинстве случаев почти равны диаметру атомов, из которых состоит кристалл. Таким образом, атомы в кристалле упакованы очень плотно. Следует учитывать, что при построении

кристалла атомы или атомные группы могут располагаться не только в вершинах элементарной ячейки, но и в середине определенных плоскостей. Это значительно увеличивает число возможных структур. В зависимости от того, находятся ли атомы в центре двух противоположных граней, или в центрах всех граней элементарной ячейки, или в центре (центре тяжести) самой элементарной ячейки, различают *базоцентрированную, гранецентрированную и объемноцентрированную* решетки.

Из числа наиболее интересных для нас с точки зрения проводимости веществ одновалентные металлы, т. е. *щелочные металлы* Li, Na, K, Rb, Cs, кристаллизуются в объемноцентрированной кубической решетке. Двухвалентные металлы, к которым относятся такие *хорошие проводники*, как медь, серебро и золото, обладают гранецентрированной кубической решеткой. Более сложную структуру имеет кристаллическая решетка германия и кремния, веществ, используемых в *полупроводниковой технике*. Их решетка представляет собой две вложенные одна в другую гранецентрированные кубические решетки, т. е. здесь мы имеем *решетку алмаза*, названную так по своему главному представителю.

Поскольку при учете возможного расположения атомов в центрах граней и в центре элементарной ячейки не всегда получаются новые решетки, полное число различных решеток равно не 28, а 14, что можно показать при помощи геометрических соображений.

В зависимости от химического состава в стабильном кристалле действуют разные силы связи. В кристаллах различают три типа связей: ионную, металлическую и ковалентную. Наиболее проста для понимания *ионная связь*. Типичными представителями веществ с этим типом связи могут служить кристаллы галогенидов щелочных металлов, например NaCl. Вследствие передачи электрона от атома щелочного металла атому галоида возникают ионы обоих знаков. Силы связи имеют электростатическую природу, причем на больших расстояниях преобладает притяжение, а на малых, наоборот, отталкивание, поскольку электронные оболочки внедряются друг в друга так, что начинает преобладать отталкивание положительно заряженных ядер. В равновесии устанавливается некоторое определенное среднее расстояние между ионами. Этот тип связи встречается преимущественно в кубических и гексагональных решетках.

*Металлическая связь*, обеспечивающая прочные связи в металлическом кристалле и представляющая особый интерес с точки зрения огромной проводимости металлов, также имеет электростатическое происхождение. Для этого рода связи существенно то обстоятельство, что при образовании кристалла атомы металла отдают один или несколько электронов из электронной оболочки (в зависимости от химической

валентности) и превращаются в положительно заряженные ионы. Таким образом, атомы ионизируются, причем даже при очень низких температурах ионизация оказывается полной, т. е. степень ионизации равна единице. (Объяснение этого факта будет дано позже.) Отданные атомами электроны свободно перемещаются внутри кристалла. Они принимают участие в неупорядоченном тепловом движении и в других отношениях также ведут себя подобно газу. Поэтому можно говорить об *электронном газе*.

Эти коллективизированные свободные электроны следует четко отличать от гораздо более многочисленных электронов, остающихся в атомных остовах. Существованием электронного газа объясняются особые оптические и электрические свойства металлов – высокая отражательная способность в видимой области, большая проводимость. Это же позволяет понять существование связи в металлических кристаллах, способной противостоять значительным по величине кулоновским силам отталкивания, действующим, естественно, между ионами. Свободные электроны экранируют кулоновские поля положительно заряженных ядер. Мы уже видели ранее, что экранирующее воздействие некоторой совокупности носителей заряда определяется дебаевской длиной. Применяя соотношение к электронному газу в металле, например в натрии, получаем, что для  $n = 2,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$  при комнатной температуре дебаевская длина  $L_D = 0,54 \cdot 10^{11} \text{ м}$ . Таким образом, она существенно меньше расстояния между двумя соседними атомными ядрами, даже если температура достигает нескольких тысяч градусов. Поэтому свободные электроны обеспечивают полную экранировку. Они образуют своего рода цемент, прочно скрепляющий кристаллическую структуру металла. Металлические кристаллы обладают такой же плотной упаковкой, как ионные кристаллы, поэтому металлы обычно имеют кубические или гексагональные решетки.

*Гомеопольярную, или ковалентную, связь* мы встречаем у химически однородных веществ, полупроводников или диэлектриков, например у германия, кремния, алмаза и т. д. Силы связи в этом случае уже нельзя объяснить на основе классических представлений ввиду того, что здесь отсутствуют свободные электроны, которые могли бы эффективно экранировать силы отталкивания. Гомеопольярная связь обуславливается *квантово-механическими обменными силами*, которые при определенных условиях, а именно при определенных межатомных расстояниях, могут стабилизировать решетку.

Если мы рассматриваем свободный атом, т. е. атом газа, то работа, затрачиваемая на отрыв электрона от атома, довольно велика (5–25 эВ). Однако в металлических кристаллах свободные электроны существуют даже при очень низких температурах. Отсюда следует, что при

объединении большего числа атомов в кристалл потенциал ионизации заметно снижается; таким образом, согласно уравнению Эггерта – Саха, уже при очень низких температурах возможна практически полная ионизация. Это снижение потенциала ионизации почти до нуля при сильном сближении многих атомов обусловлено процессом, аналогичным эффекту Шоттки, а именно изменением формы потенциального барьера атома под влиянием поля соседнего атома. При этом следует иметь в виду, что расстояние между атомами в решетке приблизительно равно радиусу электронной оболочки, так что *возмущением* со стороны соседнего атома более нельзя пренебрегать. Мы обладаем основными сведениями относительно характера изменений потенциала поля ядра. Ранее была определена потенциальная энергия электрона атома водорода как функция расстояния последнего от ядра. При этом потенциальная энергия, естественно, соответствует невозмущенному кулоновскому полю точечного заряда, т.е. потенциал изменяется пропорционально  $1/r$ . В атомах с более высоким атомным номером поле ядра деформируется вследствие воздействия полей электронов оболочки, так что характер изменения потенциала  $\varphi(r)$  уже не будет столь простым. Тем не менее в основном сохраняется воронкообразная форма потенциальной ямы, как это схематически показано на рисунке 1.2 для атома натрия (следует представить, что эта фигура вращается вокруг оси симметрии).

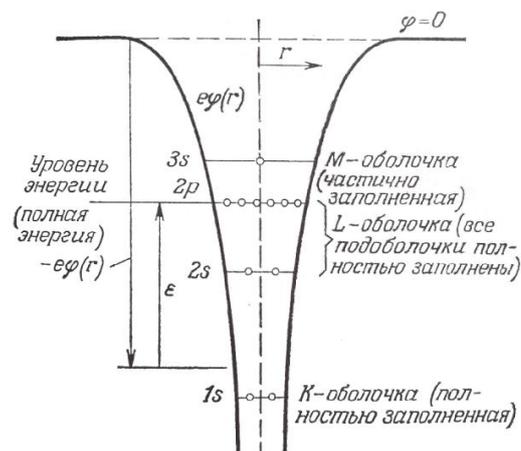


Рисунок 1.2 – Потенциальная яма и распределение электронов в атоме натрия

Потенциальная энергия электрона «наверху»  $e\varphi(r)$  отрицательна вследствие отрицательного знака заряда электрона и стремится при  $r = 0$  к  $-\infty$ . На схеме указана также заселенность уровня электронами. В натрии

нужно разместить в общей сложности 11 электронов. Полную энергию каждого электрона в оболочке, т. е. его *терм*, можно определить, как это показано на рисунке 1.2, добавляя к отрицательной потенциальной энергии положительную – кинетическую, которой соответствует направленная вверх стрелка  $\epsilon$ . Заселенность термов определяется, как всегда, принципом Паули. В соответствии с этим как *K*-, так и *L*-оболочка натрия полностью заполнены, тогда как *M*-оболочка содержит только один электрон, называемый *валентным* или *оптическим*.

Если теперь много таких атомов объединяются в некое кристаллическое образование, то их потенциалы, являющиеся скалярами, складываются аддитивно; в результате возникает состояние, схематически изображенное на рисунке 1.3. Здесь приведено только одномерное упорядоченное расположение атомов, т. е. не существующий в действительности «линейный» кристалл. Легко видеть, что результирующая кривая, описывающая изменение потенциала (обозначенная пунктиром), всюду смещена в сторону больших значений  $\varphi(x)$ , поэтому нигде внутри атомной цепочки потенциал не равен нулю. Это смещение будет еще больше, т. е. максимумы потенциала сдвинутся еще ниже, если рассматривать реальный трехмерный кристалл, так как тогда следует учитывать возмущения во всех трех направлениях.

Вследствие описанной деформации потенциала отрыв *3s*-электрона от атома не требует дополнительных энергетических затрат, т. е. энергия ионизации равна нулю, так как теперь препятствующий этому потенциальный барьер имеет меньшую высоту (рисунок 1.3). Валентные электроны можно считать вполне свободными, они образуют *электронный газ*.

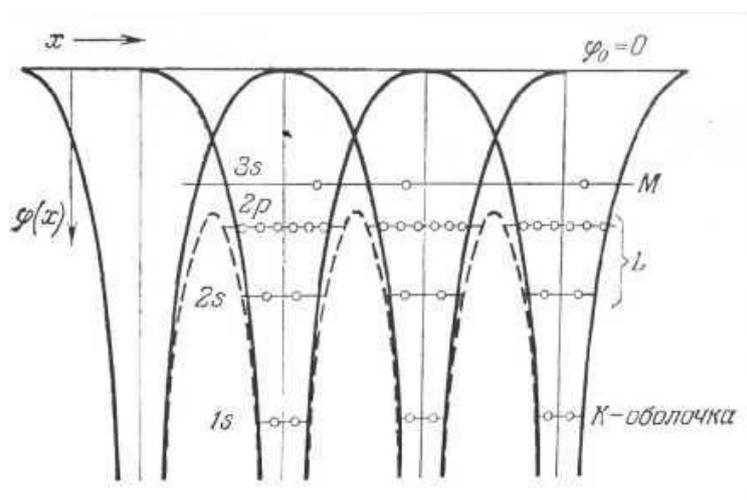


Рисунок 1.3 – Изменения потенциала вдоль атомной цепочки в решетке натрия

Электроны, находящиеся на более глубоко лежащих оболочках (1s, 2s и 2p), расположены ближе к ядру и поэтому связаны столь прочно, что деформация потенциала, обусловленная возмущающим воздействием ближайших соседей, недостаточна, чтобы вырвать их из сферы притяжения ядра. Поэтому эти электроны остаются *связанными*.

Электроны, образующие электронный газ, могут принимать участие в дрейфе под влиянием приложенного внешнего электрического поля, создавая ток проводимости. Поэтому эти электроны называют также *электронами проводимости*. В принципе дрейф мог бы возникнуть и за счет диффузии электронов, если бы в объеме существовал перепад концентрации электронов. У металлов, обладающих хорошей проводимостью, заметный перепад концентрации электронов проводимости, как правило, не наблюдается, за исключением особых случаев. Ввиду огромной концентрации электронов проводимости (она равна концентрации атомов в кристаллической решетке и в натрии составляет примерно  $2,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ ) и их достаточно большой подвижности возникает чрезвычайно высокая проводимость, которая, как известно, характерна для хороших металлических проводников.

Ранее уже приводились некоторые данные относительно *распределения скоростей*, или *энергий*, электронов проводимости. Было показано, что электронный газ полностью вырожден и потому описывается не классической статистикой Максвелла – Больцмана, а статистикой Ферми, основанной на квантово-механических представлениях. Как было показано выше, вырождение обусловлено, с одной стороны, огромной концентрацией частиц, а с другой – чрезвычайно малой массой последних. Распределение кинетической энергии  $\varepsilon$  при этих условиях описывается соотношением:

$$F(\varepsilon) = 8\pi\sqrt{2} \frac{m^{3/2}}{h^3} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{1 + \exp[(\varepsilon - \mu)/kT]} d\varepsilon$$

Входящая сюда константа  $\mu$ , так называемый *уровень Ферми*, по порядку величины составляет несколько электронвольт. Об уровне Ферми мы будем говорить более подробно при рассмотрении полупроводников. При  $T=0$  уровень Ферми представляет собой границу энергетического распределения электронов. Для этой температуры его легко определить путем интегрирования:

$$n = \int_0^{\mu} F(\varepsilon) d\varepsilon.$$

На рисунке 1.4 приведено распределение Ферми при абсолютном нуле для нескольких хорошо проводящих металлов. При комнатной температуре вид кривых несколько изменяется, а именно края скругляются, т. е. спад становится менее резким.

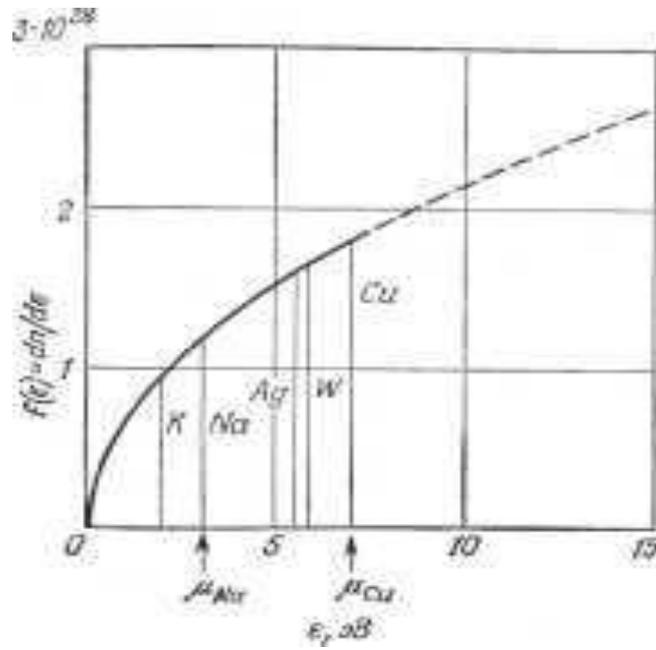


Рисунок 1.4 – Распределение Ферми для электронов проводимости в различных металлах при 0 К

## 2. Физические модели твердых тел

Электроны проводимости могут свободно двигаться внутри кристалла, а также внутри конгломерата кристаллитов, тогда как выход из металла в окружающий газ или в вакуум им запрещен. Это непосредственно следует из предоставленного на рисунке 2.1 изменения потенциала внутри кристалла. На обоих концах атомной цепочки спад потенциала уже не выравнивается соседним атомом и поэтому проявляется в полной мере. Таким образом, как и в случае свободного атома, потенциал достигает на поверхности металла нулевого значения. Чтобы преодолеть этот потенциальный барьер у поверхности и выйти в вакуум, свободный электрон должен совершить определенную работу. Это и есть *работа выхода*. Она составляет по порядку величины несколько электронвольт. Описанное положение вещей можно наглядно представить с помощью предложенной Шоттки модели потенциальной ямы. Для рассмотрения вопросов, связанных с эмиссией электронов, можно сначала в первом приближении заменить периодически изменяющийся внутри кристалла потенциал постоянным. Положительным значением потенциала будем откладывать вниз, чтобы к электрону можно было применить модель шарика, обладающего некоторой массой и находящегося в поле силы тяжести.

Если внешнему пространству, для краткости называемому вакуумом, приписать нулевой потенциал, то изменение потенциала  $\varphi(x)$  в сечении металлического листка будет выглядеть так, как это схематически представлено на рисунке 2.1.

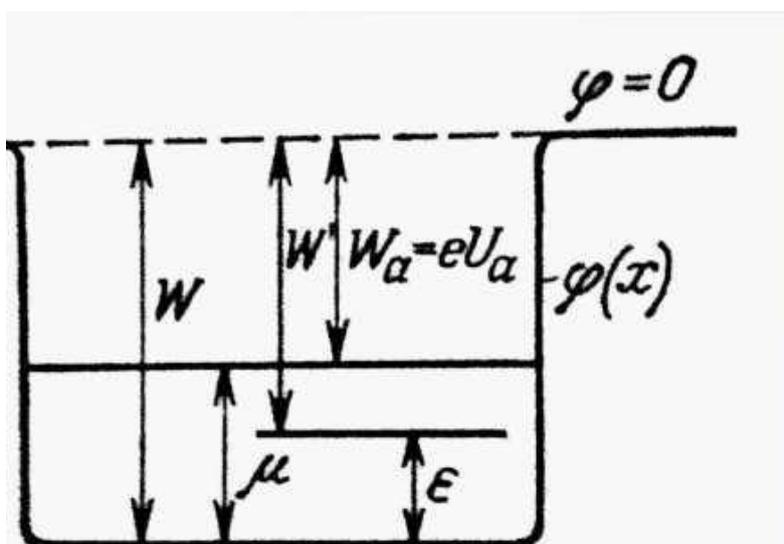


Рисунок 2.1 – Модель распределения потенциала в металле по Шоттки (потенциальная яма)

Потенциал имеет вид потенциальной ямы, края которой изогнуты под прямым углом; а на значительном расстоянии от ямы потенциал равен нулю. Электронный газ, находящийся в этой яме, можно рассматривать как тяжелую жидкость. Расстояние от дна ямы является мерой кинетической энергии  $\epsilon$  электронов. Поскольку при  $T = 0$  распределение Ферми характеризуется четкой верхней границей для кинетической энергии электронов, «электронный пруд» может заполнить яму только до этой высоты и, подобно истинной жидкости, должен обладать резкой границей. Однако при более высоких температурах распределение по энергиям будет расплываться, так что по мере увеличения  $T$  все возрастающее число электронов будет обладать энергией, превышающей  $\mu$ .

Весьма важным следствием плотной упаковки атомов в кристалле и обусловленного этим интенсивного взаимодействия между соседними атомами является расщепление узких энергетических уровней (термов), характерных для атомов, в энергетические зоны, обладающие чрезвычайно тонкой структурой. Такое свойство проявляется не только у хорошо проводящих металлов, но и у полупроводников и диэлектриков. Число уровней, возникающих из одного терма, равно числу атомов в рассматриваемом кристаллическом объеме. Таким образом, оно чрезвычайно велико, поскольку, например, в  $1 \text{ см}^3$  натрия содержится  $2,5 \cdot 10^{22}$  атомов. На такое же число энергетических уровней расщепляется один атомный терм. Поскольку даже кристаллы, применяемые в микроэлектронике и обладающие обычно весьма малыми размерами, все же содержат очень много атомов, число энергетических уровней в зоне достаточно велико, а различие в энергии между соседними уровнями достаточно мало для того, чтобы такую *энергетическую зону* можно было рассматривать как квазинепрерывную последовательность дискретных термов. Энергетическое расстояние между уровнями в зоне всегда значительно меньше средней тепловой энергии  $kT$ .

Расщепление атомного терма в квазинепрерывную энергетическую зону объясняется тем, что на электроны в кристалле воздействует периодически изменяющийся в объеме потенциал  $V(x, y, z)$ , связанный с упорядоченным расположением атомов или ионов в решетке. Этот потенциал действует как на электроны проводимости, которые, следовательно, нельзя считать совершенно свободными, так и на связанные электроны внутренних оболочек, добавляясь к потенциалу ядра. Поле решетки взаимодействует с электронными волнами, распространяющимися по кристаллу, и поэтому оказывает существенное влияние на кинетику электронов. Такое взаимодействие приводит к *дифракционным* и *интерференционным* явлениям, давно известным

в обычной и рентгеновской оптике. В данном случае речь идет о пространственном расположении элементов решетки, вызывающих дифракцию. Таким образом, в качестве аналога следует рассматривать не оптическую плоскую решетку, а скорее систему кристаллическая решетка – рентгеновское излучение. Это сравнение соответствует и количественным соотношениям, так как длина волны электронов в кристалле по порядку величины равна длине волны рентгеновского излучения. Расстояние между узлами решетки в кристалле также сравнимо с длиной волны электронов в кристалле. Поэтому можно распространить результаты, полученные в рентгеновской спектроскопии, на обсуждение проблемы спектроскопии дебройлевских (электронных) волн. В особенности важное значение имеет уравнение Вульфа – Брэгга, которое показывает, что отражение рентгеновских волн от атомных плоскостей кристалла происходит в некотором преимущественном направлении. Волны, отраженные в этом направлении, усиливаются благодаря интерференции, поэтому только они имеют значение. Уравнение Вульфа – Брэгга имеет вид

$$2d \sin \theta = n\lambda = \frac{n2\pi}{k} \quad (2.1)$$

Здесь  $d$  – расстояние между атомными плоскостями,  $\theta$  – угол скольжения, т. е. угол между направлением падающего луча и атомной плоскостью,  $\lambda$  – длина волны и  $k = 2\pi/\lambda$  – волновое число,  $n$  – целое число, указывающее порядок интерференции.

Нас интересует *спектр энергии электронов*, т. е. распределение полной энергии  $W$  электронов по длинам волн  $\lambda$ , или, лучше, по волновым числам  $k$ . Таким образом, речь идет о вычислении функции  $W(k)$ . Для свободных электронов, т. е. без учета взаимодействия с решеткой, она имеет вид

$$W = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.2)$$

Энергия свободного электрона возрастает квадратично с ростом волнового числа  $k$ , так что геометрическая функция  $W(k)$  изображается параболой (рисунок 2.2).

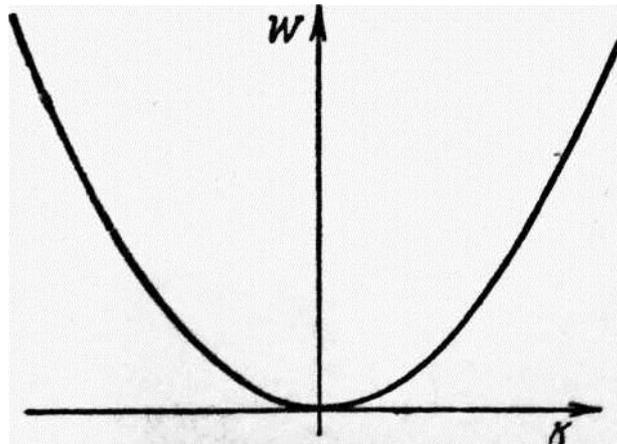


Рисунок 2.2 – Зависимость энергии свободных электронов от волнового числа

Для *импульса*, естественно, опять получаем

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi} = m\nu, \quad (2.3)$$

или в векторном выражении

$$p = \frac{h}{2\pi} k, \quad (2.4)$$

а для *скорости* электрона имеем

$$\nu = \frac{h}{m\lambda} = \frac{hk}{2\pi m}. \quad (2.5)$$

Эти простые соотношения непригодны для описания электронов в кристалле, на которые влияет периодическое поле решетки. Чтобы получить выражение  $W(k)$ , нужно решить уравнение Шредингера, введя в него потенциал  $V(x, y, z)$ , который является периодической функцией координат, т. е. радиус-вектора  $r$ , и, кроме того, зависит, конечно, от структуры кристалла. В настоящее время это решение получено строго лишь для простого частного случая *одномерной* решетки, где все параметры зависят только от одной координаты. Тогда условие интерференции Вульфа – Брэгга переходит в условие Лауэ

$$n\lambda = 2a, \quad (2.6)$$

где  $a$  – постоянная решетки (расстояние между узлами решетки), а  $n$  – целое число. Однако для трехмерных решеток (каковые только и существуют в действительности) можно получить удовлетворительное приближенное решение. При этом оказывается, что решение уравнения Шредингера всегда можно привести к виду

$$\psi(r, k) = u(r, k) e^{jk \cdot r}, \quad (2.7)$$

где функция  $u(r, k)$  имеет ту же периодичность, что и потенциал  $V(r)$  в кристалле. Для решения нашего вопроса о причине возникновения энергетических зон принципиальное значение имеет то обстоятельство, что решение  $\psi(r, k)$  существует при действительных значениях  $k$  только в том случае, когда полная энергия лежит внутри определенных, четко отделенных друг от друга областей, которые эквивалентны нашим зонам. Как видно, при действительном значении  $k$  мы имеем *незатухающую* волну, амплитуда которой модулируется в соответствии с периодом решетки. Если же энергия лежит вне энергетической зоны, т. е. в «запрещенной» зоне, то  $k$  имеет комплексную величину и волна экспоненциально затухает. Таким образом, квантово-механическое рассмотрение показывает, что энергетический спектр электронов должен представлять собой последовательность (теоретически бесконечную) чередующихся разрешенных и запрещенных энергетических зон.

Выше мы дали точное теоретическое объяснение зонной структуры кристалла. Приведем теперь некоторые соображения, связанные с уже известными фактами. Это позволит нам качественно представить себе зонный механизм, или понять само существование зон. Это можно сделать двумя путями.

Одно объяснение исходит из того, что, согласно квантовой механике, между энергией и частотой колебаний существует соотношение

$$W = hf, \quad (2.8)$$

справедливость которого столь убедительно подтвердилась при анализе линейчатых спектров. В соответствии с этим кристалл, состоящий из  $N$  атомов, можно представить как систему из  $N$  колеблющихся объектов (осцилляторов) типа механических маятников или электрических колебательных контуров, имеющих одинаковую частоту. Все эти  $N$  объектов взаимодействуют друг с другом, т. е. связаны. Как показывает элементарная теория колебаний, в этом случае в системе возникают новые частоты, число которых равно числу осцилляторов, т. е.  $N$ . В этой модели

снова используется представление о коллективных взаимодействиях, распространяющихся на весь кристалл. Можно сказать, что  $N$  атомов кристалла образуют некоторую статистическую совокупность. Если теперь принять, что каждой из  $N$  близких друг к другу частот отвечает энергетический уровень, то таким образом можно объяснить расщепление терма.

Другое наглядное объяснение возникновения зон основано на применении *принципа Паули*, согласно которому в квантовом объекте (атоме или молекуле) одним и тем же определенным значением энергии могут обладать максимум два электрона в соответствии с двумя спиновыми ориентациями. Эта модель также основана на представлении о кристалле как об одном макроатоме, в котором событие, происходящее в каком-либо месте, определяется всеми элементами системы. Если бы в таком комплексе остался нерасщепленным какой-то энергетический уровень, например терм атома натрия с двумя  $2s$ -электронами (рисунок 1.2), то, поскольку в кристалле такой энергией обладают  $2N$  электронов, этот терм был бы  $N$ -кратно перенаселен. Чтобы выполнялся принцип Паули, указанный терм должен расщепиться на  $N$  расположенных рядом уровней энергии. То же самое справедливо не только для заполненных, но и для всех расположенных выше незаполненных термов, поскольку на этих термах должно иметься  $M$  свободных мест, которые при известных условиях могут быть заняты электронами (например, в результате возбуждения).  $3s$ -уровень атома натрия, на котором находится единственный электрон, также расщепляется на  $2N$  энергетических уровней, однако в нормальном состоянии только половина из них заполнена. Ниже мы увидим, что такие *наполовину заполненные зоны* играют особую роль при прохождении электрического тока.

Явление расщепления, или уширения, энергетических уровней вследствие воздействия возмущающих полей известно в спектроскопии уже давно. Уширение спектральных линий при увеличении плотности газа в значительной мере обусловлено этим эффектом. При увеличении плотности газа уменьшается среднее расстояние между молекулами, поэтому возмущающее взаимодействие между молекулами возрастает.

Вернемся теперь к распределению энергии  $W(k)$ , из которого, как будет показано, можно получить другие кинетические и динамические параметры, характеризующие электроны в кристалле. Приближенные расчеты дают для всех энергетических зон кристалла зависимость  $W(k)$ , близкую косинусоидальной, как это представлено на рисунке 2.3 для трех нижних зон.

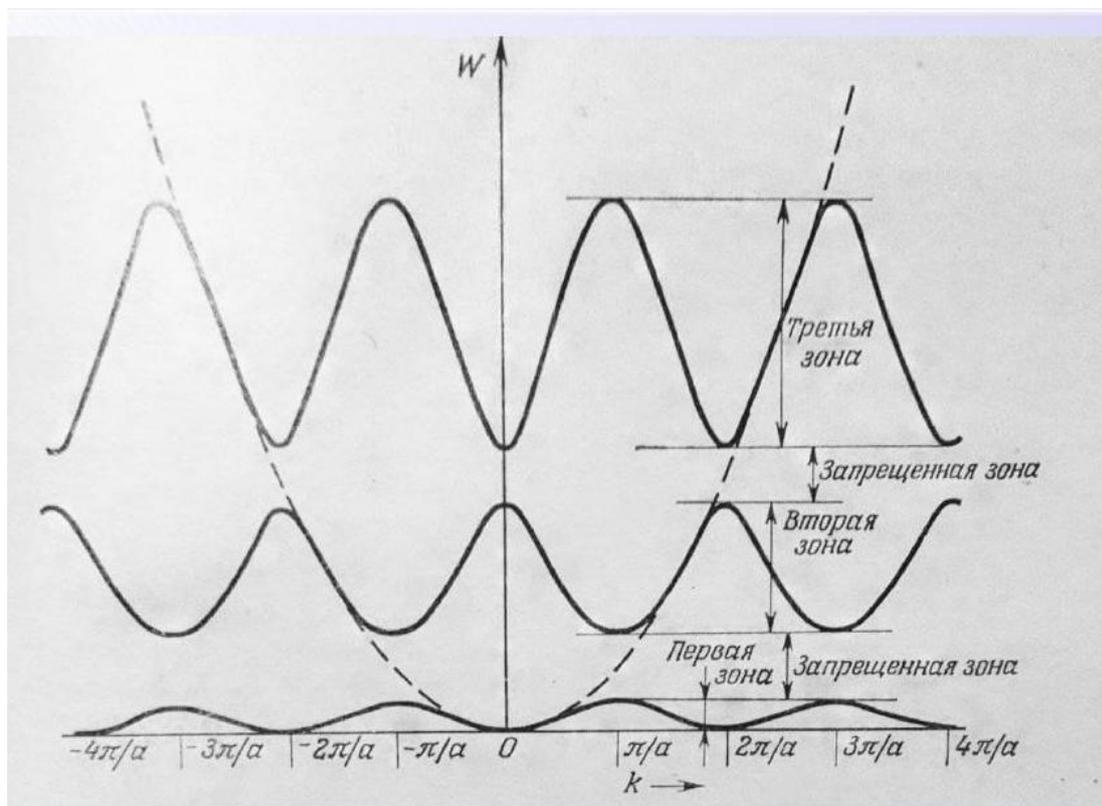


Рисунок 2.3 – Энергетический спектр трех первых зон (схематически)

Пунктирная кривая изображает параболическую зависимость энергии свободных электронов от волнового числа.

Эти кривые наглядно показывают деформацию энергетического спектра свободных электронов, обусловленную учетом их взаимодействия с кристаллической решеткой.

По энергетическому спектру  $W(k)$  теперь можно сразу же рассчитать *скорость* и *импульс* электронов. При этом следует учитывать, что скорость у электрона всегда совпадает с *групповой скоростью*  $v_g$  его дебройлевской волны. Последняя связана с *фазовой скоростью*  $v_p$  соотношением, известным любому специалисту, занимающемуся высокими частотами:

$$\frac{1}{v_g} = \frac{d}{d\omega} \left( \frac{\omega}{v_p} \right). \quad (2.9)$$

Учитывая, что

$$v_p = \frac{\lambda\omega}{2\pi} = \frac{\omega}{k}, \quad (2.10)$$

имеем

$$\frac{1}{v_p} = \frac{dk}{d\omega}, \quad (2.11)$$

или

$$v_p = \frac{d\omega}{dk}. \quad (2.12)$$

Если вместо частоты подставить соответствующую ей энергию, то в конце получим для скорости электрона

$$v = v_g = \frac{2\pi}{h} \frac{dW}{dk}. \quad (2.13)$$

В векторной форме можно записать

$$v = \frac{2\pi}{h} \text{grad}_k W. \quad (2.14)$$

В соответствии с этим импульс

$$p = mv = \frac{2\pi m}{h} \text{grad}_k W. \quad (2.15)$$

Относительно *ширины энергетических зон* теория в полном соответствии с экспериментом показывает, что при увеличении энергии или при увеличении расстояния электронов от атомного ядра ширина разрешенных энергетических зон возрастает, а ширина лежащих между ними *запрещенных зон*, наоборот, уменьшается. В связи с этим следует напомнить, что термы даже прочно связанных с атомами электронов расщепляются в зоны, причем эти полностью заполненные зоны имеют тем меньшую ширину, чем ближе к ядру расположены электроны, т. е. чем прочнее они связаны с ядром.

При более сильном уширении энергетических уровней запрещенные зоны при известных обстоятельствах могут полностью перекрыться. В таком случае говорят о *перекрытии* (наложении) разрешенных зон. Тогда один электрон может одновременно принадлежать нескольким зонам, так что переход от одной зоны к другой будет происходить без изменения энергии. Такое перекрытие мы имеем, например, в решетках натрия и меди. У натрия (рисунок 2.4) наполовину заполненная (на схеме

заштрихована)  $3s$ -зона перекрывается с пустой  $3p$ -зоной, а также со всеми зонами, находящимися выше, которые здесь не обозначены. Конечно, при  $T = 0$  электроны не могут достигать  $3p$ -зоны, так что она не заселена, но по мере увеличения температуры в нее попадает все большее число электронов.

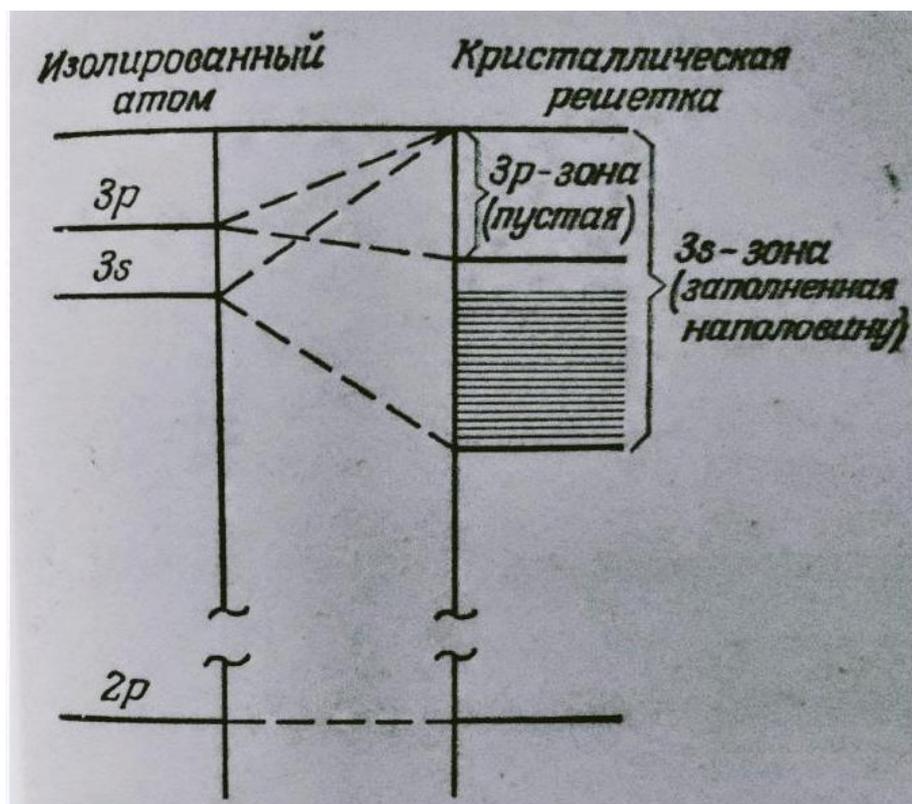


Рисунок 2.4 – Расщепление энергетического уровня в энергетическую зону и увеличение ширины зоны с ростом энергии

У меди полностью заполнены все подоболочки, включая  $3d$  (рисунок 2.5), т. е. каждый уровень занят двумя электронами. Однако последняя оболочка ( $4s$ ) содержит только один электрон, т. е. занята только наполовину. На рисунке 2.5 изображены только верхние уровни (начиная с  $3p$ ). Здесь  $3p$ -зона уширена еще весьма незначительно. Наоборот,  $4s$ -уровень расщепляется настолько, что эта зона перекрывается не только со столь же сильно расщепленной заполненной  $3d$ -зоной, но и с совершенно пустой  $4p$ -зоной.

Хотя  $4s$ -зона заполнена электронами, на схеме она не заштрихована, чтобы не усложнять рисунок. Электроны заполняют зону лишь до середины, причем верхний энергетический уровень лежит немного выше верхнего края  $3d$ -зоны. Перекрывание зон играет чрезвычайно важную роль, обуславливая проводимость.

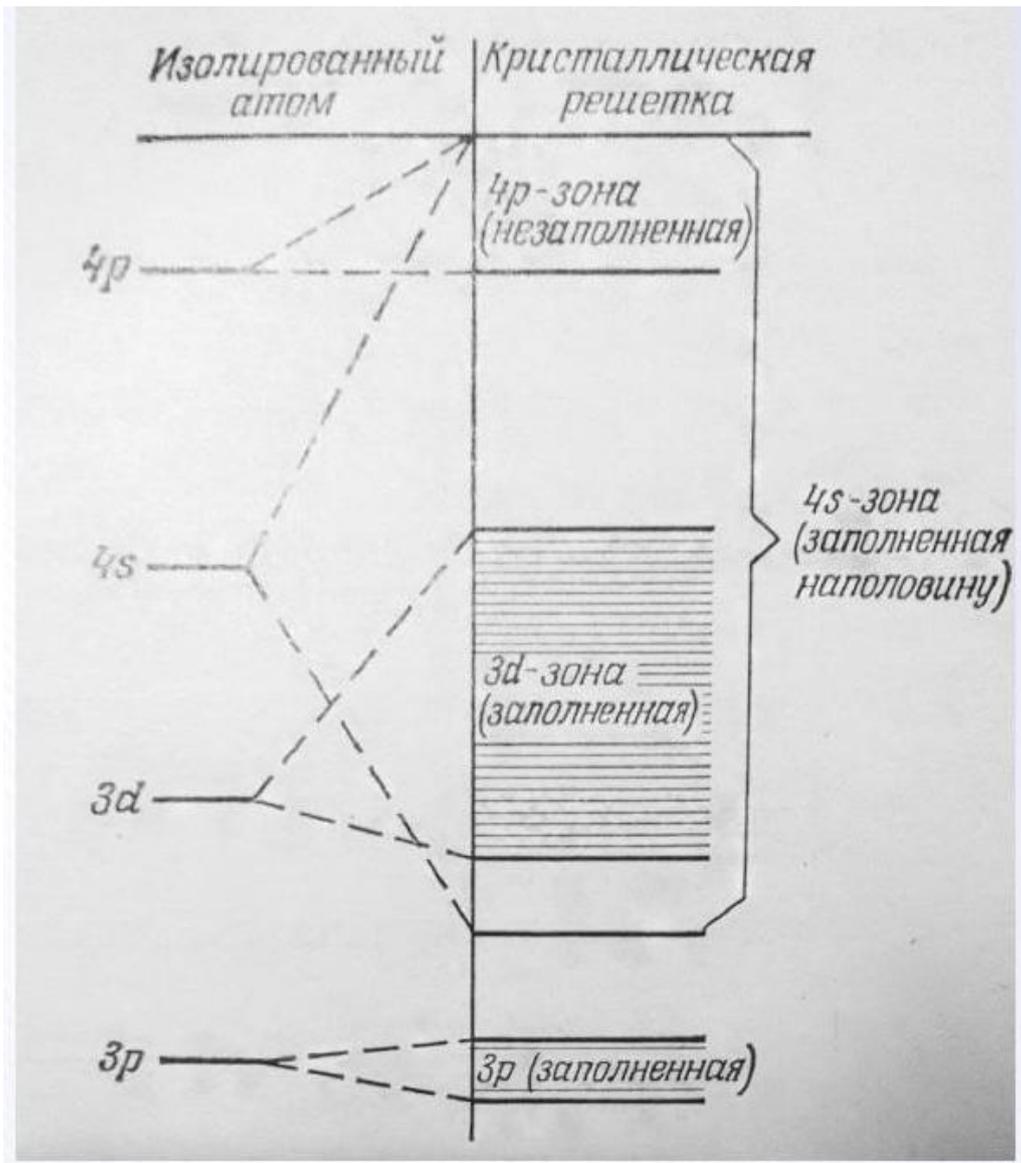


Рисунок 2.5 – Возникновение перекрытия энергетических зон в монокристалле

Проблемой прохождения тока в твердом теле мы займемся позднее, однако уже здесь, исходя из основных представлений зонной модели, можно ввести важнейшие критерии различия между хорошими проводниками (металлами), полупроводниками и диэлектриками. Прохождение электрического тока заключается в том, что при приложении напряжения к твердому телу начинается движение носителей заряда. В твердых телах при этом следует рассматривать только электроны, так как положительно заряженные атомные остатки прочно закреплены в решетке. Для прохождения тока необходимо, чтобы электроны, которые, конечно, участвуют в беспорядочном тепловом движении, под действием поля приобрели

направленную скорость, т. е. чтобы начался *дрейф*. Дрейф накладывается на пространственно изотропное беспорядочное движение и приводит к появлению преимущественного направления средней скорости, каковым является направление, противоположное приложенному полю. В результате кинетическая энергия электронов повышается, или, если пользоваться терминами зонной модели, электроны занимают более высокие энергетические уровни. Может ли происходить такое увеличение энергии, зависит исключительно от структуры энергетических зон и от заселенности их электронами. Если зона полностью заселена электронами, то их энергия не может возрастать, так как отсутствуют необходимые для этого свободные энергетические уровни. Таким образом, целиком заполненная зона не может принимать участия в создании проводимости. Но если целиком заполненная зона перекрывается с незаполненной, то электроны заполненной зоны получают возможность увеличивать свою энергию, так как в этом случае они принадлежат в то же время и незаполненной зоне. Благодаря этому обстоятельству такие вещества должны быть хорошими проводниками, каковыми и являются щелочные металлы, в частности натрий (рисунок 2.4).

В соответствии с этим мы приходим к следующим характерным признакам различных типов проводимости.

1. Хорошие проводники: самая верхняя энергетическая зона либо наполовину заполнена, либо если все зоны заполнены полностью, то по крайней мере одна из них (верхняя) перекрывается с пустой зоной.

2. Диэлектрики: все зоны заполнены полностью, и перекрытия не существует.

3. Полупроводники: занимают промежуточное положение. По зонной структуре полупроводники относятся к диэлектрикам, т. е. их зонная модель состоит из полностью заполненных неперекрывающихся зон. Однако энергетическое расстояние от верхней, полностью заполненной зоны до нижнего края находящейся над ней незаполненной зоны столь незначительно, что некоторые электроны уже при комнатной температуре могут за счет своей тепловой энергии преодолеть запрещенную зону и попасть в незаполненную зону, которая вследствие этого становится *зоной проводимости*. Отличие полупроводников от диэлектриков является, таким образом, только количественным и заключается в том, что ширина запрещенной зоны, которую должны преодолеть электроны, у полупроводников составляет около 1 эВ, а у диэлектриков значительно больше – до 7 эВ. Таким образом, при достаточно высоких температурах любой диэлектрик становится полупроводником. Переход электронов в зону проводимости может быть существенно облегчен в результате введения примеси – *легирования*. В этом случае говорят о *примесной проводимости*.

### 3. Поляризация диэлектриков

Фарадей обнаружил, что емкость конденсатора увеличивается, если пространство между обкладками конденсатора вместо воздуха частично или полностью занято твердым или жидким изолирующим веществом — *диэлектриком*. Относительное увеличение емкости равно относительной *диэлектрической постоянной*  $\epsilon$  (*диэлектрической проницаемости*). При высоких требованиях к точности емкость необходимо относить к значению, полученному при экспериментах в вакууме.

Причиной увеличения емкости является поляризация диэлектрика, т. е. существенное изменение электрического состояния вещества под влиянием внешнего электрического поля. Поляризацию можно связать с элементарными атомными процессами. При этом необходимо различать два вида поляризации: *упругую поляризацию* и *ориентационную поляризацию*. В дальнейшем оба явления будут объяснены при упрощающем предположении, что взаимодействием между соседними молекулами можно пренебречь. Это обычно выполняется, когда среднее расстояние между молекулами достаточно велико, а именно больше расстояния, на которое распространяется действие электрического поля, создаваемого молекулой. Лучше всего это условие выполняется в разреженных газах.

Существуют вещества, молекулы которых сами по себе не имеют собственного электрического дипольного момента и поэтому называются *неполярными*. Момент равен нулю в том случае, когда центр тяжести положительного заряда (ядра) совпадает с центром тяжести отрицательных зарядов (электронной оболочки). К этой группе относятся прежде всего все одноатомные молекулы (инертные газы, пары металлов), кроме того, такие многоатомные молекулы, которые, как известно из структурной химии, имеют симметричное строение. На рисунке 3.1 схематически изображены некоторые симметричные молекулы.

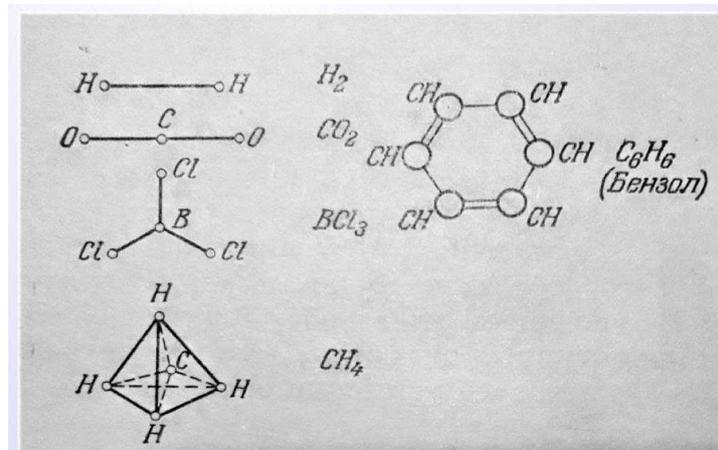


Рисунок 3.1 – Некоторые неполярные молекулы

Если неполярная молекула подвергается действию электрического поля  $E$ , то центры тяжести зарядов смещаются один относительно другого на расстояние  $a$  в направлении приложенного поля, так что теперь молекула имеет электрический дипольный момент

$$p = qa, \quad (3.1)$$

где  $q$  – полный положительный или отрицательный заряд молекулы. Вектор  $p$  направлен от отрицательного к положительному заряду диполя. Так как поле оказывает одинаковое воздействие на все молекулы, то в диэлектрике возникает пространственная поляризация, причем удельный дипольный момент (дипольный момент единицы объема) выражается формулой

$$P = np, \quad (3.2)$$

где  $n$  – концентрация частиц (число частиц в  $1 \text{ м}^3$ .) Вектор  $P / \epsilon_0$  называется *электризацией*.

В дальнейшем предполагается, что смещение зарядов  $a$ , а следовательно, и дипольный момент  $p$  пропорциональны полю  $E$ , т. е. мы имеем упругую деформацию (здесь можно провести аналогию с законом Гука в теории упругости, который также выражает пропорциональность между деформацией и силой). Таким образом, можно записать

$$p = \alpha E, P = n\alpha E, \quad (3.3)$$

где  $\alpha$  – зависящая от вещества постоянная, называемая *поляризуемостью*.

Существуют три вида упругой поляризации: во-первых, электронная оболочка атома может смещаться относительно ядра (*электронная поляризация*), во-вторых, в молекуле, содержащей ионы ( $HCl$ ,  $H_2O$  и т. д.), возможны смещения положительных ионов относительно отрицательных (*ионная поляризация*), в-третьих, в ионной решетке (например,  $NaCl$ ) возможно смещение всей положительной подрешетки по отношению к отрицательной (*поляризация решетки*).

Ориентационная поляризация наблюдается только в таких веществах, молекулы которых имеют электрический дипольный момент в отсутствие поля (*полярные молекулы*). Существование электрических диполей обусловлено определенной асимметрией в строении молекул, приводящей к несовпадению центров тяжести зарядов.

Если  $s$  – расстояние между центрами тяжести зарядов, то для собственного момента молекулы имеем

$$\mu = qs. \quad (3.4)$$

Расстояние  $s$  в этом случае постоянно, т. е. не зависит от напряженности внешнего поля.

Чтобы показать, какие виды асимметрии могут привести к возникновению собственного дипольного момента, на рисунке 3.2 в качестве примера изображены некоторые полярные молекулы. Особенно показательной является структура бензола: бензольное кольцо неполярно вследствие своей совершенной симметрии (рисунок 3.1). Но если, например, атом  $H$  заменен атомом  $Cl$ , то возникает хлорбензол ( $C_6H_5Cl$ ), симметрия нарушается, и молекула становится полярной.

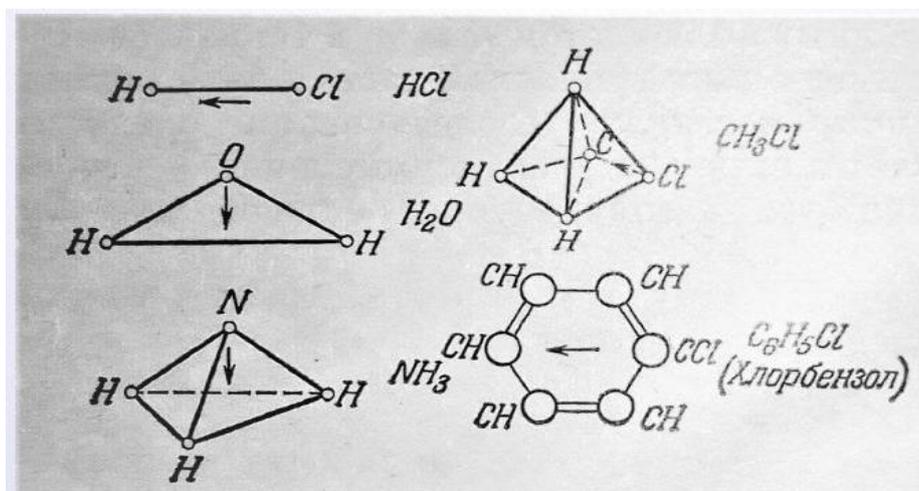


Рисунок 3.2 – Некоторые полярные молекулы

В таблице 3.1 приведены дипольные моменты молекул ряда веществ.

Таблица 3.1 – Электрические дипольные моменты многоатомных молекул

| $\mu \cdot 10^{30}, \text{A} \cdot \text{c} \cdot \text{м}$ | $\mu \cdot 10^{30}, \text{A} \cdot \text{c} \cdot \text{м}$ | $\mu \cdot 10^{30}, \text{A} \cdot \text{c} \cdot \text{м}$ |
|---|---|---|
| $HCl$ 3,6   | $H_2O$ 6,2  | $CH_4O$ 0   |
| $HBr$ 2,6   | $SO_2$ 5,3  | $CH_3Cl$ 6,25   |
| $HI$ 1,3  | $NO_2$ 1,03   | $CH_2Cl_2$ 5,30   |
| $CO$ 0,33   |   | $CHCl_3$ 3,50   |
|   |   | $CCl_4$ 0   |

В полярных веществах в отсутствие поля макроскопическая поляризация, естественно, не возникает, так как электрические дипольные моменты изотропно распределены в пространстве.

Если же наложено электрическое поле  $E$ , то распределение направлений диполей становится анизотропным, так как поле стремится ориентировать молекулярные диполи в направлении  $E$ . Правда, это не вполне удается из-за разупорядочивающего воздействия хаотического *теплового движения*. Следовательно, поляризация определяется равновесием между этими двумя факторами. Значение  $P$  можно определить, пользуясь больцмановским равновесным распределением, а именно соотношением

$$\frac{dN}{N} \sim e^{-U/kT} dU, U = -\mu E \cos\theta, \quad (3.5)$$

выражающим вероятность того, что дипольный момент  $\mu$  образует с полем угол  $\theta$ . Элементарный расчет приводит к следующему выражению для поляризации  $P$  единицы объема:

$$P = \frac{n\mu^2 E}{3kT}. \quad (3.6)$$

Это соотношение соответствует соотношению для парамагнитной восприимчивости  $\sigma$ , в котором также важную роль играет коэффициент  $n\mu_B^2 / 3kT$ .

В то время как в газах и жидкостях даже при наличии сил трения и инерции вполне возможна ориентация диполей, в твердых телах (кристаллах) свобода движения частиц настолько ограничена, что ориентационной поляризацией практически можно пренебречь. С исключениями из этого правила, являющимися аналогами ферромагнетизма, мы познакомимся позже.

Так как в общем случае одновременно могут существовать оба направления поляризации, причем полная поляризация получается в результате аддитивного сложения обеих ее видов, для суммарной поляризации можно написать

$$P = n \left( \frac{\alpha + \mu^2}{3kT} \right) E. \quad (3.7)$$

Вектор  $P$  аддитивно складывается с вектором смещения в вакууме:

$$D = \varepsilon_0 E + P. \quad (3.8)$$

С другой стороны, учитывая упомянутое выше возрастание емкости, запишем выражение, связывающее смещение и напряженность электрического поля

$$D = \varepsilon_0 \varepsilon E, \quad (3.9)$$

откуда получаем

$$\varepsilon_0 E + P = \varepsilon_0 \varepsilon E, \quad (3.10)$$

или

$$(\varepsilon - 1)\varepsilon_0 E = P. \quad (3.11)$$

Величина

$$\chi = \varepsilon - 1 = \frac{P}{\varepsilon_0 E} \quad (3.12)$$

называется диэлектрической восприимчивостью. Используя (3.7), получаем

$$\chi = \varepsilon - 1 = \frac{n}{\varepsilon_0} \left( \alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \right). \quad (3.13)$$

Это соотношение можно проверить экспериментально. Так как только ориентационная поляризация зависит от температуры, то это позволяет простым путем разделить две компоненты поляризации. На рисунке 3.3 представлена зависимость величины  $(\varepsilon - 1)$  от  $1/T$ . Из (3.11) следует, что этой зависимости соответствует прямая, по углу наклона которой можно определить  $\mu$ , а по отрезку, отсекаемому на оси ординат, – величину  $\alpha$ .

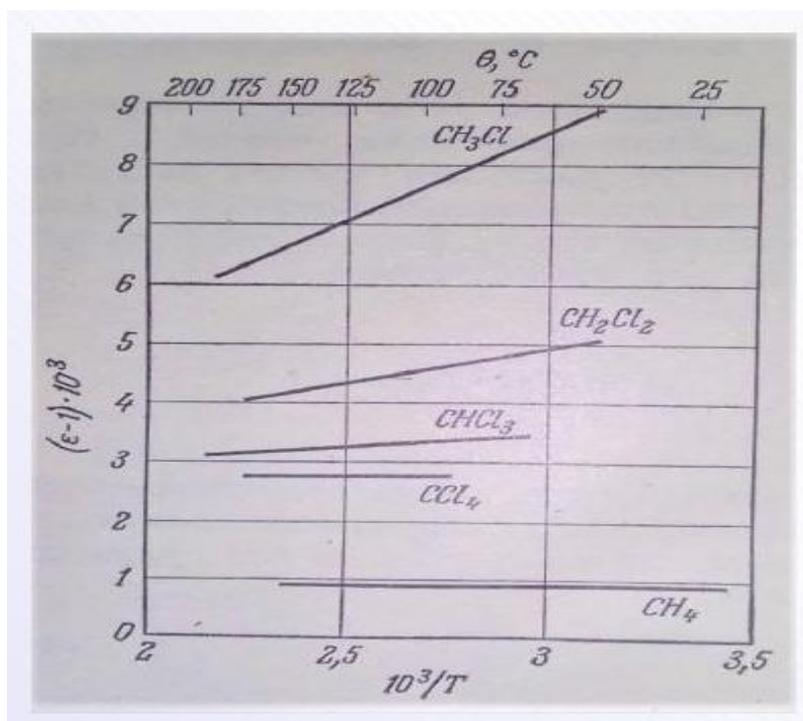


Рисунок 3.3 – Температурная зависимость диэлектрической восприимчивости для некоторых газообразных соединений

В веществах, обладающих высокой плотностью (газы под высоким давлением, жидкости и твердые тела), возмущениями электрического поля, обусловленными наличием диполей, пренебрегать уже нельзя, так как среднее расстояние между молекулами сопоставимо с диаметром молекул. При этом нельзя также считать, что поляризация молекулы определяется *макроскопической напряженностью поля*  $E$ , т. е. напряженностью поля, обусловленной геометрией электродов и величиной приложенного напряжения: на это поле налагается локальное *микрполе*, возникновение которого обусловлено поляризованными молекулами, а структура зависит от взаимного расположения и концентрации молекул. Чтобы по измеренной величине поляризации  $P$  (макроскопической) можно было судить о дипольных моментах молекул, необходимо рассчитать поле, существующее в том месте, где находится молекула, так называемое *локальное поле*  $E'$ . Его можно с достаточной точностью оценить с помощью метода Лоренца (точный расчет до настоящего времени провести не удастся). Локальное поле связано с макроскопическим полем  $E$  соотношением

$$E' = E + \frac{P}{3\epsilon_0}. \quad (3.14)$$

Таким образом, напряженность локального поля всегда больше, чем макроскопического. Само собой разумеется, что справедливо следующее соотношение, вытекающее из теории потенциала:

$$\int_K^A \mathbf{E} \cdot d\mathbf{s} = U_0, \quad (3.15)$$

где  $U_0$ , как и раньше, – напряжение, существующее между создающими поле пластинами  $A$  и  $K$ , так как локальное поле  $E'$  превышает  $E$  лишь в тех местах, где находится молекула. В остальных местах, наоборот,  $E'$  меньше  $E$ .

Учет локального поля требует введения поправок в (3.3) и (3.6), а именно замены  $E$  на  $E'$ . В (3.11), наоборот, сохраняется макрополе  $E$ , так как это соотношение определяет диэлектрическую восприимчивость  $(\varepsilon - 1)$ . Подставляя  $P$  из (3.11) в (3.14), получаем

$$\frac{E'}{E} = 1 + \frac{\chi}{3} = \frac{2 + \varepsilon}{3}. \quad (3.16)$$

Используя соотношение (3.7), которое теперь имеет вид

$$P = n \left( \alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \right) E', \quad (3.17)$$

можно выразить диэлектрическую восприимчивость следующим образом:

$$\chi = \varepsilon - 1 = \frac{P}{\varepsilon_0 E} = \frac{n}{\varepsilon_0} \left( \alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \right) \frac{E'}{E}, \quad (3.18)$$

откуда получим

$$\varepsilon - 1 = \frac{P}{\varepsilon_0 E} = \frac{n}{\varepsilon_0} \left( \alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \right) \frac{\varepsilon + 2}{3}, \quad (3.19)$$

или

$$\frac{\varepsilon_0 - 1}{\varepsilon_0 + 1} = \frac{n}{3\varepsilon_0} \left( \alpha + \frac{\mu^2}{3kT} \right). \quad (3.20)$$

Это соотношение заменяет (3.13) в тех случаях, когда влиянием микрополей нельзя пренебречь. В смеси многих веществ (каждое из которых отмечается индексом  $i$ ) для поляризации справедлив принцип суперпозиции, поэтому выполняется соотношение

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} = \frac{1}{3\varepsilon_0} \sum n_i \left( \alpha_i + \frac{\mu_i^2}{3kT} \right). \quad (3.21)$$

Это соотношение является общей формулировкой закона, выведенного Клаузиусом и Моссогги и названного их именами. Под знаком суммы в правой части содержится вклад всех трех видов упругой поляризации и вклад ориентационной поляризации всех входящих в смесь частей. О характере температурной зависимости уже говорилось выше. Особенно отчетливо влияние температуры проявляется, если внутри температурного интервала, в котором проводятся измерения, находится точка замерзания. При замерзании молекулярные диполи теряют свою подвижность, так что уже не могут ориентироваться по направлению поля. В связи с этим исчезает соответствующая компонента поляризации. Так, ход температурной зависимости диэлектрической проницаемости нитрометана, представленной на рисунке 3.4, объясняется следующим образом: выше  $-29^\circ\text{C}$  (точка замерзания) преобладает ориентационная поляризация, которая, согласно (3.6), увеличивается при понижении температуры. В твердом же теле сохраняется значительно меньшая упругая поляризация, так что наблюдается скачкообразный переход при точке замерзания. В отличие от этого в неполярном бензоле такой разрыв отсутствует.

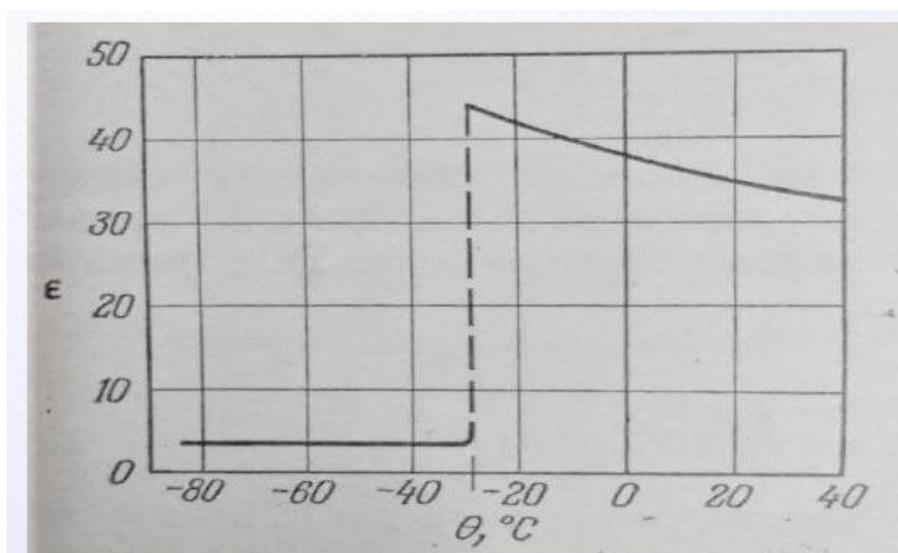


Рисунок 3.4 – Температурная зависимость диэлектрической восприимчивости нитрометана (точка замерзания  $-29^\circ\text{C}$ )

Соотношение (3.20) подвергалось многократной экспериментальной проверке. Оно в общем является довольно точным. Например, для  $\text{CO}_2$  величина  $(\varepsilon - 1)/(\varepsilon + 2)n$  при постоянной температуре (например,  $100^\circ\text{C}$ ) изменяется менее чем на 3 % при возрастании концентрации  $n$  в 600 раз, что требует повышения давления от 1 до 1700 атм. Однако отклонения от теории превышают ошибки измерений; кроме того, они носят систематический характер. В связи с этим в последнее время были введены поправки в теоретическое выражение для расчета локального поля  $E'$ .

Если концентрация полярных молекул достаточно велика, то уже нельзя пренебрегать взаимодействием между ними, и соотношение (3.21) перестает выполняться. Наличие связи между близко расположенными диполями, удовлетворительной теории которой пока не существует, приводит, подобно тому как это наблюдается в ферромагнетиках, к совершенно новым эффектам, в частности к чрезвычайно высокому значению диэлектрической проницаемости. К этим явлениям, которые носят название *сегнетоэлектрических*, мы вернемся ниже.

#### 4. Сегнетоэлектрики. Пьезоэлектричество. Электреты

Сегнетоэлектрические (ферроэлектрические) вещества, роль и число которых за последние десятилетия сильно возросли, заимствовали это название у ферромагнетиков, поскольку многие основные технические важные свойства обнаруживают поразительное сходство у обоих типов веществ. Ниже будет показано, что феноменологические аналогии обуславливают аналогии и в молекулярной теории этих веществ.

Сначала приведем важнейшие диэлектрические свойства сегнетоэлектриков, которые соответствуют магнитным свойствам ферромагнетиков.

1. Диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$ , которая у «классических» диэлектриков в большинстве случаев меньше 10 и редко превышает 100, у сегнетоэлектриков может достигать значений порядка  $10^4$ .

2. Диэлектрическая проницаемость не является величиной постоянной, а зависит от напряженности поля  $E$ .

3. Функция  $\varepsilon = \varepsilon(E)$  зависит от предыстории материала, вследствие чего наблюдается *гистерезис*: если построить график зависимости  $D$  от  $E$ , то получатся кривые, вид которых уже знаком нам из теории ферромагнетизма. По ним можно определить *коэрцитивную силу*  $E_k$ , *насыщение* и *остаточное смещение*  $D$ .

4. Процесс поляризации в возрастающем поле, как и при намагничивании железа, происходит маленькими скачками (*скачки Баркгаузена*).

5. При температуре, превышающей критическую температуру  $T_c$ , т. е. *температуру Кюри*, электрическая восприимчивость  $\chi = \varepsilon - 1$  уменьшается с возрастанием температуры в соответствии с законом Кюри – Вейсса:

$$\chi = \frac{C}{T - T_c}. \quad (4.1)$$

Температура Кюри  $T_c$  для используемых в технике сегнетоэлектриков лежит в интервале от 300 до 400 °С.

6. Сегнетоэлектричество является свойством только твердых кристаллических веществ. Оно обнаруживается лишь у веществ 11 *кристаллических классов* (из 32 существующих), так называемых *полярных*, или *пироэлектрических*, классов. Для ферромагнетиков, в отличие от этого, характерна лишь кубическая кристаллическая решетка.

7. С поляризацией сегнетоэлектриков в большинстве случаев связано изменение формы образца, так что можно говорить об *электрострикции*, аналогичной магнитострикции.

Первоначально сегнетоэлектричество было исследовано на двух веществах: *сегнетовой соли* (натриево-калиевая соль винной кислоты)

$\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  и на калии  $\text{KN}_2\text{PO}_4$ , для которого в литературе часто используется сокращенное обозначение *KDR*. В настоящее время известно множество других сегнетоэлектрических веществ. Это в первую очередь фосфаты, тартраты, сульфаты, квасцы, титанаты, ниобаты и пр. В связи с большим техническим значением ведущее место в настоящее время занимает титанат бария  $\text{BaTiO}_3$ .

Важную роль как с точки зрения молекулярной теории, так и для технического использования играет *температурная зависимость* диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$ . Так как  $\varepsilon$  зависит от напряженности поля  $E$ , то последнюю величину также необходимо указывать. Если же нас интересует только ход зависимости  $\varepsilon(T)$ , то поле должно поддерживаться постоянным. Обычно в работах, касающихся этого вопроса, используется «истинная», или «эффективная», диэлектрическая проницаемость

$$\varepsilon\varepsilon_0 = \frac{D}{E}. \quad (4.2)$$

Простейшая температурная зависимость  $\varepsilon$  наблюдается у дигидрофосфата калия (рисунок 4.1). При очень низких температурах значение приблизительно равно 1000; при повышении температуры оно увеличивается примерно до 60 000 (при  $T_c = 122$  К, или  $\theta_c = -151^\circ\text{C}$ ), а затем, пройдя через очень острый максимум при температуре  $T_c$ , уменьшается, снижаясь при комнатной температуре до 25 – значения, характерного для несегнетоэлектрических веществ. Таким образом,  $T_c$  представляет собой температуру Кюри, выше которой выполняется закон Кюри – Вейсса (4.1) с постоянной  $C = 2800$  К. Сегнетоэлектрические свойства проявляются при температурах ниже точки Кюри, т. е. в диапазоне температур, малоинтересных с технической точки зрения. Данные, приведенные на рисунке 2.5, относятся к монокристаллу, причем измерения производились в направлении сегнетоэлектрической оси, которая, конечно, связана с кристаллографическими направлениями. Точка Кюри  $T_c$  в кристаллографическом отношении представляет собой *температуру перехода*: выше  $T_c$  существует неполярная тетрагональная симметрия, не способствующая появлению сегнетоэлектрических свойств, ниже ее возникает ромбическая симметрия, что и определяет сегнетоэлектрические свойства. Ниже точки Кюри в большинстве случаев также выполняется закон Кюри – Вейсса для восприимчивости в форме

$$\chi = \frac{C}{T_c - T}, \quad (4.3)$$

но с иной постоянной  $C$ .

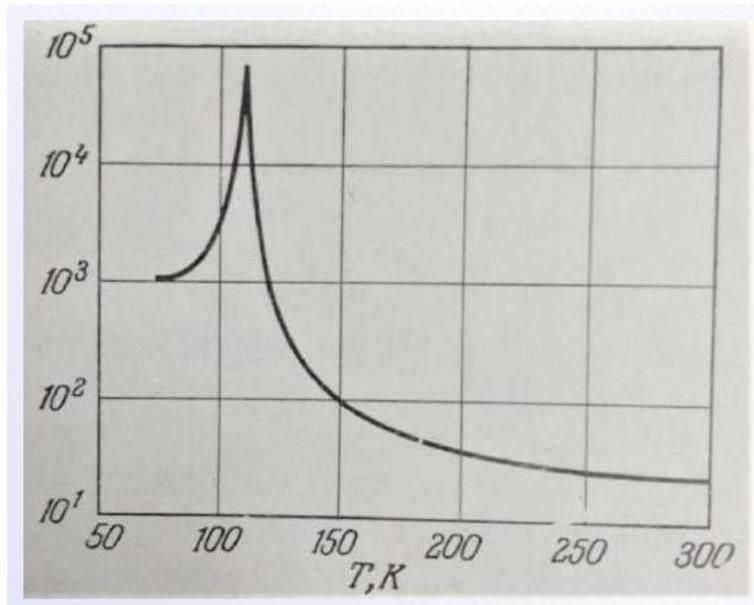


Рисунок 4.1 – Температурная зависимость диэлектрической восприимчивости дигидрофосфата калия

Более сложные свойства обнаруживает *сегнетова соль*, у которой существуют две температуры Кюри, а именно  $+24$  и  $-18$  °С. Между ними лежит сегнетоэлектрическая область. На рисунке 4.2 изображена зависимость  $\epsilon(0)$  для монокристалла, измеренная в направлении его сегнетоэлектрической оси. Оба значения температуры можно определить по очень острым максимумам проницаемости  $\epsilon$ . Вне сегнетоэлектрической области опять справедлив закон Кюри – Вейсса, где  $C = 180$  выше верхней и  $C = 136$  ниже нижней точки Кюри.

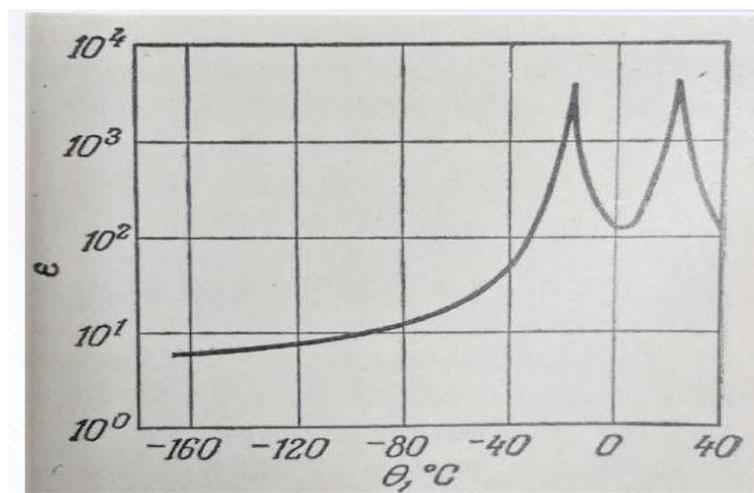


Рисунок 4.2 – Температурная зависимость диэлектрической восприимчивости сегнетовой соли

*Титанат бария*, вещество, очень важное в техническом отношении, кроме точки Кюри при  $120\text{ }^{\circ}\text{C}$ , выше которой диэлектрик ведет себя «классически», имеет еще две точки фазового перехода, а именно  $+5$  и  $-80\text{ }^{\circ}\text{C}$ , при которых происходит перестройка кристаллической решетки.

Схема переходов и температурные пределы существования четырех кристаллических систем, которые может образовать титанат бария, показаны на рисунке 4.3. Одновременно на рисунке 4.3 изображен ход температурной зависимости диэлектрической проницаемости, измеренной вдоль оси поляризации. Скачки кривой  $\varepsilon(0)$  связаны с четко проявляющимися гистерезисными эффектами. При переходе через верхнюю точку Кюри ( $125\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) в направлении снижения температуры превращение заключается в том, что элементарная ячейка несколько искажается, а именно отношение осей скачкообразно увеличивается от значения 1,000, характерного для чисто кубической решетки, до 1,005 и при дальнейшем повышении температуры медленно растет. Хотя кубическая структура в общем сохраняется, элементарная ячейка приобретает структуру четырехугольной призмы, вследствие чего возникает предпочтительное направление поляризации.

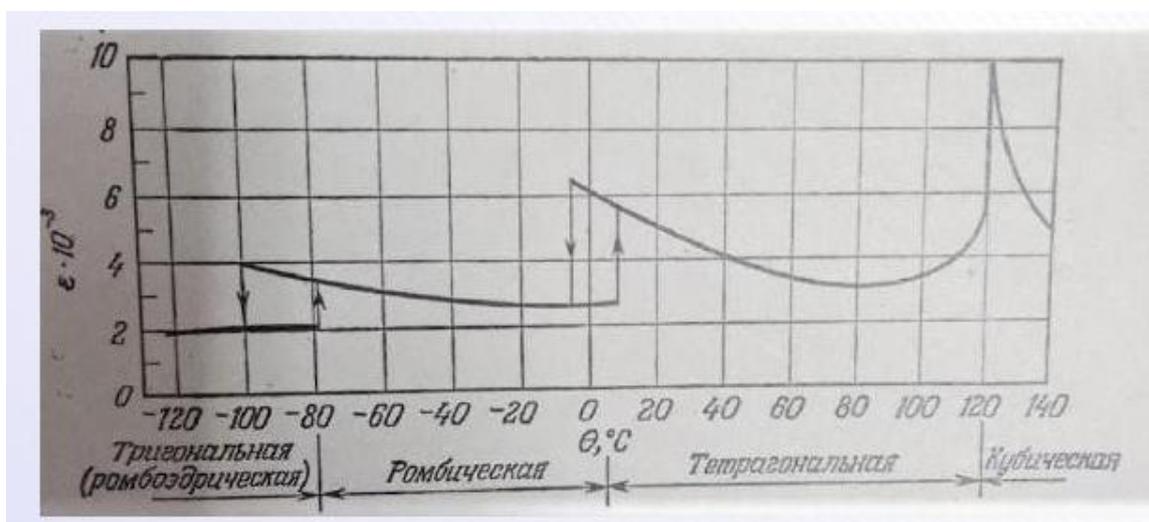


Рисунок 4.3 – Температурная зависимость кристаллической структуры и диэлектрической восприимчивости титаната бария

Переход от классического диэлектрика к сегнетоэлектрику, обусловленный подобным изменением структуры, легко проследить по диаграмме  $D-E$ , которую можно получить, например, при низких частотах с помощью электронно-лучевой трубки, причем можно наблюдать непрерывное ее изменение в зависимости от  $T$ .

На рисунке 4.4, *a* показаны кривые  $D-E$  для кристаллического твердого раствора, содержащего 79 %  $BaTiO_3$  и 21 %  $SrTiO_3$ ; температура Кюри равна  $55^\circ C$ . Мы видим, что выше точки Кюри линии  $D-E$  являются практически прямыми, так что для каждой из них  $\epsilon$  имеет постоянную величину и петли гистерезиса не наблюдается. При понижении температуры, значения  $\epsilon$ , определяемые по наклону, возрастают в соответствии с законом Кюри – Вейсса. При  $55^\circ C$  линия уже заметно искривляется и намечается насыщение. При более низкой температуре ( $20^\circ C$ ) наблюдается типичная петля гистерезиса, показанная на рисунке 4.4, что указывает на существование сегнетоэлектрических свойств, а при  $-180^\circ C$  петля гистерезиса полностью приобретает форму петли, хорошо знакомую нам по ферромагнетикам (рисунок 4.4).

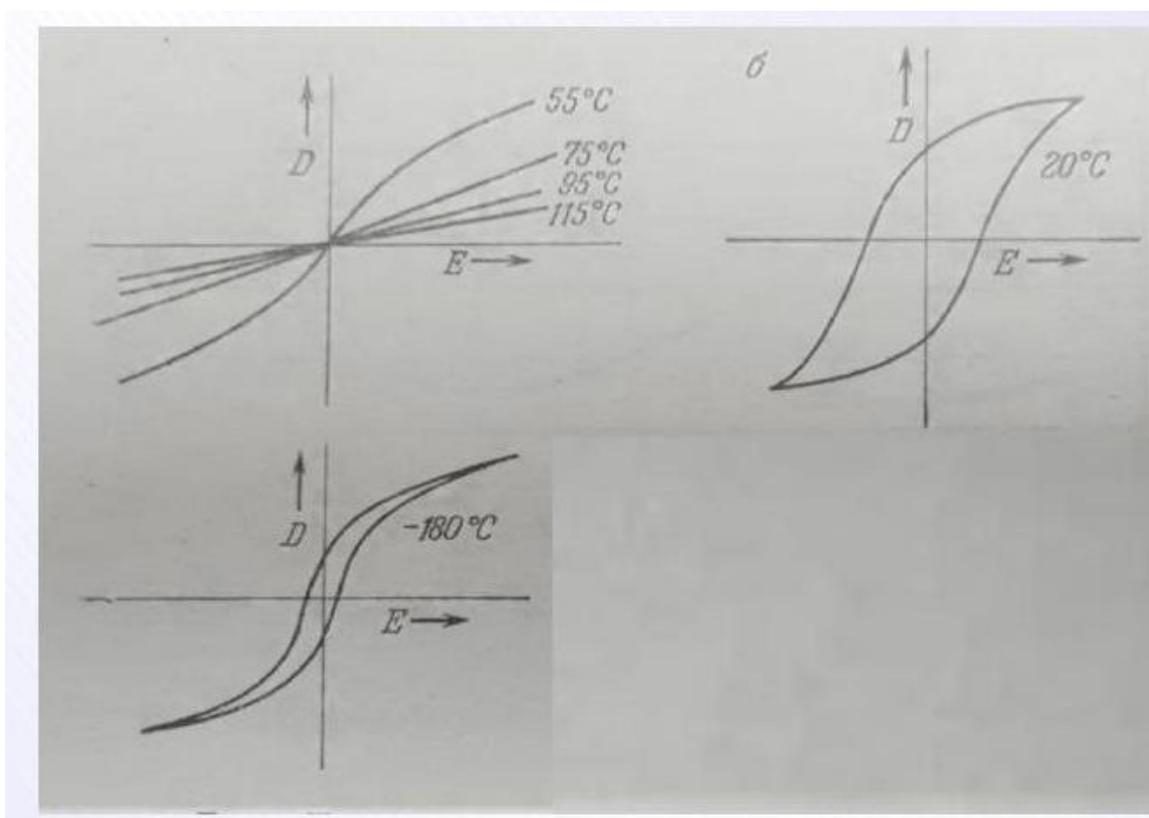


Рисунок 4.4 – Кривые  $D(E)$  для твердого раствора (барий-стронций титан) при различных температурах выше и ниже температуры Кюри

При обсуждении молекулярного механизма, обуславливающего возникновение сегнетоэлектричества, целесообразно широко использовать уже знакомые нам положения из области *ферромагнетизма*. Сегнетоэлектрические свойства также обусловлены тем, что внутри вещества существуют области (*домены*) спонтанной поляризации. При наложении

электрического поля домены устанавливаются преимущественно в направлении поля, что происходит в результате *смещений стенок* и поворотов. Насыщению соответствует такое состояние, при котором направление поляризации всех доменов совпадает с направлением внешнего поля  $E$ ; для этого обычно достаточна напряженность поля порядка 100 В/см. Спонтанная поляризация доменов лежит в пределах от  $10^{-3}$  до  $1 \text{ А} \cdot \text{с} / \text{м}^2$ . В «классическом» диэлектрике для получения подобных значений  $P$  необходимы были бы поля с напряженностью от  $10^5$  до  $10^8$  В/см, что значительно превышает значения, при которых происходит пробой этих материалов.

Указанный механизм, обуславливающий сегнетоэлектрические свойства, объясняет целый ряд отдельных явлений, аналогичных явлениям, наблюдающимся в ферромагнетиках. Сюда относятся: *петля гистерезиса* с ее характерными точками, а именно *остаточной индукцией* и *коэрцитивной силой*, *скачки Баркгаузена* и пр. Конечно, необходимо еще определить, какие силы приводят к возникновению однородной поляризации внутри домена. В ферромагнетиках такими силами являются квантово-механические обменные силы, которым трудно дать наглядную интерпретацию: очевидно, в сегнетоэлектриках для создания поляризации насыщения достаточно сил *кулоновского взаимодействия* между соседними доменами, так что при объяснении этого явления можно ограничиться классическими физическими представлениями, по крайней мере когда речь идет о приближенном описании.

Поляризация молекулы не определяется приложенным внешним полем  $E$ , а обусловлена действием поля, создаваемого всеми окружающими диполями, т. е. локальным полем  $E'$  в месте нахождения молекулы, которое больше среднего значения внешнего поля  $E$ . Возникает вопрос: достаточно ли локального поля, обусловленного только поляризацией  $P$  в отсутствие внешнего поля, для того чтобы поляризовать молекулы? Если это возможно, то поляризация должна возникать примерно так: в каком-то месте диэлектрика, в котором в силу теплового движения чисто случайно моменты нескольких диполей установились параллельно друг другу, возникает локальное поле  $E'$ , которое приводит к дальнейшей ориентации моментов соседних диполей, так что данная область становится *зародышем* общей поляризации. Вызываемая таким зародышем поляризация всего объема является тогда результатом расширяющейся причинно-следственной связи. Простые рассуждения показывают, что такой процесс развития подобен процессу в неустойчивой системе

$$E' = E + \frac{P}{3\epsilon_0},$$

а выражение (3.17) можно записать в виде

$$P = n\alpha' E',$$

где для сокращения записи введено обозначение

$$\alpha' = \alpha + \frac{\mu^2}{3kT}.$$

Исключая  $E'$ , получаем

$$P = \frac{n\alpha' E}{1 - \frac{n\alpha'}{3\varepsilon_0}}. \quad (4.4)$$

Очевидно, знаменатель становится равным нулю, если  $n\alpha' = 3\varepsilon_0$ , означает, что при  $E = 0$  возможна отличная от нуля поляризация. Эта так называемая *спонтанная поляризация* обязана своим происхождением особо сильным «внутренним» полям, соответствующим определенному расположению молекул.

Чтобы лучше понять условия, при которых возможна спонтанная поляризация, необходимо учесть *энергетические* соотношения. Следует ожидать, что при достаточно высокой температуре внутреннее поле уже не сможет противостоять влиянию теплового движения и обеспечить одинаковую ориентацию моментов. Поэтому возникает вопрос о *равновесном состоянии* (которое, конечно, зависит от температуры).

Для расчета параметров равновесного состояния будем исходить из наиболее общей постановки задачи, а именно найдем связь между напряженностью поля  $E$  и поляризацией  $P$ , которые для рассматриваемых веществ уже не будут пропорциональны друг другу. Однако, поскольку должно выполняться равенство  $E(-P) = -E(P)$ , функцию  $E(P)$  можно представить в виде степенного ряда, содержащего члены только с нечетными степенями:

$$E = aP + bP^3 + cP^5 + \dots \quad (4.5)$$

Коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$  зависят от температуры и в данном случае также от растягивающих и сжимающих усилий, действующих в материале. Как показывает практика, в большинстве случаев вполне можно ограничиться двумя членами ряда, что, во всяком случае, позволяет

установить основные закономерности. Прежде всего найдем решение при  $E = 0$ , что соответствует спонтанной поляризации. Из всех математически найденных корней равновесному состоянию отвечает лишь один корень, а именно тот, при котором плотность электростатической энергии достигает абсолютного минимума. Так как при  $P = 0$ , естественно,  $\omega = 0$ , то в абсолютном минимуме значение  $\omega$  должно быть отрицательным. Далее необходимо, чтобы экстремальное значение, найденное из условия  $\omega' = 0$ , представляло собой действительно минимум. Это значит, что вторая производная  $\omega''$  должна быть положительной. Из этих ограничений вытекают некоторые условия, налагаемые на коэффициенты  $a$  и  $b$ . Для плотности электростатической энергии можно написать

$$\omega = \int_0^P E dP = \frac{a}{2} P^2 + \frac{b}{4} P^4, \quad (4.6)$$

тогда для первой производной получим

$$\omega' = E = aP + bP^3.$$

Кроме тривиального решения  $P = 0$ , корень и одновременно экстремум отвечают значению

$$P_0 = \sqrt{-\frac{a}{b}}. \quad (4.7)$$

Так как величина  $P_0$  должна быть действительной, то в качестве первого условия получаем

$$\frac{a}{b} < 0. \quad (4.8)$$

Вторая производная

$$\omega'' = a + 3bP^2 \quad (4.9)$$

при  $P = P_0$  должна быть положительной:

$$a + 3b \left( -\frac{a}{b} \right) = -2a > 0,$$

откуда

$$a < 0 \quad (4.10)$$

и

$$b > 0. \quad (4.11)$$

Наконец, должно еще выполняться условие  $\omega(P_0) < 0$ , что справедливо для всех  $b > 0$ . Таким образом, возможность спонтанной поляризации можно считать доказанной и с энергетической точки зрения. Если, как уже говорилось, рассматривать коэффициент  $a$  как функцию температуры  $T$ , то это позволяет рассчитать ход температурной зависимости диэлектрической проницаемости  $\varepsilon$  вблизи температуры Кюри, где она проходит через очень острый максимум. Чтобы выполнялось требование  $a < 0$  при  $T < T_c$ , функция  $a(T)$  должна быть возрастающей. Вблизи точки Кюри ее можно аппроксимировать линейной функцией вида

$$a = A(T - T_c), \quad (4.12)$$

где  $A$  – положительная константа. Поэтому при температурах ниже  $T_c$  коэффициент  $a$  отрицателен, что соответствует условию существования спонтанной поляризации, тогда как при температурах выше  $T_c$  это условие не выполняется. Восприимчивость  $\chi$  рассчитывается по формуле

$$\chi = \varepsilon - 1 = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{dP}{dE} = \frac{1}{\varepsilon_0 dE / dP}.$$

Учитывая (4.8) и снова ограничиваясь двумя членами, получаем

$$\chi = \frac{1}{\varepsilon_0 (a + ebP^2)}. \quad (4.13)$$

Рассмотрим две температурные области.

1.  $T > T_c$ . Поляризацией  $P$  здесь можно пренебречь, поэтому

$$\chi = \frac{1}{\varepsilon_0 a} = \frac{1}{\varepsilon_0 A(T_c - T)}, \quad (4.14)$$

что соответствует закону Кюри – Вейсса.

2.  $T < T_c$ . Воспользовавшись выражением для  $P^2$ , согласно которому  $P^2 = -a/b$ , и выразив отсюда коэффициент  $b$ , получим

$$\chi = -\frac{1}{2\varepsilon_0 a} = \frac{1}{2\varepsilon_0 A(T - T_c)}. \quad (4.15)$$

Таким образом, по обе стороны точки Кюри происходит резкое возрастание восприимчивости, а следовательно, и  $\varepsilon$ , причем при  $T - T_c$  значение  $\varepsilon$  обращается в бесконечность. Здесь наш упрощенный расчет оказывается уже неудовлетворительным.

Можно прийти также к заключению о существовании двух точек Кюри, наблюдающихся у сегнетовой соли  $+24^\circ\text{C}$  и  $-18^\circ\text{C}$ , если предположить, что коэффициент  $a$  отрицателен только между двумя точками Кюри и положителен всюду за пределами этого интервала. Кроме того, связанные с изменением кристаллической структуры скачкообразные изменения диэлектрической проницаемости также могут быть объяснены на основании изменений коэффициентов ряда (4.5), что здесь рассматриваться не будет.

Объяснив возникновение спонтанной поляризации в полярных кристаллах, мы можем при дальнейшем рассмотрении сегнетоэлектрических свойств пользоваться результатами теоретического и экспериментального изучения ферромагнитных явлений. Размеры доменов с одним направлением поляризации определяются опять требованием минимума плотности энергии, причем для уменьшения энергии полей рассеяния необходимо разделение на возможно более тонкие параллельные друг другу домены со  $180^\circ$ -ми стенками, а для уменьшения энергии стенок необходимо, наоборот, чтобы число разделяющих стенок было по возможности меньше. В большинстве веществ минимальной энергии отвечают стенки толщиной лишь в несколько межатомных расстояний, т. е. в несколько десятых нанометра (у ферромагнетиков стенки примерно в 100 раз толще). В кристаллах лишь с одним возможным направлением спонтанной поляризации (сегнетова соль, дигидрофосфат калия) существуют лишь  $180^\circ$ -е стенки  $\text{BaTiO}_3$ , кубическая структура которого характеризуется тремя возможными направлениями поляризации (параллельными трем ребрам куба), имеются также и  $90^\circ$ -е стенки.

Доменную структуру сегнетоэлектриков можно *наблюдать непосредственно*. Это обусловлено тем, что со спонтанной поляризацией связаны характерные изменения оптического показателя преломления. Если на вещество действует внешнее поле  $E$ , то происходит вторжение доменов,

ориентированных «благоприятно» по отношению к полю, в домены с неблагоприятной ориентацией. Другими словами, в результате *смещения стенок* происходит рост благоприятно ориентированных доменов за счет ориентированных неблагоприятно. Это смещение стенок имеет вид острых иголок, причем непосредственно видно, как при увеличении внешнего поля они «вонзаются» внутрь неблагоприятно ориентированного домена. Форма *петли гистерезиса* при знакопеременной нагрузке зависит от того, какой образец исследуется – монокристаллический или поликристаллический.

В первом случае получаются практически прямоугольные кривые, если направление поля совпадает с одним из возможных направлений поляризации. В этом случае остаточная поляризация равна поляризации насыщения. Во втором случае (рисунок 4.4) вообще нельзя говорить о насыщении, так как при возрастании поля в его направлении ориентируются все новые и новые домены. Остаточная поляризация, как и в ферромагнетиках, объясняется тем, что при уменьшении поля до нуля все ориентированные в поле домены стремятся вернуться к старой ориентации, соответствующей изотропному распределению направлений векторов поляризации. Следовательно, для уничтожения суммарной поляризации необходимо обратное поле, а именно *коэрцитивная сила*.

В некоторых кристаллах (кварц, турмалин и др.) при воздействии *растягивающих* или *сжимающих* усилий возникает электрическая поляризация. Косвенным доказательством поляризации может служить появление индуцированного заряда на металлических электродах, нанесенных соответствующим образом на кристалл, который вследствие пьезоэффекта превращается в электрический диполь. Правда, эти заряды не сохраняются на электродах сколь угодно долго, даже если механическое воздействие не прекращается, так как вследствие конечной проводимости кристалла (примесная проводимость) с течением времени происходит компенсация зарядов. Пьезоэлектрический эффект, как правило, обнаруживается у тех кристаллов, которые имеют минимум одну полярную ось.

На рисунке 4.5 изображен естественный кристалл кварца с осями  $x$  и  $y$ , а на рисунке 4.6 показано, как нужно вырезать из кристалла прямоугольную или круглую пластину, чтобы получить пьезоэлектрический элемент. На поверхности, перпендикулярные оси  $x$ , наносятся электроды. Силу можно прикладывать как в направлении  $x$ , так и в направлении  $y$ . В обоих случаях на электродах появляются заряды. В первом случае пьезоэффект называют *продольным*, во втором – *поперечным*.

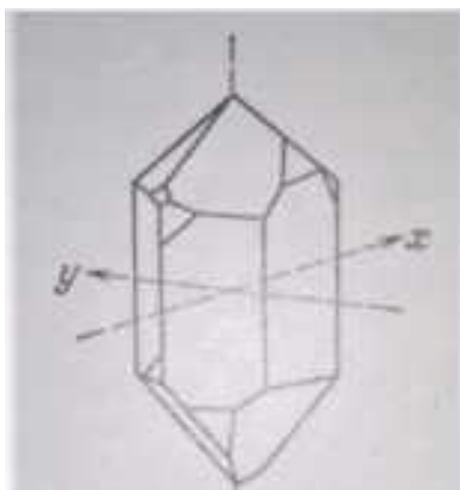


Рисунок 4.5 – Природный кристалл кварца

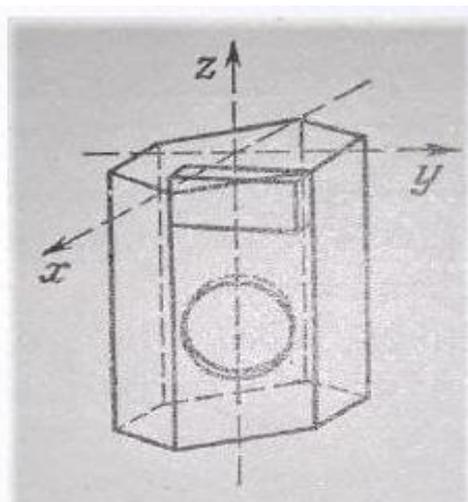


Рисунок 4.6 – Изготовление пьезоэлектрических пластин из кристалла кварца

Основную роль в этом случае опять играет кристаллическая структура. Если на кристалл действует сжимающее усилие, то оно вызывает соответствующую деформацию. Если полярной оси нет, то все ионы, образующие кристалл, смещаются одинаково, и поляризация не возникает. Однако в полярных кристаллах под действием внешней силы ионы сдвигаются *один относительно другого*, так что возникает поляризация, которую в соответствии с предыдущим можно назвать *поляризацией решетки*. На рисунке 4.7 на примере кристалла кварца (кварц и турмалин – «классические» пьезоэлектрики) показано, как возникает поляризация. На рисунке 4.7, *a* изображено строение элементарной ячейки, содержащей три молекулы  $SiO_2$ , в случае когда кристалл находится в ненагруженном,

т. е. нормальном, состоянии. Под действием силы, приложенной в направлении  $x$ , происходит сжатие конгломерата ионов, так что он должен несколько расшириться. В результате связанного с этим смещения зарядов возникает поляризация  $P$ , направленная вниз, поскольку центр тяжести зарядов положительных ионов  $Si$  при сжатии оказывается ниже центра тяжести отрицательных ионов  $O$ . При этом на верхнем электроде индуцируется положительный заряд, а на нижнем – такой же по величине отрицательный. Такое расположение соответствует *продольному* эффекту. На рисунке 4.7, *в* показано возникновение *поперечного* эффекта, при котором сила сжатия действует в направлении  $y$ . Материал сжимается в направлении  $y$ , и заряд на пластинах имеет, следовательно, другой знак, чем на рисунке 4.7, *б*, где происходит расширение в направлении  $y$ . Если вместо силы сжатия приложить силу растяжения, то знаки поляризации  $P$ , а значит, и индуцированных зарядов, конечно, изменятся на обратные. Действие силы вдоль третьей (не изображенной здесь) оси, перпендикулярной плоскости рисунка, не вызывает поляризации.

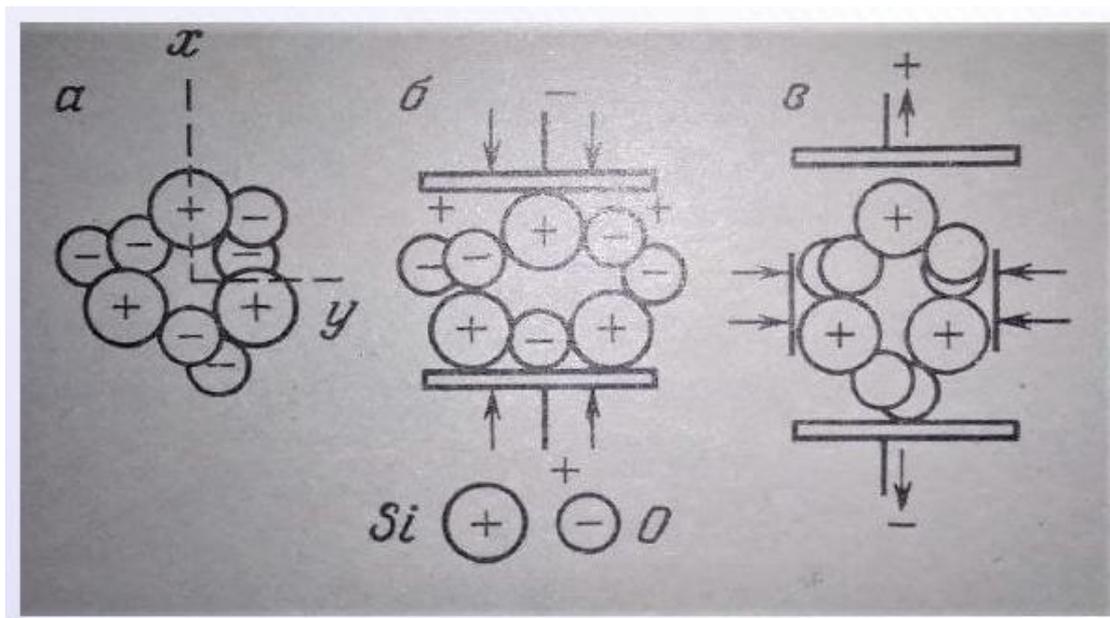


Рисунок 4.7 – К рассмотрению пьезоэлектрического эффекта

Из рассмотренной модели следует, что должен существовать эффект, *обратный* пьезоэлектрическому эффекту. Действительно, если к пластинам конденсатора, заполненного диэлектриком, не подвергающимся воздействию сил, приложить напряжение, то диэлектрик поляризуется (в результате смещения ионов), что приводит к изменению его длины. Если, например, на рисунке 4.7, *б* верхняя пластина заряжена положительно, а нижняя отрицательно, так что электрическое поле вновь

вызывает поляризацию, направленную вниз, то группа ионов опять оказывается сжатой так же, как под действием направленной по оси  $x$  силы. Действительно, под действием приложенного поля ионы  $\text{Si}^+$  смещаются вниз, а ионы  $\text{O}_-$ , наоборот, вверх. При этом происходит укорачивание в направлении  $x$  и удлинение в направлении  $y$ . В случае изменения полярности возбуждающего поля картина меняется на обратную, что соответствует рисунку 4.7, в. Этот чрезвычайно важный для техники эффект называют *обратным пьезоэлектрическим эффектом*. Его не нужно смешивать с электрострикционным эффектом, который имеет точный аналог в ферромагнетизме: электрострикция в противоположность обратному пьезоэлектрическому эффекту является свойством всех кристаллов. Электрострикция заключается в изменении длины, которое не зависит от направления приложенного электрического поля и квадратично возрастает с увеличением  $E$ , в то время как в соответствии с изложенным деформация, обусловленная пьезоэлектрическим эффектом, меняет знак одновременно с напряженностью поля.

Если вызывающие поляризацию силы и напряженности полей не очень велики, то можно принять, что они связаны линейными соотношениями

$$D = \varepsilon\varepsilon_0 E + qT_m,$$

$$\xi = q'E + \frac{T_m}{M}. \quad (4.16)$$

Здесь  $T_m$  означает напряжение сжатия или растяжения (сила на  $1 \text{ м}^2$ ),  $M$  – модуль упругости Юнга (для кварца  $M = 7,85 \cdot 10^{10} / \text{м}^2$ ),  $q$  – «пьезоэлектрическая постоянная» (для кварца  $q = 2,1 \cdot 10^{-12} \text{ А} \cdot \text{с} / \text{Н}$ ) и  $\xi = \Delta x / x$  – относительное изменение длины, например, в направлении  $x$ . Постоянная обратного пьезоэффекта  $q'$  равна постоянной  $q$ , что можно доказать с помощью термодинамических соображений. Вышеприведенные уравнения можно записать в матричной форме:

$$\begin{pmatrix} D \\ \xi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon\varepsilon_0 & q \\ q & \frac{1}{M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ T_m \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Кроме того, всегда, конечно, справедливо соотношение

$$D = \varepsilon\varepsilon_0 E + P. \quad (4.18)$$

Особый интерес представляют следующие частные случаи.

1. Обе пластины конденсатора изолированы, так что при возникновении поляризации индуцированный заряд не может стекать, и поэтому  $D = 0$ . Из приведенных выше уравнений следует

$$E = -\frac{q}{\varepsilon\varepsilon_0 T_m},$$

$$\xi = \left( \frac{1}{M} - \frac{q^2}{\varepsilon\varepsilon_0} \right) T_m. \quad (4.19)$$

Таким образом, в результате механического воздействия внутри материала возникает электрическое поле  $E$  и деформация, которая имеет меньшую величину, чем в том случае, когда  $E = 0$ .

2. Пластины конденсатора соединены друг с другом через баллистический гальванометр с пренебрежимо малым сопротивлением. В этом случае  $E = 0$ , а следовательно,

$$D = qT_m,$$

$$\xi = \frac{T_m}{M}. \quad (4.20)$$

Измеряя  $D$  по кратковременному импульсу тока, можно определить постоянную  $q$ , а на основании измерения  $\xi$  найти модуль упругости  $M$ .

3. Кристалл жестко закреплен, что препятствует всякому изменению его длины, так что  $\xi = 0$ . В этом случае сжатие или растяжение, воспринимаемое креплением, рассчитывается следующим образом:

$$T_m = -MqE,$$

отсюда

$$D = (\varepsilon\varepsilon_0 - Mq^2)E. \quad (4.21)$$

Эффективная диэлектрическая проницаемость (выражение в скобках) имеет несколько меньшую величину, чем в отсутствие сжатия.

Эти несколько примеров показывают многообразие связей между электрическими и механическими величинами, что типично для всей области пьезоэлектрических явлений.

Некоторые пьезоэлектрические кристаллы могут поляризоваться без какой-либо механической нагрузки, а только в результате изменения температуры. Поляризация опять обнаруживается по скоплению *зарядов* на электродах. Это явление называется пирозлектричеством. Типичным и наиболее часто исследуемым пирозлектрическим веществом является минерал *турмалин*. При пирозлектрическом эффекте заряды, возникшие на электродах в результате изменения температуры, также компенсируются с течением времени, причем тем быстрее, чем выше проводимость материала. Механизм пирозлектрического эффекта совершенно аналогичен механизму пьезоэлектрического эффекта. Оба эффекта основаны на *деформации* кристаллической решетки (ионной решетки), причем безразлично, возникает эта деформация под действием внешней силы или в результате теплового расширения. Существенное различие заключается лишь в том, что пирозлектрические кристаллы должны иметь постоянную поляризацию, тогда как для пьезоэлектрического эффекта это условие не является необходимым. Отсюда ясно, что не все пьезоэлектрические кристаллы являются и пирозлектрическими; другими словами, пирозлектрические вещества представляют собой подгруппу пьезоэлектрических веществ. Если присоединить сюда сегнетоэлектрические вещества, которые также характеризуются наличием постоянной поляризации, то мы получим схему, представленную на рисунке 4.8.

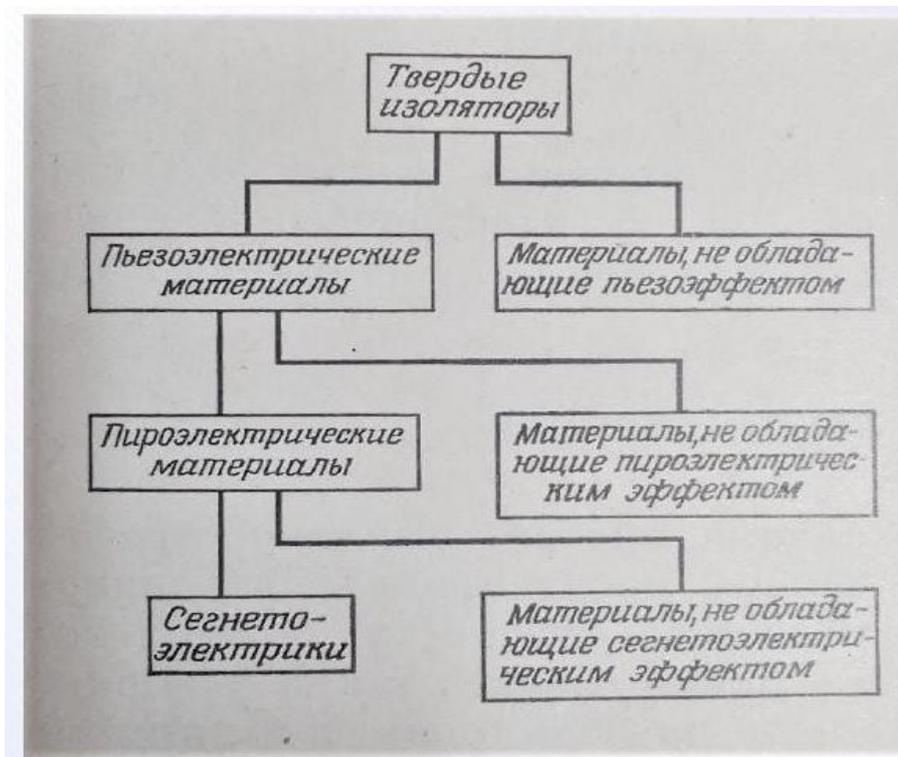


Рисунок 4.8 – Схема классификации диэлектриков

Из геометрически возможных и действительно наблюдаемых в природе 32 классов кристаллов пьезоэлектрическими свойствами могут обладать кристаллы лишь 20 классов, и из них лишь кристаллы 10 классов обладают пьезоэлектрическими свойствами. Тщательный кристаллографический анализ показывает, что при гидростатическом, т. е. всестороннем, сжатии кристалла пьезоэлектрический эффект проявляется только в том случае, когда кристалл является также и пьезоэлектрическим. Следовательно, между этими двумя эффектами существует тесная связь, которая, правда, нарушается, если вследствие изменения температуры или гидростатического сжатия происходит изменение структуры кристалла.

Величина пьезоэлектрического эффекта характеризуется отношением изменения поверхностного заряда к изменению температуры. Так называемый пьезоэлектрический коэффициент равен

$$p = \frac{dD}{dT}. \quad (4.22)$$

## 5. Техническое применение твердых диэлектриков

Изолирующие вещества находят с давних пор широкое применение в электротехнике. Благодаря специальным свойствам сегнетоэлектриков, а также пьезоэлектрическому эффекту область применения диэлектриков в настоящее время существенно расширилась.

Высокая диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  сегнетоэлектриков позволяет сильно уменьшить объем конденсаторов при той же емкости и электрической прочности. Однако по сравнению с «классическими» диэлектриками отрицательными факторами в этом случае являются большее значение тангенса угла диэлектрических потерь ( $10^2$ ), также сильная зависимость  $\varepsilon$  от температуры и напряженности поля. Температурная зависимость проявляется в существовании одного или нескольких максимумов функции  $\varepsilon(T)$ , которые тем острее, чем больше  $\varepsilon$ . Частичной компенсации этого температурного эффекта можно достичь, используя смесь двух или многих веществ, для которых максимумы лежат при различных температурах. Смеси изготавливаются методами порошковой металлургии. При этом большей частью используются титанаты щелочно-земельных металлов. Другой способ компенсации заключается в том, что пространство между пластинами конденсатора разделяется на два или несколько сегментов, которые заполняются сегнетоэлектриками с различным ходом температурной зависимости  $\varepsilon(T)$ . В этом случае получается параллельное соединение нескольких конденсаторов с различным температурным поведением.

Если нужно уменьшить тангенс угла потерь, то диэлектрик выбирают таким образом, чтобы его точка Кюри лежала ниже рабочей температуры. В этом случае диэлектрик ведет себя как «параэлектрик», т. е. гистерезис отсутствует.

Следствием зависимости диэлектрической проницаемости от напряженности поля является зависимость емкости от напряжения, так что в результате получается нелинейный элемент. Подобный конденсатор не может быть использован в колебательных контурах, однако находит применение для емкостной связи или же для шунтирования. С другой стороны, нелинейность может быть использована в усилителях («диэлектрические усилители»), для модуляции и т. п. Это открывает дальнейшие возможности для применения сегнетоэлектриков в технике связи, о чем мы здесь говорить не будем. Подробнее этот вопрос рассмотрен в специальной литературе.

По аналогии с ферромагнетиками сегнетоэлектрики также можно использовать в качестве запоминающих элементов, главным образом в тех

случаях, когда они обладают четко выраженной *прямоугольной петлей*, как, например, монокристалл титаната бария.

Подобный запоминающий элемент, естественно, может хранить лишь два типа информации соответственно двум направлениям поляризации. Считывание осуществляется с помощью импульса напряжения с малой амплитудой, управляемого возбужденным им импульсом тока.

В данном случае речь идет об использовании пьезоэлектрического эффекта. Для *звукоснимателей* и *микрофонов* применяются пластинки из сегнетовой соли или, еще лучше, из титаната бария толщиной приблизительно 0,3 мм, из которых изготавливаются элементы, совершающие колебания изгиба: две пластинки из пьезоэлектрика с тонкими алюминиевыми фольгами накладываются друг на друга так, что при изгибающем напряжении возникает удлинение или сжатие пластинки. При этом возникают напряжения, которые благодаря последовательному соединению пластин складываются. В *ультразвуковом датчике* электрическая мощность преобразуется в механическую. В качестве пьезоэлектрических веществ используются кварц или  $BaTiO_3$ . Кварц имеет перед  $BaTiO_3$  то преимущество, что допускает примерно в три раза большую нагрузку, а именно примерно до  $10/3$ . Титанат бария при такой нагрузке разогрелся бы до температур, лежащих выше точки Кюри, и, следовательно, не проявлял бы пьезоэлектрических свойств. Но, с другой стороны, из титаната бария можно изготавливать датчики любой формы с помощью методов, используемых в порошковой металлургии.

Пьезоэффект уже давно стал применяться в технике для стабилизации частоты (*кварцевый генератор*). Вследствие высокой добротности кварца можно таким путем достигнуть постоянства частоты с точностью до  $10^8$ , так что подобные генераторы могут применяться для измерения Бремента (*кварцевые часы*). Раньше применение кварцевых пластинок сильно ограничивалось из-за нехватки естественных кристаллов кварца. Сейчас разработаны способы выращивания кристаллов кварца с превосходными оптическими и электрическими свойствами (выращивание производится при  $400\text{ }^\circ\text{C}$  и  $10^3$  атм). В настоящее время удается изготавливать кристаллы кварца весом до 1,3 кг.

## 6. Электрический ток в металлах

В твердых телах возможны два типа проводимости, а именно электронная и ионная. В этом разделе основное внимание мы уделим проводимости первого типа и лишь в конце сделаем некоторые замечания, касающиеся ионной проводимости, роль которой в технике весьма незначительна. Электронная проводимость обуславливается двумя видами носителей тока – электронами и дырками. Сущность понятия дырки будет определена при рассмотрении полупроводников, а пока достаточно отметить, что в процессе проводимости дырка ведет себя как положительно заряженный носитель с массой, лишь немного отличающейся от массы электрона. При электронной проводимости отсутствует перенос массы, что отличает ее от ионной проводимости. Если обозначить электронную концентрацию через  $n^-$ , а концентрацию дырок через  $n^+$ , то для плотности тока при напряженности поля  $E$  получим,

$$G = e(n^+b^+ + n^-b^-)E, \quad (6.1)$$

откуда для проводимости находим

$$\kappa = e(n^+b^+ + n^-b^-), \quad (6.2)$$

здесь  $b^-$  и  $b^+$  представляют соответственно подвижности электронов и дырок.

$$b = \frac{\lambda e}{m\bar{v}}, \quad (6.3)$$

где мы заменили несколько сомнительный коэффициент  $1/2$  на единицу. Величина  $\tau = \lambda / \bar{v}$  представляет собой среднее время между двумя последовательными столкновениями одного носителя заряда с молекулами, т. е. время свободного пробега. При этом необходимо иметь в виду, что понятие длины свободного пробега носителя  $\lambda$  в твердых телах, обладающих решеткой, отличается от понятия длины свободного пробега в плазме.

Говоря о концентрации носителей заряда, следует различать два случая.

1. Число носителей заряда одного типа значительно превышает число носителей другого типа. Тогда величина проводимости определяется практически только носителями первого типа, называемыми основными.

Вклад, вносимый в проводимость носителями заряда второго типа, называемыми неосновными, настолько мал, что им можно пренебречь. Если  $n_i$  – концентрация основных носителей и  $b_m$  – их подвижность, то проводимость выражается формулой

$$\kappa = en_m b_m \quad (6.4)$$

2. Если  $n^-$  и  $n^+$  по порядку величины одинаковы, как это обычно наблюдается в полупроводниках, то справедлива формула (6.2)

Для однородных твердых тел при определенных условиях выполняется закон Ома; тогда проводимость  $\kappa$  не зависит от напряженности поля. Ориентировочное представление о величине  $\kappa$  для различных веществ дает рисунок 6.1.

| $\kappa, \text{Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ |                   | $\kappa, \text{Ом}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ |                         |
|--|-------------------|--|-------------------------|
| Серебро                                      | $6,3 \cdot 10^7$  | Кремний<br>высоколегированный                | $2 \cdot 10^3$          |
| Медь   | $5,6 \cdot 10^7$  | Твердый фарфор                               | $\sim 10^{-13}$         |
| Германий чистый                              | 2                 | Слюда  | $\sim 10^{-15}$         |
| Германий<br>высоколегированный               | $3 \cdot 10^4$    | Парафин                                      | $\sim 10^{-16}$         |
| Кремний чистый                               | $2 \cdot 10^{-3}$ | Кварц  | $\sim 3 \cdot 10^{-17}$ |

Рисунок 6.1 – Проводимость твердых тел

Мы видим, что для разных твердых тел значение  $\kappa$  изменяется в чрезвычайно широких пределах, охватывающих почти 25 порядков. Можно показать, что значения подвижностей носителей в твердых телах меняются в более узком интервале. Поэтому почти единственным фактором, обуславливающим широкий диапазон значений  $\kappa$ , является концентрация носителей.

Из практических соображений все материалы в зависимости от их проводимости удобно разделить на три класса:

1. Хорошие металлические проводники (медь, серебро, алюминий и др.).

2. Полупроводники (германий, кремний, селен и различные соединения элементов III и V групп периодической системы, например  $In - As$ ,  $In - Sb$  и т. д.).

3. Плохие проводники – изоляторы (фарфор, слюда, алмаз, кварц).

Важный экспериментальный метод определения характера проводимости тела или, иначе говоря, выяснения вопроса о том, какие именно носители – электроны или дырки – ответственны за перенос тока, основан на эффекте Холла. Эффект Холла, открытый в 1879 г., заключается в следующем: если через проводящую пластину с прямоугольным сечением (рисунок 6.2), находящуюся в магнитном поле, перпендикулярном ее плоскости, протекает ток  $I$ , между точками  $P$  и  $Q$  возникает разность потенциалов (поперечная разность потенциалов), которая может быть измерена гальванометром  $G$ . Это напряжение, называемое *напряжением Холла*  $U_H$ , пропорционально току  $I$  и магнитной индукции  $B$ , т. е.

$$U_H = RIB, \quad (6.5)$$

где константа Холла  $R$  – величина, постоянная для данного проводящего материала.

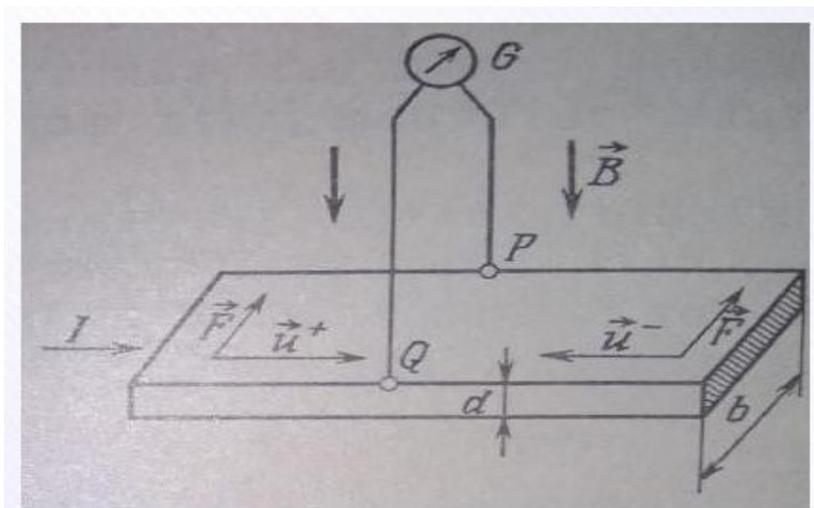


Рисунок 6.2 – К рассмотрению эффекта Холла

Эффект Холла легко объясняется наличием силы Лоренца, действующей одновременно и на электроны, и на дырки. Выражение для этой силы имеет вид

$$F = e[\nu \times B]. \quad (6.6)$$

Оно в равной мере справедливо и для электронов, и для дырок. Следует ясно представлять, что скорость носителей, движущихся в электрическом поле, складывается из изотропной скорости теплового движения и скорости направленного движения дрейфа. Конечно,

и то, и другое движения приводят к появлению силы Лоренца, но поскольку компоненты тепловой скорости равномерно распределены по всем направлениям, то соответствующие силы Лоренца не могут вызвать отклонения носителей в каком-либо преимущественном направлении. Таким образом, основную роль в процессе играет лишь компонента скорости дрейфа, которая параллельна электрическому полю и определяет ток. Следовательно, в формуле (6.6) скорость  $v$  следует заменить скоростью направленного движения  $u$ . В результате получим выражение для силы, действующей на каждый носитель заряда и заставляющей его двигаться в направлении, перпендикулярном векторам  $E$  и  $B$ . Направление этой силы не зависит от знака заряда, и в случае, когда направление магнитного поля и тока соответствует рисунку 6.2, сила направлена к точке  $P$ . Если носителями тока являются только электроны, как это имеет место в металлах, то под действием силы Лоренца у задней грани пластины создается пространственный отрицательный заряд, так как концентрация электронов здесь становится выше той, которая необходима для компенсации локального положительного заряда ионов решетки. На передней же грани пластины концентрация электронов, наоборот, недостаточна, т. е. создается избыточный положительный пространственный заряд. Эти пространственные заряды (практически изменение электронной концентрации очень невелико) создают электрическое поле  $E_H$ , величина которого растет до тех пор, пока сила, действующая на заряды со стороны этого поля  $E_{H^e}$ , не станет равна силе Лоренца

$$E_{H^e} = euB. \quad (6.7)$$

Это условие достигается в течение очень короткого времени, после чего электроны снова движутся свободно, как и раньше, ибо результирующая сила в поперечном направлении теперь равна нулю. Потенциал точки  $P$  отрицателен по отношению к точке  $Q$ . Исключая неизвестную скорость дрейфа, путем введения тока  $I$  и используя выражение  $I = Gbd = neubd$ , нетрудно рассчитать холловскую разность потенциалов (напряжение Холла):

$$U_H = E_H b + \frac{IB}{ned} = R \frac{IB}{d}, \quad (6.8)$$

следовательно, константа Холла  $R$  равна

$$R = \frac{1}{ne}. \quad (6.9)$$

В случае преобладания электронной проводимости константа Холла  $R$  отрицательна. Если же ток преимущественно переносится дырками, которым условно приписывается положительный заряд, то потенциал точки  $P$  положителен по отношению к точке  $Q$ ; напряжение Холла при этом меняет знак и в соответствии с этим  $R$  оказывается величиной положительной. Если же ни один из видов носителей заряда не является преобладающим, как это бывает в полупроводниках, то выражение (3.8) для константы Холла заменяется выражением

$$R = \frac{3\pi}{8e} \frac{n^+ - \beta^2 n^-}{(n^+ + \beta^2 n^-)^2}, \quad (6.10)$$

где  $\beta = b^- / b^+$  представляет собой отношение подвижностей носителей. Если  $n^+ = 0$  или  $n^- = 0$ , то выражение (6.10) переходит в (6.9).

Константа Холла имеет постоянную величину только для немагнитных материалов; для ферромагнетиков ( $Fe, Co, Ni$ ) она быстро уменьшается с возрастанием магнитной индукции  $B$ .

Если практически имеется лишь один вид носителей (основные носители), то их подвижность можно определить, комбинируя выражения для константы Холла и проводимости  $\kappa$ . Так как  $\kappa = enb$ , а  $R = 1/ne$ , то

$$b = R\kappa. \quad (6.11)$$

Во втором столбце таблицы (рисунок 6.3) приведены измеренные значения константы Холла для некоторых металлических проводников.

| Ме-<br>талл | $R$ ,<br>$10^{-10}$ м <sup>3</sup> /А·с | $n$ , $10^{28}$ м <sup>-3</sup> | $n_0$ , $10^{28}$ м <sup>-3</sup> | $\kappa$ , $10^7$ Ом <sup>-1</sup> ·м <sup>-1</sup> | $b$ , $10^{-3}$ м <sup>2</sup> /В·с |
|-------------|---|---------------------------------|-----------------------------------|---|-------------------------------------|
| Ag          | -0,90                                   | 6,9                             | 5,9                               | 6,1   | 5,5                                 |
| Cu          | -0,55                                   | 11,4                            | 8,5                               | 5,8   | 3,2                                 |
| Au          | -0,73                                   | 8,5                             | 5,9                               | 4,5   | 3,3                                 |
| Pt          | -0,18                                   | 35                              | 6,6                               | 0,93  | 0,17                                |
| W           | +1,14                                   | 5,5                             | 6,33                              | 1,82  | 2,1                                 |
| Al          | -0,36                                   | 17,4                            | 6,0                               | 3,6   | 1,3                                 |
| Na          | -2,5                                    | 2,5                             | 2,54                              | 2,34  | 5,85                                |

Рисунок 6.3 – Константа Холла, плотность и подвижность носителей заряда для металлов

При использовании обычной методики измерений значения напряжений Холла лежат в интервале от нескольких микровольт до милливольт. Точность измерения величины  $R$  не особенно велика, что объясняется существованием неконтролируемых источников погрешностей (геометрические ошибки, неравномерность нагрева и т. д.). Поэтому точность измерения  $R$  не превышает 20 %.

В третьем столбце даны значения концентраций носителей  $n$ . Их следует сравнить с приведенными в четвертом столбце значениями  $n_0$ , т. е. с концентрацией атомов в решетке, рассчитанной по плотности вещества и атомному весу. В большинстве случаев значения  $n$  и  $n_0$  находятся в удовлетворительном согласии. В пятом столбце указаны значения проводимости  $\kappa$ , а в шестом – значения подвижностей основных носителей.

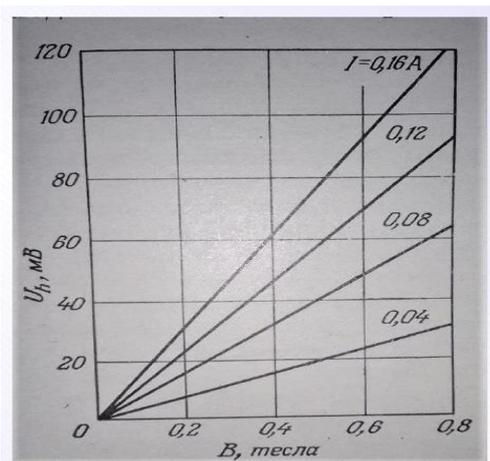


Рисунок 6.4 – Характеристики генератора Холла на  $InAs$

В приведенные выше формулы не входит масса электрона. Таким образом, не следует рассматривать вопрос об эффективной массе. Иначе обстоит дело, когда речь идет об отрицательной электронной массе, что возможно, например, в верхней части энергетической зоны.

Эффект Холла можно использовать в измерительной технике. Например, с его помощью можно измерять магнитное поле в узких зазорах (в дросселях, вращающихся узлах машин). Чтобы получить легко измеримые напряжения Холла, необходимо в соответствии с формулой (3.7) использовать по возможности тонкие пластины, изготовленные из материала, обладающего большой константой Холла. Для этой цели особенно пригодны ранее упоминавшиеся соединения  $A_{III}B_V$ , в частности  $In-As$ ,  $In-Se$  и т. д. (генераторы Холла). Рисунок 6.4 дает представление о зависимости между величиной магнитного поля, тока и напряжения Холла.

Кроме рассмотренного выше поперечного эффекта Холла, существует и вполне доступный для измерения продольный эффект, заключающийся в возрастании омического сопротивления при наличии магнитного поля. Указанный эффект также используется для измерения магнитных полей. Чаще всего применяется висмутовая спираль, так как в висмуте эффект проявляется наиболее отчетливо.

Наличие свободных электронов в металлах может быть доказано не только на основании эффекта Холла, но и непосредственно с помощью остроумного опыта Толмена: при ускоренном движении металлического образца, например медной проволоки, электроны, обладающие механической инерцией, испытывают отставание, что приводит к повышению их концентрации на «заднем» конце образца и, наоборот, к ее уменьшению на «переднем» конце. Это явление можно уподобить воздушному потоку, возникающему в вагоне поезда, движущегося с ускорением. Такой поток направлен против движения поезда и вызывает некоторое увеличение давления воздуха в конце вагона и разрежение в начале (при торможении наблюдается обратный эффект). Подобным образом в проводнике возникает поток электронов, направленный в сторону, противоположную мгновенному ускорению тела. Этот поток можно обнаружить по создаваемому им внешнему магнитному полю. На практике используются периодические перемещения металла, например крутильные колебания металлического цилиндра вокруг собственной оси, как показано на рисунке 6.5. Электронный ток, возникающий вследствие наличия ускорения, измеряется по переменному напряжению в катушке, охватывающей вращающееся тело. По величине тока можно определить удельный заряд носителей  $e/m$ ; его значение с большой точностью совпадает с соответствующим отношением для электронов.

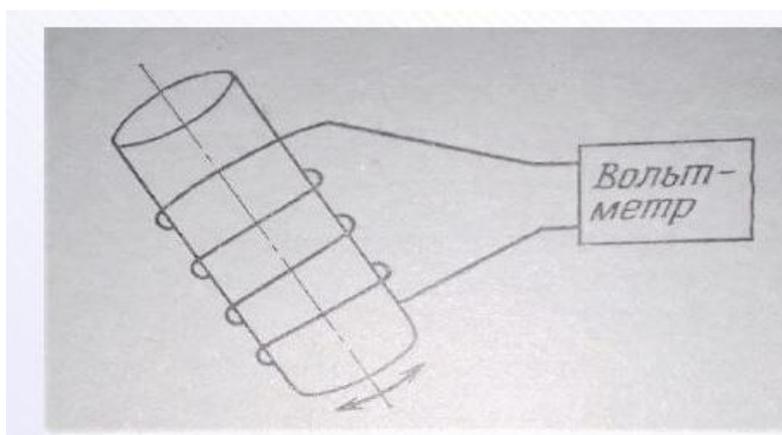


Рисунок 6.5 – Принципиальная схема опыта Толмена

Строгий анализ показывает, что измерения, проводимые в опытах, аналогичных опыту Толмена, не дают возможности различить электронную и дырочную проводимости. Однако на основании рассматриваемого ниже механизма образования дырок известно, что в хороших проводниках – металлах – перенос тока осуществляется только электронами. Это подтверждается также и результатами наблюдения эффекта Холла.

Выражение для проводимости металла

$$\kappa = \frac{e^2 n \lambda}{m \bar{v}} = \frac{e^2 n}{m} \tau. \quad (6.12)$$

В дальнейшем мы будем использовать обычные для современной физики полупроводников обозначения:  $n$  – концентрация электронов,  $p$  – концентрация дырок.

Формула (6.12) получена в рамках «классической» электронной теории проводимости металлов (Друде, 1902). Однако интерпретация формулы (6.12) оказывается различной в зависимости от того, проводится она на основании классических представлений или на основании квантовой теории, согласно которой распределение электронов по энергиям подчиняется статистике Ферми. Это различие проявляется уже в вопросе о температурной зависимости проводимости. Согласно классической теории, общая зависимость  $\kappa$  от температуры обусловлена температурной зависимостью скорости  $\bar{v}$ , которая растет пропорционально  $T^{1/2}$ . Таким образом, величина обратная, т. е. удельное сопротивление  $\rho$  должно расти пропорционально  $T^{1/2}$ . В действительности же, как показывает опыт,  $\rho$  растет пропорционально  $T$  (рисунок 6.6), т. е. наблюдается расхождение, которое наряду с другими недостатками представляет собой одно из серьезных затруднений классической электронной теории проводимости.

Удовлетворительное объяснение наблюдающейся температурной зависимости проводимости удалось получить только на основании применения к электронам распределения Ферми. В соответствии с ним среднее значение скорости, стоящее в знаменателе формулы (6.12), практически вообще не зависит от  $T$ , так как повышение температуры приводит лишь к тому, что резкий спад кривой распределения вблизи уровня Ферми становится более пологим. Это лишь в незначительной степени влияет на среднее значение скорости. Таким образом, ответственной за температурную зависимость  $\kappa$  оказывается только средняя длина свободного пробега электронов в решетке, поскольку все

остальные величины в формуле (6.12) не зависят от температуры (Зоммерфельд).

В волновой теории электронов под воздействием электрона с атомами металлов в решетке понимается явление дифракции и интерференции электронных волн на пространственной решетке. Согласно законам, которым подчиняются эти явления, в идеальной кристаллической решетке не происходит ни рассеяния, ни отражения, ни торможения электронов, т. е. средний импульс каждого электрона остается постоянным. Это означает, что не только средняя длина свободного пробега электронов, но и проводимость металла, согласно формуле (6.12), должны быть бесконечно большими. В действительности этого не наблюдается, так как совершенно идеальных кристаллов, т. е. кристаллов без дефектов, не существует. Дефектами структуры, характерными для данного случая, являются не только статистически распределенные геометрические искажения решетки, возникающие в процессе образования кристалла, но главным образом всевозможные примеси и тепловые колебания атомов в узлах решетки.

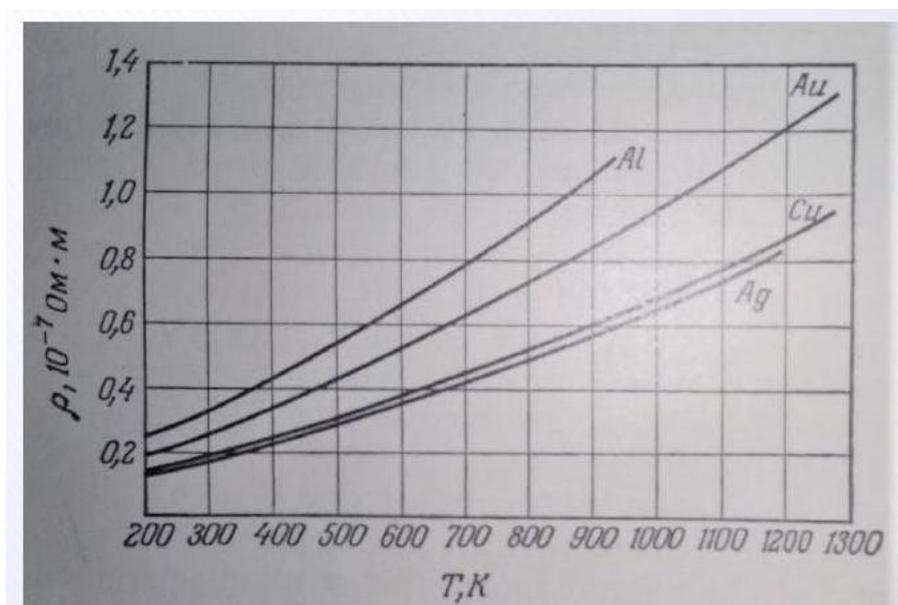


Рисунок 6.6 – Температурная зависимость удельного сопротивления чистых металлов

В соответствии с такими представлениями конечная величина сопротивления металлов представляет собой «патологическое» явление, обусловленное несовершенством кристаллической структуры. Этим же объясняются сравнительно большие расхождения встречающихся в литературе значений проводимостей металлов. На значение  $\chi$  сильное

влияние оказывают даже ничтожные загрязнения, а также предварительная обработка (литье,ковка,растяжение и т.п.), которая приводит к различным искажениям структуры решетки. Зависимость проводимости от температуры, представленная на рисунке 6.6, объясняется тем, что при повышении температуры усиливаются колебания решетки и соответственно уменьшается длина свободного пробега электронов.

Из сказанного следует, что закон Ома справедлив лишь до тех пор, пока температура остается постоянной. При очень больших токах он будет соблюдаться только при условии, что измерения сопротивления проводятся при кратковременных импульсах тока. Тогда закон Ома выполняется вплоть до максимально допустимых для данного вещества плотности тока или напряженности приложенного поля.

При приближении температуры к абсолютному нулю та часть сопротивления, которая обусловлена тепловыми колебаниями атомов решетки, должна стремиться к нулю, так что должно остаться лишь сопротивление, обусловленное дефектами решетки (примесями и т.п.). Действительно, при температурах, близких к 0 К, наблюдается остаточное сопротивление, которое тем больше, чем сильнее загрязнен металл. У целого ряда веществ обнаруживается, однако, совершенно иной ход зависимости  $\chi(T)$ : при некоторой характерной для каждого вещества температуре (критическая температура), не превышающей 20 К, сопротивление вещества скачкообразно падает, уменьшаясь на несколько порядков, и практически становится равным нулю. Это явление, теоретическое объяснение которого было дано лишь недавно, называется сверхпроводимостью. В последнее время явление сверхпроводимости нашло практическое применение, например для получения исключительно сильных магнитных полей, для изготовления трансформаторов с малыми потерями. Кроме того, существуют вполне приемлемые конструктивные предложения для осуществления передачи больших мощностей по сверхпроводящим кабелям. Широкому применению сверхпроводимости в технике в настоящее время уже не препятствует, как это было раньше, дороговизна холодильных установок. Стоимость производства жидкого водорода и гелия сейчас такова, что вполне окупится, если таким путем удастся полностью исключить омическое сопротивление.

С помощью представления о том, что сопротивление обусловлено дефектами структуры решетки, можно объяснить и проводимость сплавов. При измерении зависимости проводимости сплавов от их состава получаются кривые типа изображенной на рисунке 6.7. Следует отметить, что даже незначительные примеси очень сильно изменяют величину  $\lambda$  чистого металла. Это объясняется тем, что наличие примесей сильно влияет на значение  $\lambda$ .

Длину свободного пробега электронов проводимости, характеризующую сопротивление металла, можно определить непосредственно экспериментальным путем. Если равномерно уменьшать толщину металлической проволоки, например с помощью электролиза, то оказывается, что после того, как диаметр достигнет определенного значения, проводимость проволоки начинает понижаться. Это можно объяснить тем, что, начиная с определенного диаметра проволоки, длина свободного пробега электронов ограничивается ударами о поверхность, поэтому дальнейшее уменьшение сечения ведет к уменьшению длины свободного пробега электронов, а следовательно, согласно (6.12) и проводимости. Определенный таким способом критический диаметр проволоки является грубой мерой длины свободного пробега. Таким методом найдено, что длина свободного пробега в меди приблизительно равна 65 нм. Эта величина согласуется со значением проводимости, рассчитанным по формуле (6.12), если принять, что число свободных электронов не точно равно числу атомов  $Cu$ , а составляет примерно  $2/3$  от него.

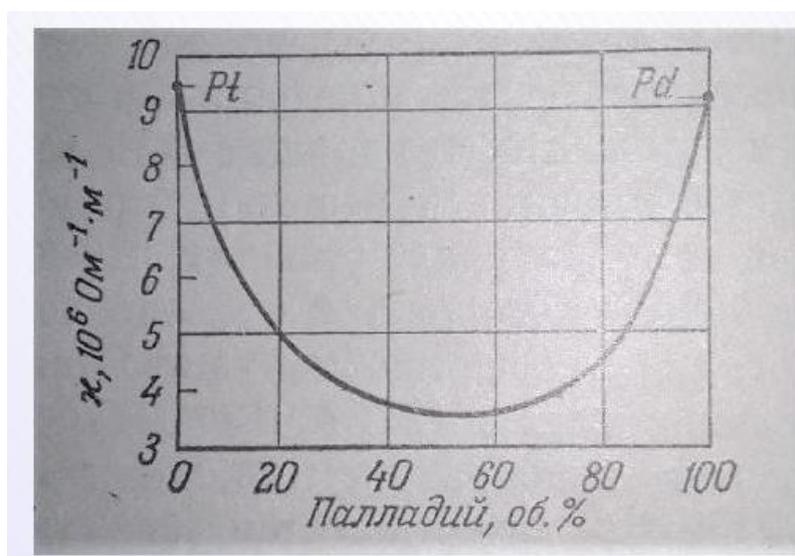


Рисунок 6.7 – Зависимость проводимости металлических сплавов от состава (например, платина – палладий)

## 7. Электрический ток в полупроводниках

Собственной проводимостью называют проводимость очень чистых полупроводниковых материалов. Доля примесей в них не должна превышать  $10^{-9}$ , другими словами, на  $10^9$  атомов *Ge* или *Si* должно приходиться не больше одного постороннего атома. Если в подобном кристалле при поглощении тепловой энергии или энергии фотона происходит переход электрона из валентной зоны в зону проводимости, то возникает не один свободный носитель, а два, т. е. пара носителей. При удалении электрона из валентной зоны там освобождается место, т. е. образуется дырка (электронная вакансия), которая может так же свободно совершать дрейф в валентной зоне, как электрон в зоне проводимости. Чтобы наглядно представить себе этот процесс, обратимся вместо зонной схемы к модели кристаллической решетки. В кристалле германия (у кремния картина аналогична) у каждого атома имеются четыре пространственно расположенных ближайших соседа, связь с которыми в силу четырехвалентности атома осуществляется путем обмена четырьмя электронами. Поскольку характер взаимодействия с соседями для всех атомов совершенно одинаков, можно представить себе схему, двумерный вариант которой изображен на рисунке 7.1.

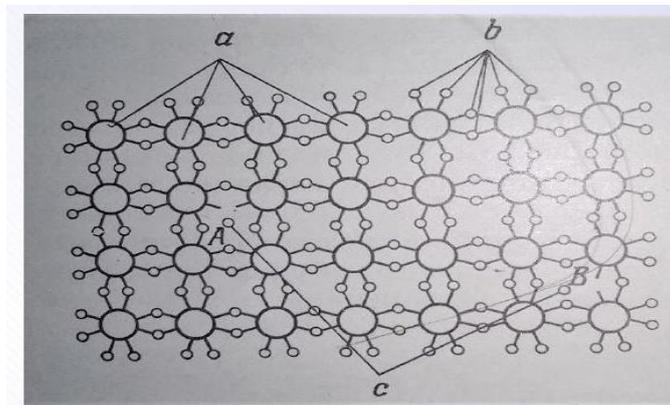


Рисунок 7.1 – Двумерная модель электронных связей в решетке германия

Вследствие теплового движения то тут, то там (например, в точках *A* и *B*) электрон разрывает свои связи и благодаря этому получает возможность дрейфовать в электрическом поле. Такой электрон принадлежит зоне проводимости. Возникающая в результате этого дырка существует в решетке недолго, так как происходит захват электрона, и дырка «заштопывается». Таким электроном может быть или электрон, освободившийся в другом месте и случайно проходящий около дырки, или расположенный вблизи дырки связанный электрон, который, заполнив

вакансию, естественно, оставляет дырку на своем прежнем месте. Первый процесс приводит к исчезновению пары носителей (электрона и дырки), вследствие чего его называют рекомбинацией. Вторым процессом, при котором дырка перемещается в каком-то предпочтительном направлении, происходит в электрическом поле, причем «заполняющий» электрон движется преимущественно против поля, а дырка, следовательно, в направлении поля. Так как этот процесс непрерывно повторяется, то можно считать, что дырка дрейфует по кристаллу в направлении электрического поля, как будто она имеет положительный заряд. Другими словами, дырка ведет себя как носитель тока с положительным зарядом, так что общая плотность тока в кристалле аддитивно складывается из вкладов электронов проводимости и дырок.

Представление о дырках, или электронных вакансиях, как об частицах с положительным зарядом служит лишь для упрощения понимания процессов, реально происходящих в валентной зоне. В действительности не может быть, конечно, и речи о положительно заряженных частицах с такой же массой, как у электронов. Их чисто формальное введение предназначено для того, чтобы заменить описание сложного процесса движения электронов валентной зоны, осуществляющегося как ряд следующих друг за другом скачков от дырки к дырке, упрощенным и более удобным представлением о непрерывно движущихся дырках. Здесь также речь идет об упрощенном описании, согласно которому общее влияние на электроны периодического поля, существующего в кристалле, заменяется представлением об эффективной, т. е. зависящей от положения внутри зоны, электронной массе.

При этом в дальнейшем отпадает необходимость в учете поля, обусловленного решеткой. Конечно, электронов с переменной массой, так же как и с положительным зарядом, не существует. (Кратковременно существующие позитроны не представляют интереса.)

Совершенно очевидно, что подобное упрощенное представление при всех условиях должно приводить к выводам, соответствующим истинному положению вещей. Поясним это на примере механизма переноса тока с помощью дырок. Допустим, что валентная зона целиком заполнена электронами, т. е. каждое состояние, разрешенное квантовыми законами, занято электроном. Такое положение, строго говоря, возможно лишь при температуре  $T=0\text{ К}$ . Внешнее электрическое поле  $E$  действует на все электроны с одинаковой силой  $F=eE$ . Но так как эффективные массы электронов в нижней половине зоны положительны, а в верхней отрицательны, то ускорение, а также устанавливающаяся при равновесии средняя скорость дрейфа в нижней половине зоны совпадают с направлением силы, т. е. противоположны направлению, а в верхней

части зоны, наоборот, направлены навстречу силе. Общий ток, таким образом, равен разности отдельных токов, соответствующих этим двум «группам». Можно показать, что в целиком заполненной зоне ток будет точно скомпенсирован, т. е. равен нулю (как это, очевидно, выполняется при симметричном распределении массы). Это еще раз подтверждает, что целиком заполненная зона не вносит вклада в ток.

В том случае, когда имеются дырки, т. е. когда зона лишь частично заполнена электронами, в ее верхней половине, очевидно, будет содержаться недостаточно электронов с отрицательной массой, чтобы ток был полностью скомпенсирован. Поэтому будет существовать избыток электронов с положительной массой, создающих ток в направлении, предсказываемом классической теорией. Ток тем больше, чем больше недостает электронов в верхней части зоны, т. е. чем выше концентрация дырок. В этом случае можно также доказать, что дырочный ток имеет точно такую же величину, как и ток, переносимый электронами частично заполненной валентной зоны.

Объяснение эффекта Холла также можно дать, не прибегая к помощи облегчающего представления о дырочной проводимости. Для этого необходимо рассмотреть электроны частично заполненной валентной зоны и проанализировать их движение при одновременном воздействии на них электрического и магнитного полей. В этом случае довольно громоздкие вычисления приводят в конечном итоге к тем же самым результатам, которые следуют из представления о дырочной проводимости.

Возникновение носителей в полупроводниках, обладающих собственной проводимостью, обусловлено в основном двумя противоположными явлениями: образованием пар, т. е. вырыванием электрона из решетки, вследствие чего возникает свободный электрон и свободная (способная к дрейфу) дырка, и рекомбинацией, т. е. процессом, при котором такая пара исчезает. Для образования пары необходимо поглощение определенной энергии, равной энергетическому расстоянию между верхним краем (потолком) валентной зоны и нижним краем (дном) зоны проводимости, т. е. равной ширине запрещенной зоны (рисунок 7.2). Эта энергия соответствует потенциалу ионизации в плазме. Однако она значительно меньше потенциала ионизации. Так, ширина запрещенной зоны у германия равна 0,72 эВ и 0,11 эВ у кремния, в то время как потенциал ионизации составляет от 4 до 25 эВ. Такое количественное различие обусловлено тем, что при ионизации газа происходит отрыв электрона от отдельного атома или молекулы, не подверженных влиянию других частиц, а при образовании пары в твердом теле электрон вырывается из атома, входящего в состав решетки, т. е. в процессе

участвуют и ближайшие соседи атома. Обозначим энергию, необходимую для перехода электрона через запрещенную зону,  $W_i = eU_i$ .

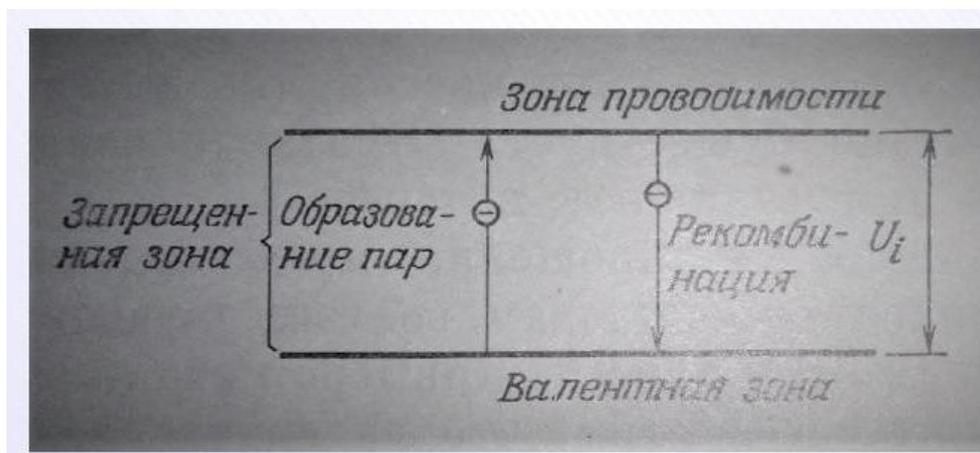


Рисунок 7.2 – Образование пар носителей заряда и рекомбинация в зонной модели

При равновесии устанавливается определенная концентрация носителей  $n = p = n_i$ , которая определяется условием, что скорость образования пар, т. е. число пар носителей, возникших в единице объема за единицу времени, равна скорости рекомбинации. Первая из этих величин слабо зависит от имеющейся концентрации носителей, тогда как вторая пропорциональна произведению концентраций пр. Поэтому, применяя закон действующих масс, мы приходим к соотношению

$$pn = n_i^2 = 4 \left( \frac{2\pi kT}{h^2} \right)^3 e^{-eU_i/kT} = N^2 e^{-eU_i/kT}. \quad (7.1)$$

Входящая сюда величина

$$N = 2 \left( \frac{2\pi kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (7.2)$$

называется эффективной плотностью состояний. Ее значение при комнатной температуре (300 К) равно  $N_0 = 2,5 \cdot 10^{25} \text{ м}^{-3}$ . Величина  $n_i$  называется инверсной концентрацией. Так как  $p = n$ , имеем

$$p = n = n_i = N e^{-eU_i/2kT}. \quad (7.3)$$

Величина  $U_i$  равна 0,72 В для германия и 1,11 В для кремния, так что при 300 К имеем  $n_i = 2,4 \cdot 10^{19} \text{ м}^{-3}$  для германия и  $n_i = 6,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$  для кремния. Таковы же значения концентраций носителей в случае собственной проводимости.

В хорошо проводящих металлах плотность электронного газа на 9 и более порядков выше, чем и объясняется столь большое различие в проводимости. Однако определенную роль играет и подвижность носителей, как это видно из формулы (3.2):

$$\kappa_i = en_i(b^+ + b^-). \quad (7.4)$$

На рисунке 7.3 сопоставлены значения подвижностей носителей обоих видов. Они мало отличаются друг от друга, но превышают примерно в 100 раз подвижность электронов проводимости в металлах. В результате отношение проводимости полупроводников и хорошо проводящих металлов оказывается примерно равным  $1:10^7$ , если отношение концентраций носителей имеет порядок  $1:10^9$ .

|    | $b^-, \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ | $b^+, \text{ м}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ |
|----|--|--|
| Ge | 0,36   | 0,17   |
| Si | 0,17   | 0,025  |
| Cu | 0,005  | —  |

Рисунок 7.3 – Подвижности электронов

Рассчитанные по формуле (7.4) значения проводимости при  $T = 300 \text{ К}$  составляют  $2,1 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{ м}^{-1}$  для германия и  $2 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{ м}^{-1}$  для кремния. Поскольку проводимость очень чувствительна к всевозможным загрязнениям, как мы увидим в дальнейшем, ее измеренное значение является очень точным критерием чистоты материала.

В отличие от металлических проводников у полупроводников проводимость увеличивается при повышении температуры: проводимость примерно пропорциональна  $\exp(-eU_i / 2kT)$ . Увеличение проводимости с температурой, обусловленное ростом концентрации носителей, настолько сильно преобладает, что влиянием температурной зависимости подвижностей можно пренебречь. Почти не сказывается также влияние множителя  $T^{3/2}$ . Если построить зависимость  $\lg \kappa_i$  от  $1/T$ , то получится

прямая (рисунок 7.4) с отрицательным наклоном, по тангенсу угла которого можно определить ширину запрещенной зоны  $eU_i$ . Подводя итог, можно сказать, что влияние температуры на проводимость металлов, у которых число носителей постоянно, обусловлено лишь изменением подвижности носителей, а именно ее уменьшением с повышением  $T$ . У полупроводников, напротив, при повышении  $T$  очень быстро растет число носителей, так что зависимостью подвижностей от температуры, безусловно, можно пренебречь.

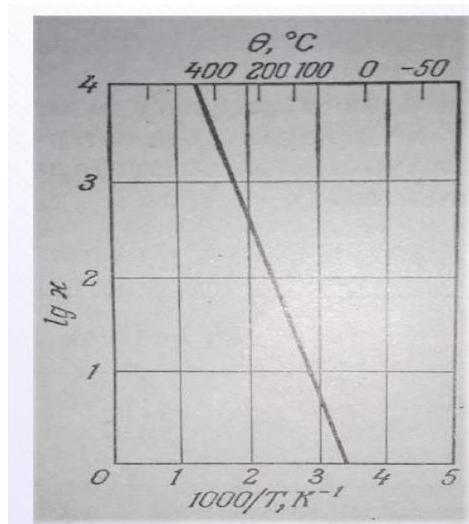


Рисунок 7.4 – Температурная зависимость собственной проводимости германия

При постоянной температуре концентрация и подвижность носителей в полупроводнике, а следовательно, и проводимость остаются постоянными. Это означает, что выполняется закон Ома. Для технического применения полупроводников, обладающих собственной проводимостью, важное значение имеет большая крутизна хода температурной зависимости проводимости, что позволяет использовать их в качестве термических датчиков (термисторов). У хороших диэлектриков ширина запрещенной зоны больше, чем у полупроводников. Так, у алмаза она достигает примерно 7 эВ. Согласно соотношению (7.3), в этом случае концентрация носителей, а следовательно, и проводимость чрезвычайно малы.

Если к образцу германия, обладающему собственной проводимостью, подсоединить два металлических контакта и приложить к ним напряжение, то из условия непрерывности тока следует, что на поверхностях металл – полупроводник должно происходить преобразование двух компонент тока в соответствующие потоки свободных электронов в металлическом контакте. К анодному контакту движутся электроны; они сразу же

захватываются металлом и протекают по замкнутой цепи, как обычные электроны проводимости. Подходя к катодному контакту, они эмитируются в полупроводник. В результате цепь электронного тока замыкается. В противоположность электронам дырки в поле устремляются к катодному контакту. Каждая дырка соединяется с электроном, отнятым у металла (нейтрализуется), другими словами, перестает существовать. Электроны, отнятые у катода, должны снова возвратиться в металл с тем, чтобы и для дырочного тока выполнялось условие непрерывности. Это осуществляется путем передачи аноду электронов, в результате чего на анодной поверхности образуются дырки. Чтобы проще было представить движение дырок, нужно исходить из того, что перемещение дырок по существу является направленным в противоположную сторону давлением электронов, эмитируемых катодом и захватываемых анодом.

Кристаллы, обладающие собственной проводимостью, непригодны для создания управляемых элементов, поскольку, помимо низкой проводимости, они обладают при постоянной температуре линейной вольт-амперной характеристикой. Проводимость полупроводника можно значительно повысить, если в первоначально чистое вещество добавить небольшое количество другого вещества, т. е. легировать его. Таким образом получают полупроводниковые материалы, в которых в зависимости от требований будет преобладать либо электронная, либо дырочная проводимость. Подобные материалы, полученные с помощью легирования, сокращенно называют полупроводниками *n*- и *p*-типа.

#### *Решеточная модель примесной проводимости*

Наиболее пригодными для легирования оказались элементы III и V групп периодической системы, т. е. соседних с IV группой (рисунок 7.5).

| Группа | III   | IV    | V     |
|--------|-------|-------|-------|
|        | 13 Al | 14 Si | 15 P  |
|        | 31 Ga | 32 Ge | 33 As |
|        | 49 In | 50 Sn | 51 Sb |

Рисунок 7.5 – Часть периодической системы элементов

Предположим, что к расплавленному чистому германию добавлено небольшое количество мышьяка. Рассмотрим, как атомы примеси встраиваются в решетку германия. Экспериментально установлено, что атомы примеси располагаются не в междоузлиях, а в узлах решетки, вытесняя оттуда атомы германия. Это показано на рисунке 7.6. Так как

пятивалентный атом мышьяка имеет пять валентных электронов, а для связи его с соседними атомами германия требуются лишь четыре электрона, то пятый электрон оказывается в известной степени «пятым колесом в телеге». Это значит, что он легко отделяется от атома и может оказаться в зоне проводимости в качестве свободного электрона. Сам атом примеси при этом превращается в положительный ион. Атомы примеси такого рода, т. е. атомы V группы периодической системы, называются донорами, поскольку они легко отдают электрон. Отрыв происходит настолько легко, что уже при комнатной температуре энергии теплового движения достаточно, чтобы все без исключения доноры оказались ионизованными. Благодаря этому возникают свободные электроны, концентрация которых равна концентрации доноров, и появляется соответствующая проводимость.

Если же добавить к чистому германию небольшое количество галлия или индия, т. е. элемента III группы, то атомы примеси также будут располагаться в узлах решетки. Поскольку они трехвалентны, то для укомплектования связи с четырьмя соседями у каждого из них не хватает по одному электрону.

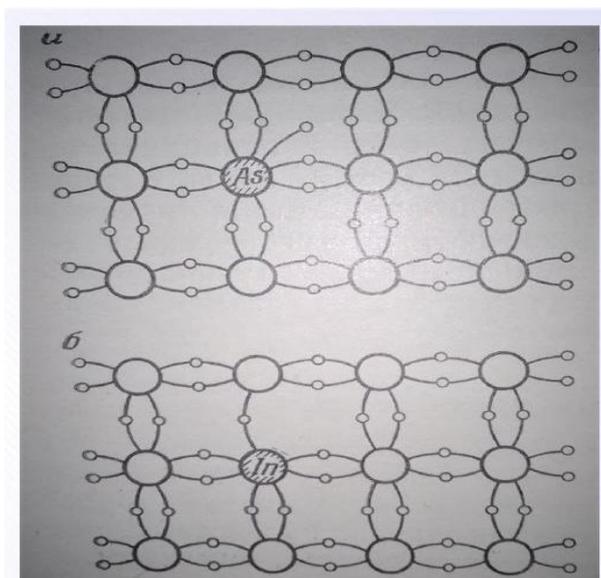


Рисунок 7.6 – Влияние атомов примеси (дефектов)

Вследствие этого возникает дырка, которая может начать кочевать, если случайно рядом окажется один из ближайших электронов и заполнит пустое место, т. е. укомплектует связь. В результате этого атом примеси становится отрицательным ионом, а дырка, т. е. электронная вакансия, займет место электрона. Такой процесс обмена может повторяться снова и снова, т. е. дырка будет перемещаться по кристаллу. Примесные центры

данного вида (III группы) благодаря их свойству захватывать электроны называют акцепторами. Попадающий в дырку электрон движется преимущественно против электрического поля, откуда следует, что сама дырка дрейфует в направлении поля, т. е. вносит положительный вклад в ток, обуславливая проводимость, которая носит название дырочной проводимости.

При комнатной температуре практически все примесные центры обеспечены электронами, так что концентрация дырок и в этом случае равна концентрации атомов примеси (акцепторов). Разумеется, целесообразно легировать кристалл примесью какого-то одного вида так, чтобы по желанию получать полупроводники с преобладанием либо электронной, либо дырочной проводимости. Если ввести *Ga* и *Sb* в одинаковой концентрации, то все электроны, отданные донорами, заполнили бы связи акцепторов, т. е. опять возникли бы условия, соответствующие случаю собственной проводимости. Ионизованные примесные центры, так же как и основные атомы решетки (*Ge*), неподвижно встроены в решетку и поэтому, несмотря на наличие у них заряда, не могут вносить вклада в проводимость. За проводимость ответственны либо одни свободные электроны, либо одни дырки, возникающие при ионизации примесных центров. Так как перемещение дырок по существу является завуалированным перемещением электронов, то примесную проводимость можно с полным правом рассматривать как явление электронной, а не электролитической проводимости.

На практике, за исключением особых случаев, концентрация примесей, а следовательно, и носителей имеет порядок  $10^{23} \text{ м}^{-3}$ . Сравнение этой величины с приведенной выше концентрацией носителей в чистом *Ge*

$$(n = p = 2,4 \cdot 10^{19})^{-3}$$

показывает, что концентрация носителей, а вместе с ней и проводимость при легировании увеличиваются в 4000 раз. Закон действующих масс справедлив и для легированных кристаллов. Это означает, что концентрация основных носителей, определяемая родом и количеством примеси, как правило, на несколько порядков больше инверсной концентрации  $n_i$ , тогда как концентрация неосновных носителей, наоборот, на столько же порядков меньше  $n_i$ . В приведенном выше примере при легировании донорной примесью мы имели бы значения  $n = 10^{23} \text{ м}^{-3}$  и  $p = 6,3 \cdot 10^{23} \text{ м}^{-3}$ . Концентрация дырок тогда была бы в  $1,6 \cdot 10^7$  раз меньше концентрации электронов, так что

дырочной проводимостью в этом случае можно, безусловно, пренебречь по сравнению с электронной.

Электроны и дырки могут не только дрейфовать (в соответствии с их подвижностями) в электрическом поле (дрейф в поле), но и совершать перемещение, обусловленное существованием градиента концентрации (диффузионный дрейф). Между коэффициентом диффузии  $D$  и подвижностью обоих видов носителей, так же как и в плазме, существует соотношение

$$\frac{D}{b} = \frac{kT}{e}. \quad (7.5)$$

Так как примесные центры, имеющиеся в кристалле, представляют собой дефекты решетки, они уменьшают длину свободного пробега носителей, а следовательно, и их подвижность и коэффициент диффузии. Правда, это заметно лишь при значительных концентрациях примеси.

Прежде всего выясним вопрос об энергетическом положении примесных центров в зонной модели. Поскольку доноры легко, т. е. без затраты большой энергии, отдают электроны в зону проводимости, то их энергетические уровни должны располагаться под нижней границей зоны проводимости почти вплотную к ней. Аналогично акцепторы с небольшими затратами энергии присоединяют электроны из валентной зоны (атом акцептора отнимает от соседней связи недостающий для его связи четвертый электрон), так что акцепторный уровень должен лежать вблизи верхней границы валентной зоны. Оба эти случая представлены на рисунке 7.7. Расстояние между примесными уровнями и границами зон составляет примерно 0,05–0,1 эВ.

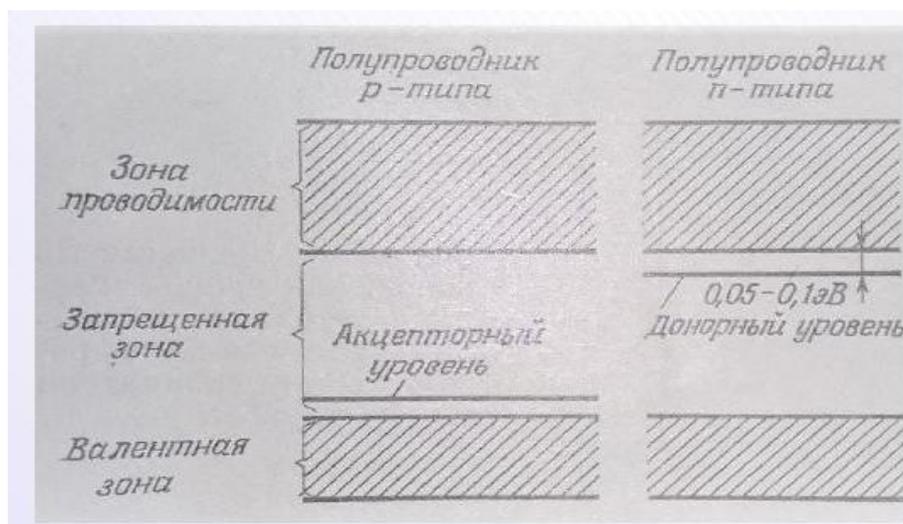


Рисунок 7.7 – Расположение примесных центров в зонной схеме

Для решения целого ряда вопросов необходимо знать положение уровня Ферми. Уровень Ферми связан с локальным значением потенциала, так как его положение определяется внешними полями, приложенными к полупроводнику, и не зависит от возникающих внутри неоднородно легированного полупроводника полей, потенциалы которых не проявляются вне кристалла. В проводнике, на который не действует внешнее поле и в котором отсутствуют также внутренние ЭДС, например термоЭДС, положение уровня Ферми везде одинаково. Поэтому на схеме зонной структуры уровень Ферми всегда изображается параллельной оси  $x$  прямой линией, которую можно принять за начало отсчета энергий для всех энергетических зон.

В хорошо проводящих металлах (обладающих электронной проводимостью) при  $T=0$  К уровень Ферми совпадает с наиболее высоким, занятым электронами уровнем зоны проводимости. Отсчитываемая от ее нижней границы энергия  $\mu$  уровня Ферми связана с концентрацией электронов  $n$ . При более высоких температурах вследствие того, что с повышением температуры усиливается размытие распределения Ферми, четкой верхней границы занятых уровней более не существует. В этом случае для определения значения  $\mu$  используется выражение

$$n = \int_0^{\infty} F(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{\varepsilon}}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon - \mu}{kT}\right]} d\varepsilon, \quad (7.6)$$

которое показывает, что, согласно статистике Ферми, электроны заполняют с заданной концентрацией все имеющиеся уровни, начиная с нижнего, до тех пор, пока не будут израсходованы все электроны, содержащиеся в  $1 \text{ м}^3$ .

Применение этого соотношения к случаю металлической проводимости показывает, что энергия уровня Ферми  $\mu$  зависит от температуры. Эта зависимость описывается приближенным выражением

$$\mu = \mu_0 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right] \quad (7.7)$$

из которого видно, что  $\mu$  незначительно уменьшается с повышением температуры. Так, для меди при комнатной температуре ( $300 \text{ К}$ )  $\mu$  примерно на  $8 \cdot 10^{-5}$  эВ меньше, чем при  $0 \text{ К}$ .

Соотношение (7.6) можно использовать также и для вычисления уровня Ферми у полупроводников. При этом оказывается, что в случае собственной проводимости уровень Ферми лежит в середине запрещенной зоны, так что (по отношению к верхней границе валентной зоны)  $\mu = eU_i / 2$ .

Если имеются примесные центры, то положение уровня Ферми зависит от их концентрации  $n_D$  или  $n_A$ , а следовательно, и от концентрации соответствующих носителей, т. е.  $n$  или  $p$ . При увеличении концентрации акцепторов (полупроводник  $p$ -типа) уровень Ферми приближается к валентной зоне. На рисунке 7.8 это показано для  $Ge$  и  $Si$  (при  $T = 300$  К). В предельном случае слабого легирования уровень Ферми стремится к среднему положению, так как полупроводник в этом случае приближается к состоянию с собственной проводимостью. Наоборот, при очень сильном легировании уровень Ферми может проникнуть в зону проводимости или валентную зону (вырождение).

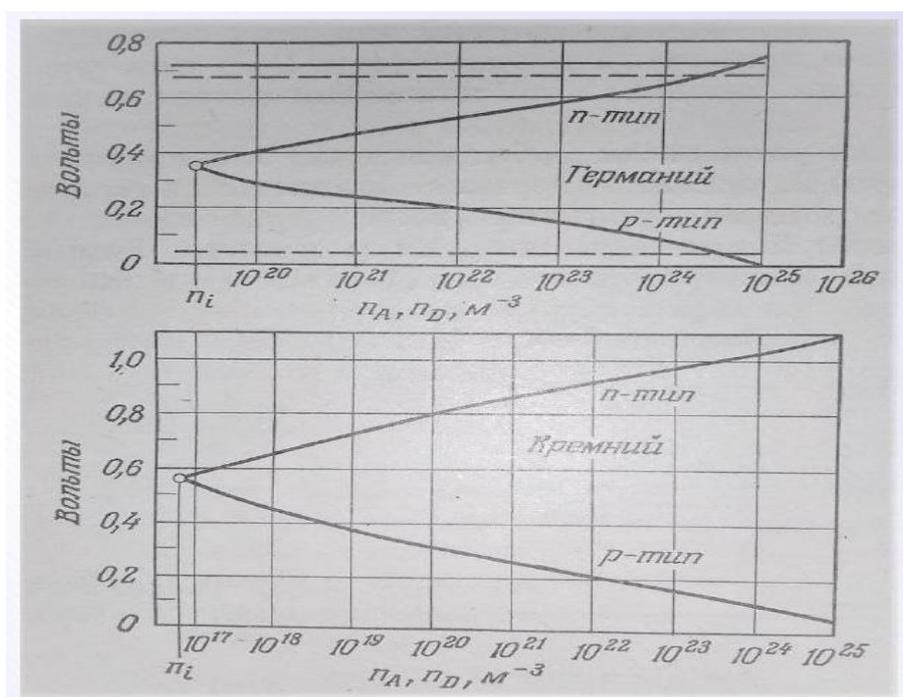


Рисунок 7.8 – Зависимость положения уровня Ферми у германия и кремния от степени легирования (при комнатной температуре)

Положение уровня Ферми у полупроводников зависит также от температуры  $T$ , причем в более сильной степени, чем это имеет место в случае металлов. При повышении температуры уровень Ферми

приближается к среднему положению  $U_i/2$ , так как при достаточно высокой температуре собственная проводимость начинает преобладать над примесной из-за очень сильного возрастания концентрации носителей при повышении температуры  $T$ , и поэтому легирование уже не играет никакой роли. С этим согласуется тот экспериментальный факт, что при достаточно высокой температуре зависимость проводимости от температуры подчиняется экспоненциальному закону и для примесных полупроводников.

Концентрации носителей  $p$  и  $n$  в примесном полупроводнике, как и в полупроводнике с собственной проводимостью, можно выразить через величину, характеризующую положение уровня Ферми и плотность состояний  $N$ .

Для этого следует  $eU_i/2$  заменить на  $\mu$ , в результате чего получаем

$$p = N \exp \left[ -\frac{\mu^+}{kT} \right], \quad (7.7)$$

$$n = N \exp \left[ -\frac{\mu^-}{kT} \right], \quad (7.8)$$

где  $\mu^+$  и  $\mu^-$  – энергетические расстояния уровня Ферми от верхнего края валентной зоны и от нижнего края зоны проводимости соответственно. Значения  $\mu$  указываются в джоулях.

Ход уровня Ферми для любого направления в твердом теле, например для направления  $x$ , зависит только от приложенного внешнего напряжения  $V$  и, следовательно, от напряженности поля, созданного в проводнике. Если  $V=0$ , то уровень Ферми для всего проводника расположен на одной высоте независимо от того, имеются ли пограничные поверхности между областями с проводимостью разного вида. Уровень Ферми, таким образом, целесообразно считать исходным для отсчета энергии зон. При этом зависимость расстояния между границами зон полупроводников от температуры и концентрации носителей описывается формулами (7.7), (7.8). Если где-либо происходит пространственное изменение концентрации носителей  $p$  или  $n$  (например, концентрация меняется как функция от  $x$ ), то соответственно изменяются Энергетические расстояния  $\mu^+$  и  $\mu^-$ , следствием чего является искривление границ зон, а также всех энергетических уровней. К этому мы еще вернемся ниже.

Если к проводнику приложено внешнее напряжение  $V$ , то уровень Ферми получает соответствующий наклон и в однородном, равномерно легированном полупроводнике все границы зон будут иметь одинаковый наклон, т.е. будут параллельны уровню Ферми. Это показано на рисунке 7.9 для случая не очень сильно легированного кристалла  $Ge$  с проводимостью  $n$ -типа, уровень Ферми у которого лежит ниже зоны проводимости. Пусть правый конец кристалла положительно заряжен. Наблюдаемый наклон объясняется тем, что в соответствии с моделью Шоттки положительные значения потенциала откладываются вниз. Электроны зоны проводимости рассматриваются, согласно модели, как обладающие массой шарики, скатывающиеся вправо под действием силы тяжести. Чтобы модель лучше соответствовала действительности, представим мысленно, что электроны движутся в вязкой жидкости (в масле). Тогда их скорость пропорциональна действующей силе, т.е. силе, действующей со стороны поля, что определяет их подвижность (постоянную). Дырки, являющиеся неосновными носителями, представим себе как пузырьки воздуха в масле, которые движутся снизу вверх вдоль верхней границы валентной зоны, оставаясь ниже ее, с постоянной скоростью дрейфа, что обусловлено вязкостью. Оба потока носителей складываются в общий поток, направление которого задается полярностью приложенного напряжения.

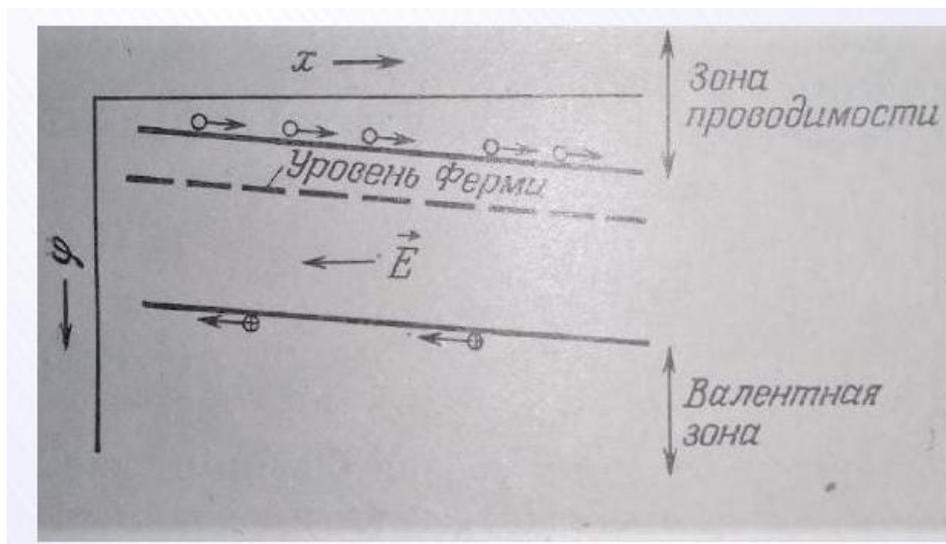


Рисунок 7.9 – Движение носителей в электрическом поле в полупроводнике  $n$ -типа

## 8. Контактные явления в металлах и полупроводниках

Рассмотрим сначала очень важный для всех практических применений полупроводников контакт металл – полупроводник, а затем контакт полупроводник – вакуум.

Обсуждение будет проводиться для полупроводника  $n$ -типа. Обозначим работу выхода металла и полупроводника соответственно через  $U_{AM}$  и  $U_{AH}$ . Если расположить металл и полупроводник друг около друга, не соединяя их проводником, то в пространстве между ними поля не будет, так что ход потенциала и вид энергетических зон будут соответствовать рисунку 8.1, *а*. Предположим, что  $U_{AM} > U_{AH}$ . Соединим металл и полупроводник проволокой (короткое замыкание,  $V = 0$ ). Это приводит к тому, что уровень Ферми  $FN$  устанавливается в обоих телах на одной высоте (рисунок 8.1, *б*); в результате потенциал полупроводника обязательно повысится относительно потенциала металла (смещение вниз). Это осуществляется путем перемещения некоторого числа электронов из полупроводника в металл. Если, наоборот,  $U_{AM} < U_{AH}$ , то полупроводник должен заряжаться отрицательно, т. е. электроны должны переходить из металла в полупроводник. В любом случае на двух обращенных друг к другу поверхностях, которые мы считаем плоскими и параллельными, возникает двойной слой с соответствующим скачком потенциала. При  $U_{AM} > U_{AH}$  в полупроводнике преобладает положительный заряд доноров, отдавших электроны, в результате чего образуется заряженный слой определенной конечной толщины. Вне этого заряженного слоя сохраняется ненарушенное нейтральное состояние. Таким образом, концентрация носителей  $n$  вблизи границы является функцией координаты, и в соответствии с приведенными выше соображениями края зоны изгибаются, как это показано на рисунке 8.1, *б*. При соприкосновении поверхностей друг с другом число электронов в слое, обедненном электронами, уменьшается еще больше, так как увеличение емкости должно привести к соответствующему увеличению заряда в слое (рисунок 8.1, *в*). Толщина обедненного электронами слоя может достигать 1 мкм. Края зоны при этом поднимаются так высоко, что полное падение потенциала  $U_{AM} - U_{AH}$  происходит внутри слоя с пространственным зарядом (внутри слоя, содержащего доноры). Оно совпадает теперь с так называемой диффузионной разностью потенциалов  $U_D$ , к чему мы еще вернемся. Этот потенциальный барьер могут преодолеть лишь некоторые электроны полупроводника. Переносимый ими ток точно компенсируется соответствующим встречным током из металла (динамическое равновесие).

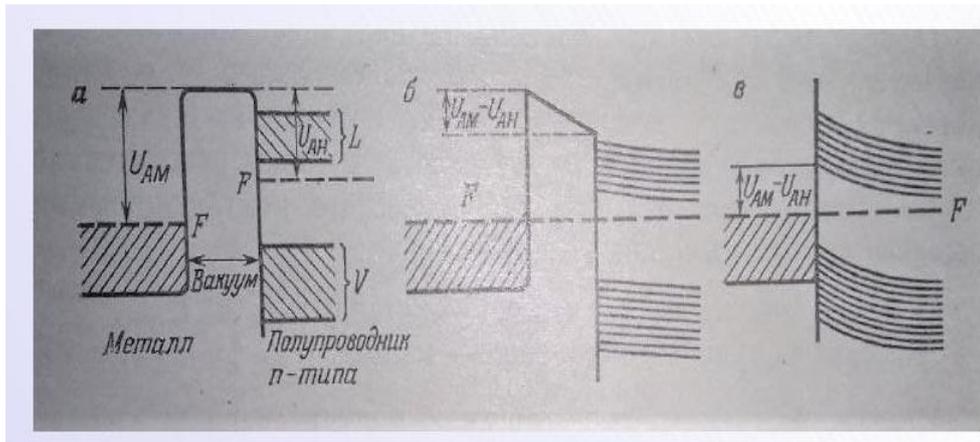


Рисунок 8.1 – Контакт металл – полупроводник ( $n$ -типа) для случая  $U_{AM} > U_{AH}$

Легко понять, что такой контакт обладает свойствами выпрямителя, а именно пропускает ток в направлении от металла к полупроводнику. Если полупроводник обладает потенциалом  $F$ , отрицательным относительно потенциала металла, то уровень Ферми и края зоны в полупроводнике смещаются вверх, что способствует прохождению электронного тока в направлении справа налево (рисунок 8.1). Наоборот, если полупроводник соединен с положительным полюсом, то уровень Ферми и края зоны изгибаются вниз. При этом дырки могут перетекать из валентной зоны в металл, но поскольку они являются неосновными носителями, то создаваемым ими малым током можно пренебречь. С другой стороны, для того чтобы произошел переход электронов металла в зону проводимости полупроводника, они должны преодолеть потенциальный барьер  $U_{AM} - U_{AH}$ , что удастся лишь незначительному числу электронов. При замене  $n$ -полупроводника  $p$ -полупроводником в принципе остаются справедливыми те же рассуждения, но только, естественно, с изменением индексов и переменных некоторых математических знаков на противоположные. Направлением выпрямления в этом случае является направление от полупроводника к металлу. Особую роль в общей технологии полупроводниковых элементов играют так называемые омические контакты, т.е. такие контакты металла с полупроводником, которые не оказывают выпрямляющего действия и сопротивление которых относительно низко. Легко показать, что для омического контактирования должны выполняться следующие условия:

- контакт полупроводник  $n$ -типа – металл:  $U_{AM} < U_{AH}$ ;
- контакт полупроводник  $p$ -типа – металл:  $U_{AM} > U_{AH}$ .

Ограничимся опять рассмотрением полупроводника  $n$ -типа. До установления контакта уровень Ферми в полупроводнике расположен ниже, чем в металле. При контакте для выравнивания уровней Ферми полупроводник должен быть отрицательно заряжен по отношению к металлу. Необходимые для этого избыточные электроны скапливаются в пограничном слое, что приводит к изгибанию края зоны вниз (рисунок 8.2). В результате из полупроводника в этот слой переходит все большее число электронов, и их концентрация в слое становится настолько высокой, что нижняя граница зоны проводимости оказывается даже ниже уровня Ферми. При наложении внешнего поля скопившиеся здесь электроны могут беспрепятственно перейти в металл, так же как при обратной полярности электроны металла могут перейти в полупроводник. Таким образом, подобный контакт в идеальном случае совсем не обладает сопротивлением. Сопротивление будет тогда обуславливаться сопротивлением самого полупроводника, которое и определяет омическую характеристику контакта.

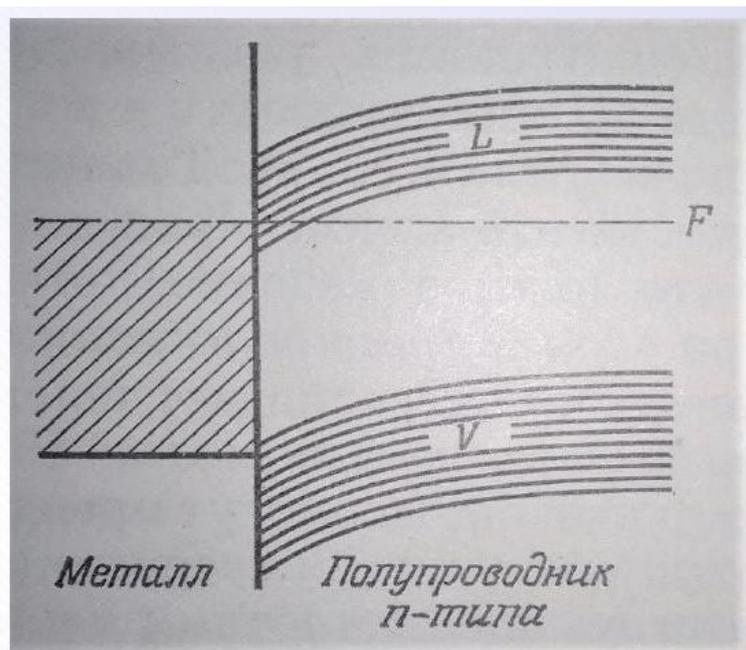


Рисунок 8.2 – Омический контакт металла с полупроводником  $n$ -типа

Однородно легированный полупроводник так же непригоден для создания управляемых элементов, как однородный полупроводник, обладающий собственной проводимостью, так как при постоянной температуре он подчиняется закону Ома. Лишь неоднородно легированные полупроводники с зависящей от координат концентрацией примесей обладают свойствами, которые могут быть использованы в технике.

Технической реализацией этого принципа является  $p-n$ -переход. Он получается, если первоначально чистый монокристалл ( $Ge$  или  $Si$ ) путем соответствующего легирования превратить на одной стороне в полупроводник  $n$ -типа, а на другой –  $p$ -типа. Поверхность раздела между двумя различно легированными областями определяет электрические свойства кристалла в целом.

Рассмотрим кристалл, имеющий форму длинного цилиндра, левая половина которого сильно легирована примесью  $p$ -типа, а правая – примесью  $n$ -типа (рисунок 8.3). Пусть сначала контактов нет, так что кристалл предоставлен сам себе. Равновесную концентрацию носителей заряда в веществе ( $Ge$ ) примем округленно равной  $n_i = 10^{19} \text{ м}^{-3}$ ; концентрации акцепторов (слева) и доноров (справа) должны быть одинаковыми, а именно  $n_D = n_A = 10^{22} \text{ м}^{-3}$ . Принятые условия не ограничивают общности наших рассуждений, но упрощают объяснение явлений. Выберем в качестве оси  $x$  продольную ось кристалла. Пусть две различно легированные области соприкасаются в плоскости  $x=0$ . В этом месте концентрация примеси с каждой стороны должна скачкообразно падать до нуля, так что  $n_D = 0$  при  $x \leq 0$ ,  $n_A = 0$  при  $x \geq 0$ . Концентрация подвижных носителей (электронов или дырок) не может изменяться скачком, так как в этом случае мы имели бы  $dn/dx = dp/dx = \infty$  при  $x=0$ , и, следовательно, должны были бы течь бесконечно большие диффузионные токи. Поэтому резкое изменение концентрации носителей на шесть порядков должно происходить непрерывно, так чтобы плотность диффузионного тока оставалась конечной. Направленные навстречу друг другу потоки носителей нарушают равновесие пространственных зарядов в областях, граничащих с плоскостью  $x=0$ , поскольку  $p$ -область теряет дырки и получает электроны, так что здесь возникает отрицательный пространственный заряд, а  $n$ -область соответственно заряжается положительно. Ход потенциала  $\varphi(x)$ , изображенный пунктиром на рисунке 8.3, определяется уравнением Пуассона, которое для одномерного случая имеет вид

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (8.1)$$

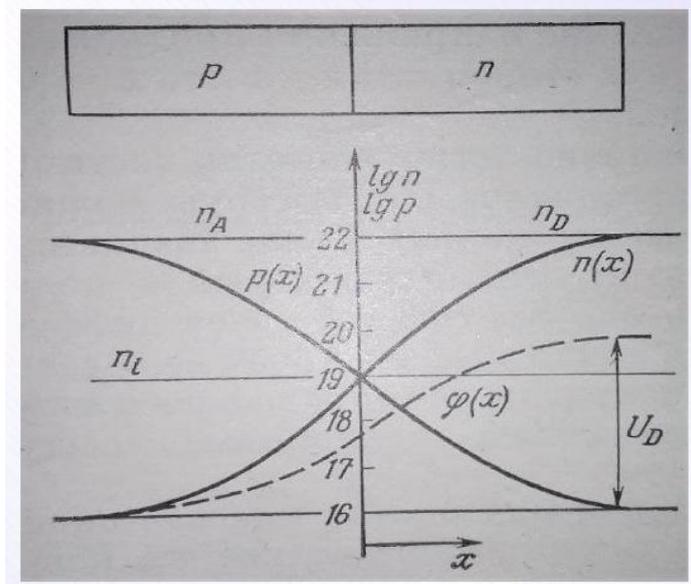


Рисунок 8.3 – Зависимость концентрации примесных центров, концентрации носителей и локального значения потенциала от координаты  $x$  в  $p-n$ -переходе в отсутствие тока

Согласно уравнению (8.1), знак кривизны функции  $\varphi(x)$  в каждой точке противоположен знаку пространственного заряда (вниз отложены положительные значения  $\varphi$ ).

Ниже будет показано, что области пространственного заряда не очень глубоко проникают в однородно легированные области, и, таким образом, все внутреннее падение напряжения приходится на тонкий слой, расположенный с двух сторон от плоскости  $x = 0$ , а вне его потенциал снова постоянен.

Следовательно, между двумя различно легированными частями кристалла существует разность потенциалов  $U_D$ , которую можно назвать диффузионным напряжением, поскольку своим возникновением она обязана диффузии носителей. Электрическое поле  $E = -\text{grad}\varphi$  направлено так, что оно противодействует диффузии и при условии отсутствия тока точно компенсирует ее. Здесь мы вновь встречаемся с уже неоднократно упоминавшейся выше барометрической формулой, описывающей равновесие между диффузией и силой тяжести.

В тех случаях, когда частицы, подчиняющиеся классической статистике, диффундируют против поля, распределение их концентрации описывается формулой Больцмана. (В рассматриваемом случае концентрация электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне мала, так что вырождение отсутствует и применима классическая статистика.)

Ход потенциала в  $p-n$ -переходе в отсутствие тока можно наглядно представить на зонной схеме (рисунок 8.4). Поскольку внешнее напряжение отсутствует, уровень Ферми не должен меняться в пределах кристалла, а зоны должны иметь такую форму, чтобы уровень Ферми был правильно расположен по отношению к ним. Нижняя граница зоны проводимости представляет потенциальную кривую для электронов; ей параллельны все границы зон. Наклон этой кривой всюду равен величине напряженности поля в кристалле, под действием которого электроны (как тяжелые шарики в масле) движутся направо, а дырки (как воздушные пузырьки в масле) – налево, что уравнивает перемещение носителей заряда, обусловленное диффузией.



Рисунок 8.4 – Энергетическая зонная схема  $p-n$ -перехода в отсутствие тока

Примем, что нулевое значение внутреннего потенциала  $\varphi$  соответствует точке  $x = -\infty$ , тогда для концентрации носителей, согласно закону Больцмана, получим

$$p(x) = p_p \exp\left[-\frac{\varphi(x)}{V_{term}}\right] \quad (8.2)$$

$$n(x) = n_n \exp\left[-\frac{U_D - \varphi(x)}{V_{term}}\right], \quad (8.3)$$

где через

$$V_{term} = \frac{kT}{e} \quad (8.4)$$

обозначена температура, выраженная в вольтах. Для комнатной температуры ( $T = 300 \text{ К}$ ) имеем  $V_{term} = 0,026 \text{ В}$ . Кроме того, для концентрации основных носителей введены обозначения  $p_p$  (концентрация дырок в еще не искаженной  $p$ -области) и  $n_n$  (концентрация электронов в  $n$ -области). Пользуясь для концентраций неосновных носителей сокращенными обозначениями  $p_n$  и  $n_p$ , получим из приведенных выше выражений следующее соотношение между концентрациями основных и неосновных носителей:

$$\frac{p_n}{p_p} = \frac{n_p}{n_n} = \exp\left[-\frac{U_D}{V_{term}}\right]. \quad (8.5)$$

Здесь уместно вспомнить причину возникновения ЭДС в электролитах, которая также вызывается противоположно направленным действием диффузии и поля. В соответствии с этим соотношения между разностью потенциалов металл – электролит и концентрациями носителей заряда  $\gamma$  и  $\gamma_M$  подобны соотношениям для  $p-n$ -перехода. И в том и в другом случае существенную роль играет фактор Больцмана. Различие между двумя названными случаями состоит, однако, в том, что ЭДС электролитического элемента поддается прямому измерению и может быть использована как источник энергии. Диффузионное же напряжение  $p-n$ -перехода, наоборот, нельзя измерить непосредственно. Если бы на двух концах кристалла в действительности появилось измеримое напряжение  $U_D$ , то это позволило бы, снимая ток, привести в движение электромотор и получить работу, которая в конечном итоге совершалась бы только за счет теплосодержания кристалла. Кристалл должен был бы при этом непрерывно охлаждаться, что противоречит второму началу термодинамики. (В гальваническом же элементе снимаемая электрическая мощность, как известно, получается за счет энергии химического превращения вещества.)

Невозможность непосредственного измерения диффузионного напряжения  $p-n$ -перехода физически обусловлена тем, что для измерений такого рода необходимы металлические контакты, на которых возникают градиенты потенциалов, в сумме равные  $U_D$  и точно компенсирующие диффузионное напряжение. Эти градиенты потенциалов также возникают за счет различия концентраций носителей в металле и полупроводнике и могут быть определены с помощью фактора Больцмана.

Соотношение (8.5) позволяет выразить диффузионное напряжение  $U_D$  через отношение концентраций основных и неосновных носителей. Например, для электронов имеем

$$U_D = V_{term} \ln \frac{n_n}{n_p}. \quad (8.6)$$

В нашем примере это отношение равно  $10^6$ . Поскольку

$$V_{term} = 0,026B,$$

находим

$$U_D = V_{term} \ln 10^6 = 0,36B.$$

Для более точного вычисления потенциала  $\phi(x)$  необходимо использовать уравнение Пуассона, решение которого должно быть совместимо с законом Больцмана. Плотность пространственного заряда для  $p$ -области ( $x \leq 0$ ) выражается формулой

$$\rho = e[-n_A + p(x) - n(x)] \approx e[-n_A + p(x)] \quad (8.7)$$

и для  $n$ -области ( $x \geq 0$ )

$$\rho = e[n_D + p(x) - n(x)] \approx e[-n_D - p(x)]. \quad (8.8)$$

Значение диэлектрической проницаемости принято равным  $16\epsilon_0$  для  $Ge$  и  $12\epsilon_0$  для  $Si$ . Расчет дает следующее значение толщины слоя, в котором происходит падение диффузионного напряжения  $U_D$ :

$$d = \sqrt{\frac{2\epsilon U_D (n_D + n_A)}{en_D n_A}}. \quad (8.9)$$

В вышеприведенном примере для  $Ge$  при  $n_D = n_A = 10^{22} \text{ м}^{-3}$  и  $U_D = 0,36 \text{ В}$  получаем  $d = 3,6 \cdot 10^{-5} \text{ см}$ . Толщина переходного слоя действительно очень мала по сравнению с общей длиной кристалла (несколько миллиметров).

Проверим еще справедливость закона действующих масс

$$p(x)n(x) = n_i^2 = p(-)n(+)e^{-U_D/V_{\text{тем}}} = p_p n_n e^{-U_D/V_{\text{тем}}}. \quad (8.10)$$

Таким образом, произведение концентраций обоих носителей действительно не зависит от  $x$ , как этого требует закон действующих масс.

Пусть описанный выше кристалл с двумя различными типами легирующих примесей имеет на противоположных концах металлические контакты (лучше всего омические), так что к нему можно приложить любые внешние напряжения. Сопротивление такого устройства сильно зависит от направления приложенного напряжения, т. е.  $p-n$ -переход оказывает выпрямляющее действие. Сопротивление имеет незначительную величину, если  $n$ -область заряжена отрицательно, так что ток течет от  $p$ - к  $n$ -области (пропускное, или прямое, направление) и повышается на несколько порядков, если полярность противоположна (запорное или обратное направление). Само собой разумеется, что общее сопротивление кристалла складывается аддитивно из сопротивлений перехода и двух однородно легированных частей, поскольку все они соединены последовательно. Сопротивление нейтральных  $p$ - и  $n$ -областей называют сопротивлением базы.

Используя вышеприведенные представления, рассмотрим выпрямляющее действие  $p-n$ -перехода.

Приложенное к  $n$ -области (отрицательное) напряжение  $V$  приводит к появлению поля с напряженностью  $E_v$ , направленного, как указано на рисунке 8.5.

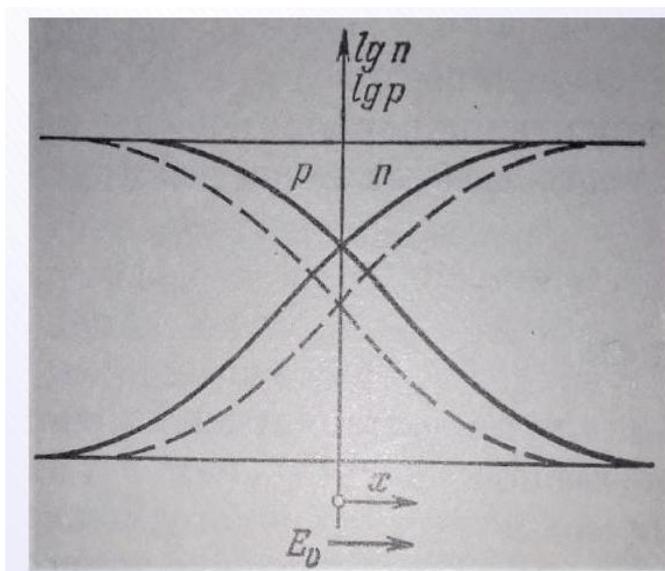


Рисунок 8.5 –  $p-n$ -переход в режиме пропуска тока

Это поле «накладывается» на «внутреннее» поле перехода и ослабляет его. Вследствие этого равновесие между дрейфом носителей в поле и диффузионным потоком нарушается в пользу последнего. Преобладающий диффузионный поток гонит дырки направо, а электроны налево. Возникает новое распределение концентраций  $p(x)$  и  $n(x)$ , которое, однако, теперь уже не приводит к статическому равновесию, а поддерживается лишь при наличии длительно протекающего тока, направление которого, естественно, соответствует приложенному напряжению  $V$ . Новое распределение концентраций носителей представлено на рисунке 8.6.

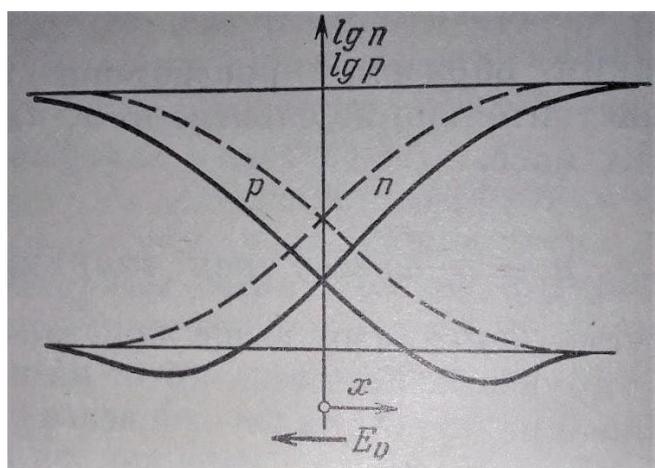


Рисунок 8.6 –  $p-n$ -переход в режиме запирания

Нетрудно видеть, что сопротивление перехода имеет одну меньшую величину, чем в случае отсутствия тока (рисунок 8.6). В результате вызванного диффузией перемещения носителей внутрь перехода последний «переполняется» носителями настолько, что его сопротивление существенно падает и приближается к сопротивлению базы. Кроме того, уменьшается толщина перехода  $d$ . При учете приложенного напряжения  $V$  формула (3.29) принимает вид

$$d = \sqrt{\frac{2\varepsilon(U_D + V)(n_D + n_A)}{en_D n_A}}, \quad (8.11)$$

причем в области пропускания значение  $V$  отрицательно.

Если полярность напряжения  $V$  изменить на противоположную, то поле в переходе возрастает. Равновесие носителей заряда нарушается в пользу преобладания дрейфа в поле. В результате этого два облака носителей отдаляются друг от друга, что приводит к значительному

обеднению носителями, а следовательно, и к повышению сопротивления лежащей между ними области, которая к тому же сильно расширяется ( $V > 0$ ) в соответствии с выражением (8.11) (рисунок 8.6). Таким образом, обратное сопротивление перехода превышает его сопротивление в отсутствие тока. Количественное рассмотрение этого вопроса позволяет получить практически важную характеристику выпрямителя, а именно вольт-амперную характеристику полупроводникового диода.

Рассчитаем по отдельности плотность тока, обусловленного дырками и электронами, для одной и той же точки, например  $x = d/2$ , и их сумму, равную полной плотности тока. Начнем с фазы пропускания. Поскольку  $V < 0$ , падение напряжения в слое уменьшается. Если предположить, что, несмотря на протекание тока, остается справедливым распределение Больцмана, то на правой границе перехода ( $x = d/2$ ) концентрация дырок  $p$ , являющихся неосновными носителями в  $n$ -области, уже не равна прежнему значению  $p_n$ , а имеет намного большую величину

$$p\left(\frac{d}{2}\right) = p_p \exp\left[-\frac{U_D + V}{V_{term}}\right]. \quad (8.12)$$

На большом расстоянии от слоя ( $x \gg d/2$ ), наоборот, справедливо прежнее соотношение для концентрации неосновных носителей:

$$p_n = p_p \exp\left[-\frac{U_D + V}{V_{term}}\right]. \quad (8.13)$$

Таким образом, вблизи перехода концентрация дырок должна непрерывно понижаться от ее начального значения при  $x = d/2$  до конечного значения, соответствующего  $x = +$ . Причиной такого уменьшения концентрации дырок является их рекомбинация с основными носителями  $n$ -области. Согласно расчету, уменьшение  $p(x)$  происходит по экспоненциальному закону, а именно

$$p(x) - p_p = \left[ p\left(\frac{d}{w}\right) - p_n \right] \exp\left(-\frac{x - d/2}{L_p}\right) \quad (8.14)$$

или приближенно для  $p \gg p_n$

$$p(x) = p\left(\frac{d}{2}\right) \exp\left(-\frac{x - d/2}{L_p}\right), \quad (8.15)$$

где  $L_p$  – диффузионная длина дырок, связанная с коэффициентом рекомбинации  $r$  соотношением

$$L_p = \sqrt{\frac{D_p}{rn_n}}. \quad (8.16)$$

Вследствие существования отличного от нуля градиента концентрации ( $dp/dx$ ) в  $n$ -области, практически свободной от поля, возникает диффузионный поток дырок слева направо. Этот поток представляет собой дырочную компоненту тока, текущего в пропускном направлении. Так как скорость движения дырок везде одинакова, то диффузионной длине соответствует среднее время жизни дырок  $\tau_p$ , рассчитываемое по формуле

$$\tau_p = \frac{L_p^2}{D_p}. \quad (8.17)$$

Укажем порядок величин некоторых параметров для германия. Время жизни дырок лежит в интервале от  $10^{-7}$  до  $10^{-3}$  с. Его можно непосредственно измерить. Диффузионная длина дырок в  $n$ -области колеблется от  $10^{-3}$  до  $10^{-1}$  см. Следовательно, она значительно больше толщины слоя  $d$ , которая при токе, равном нулю, составляет  $3,6 \cdot 10^{-5}$  см, как уже говорилось выше.

Соответствующие рассуждения справедливы, конечно, и для электронов, которые вследствие падения напряжения в слое перетекают в  $p$ -область и там, как неосновные носители, образуют диффузионный хвост с диффузионной длиной  $L_n$ . Чтобы получить значение полного тока в прямом направлении, необходимо рассчитать для одной точки обе компоненты тока и сложить их. Плотность дырочной компоненты тока в точке  $x = d/2$  описывается выражением

$$G^+ = e \frac{D_p}{L_p} p_n (e^{-V/V_{\text{term}}} - 1). \quad (8.18)$$

Соответственно плотность электронной компоненты тока в точке  $x = -d/2$ , т. е. на другой стороне перехода, равна

$$G^- = e \frac{D_p}{L_n} n_p (e^{-V/V_{\text{term}}} - 1). \quad (8.19)$$

Рассматривать сумму  $G^+ + G^-$  как плотность полного тока было бы несколько ошибочно, так как между точками, в которых эти величины определены, лежит слой толщиной  $d$ . Предположим, однако, что в данном случае, как и в отсутствие тока, процессы образования пар и рекомбинации в слое взаимно уравниваются (это, строго говоря, не соответствует действительности, так как в результате наполнения слоя носителями рекомбинация усиливается; однако, как показывают точные расчеты, возникающая при этом ошибка не очень велика). Тогда можно отказаться от требования, что обе компоненты плотности тока должны рассчитываться для одной и той же точки.

Это возможно потому, что потоки носителей, идущие с двух сторон, проходят слой без существенных потерь, и соотношение между составляющими тока практически не изменяется. При таком условии мы получаем плотность прямого тока в форме

$$G_f = e \left( \frac{D_p p_n}{L_n} + \frac{D_n n_p}{L_n} (e^{-V/V_{\text{temp}}} - 1) \right). \quad (8.20)$$

Теперь обратимся к области запираения: обратное напряжение  $V$  (положительное) приводит к увеличению падения напряжения в слое (запорный слой), вследствие чего (соотношение Больцмана) концентрация дырок в точке  $x = d/2$  уменьшается до значения, равного концентрации неосновных носителей  $p$ . Теперь из-за преобладания дрейфа в поле дырки движутся налево, а электроны – направо в соответствии с приложенным напряжением.

Для расчета компонент плотности тока можно воспользоваться теми же рассуждениями, что и в случае прямого направления. В частности, плотность дырочного тока при  $x = d/2$  определяется соотношением (8.18), а плотность электронного тока при  $x = -d/2$  – соотношением (8.19), но при условии, что потенциал  $V$  положителен. Таким образом, плотность полного обратного тока определяется выражением, аналогичным выражению (3.39):

$$G_s = -e \left( \frac{D_p p_n}{L_n} + \frac{D_n n_p}{L_n} (e^{-V/V_{\text{temp}}} - 1) \right). \quad (8.21)$$

Теперь характеристика полупроводникового диода определена для всей области напряжений.

На практике применяется ряд приближений.

Область пропускания  $p-n$ -перехода приходится на напряжения (отрицательные) порядка нескольких десятых вольта. Поэтому часто в выражении (8.20) единицей можно пренебречь по сравнению с экспоненциальной функцией, так что получается экспоненциальная вольт-амперная характеристика. Естественно, что при расчете вольт-амперной характеристики, относящейся к напряжению, приложенному к кристаллу, сопротивлением базы диода при больших токах уже пренебрегать нельзя.

Напротив, обратные напряжения обычно много больше эквивалентной температуры  $V_{\text{term}}$  (на практике в настоящее время обратные напряжения достигают значения 1 кВ для каждого элемента), так что в выражении (8.21) можно пренебречь экспоненциальной функцией. В результате оказывается, что обратный ток не зависит от напряжения, т. е. представляет собой один из видов тока насыщения, плотность которого выражается формулой

$$G_0 = -e \left( \frac{D_p p_n}{L_n} + \frac{D_n n_p}{L_p} \right). \quad (8.22)$$

Вид экспериментально полученных характеристик выпрямителей соответствует теории лишь для  $Ge$ -диодов. В  $Si$ -диодах в запирающем слое заметную роль играет процесс образования пар. При увеличении обратного напряжения, которое приводит к возрастанию толщины слоя, этот процесс усиливается. Следовательно, в области запирающего мы будем иметь возрастающую вольт-амперную характеристику, как показано на рисунке 8.7 для случая силового выпрямителя.

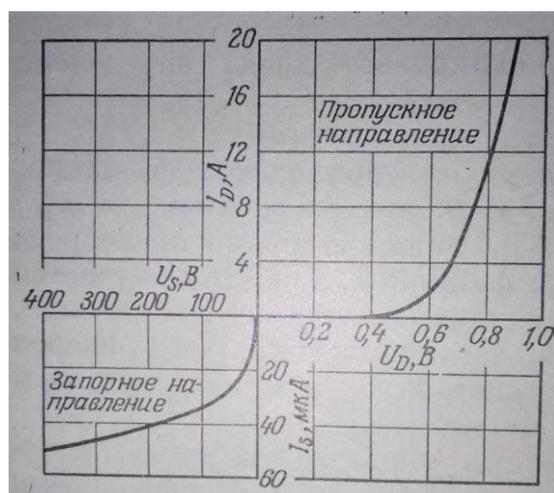


Рисунок 8.7 – Вольт-амперная характеристика кремниевого выпрямителя на 25 А (среднее значение) при температуре запирающего слоя 80 °С

Заменив в выражении концентрации неосновных носителей  $p_n$  и  $n_p$  концентрациями основных носителей  $p_p$  и  $n_n$ , которые практически равны концентрации дефектов, получим

$$G_0 = -e \left( \frac{D_p p_n}{L_n} + \frac{D_n n_p}{L_n} e^{-U_D / V_{temp}} \right). \quad (8.23)$$

Отсюда следует, что обратный ток зависит главным образом от диффузионного напряжения  $U_D$ . Так как для *Si* оно больше, чем для *Ge*, то при приблизительно одинаковом легировании в кремниевых диодах обратный ток гораздо меньше, чем в германиевых.

Если важно получить малый обратный ток, то нужно добиваться, чтобы диффузионные длины неосновных носителей  $L_p$  и  $L_n$  были возможно больше. В соответствии с (8.16) это означает, что коэффициент рекомбинации  $r$  должен быть как можно меньше. В связи с этим здесь следует сделать некоторые замечания относительно рекомбинации. Измерения показали, что диффузионные длины неосновных носителей оказываются намного меньше, чем должны быть в случае, если бы происходил только описанный выше процесс прямой рекомбинации, т. е. воссоединение случайно встретившихся пар носителей. В действительности такой процесс происходит довольно редко, что обусловлено ограничениями, налагаемыми законами сохранения энергии и импульса. Например, следует ожидать, что в германии рекомбинация, обусловленная различными иными рекомбинационными процессами, должна происходить приблизительно в  $10^4$  раз чаще, чем прямая рекомбинация. Что же это за столь многочисленные рекомбинационные процессы? Предполагается, что в кристалле существует определенное число центров рекомбинации, так называемых ловушек, которые захватывают как электроны из зоны проводимости, так и дырки из валентной зоны и могут удерживать их в течение короткого интервала времени, а именно до тех пор, пока не найдется частица, обладающая зарядом противоположного знака и способная рекомбинировать с захваченной. Здесь снова можно провести аналогию с процессами рекомбинации в плазме. Там тоже прямая рекомбинация электронов и положительных ионов происходит редко вследствие трудностей, связанных с необходимостью выполнения законов сохранения. Если, однако, имеются третьи тела, такие как молекула или твердая стенка, то вероятность рекомбинации может достигать 100 %, т. е. каждое столкновение приводит к рекомбинации. В полупроводниках все виды

дефектов кристаллической решетки, а именно посторонние примеси, вакансии, дислокации, внешняя поверхность и даже тепловые колебания решетки, могут служить центрами рекомбинации. Подобные дефекты наиболее эффективны, если их энергетические уровни лежат приблизительно в центре запрещенной зоны, так что освобождающаяся энергия состоит из двух близких по величине частей, каждая из которых примерно равна половине полной энергии рекомбинации. Так как при этом излучаются фотоны с энергией  $(hf)$ , пропорциональной частоте, то с помощью спектроскопического изучения наблюдаемого рекомбинационного свечения можно, например, определить положение энергетических уровней центра рекомбинации. Участие рекомбинационного центра в качестве третьего партнера при столкновении облегчает выполнение закона сохранения импульса, так как такой центр может принимать или передавать практически любые импульсы.

Исходя из описанного выше процесса работы  $p-n$ -перехода и его математического описания, можно сделать ряд количественных выводов, важных для использования диодов.

1. Толщина слоя  $d$  зависит от приложенного напряжения  $V$ , что особенно заметно в режиме запираания. Поскольку здесь напряжение  $U$  следует считать положительным,  $d$  возрастает с увеличением  $V$ . Если к выпрямителю приложено переменное напряжение, то слой «дышит» в такт с ним. В полупроводниковом диоде это периодическое колебание толщины слоя очень слабо проявляется, зато в транзисторах изменение толщины коллекторного граничного слоя заметно влияет на длину базовой области, что влечет за собой возникновение определенного токового режима транзистора в случае переменного тока. Это явление носит название эффекта Эрли.

2. Величина обоих пространственно разделенных зарядов разных знаков, находящихся в запирающем слое, рассчитывается для единицы поверхности  $p-n$ -перехода по формуле

$$Q = \frac{dQ}{dV} = \sqrt{\frac{\varepsilon e n_D n_A}{2(U_D + V)(n_D + n_A)}} = \frac{\varepsilon}{d}. \quad (8.24)$$

3. Для емкостей, возникающей в результате разделения зарядов, имеем

$$C = \frac{dQ}{dV} = \sqrt{\frac{\varepsilon e n_D n_A}{2(U_D + V)(n_D + n_A)}} = \frac{\varepsilon}{d}, \quad (8.25)$$

т. е. емкость зависит от приложенного напряжения  $V$ . Отсюда следует возможность управлять емкостью чисто электрическим путем (вариконд).

4. Максимальная напряженность поля, которая в случае симметричного легирования соответствует середине слоя, рассчитывается по формуле

$$E_{\max} = \frac{2(U_D + V)}{d}. \quad (8.26)$$

При  $U_D = 0,36$  В (нормально легированный германиевый диод) из  $d = 3,6 \cdot 10^{-5}$  см в отсутствие тока получаем  $E_{\max} = 2 \cdot 10^4$  В/см. В области запирающего ( $V > 0$ )  $E_{\max}$  увеличивается.

Все изложенные выше соображения были основаны на предположении, что концентрации примесей  $n_D$  и  $n_A$  в точке  $x=0$ : скачкообразно падают до нуля. На практике, однако, необходимо учитывать, что изменение концентрации примесей происходит непрерывно. Кроме того, концентрации примесей могут не иметь одинакового значения на обеих сторонах  $p-n$ -перехода. Для таких общих случаев также можно провести расчеты, аналогичные рассмотренным. В результате получаются выражения для толщины слоя, заряда и емкости, подобные вышеприведенным.

## 9. Поляризация диэлектриков в переменном электрическом поле

Если напряженность поля  $E$ , от которой зависит поляризация диэлектриков, изменяется во времени, то проявляются новые по сравнению с существующими в постоянном электрическом поле эффекты, имеющие большое практическое значение вследствие того, что они связаны с *потерями энергии*.

Будем рассматривать поляризацию  $P$ , вызванную однородным электрическим полем в гомогенной среде, как величину, состоящую из двух компонент, одна из которых ( $P_v$ ) обусловлена смещением электронов или ионов, а вторая ( $P_0$ ) представляет собой ориентационную поляризацию. Таким образом, полная поляризация запишется как

$$P = P_v + P_0. \quad (9.1)$$

Для оценки временной характеристики поляризации существенно то, что при *упругой поляризации*  $P_v$  заметное отклонение от статического режима наблюдается лишь при *очень высоких частотах*, а именно для электронной поляризации при *оптических частотах*, а для ионной поляризации – при частотах, лежащих в *инфракрасном диапазоне*. Это определяется в основном тем, что электроны и ионы обладают незначительной массой, а также тем, что трение пренебрежимо мало. Поэтому в представляющих интерес для электротехники задачах, в которых рассматриваются волны вплоть до сантиметрового диапазона, при расчетах упругой поляризации запаздывание не учитывается.

Иначе обстоит дело в случае *ориентационной поляризации*. Ниже мы обсудим характерные для нее временные соотношения, отложив пока обсуждение такого же рода вопросов для упругой поляризации.

Зависимость ориентационной поляризации от времени обусловлена механической инерцией частиц, обладающих дипольным моментом. Изменение величины  $P_0$  со временем зависит не только от мгновенного значения напряженности поля  $E$ , но и от величины существующей в рассматриваемый момент времени поляризации  $P_0$ . Таким образом, дифференциальное уравнение, описывающее зависимость величины  $P_0$  от времени, имеет вид

$$\frac{dP_0}{dt} = \frac{1}{\tau} (\varepsilon_0 \chi_0 E - P_0), \quad (9.2)$$

где  $\chi_0$  представляет собой восприимчивость, характеризующую только ориентационную поляризацию. Постоянная величина  $\tau$ , имеющая размерность времени, называется временем релаксации. При скачкообразном изменении напряженности поля со временем интегрирование уравнения (9.2) приводит к следующей функции, описывающей переходный процесс:

$$P_0 = \varepsilon_0 \chi_0 E (1 - e^{-t/\tau}), \quad (9.3)$$

которая сразу выявляет смысл как постоянной времени. Поляризация  $P_0$  достигает предельного статического значения лишь при  $t = \infty$ . Электрическим аналогом рассматриваемого случая является цепь с последовательно включенными  $R$  и  $L$ , к которой в момент времени  $t = 0$  приложено постоянное напряжение  $E$ .

Естественно, что для технического применения особый интерес представляют поля, напряженность которых изменяется по гармоническому закону. Пусть частота колебаний равна  $\omega$ . Решение уравнения (4.2) для переходного режима проще всего получить, если ввести комплексную величину

$$P_0^< = \frac{\varepsilon_0 \chi_0 \hat{E}}{1 + j\omega\tau}, \quad (9.4)$$

где фаза определяется по отношению к фазе поля  $E$ . В таком случае для полной поляризации получим

$$P^< = P_v^< + P_0^< = \varepsilon_0 \left[ \chi_v + \frac{\chi_0}{1 + j\omega\tau} \right] \hat{E}. \quad (9.5)$$

Выражение в квадратных скобках совпадает с восприимчивостью (в этом случае комплексной)  $\chi$ , так что получаем выражение для комплексной диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon^< = 1 + \chi_v + \frac{\chi_0}{1 + j\omega\tau}. \quad (9.6)$$

Записывая комплексную диэлектрическую проницаемость в виде

$$\varepsilon^< = \varepsilon' + j\varepsilon'', \quad (9.7)$$

получаем для каждой компоненты

$$\varepsilon' = 1 + \chi_v + \frac{\chi_0}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad (9.8)$$

$$\varepsilon'' = \frac{\chi_0 \omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}. \quad (9.9)$$

Электрическое смещение

$$D^< = \varepsilon^< \varepsilon_0 E^< = \varepsilon_0 (\varepsilon' - j\varepsilon'') E^< \quad (9.10)$$

имеет, таким образом, тоже две компоненты, из которых одна действительная и изменяется синхронно с  $E^<$ , а другая мнимая и отрицательная, т. е. запаздывает по фазе на  $90^\circ$  по сравнению с  $E^<$ .

Соотношения (9.8) и (9.9) описывают частотную зависимость (дисперсию) комплексной диэлектрической проницаемости. Их легко преобразовать к такому виду, что из констант вещества они будут содержать, помимо  $\tau$ , лишь легко измеряемые экспериментально значения  $\mathcal{E}$  при экстремальных значениях частоты 0 и  $\infty$ . При этих частотах мнимая часть равна нулю, так что  $\mathcal{E}$  становится действительной величиной. Обозначим (действительные) значения  $\mathcal{E}$  при частотах, равных 0 и  $\infty$ , соответственно через  $\mathcal{E}_s$  (статическая) и  $\mathcal{E}_\infty$ ; тогда для частотной зависимости комплексной диэлектрической проницаемости получим

$$\varepsilon^< = \varepsilon' - j\varepsilon'' = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + j\omega\tau}, \quad (9.11)$$

а для ее компонент

$$\varepsilon' = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad (9.12)$$

$$\varepsilon'' = \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_\infty)\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}. \quad (9.13)$$

Годографом  $\varepsilon^<$  является полуокружность в четвертом квадранте (рисунок 9.1). Частотная зависимость компонент  $\varepsilon'$  и  $\varepsilon''$  изображена на рисунке 9.2.

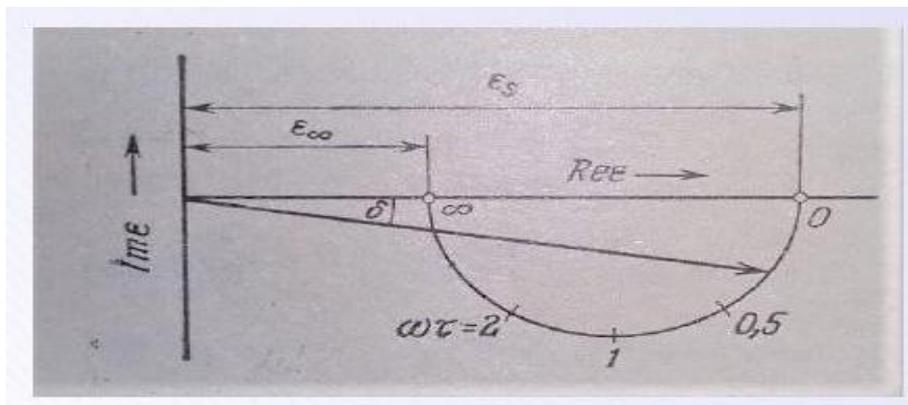


Рисунок 9.1 – График комплексной диэлектрической проницаемости

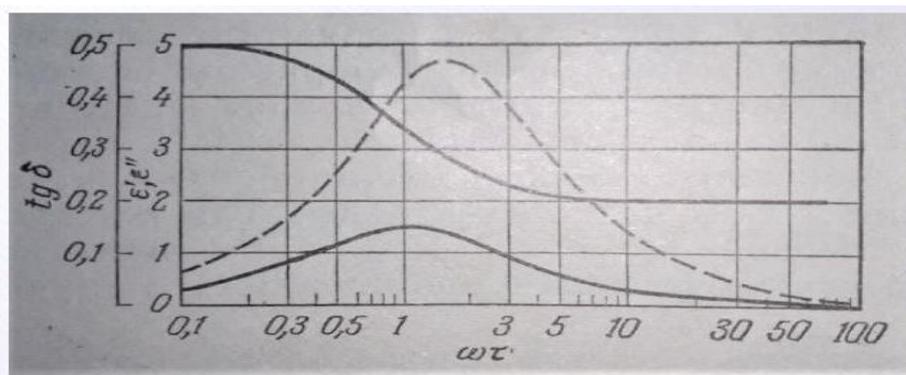


Рисунок 9.2 – Зависимость компонент комплексной диэлектрической проницаемости и тангенса угла потерь (пунктир) от частоты

Основной количественной характеристикой диэлектрика в переменном поле является время релаксации  $\tau$ , о котором необходимо сказать следующее: электронная поляризация вследствие малой величины перемещающихся масс характеризуется наименьшей постоянной времени, имеющей порядок  $10^{-14}$  с. Соответствующая ей частота лежит в видимой области спектра. Поэтому при частотах, используемых в технике, ее влиянием можно полностью пренебречь. Подобное же заключение справедливо и для ионной поляризации, для которой рассматриваемая частота лежит в ближней инфракрасной области спектра. Совершенно иначе обстоит дело при ориентационной поляризации. Здесь время релаксации обычно настолько велико, что оно сказывается уже в техническом диапазоне частот. Для ориентировочного расчета  $\tau$  Дебай

исходил из представления, согласно которому вращение молекулярного диполя в электрическом поле можно рассматривать как разновидность броуновского движения, происходящего в среде с трением.

Если для расчета силы трения считать частицы макроскопическими объектами (что, естественно, весьма проблематично и не выдерживает критики при строгом подходе), то для  $\tau$  можно получить выражение

$$\tau = \frac{4\pi a^3 \eta}{kT}; \quad (9.14)$$

где  $a$  – радиус молекулы, а  $\eta$  – вязкость окружающей среды. Если подставить разумные значения этих величин, то получим для комнатной температуры время релаксации порядка  $10^{-11}$  с, что достаточно хорошо подтверждается измерениями. Если учесть сильную зависимость вязкости от температуры, приняв для нее выражение вида  $\eta \sim e^{b/T}$ , то из (9.14) получим, что при увеличении температуры  $\tau$  уменьшается быстрее, чем  $\sim 1/T$ ; это в известной мере подтверждается экспериментально. Можно улучшить выражение для времени релаксации, если, исходя из аналогии с магнитным полем, предположить, что в электрическом поле молекулярный диполь может иметь различные ориентации, причем для перехода из одной в другую необходима энергия активации. Если принять, что возможны лишь две ориентации, а именно параллельная и антипараллельная направлению поля, то получается достаточно разумное выражение

$$\tau = Ae^{W/kT}, \quad (9.15)$$

где  $W$  – упомянутая выше энергия активации,  $A$  – постоянная. Соответственно этой модели вращение дипольных моментов заключалось бы в скачкообразных переходах между двумя возможными ориентациями, разделенными потенциальным барьером, что аналогично процессу обмена местами между молекулами.

Рассмотренная выше теория частотной зависимости комплексной диэлектрической проницаемости в ряде случаев, например для растворов полярных веществ в неполярных растворителях, а также для некоторых полярных жидкостей, таких как спирты, с удовлетворительной точностью согласуется с результатами измерений, если для времени релаксации принять значения от  $10^{-11}$  до  $10^{-9}$  с. Существуют также вещества, для которых наблюдаются значительные отклонения от теории. К таким веществам относятся особенно важные для электротехники изоляционные материалы. Обнаружено, что у них  $\tan \delta$  не зависит от частоты в широком

интервале частот. Чтобы обойти это затруднение, нужно принять, что каждому веществу соответствует не одно значение времени релаксации  $\tau$ . Это согласуется с уже изложенными соображениями, согласно которым во внешнем поле возможны многочисленные переходы полярных молекул между квантово-механически разрешенными ориентациями. С каждым таким переходом связана энергия активации  $W$ , которой соответствует определенное значение  $\tau$ . Отсюда ясно, что вследствие большого числа переходов, которые могут осуществляться, возможен ряд различных значений  $\tau$ , проявляющихся с определенной вероятностью.

В общем случае предполагается, что имеется непрерывное распределение значений  $\tau$ , а для описания этого распределения используется функция  $F(\tau)$ , так что  $F(\tau)d\tau$  представляет вероятность того, что время релаксации лежит в интервале от  $\tau$  до  $\tau + d\tau$ . Поскольку все поляризационные воздействия просто суммируются друг с другом, то путем простого пересчета получаем:

$$\begin{aligned}\varepsilon' &= \varepsilon_\infty + (\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) \int_0^\infty \frac{F(\tau) d\tau}{1 + (\omega\tau)^2}, \\ \varepsilon'' &= (\varepsilon_s - \varepsilon_\infty) \int_0^\infty \frac{\omega\tau F(\tau) d\tau}{1 + (\omega\tau)^2}.\end{aligned}\tag{9.16}$$

Если диэлектрическая проницаемость имеет действительное значение, то потери мощности (активной мощности) в конденсаторе равны нулю (идеальный случай). Существование мнимой составляющей диэлектрической проницаемости означает, что электрическое смещение  $D$  имеет компоненту, отстающую по фазе на  $90^\circ$  от напряженности поля  $E$ . Так как плотность тока смещения равна  $dD/dt$ , то для объемной плотности потерь мощности получаем

$$Q = \frac{\omega\varepsilon_0\varepsilon''}{w} \hat{E}^2.\tag{9.17}$$

В технике потери мощности обычно оцениваются при помощи угла диэлектрических потерь  $\delta$  или же тангенса диэлектрических потерь  $\operatorname{tg}\delta$ , где  $\delta$  – угол сдвига фаз, характеризующий отставание вектора электрического смещения  $D$  от вектора напряженности поля  $E$ .

$$\operatorname{tg}\delta = \frac{\varepsilon''}{\varepsilon'}.\tag{9.18}$$

На рисунке 9.2 представлена зависимость тангенса угла диэлектрических потерь от частоты.

До сих пор мы рассматривали лишь такие потери мощности в диэлектрике, которые обусловлены поворотом полярных молекул в электрическом переменном поле и запаздыванием их ориентаций во времени. Другие источники потерь сказываются в тех случаях, когда диэлектрик обнаруживает отличную от нуля проводимость  $\varkappa$ , т. е. когда в нем имеются свободные электроны или ионы. Если такой диэлектрик, который мы считаем однородным, находится в электрическом поле  $E$  плоского конденсатора, то, конечно, наряду с током смещения существует ток проводимости с плотностью  $G_L = \varkappa E$ . Плотность тока смещения равна  $G_V = \varepsilon_0 \varepsilon' dE/dt$ , где  $\varepsilon_0 \varepsilon'$  – действительная часть диэлектрической проницаемости. При синусоидальной зависимости поля от времени плотность полного тока связана с напряженностью поля соотношением

$$G^{\sphericalangle} = (\varkappa + j\omega\varepsilon_0\varepsilon')E^{\sphericalangle}. \quad (9.19)$$

Если ввести комплексную диэлектрическую проницаемость  $\varepsilon = \varepsilon' - j\varepsilon''$ , то плотность полного тока запишется как

$$G^{\sphericalangle} = \frac{dD^{\sphericalangle}}{dt} = j\omega\varepsilon_0\varepsilon E^{\sphericalangle}. \quad (9.20)$$

Из двух этих выражений следует, что

$$\varepsilon = \varepsilon' + \frac{\varkappa}{j\omega\varepsilon_0} = \varepsilon' - j\frac{\varkappa}{\omega\varepsilon_0}. \quad (9.21)$$

Для тангенса угла диэлектрических потерь такого конденсатора тогда получим

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{\varkappa}{\omega\varepsilon_0\varepsilon'}.$$

Этому соотношению соответствует эквивалентная схема параллельного включения идеального, т. е. не имеющего потерь, конденсатора и омического сопротивления.

Более интересен и более близок к реальным техническим условиям случай неоднородного диэлектрика, находящегося между пластинами

конденсатора, а именно случай, когда частицы проводящего материала статистически беспорядочно распределены в непроводящем диэлектрике. Конечно, через такой изолятор постоянный ток проходить не может, так как носители тока, начавшие двигаться под действием поля, должны останавливаться, достигнув границ проводящих частиц. Следовательно, носители не доходят до соответствующих электродов и цепь не замыкается. Однако при этом проводящие области оказываются поляризованными, так как положительные носители собираются вблизи поверхности, обращенной к катоду, а отрицательные – на противоположной, анодной стороне. Вследствие этого каждая проводящая область превращается в диполь, момент которого участвует в общем процессе поляризации, происходящем между пластинами конденсатора. Этот процесс называется промежуточной поверхностной поляризацией.

Поляризация проводящих областей также оказывает влияние на поведение изолятора в переменном поле. Правда, в этом случае уже не применима прежняя эквивалентная схема (емкость  $C$  включена параллельно сопротивлению  $R$ ), поскольку, как было отмечено, постоянный ток течь не может. Однако в данном случае можно воспользоваться рассмотренной еще Максвеллом моделью двухслойного конденсатора, что позволяет провести приближенный анализ и составить общее представление о происходящих процессах. Используя обозначения, приведенные на рисунке 9.3, можно получить выражение для поддающейся измерению комплексной диэлектрической проницаемости двух последовательно включенных емкостей:

$$\frac{1}{\varepsilon} = \frac{f}{\varepsilon_1 + \kappa / j\omega\varepsilon_0} + \frac{g}{\varepsilon_2}. \quad (9.22)$$

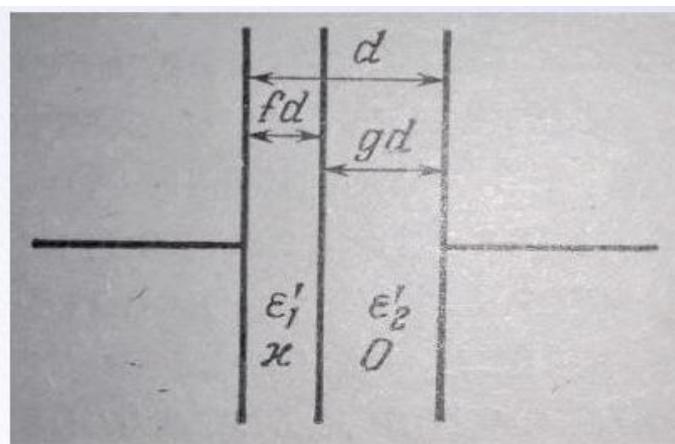


Рисунок 9.3 – Двухслойный конденсатор:  $f + g = 1$

Отсюда снова получим предельные значения при частотах  $\omega=0$  и  $\omega=\infty$ :

$$\begin{aligned}\varepsilon_s &= \frac{\varepsilon_2'}{g}, \\ \varepsilon_\infty &= \frac{\varepsilon_1' \varepsilon_2'}{f \varepsilon_2' + g \varepsilon_1'}.\end{aligned}\quad (9.23)$$

$$\varepsilon^< = \varepsilon' - j\varepsilon'' = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_\infty}{1 + j\omega\tau}.\quad (9.24)$$

Слоистый диэлектрик ведет себя, таким образом, как идеальный непроводящий диэлектрик с полярными молекулами, но только с другим временем релаксации. Аналогичный результат получается и для другой близкой к действительности модели, согласно которой проводящие области имеют вид маленьких шариков и распределены с одинаковой плотностью в непроводящем диэлектрике. Если суммарный объем, занятый шариками, мал по сравнению с полным объемом диэлектрика, то время релаксации не зависит от размеров и числа шариков, а определяется лишь константами самого вещества

$$\tau = \frac{\varepsilon_0 (\varepsilon_1' + 2\varepsilon_2')}{\varkappa}.\quad (9.25)$$

Как видим, эта модель снова приводит к единственному значению времени релаксации  $\tau$ . Однако если принять, что  $\varkappa$  и  $\mathcal{E}$  несколько изменяются от точки к точке (такое предположение довольно близко к действительности), то мы получим некоторое распределение значений  $\tau$ . Таким образом, мы нашли еще одну причину разброса значений  $\tau$ , что необходимо для объяснения результатов измерений параметров технически важных изоляционных материалов, имеющих обычно довольно сложное химическое строение.

## 10. Поведение диэлектриков при высоких частотах

Ионная, а также электронная поляризации в переменном поле подчиняются иным закономерностям, чем ориентационная поляризация. Частица (ион или электрон), смещающаяся под действием внешнего поля  $E$ , связана с равновесным положением электрической силой. В результате возникает противодействующая сила, которую в первом, вполне достаточном приближении можно считать пропорциональной смещению. Кроме того, предположим, что существует сила трения, пропорциональная скорости; тогда полное уравнение движения частицы в переменном гармоническом электрическом поле запишется следующим образом:

$$m\ddot{x} + h\dot{x} + kx = e\hat{E}e^{j\omega t}. \quad (10.1)$$

Это известное дифференциальное уравнение вынужденных колебаний упруго связанной материальной точки; здесь  $x$  – мгновенное смещение частицы,  $m$  и  $e$  – ее масса и заряд. Стационарное решение уравнения (10.1) мы получаем простейшим путем, вводя векторные величины для  $x$  и  $E$ . В таком случае

$$x^{\lessdot} = \frac{e\hat{E}}{m(\omega_0^2 - \omega^2) + j\omega\tau}; \quad (10.2)$$

здесь  $\omega_0 = \sqrt{k/m}$  – собственная частота колеблющейся частицы. Ее дипольный момент равен  $p^{\lessdot} = ex^{\lessdot}$ , следовательно, для поляризуемости получаем

$$\alpha = \frac{P}{E} = \frac{e^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2) + j\omega h}. \quad (10.3)$$

Следовательно, находим для диэлектрической проницаемости при  $\mu = 0$

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} = \frac{n\alpha}{3\varepsilon_0} = \frac{ne^2}{3\varepsilon_0 m(\omega_0^2 - \omega^2 + j\omega h/m)}. \quad (10.4)$$

Если ограничиться газами не очень большой плотности, то для комплексной восприимчивости имеем

$$\chi^{\leftarrow} = \varepsilon^{\leftarrow} - 1 = \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m (\omega_0^2 - \omega^2 + j\omega h/m)}. \quad (10.5)$$

Если разность  $|\omega_0^2 - \omega^2|$  достаточно велика, т. е. исследуемая частота далека от резонансной, то мнимым членом в знаменателе можно пренебречь, и диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  становится действительной. При экстремальных значениях  $\omega$  имеем

$$\varepsilon = 1 + \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m \omega \omega_0^2}$$

при  $\omega = 0$ ,

$$\varepsilon = 1 \quad (10.6)$$

при  $\omega = \infty$ .

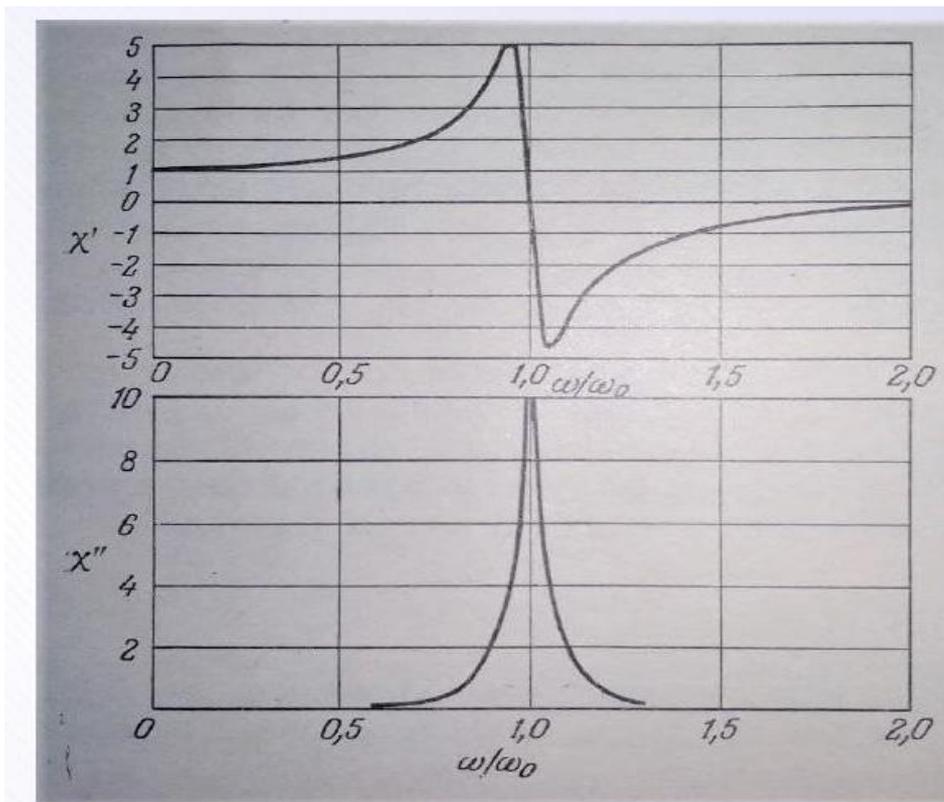


Рисунок 10.1 – Зависимость комплексной диэлектрической восприимчивости при упругой поляризации от частоты для  $h/m\omega_0 = 0,1$

Более полное представление можно получить, построив график зависимости восприимчивости от частоты, описываемой формулой (10.5). Обычно изображают действительную и мнимую части как функции отношения частоты к резонансной частоте.

$$\chi' = \operatorname{Re} \left\{ \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m \left[ \omega_0^2 - \omega^2 + j\omega(h/m) \right]} \right\},$$

$$\chi'' = -\operatorname{Im} \left\{ \frac{ne^2}{\varepsilon_0 m \left[ \omega_0^2 - \omega^2 + j\omega(h/m) \right]} \right\}. \quad (10.7)$$

Для комплексной восприимчивости снова используется выражение  $\chi^{\leftarrow} = \chi' - j\chi''$ . В формулах (10.7) приведена частотная зависимость обеих составляющих для конкретного случая, когда  $h/m\omega_0 = 0,1$ . Мы видим, что мнимая часть отличается от нуля практически лишь непосредственно вблизи резонансной частоты (по оси абсцисс отложено отношение  $\omega/\omega_0$ ), так что диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$  является комплексной только в очень узком диапазоне частот. Внутри этого диапазона отличен от нуля и тангенс угла потерь  $\operatorname{tg}\delta$ , достигающий при резонансной частоте бесконечно большого значения. Таким образом, интервал частот вблизи резонанса характеризуется сильным поглощением энергии; при этом  $\omega_0$  можно отождествить с соответствующими линиями поглощения в атомных спектрах. В случае электронной поляризации эти частоты лежат вблизи коротковолновой границы спектральной серии, в большинстве случаев в ультрафиолетовой (УФ) области спектра, в то время как в случае ионной поляризации они сдвинуты к меньшим частотам, а именно в инфракрасную (ИК) область.

Теория Максвелла приводит к очень простой и важной формуле, связывающей две константы вещества: диэлектрическую проницаемость  $\varepsilon$  и показатель преломления  $\nu$ . Последний представляет собой отношение фазовой скорости световых волн в вакууме к их фазовой скорости в соответствующем веществе, т. е.  $\nu = c/v$ . Формула имеет вид

$$\varepsilon = \nu^2. \quad (10.8)$$

Эта связь очень важна с точки зрения измерительной техники, так как показатель преломления может быть измерен с чрезвычайно высокой точностью, по крайней мере в оптической области спектра, а также в прилегающих к ней областях. Это позволяет не только осуществить тщательную проверку выведенных выше выражений для  $\mathcal{E}$ , но и с большой точностью определить величину вклада, вносимого электронной поляризацией в полную поляризацию вещества, а следовательно, оценить вклады двух других видов поляризации. Для химиков это является ценным вспомогательным методом при определении молекулярной структуры.

В оптике давно известно, что показатель преломления зависит от длины световой волны, чем и объясняется разложение света в спектр с помощью призмы. Это явление называется дисперсией. С помощью (10.4) и (10.8) можно получить формулы дисперсии, дающие зависимость показателя преломления  $\nu$  от частоты. При этом, однако, необходимо учитывать, что вещество может иметь много частот поглощения  $\omega_0$ , каждой из которых соответствует своя зависимость  $\nu(\omega)$ . Кроме того, вклад различных электронов оболочки в поляризацию характеризуется различной силой осциллятора  $A_i$ . Поскольку все эти причины действуют независимо друг от друга, дисперсионное уравнение приобретает вид

$$\frac{\nu^2 - 1}{\nu^2 + 2} = C \sum \frac{A_i}{\omega_{0i}^2 - \omega^2}, \quad (10.9)$$

где  $C$  – константа. Разумеется, это уравнение справедливо лишь вдали от частот поглощения, благодаря чему можно пренебречь мнимой частью в знаменателе формулы (10.4). В дальнейшем мы ограничимся случаями, когда  $\nu^2$  лишь немного больше единицы, так что левую часть уравнения (10.9) можно приближенно заменить величиной  $(\nu^2 - 1)/3$ . Такое приближение с высокой точностью выполняется для газов. В этом случае зависимость  $\nu(\omega)$  такова: при  $\omega < \omega_{0i}$ , т. е. в видимой области, так как все частоты поглощения лежат в УФ, показатель преломления  $\nu$  больше единицы и монотонно возрастает при увеличении частоты от своего статического значения, которое, конечно, недоступно для измерений. Такая зависимость носит название нормальной дисперсии. При  $\omega > \omega_{0i}$ , т. е. после прохождения всех резонансных частот  $\mathcal{E}$ , а следовательно, и  $\nu$  становятся меньше единицы и при возрастании частоты приближаются снизу к значению, равному единице. Таким образом, в этой области частот диэлектрик можно рассматривать как среду, «оптически менее плотную»,

чем вакуум; призма в этом случае отклоняла бы свет в обратном направлении; соответственно последовательность цветов в спектре также стала бы обратной (красный отклонялся бы больше, чем синий). Вблизи частоты поглощения  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{V}$  быстро уменьшаются с частотой (аномальная дисперсия). При этом вследствие очень сильного поглощения диэлектрик по оптическим свойствам приближается к металлу. Это связано с тем, что мнимой частью в (10.4) пренебрегать уже нельзя. Аналогичные соотношения наблюдаются при взаимодействии электромагнитного излучения с плазмой.

## ЗАДАЧИ К ПРАКТИЧЕСКИМ ЗАНЯТИЯМ

### Занятие 1

1. Частица массы  $m$  движется свободно в одномерной бесконечно глубокой потенциальной яме с прямоугольными стенками шириной  $l$ . Определить уровни энергии такой частицы.

2. Пользуясь условием Бора – Зоммерфельда, проквантовать энергию линейного гармонического осциллятора.

3. Найти уровни энергии электрона, движущегося по круговой орбите в атоме водорода, пользуясь условием квантования Бора – Зоммерфельда.

4. Оценить наименьшее значение энергии линейного гармонического осциллятора, которой он может обладать вследствие соотношения неопределенностей Гейзенберга.

5. Используя соотношение неопределенностей, оценить энергию основного состояния атомов водорода и гелия и соответствующее расстояние от электронов до ядра.

6. Рассчитать энергетические уровни микрочастицы в силовом поле вида

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < l \\ U_0, & x < 0, x > l \end{cases}$$

в случае, когда  $E < U_0$ .

7. Линейный гармонический осциллятор с зарядом  $e$  помещен в однородное электрическое поле напряженностью  $\vec{E}$ . Найти первую отличную от нуля поправку у энергии осциллятора.

8. Найти поправку первого порядка к энергии основного состояния линейного гармонического осциллятора с учетом малой аангармоничности  $U(x) = \beta x^4$ .

9. Атом водорода находится в однородном электрическом поле напряженностью  $\vec{E}$ . Найти расщепление уровня энергии, характеризующегося значением главного квантового числа  $n = 2$ .

10. Оценить среднее время жизни атома в возбужденном состоянии для разрешенных дипольных электрических переходов.

**Занятие 2**

1. Вывести условие применимости классической статистики (условие невырожденности электронного газа).

2. Оценить условие вырождения для электронного газа в натрии при температуре  $T = 1000 \text{ К}$ , зная, что концентрация этого газа  $n = 2,5 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ .

3. Для какой концентрации свободных электронов в кристалле температура вырождения газа будет равна  $300 \text{ К}$ ?

4. Определить, какой статистике (квантовой или классической) подчиняются свободные электроны в германии, если их концентрация  $10^{22} \text{ см}^{-3}$  при температуре  $300 \text{ К}$ .

5. При какой концентрации свободных электронов в кристалле температура вырождения электронного газа будет равна  $0^\circ \text{С}$ ?

6. До какого значения максимальной концентрации свободных электронов в металле при температуре  $300 \text{ К}$  можно применять классическую статистику Максвелла – Больцмана?

7. Для электронов в металле вывести выражения, описывающие:  
а) температуру Ферми; б) скорость Ферми.

8. Концентрация свободных электронов в натрии  $2,54 \cdot 10^{28} \text{ м}^{-3}$ .  
Определить температуру Ферми и скорость электронов на уровне Ферми.

**Занятие 3**

1. Оценить значение деформации кварцевой пластинки в электрическом поле  $E = 1000 \text{ В/см}$  вдоль оси второго порядка, в направлении которой пьезоэлектрический модуль  $d_{11} = -2,3 \cdot 10^{-12} \text{ Кл/Н}$ .

2. Показать, что частота собственных продольных колебаний кварцевой пластинки в направлении оси  $OX$  зависит от толщины согласно формуле  $f = \frac{286000}{d} \text{ Гц}$ .

3. Используя представления об ангармонических колебаниях частиц в кристаллической решетке, объяснить возникновение пьезоэлектрического эффекта.

4. Пьезоэлектрический коэффициент турмалина  $4 \cdot 10^{-6} \text{ Кл/(м}^2 \cdot \text{град)}$ . Определить напряженность электрического поля, которая вызывает такую же поляризацию, как изменение температуры на  $1^\circ$ , если диэлектрическая постоянная в направлении оси третьего порядка  $\epsilon = 7,1$ .

5. Вычислить поверхностную плотность заряда электрета, если емкость конденсатора  $1000 \text{ пФ}$ , диаметр электрода  $10 \text{ см}$ , а электрометр показывает напряжение  $100 \text{ В}$ .

6. Кварцевую пластинку поместили в электрическое поле  $E = 10^8 \text{ В/м}$ . Рассчитать изменение длины этой пластинки. Пьезоэлектрический модуль кварца  $A = 2,25 \cdot 10^{-12} \text{ Кл/Н}$ .

## Занятие 4

1. Определить длину волны де-Бройля, связанной с электроном эффективной массой  $m^* = 0,2m_e$ . Электрон движется в полупроводнике со скоростью  $v = 3 \cdot 10^7$  м / с.

2. Определить, будут ли нижеприведенные соединения полупроводниками или нет: *InSb*, *Mgg<sub>2</sub>Sn*, *SnS<sub>2</sub>*, *CuS*, *Co<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*, *GaAs*.

3. Для чистого германия граница поглощения электромагнитного излучения лежит в инфракрасной области  $\lambda_g = 1800$  нм. Рассчитать ширину запрещенной зоны для германия.

4. Вычислить значение энергии Ферми при  $T = 300$  К для *InSb*, если ширина запрещенной зоны его 0,2 эВ, а отношение эффективной массы электрона к эффективной массе дырки равно 20.

5. Во сколько раз изменится проводимость собственного полупроводника с шириной запрещенной зоны 0,3 эВ при повышении температуры от 300 К до 310 К?

6. Удельное сопротивление чистого германия составляет 0,47 Ом·м. Рассчитать концентрации носителей заряда, принимая, что подвижности электронов и дырок равны соответственно  $0,38 \text{ м}^2 / \text{В} \cdot \text{см}$  и  $0,18 \text{ м}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$ .

7. Определить концентрацию электронов в зоне проводимости кристалла кремния и проводимость этого кристалла при 300 К, если подвижность электронов и дырок соответственно равны  $1600 \text{ см}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$  и  $400 \text{ см}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$ , их эффективные массы:  $m_e^* = 1,08m_e$ ,  $m_p^* = 0,59m_e$ . Ширина запрещенной зоны 1,14 эВ.

8. Сколько носителей заряда образуется в кристалле при поглощении им  $10^{-4}$  Дж световой энергии с длиной волны 200 нм?

9. Ширина запрещенной зоны невырожденного полупроводника сложно зависит от температуры. Для германия при  $T > 100$  К зависимость линейная:  $E_G = E_{g0} - \alpha T$ , где  $E_{g0} = 0,789$  эВ,  $\alpha = 4 \cdot 10^{-4}$  эВ/К. Рассчитать изменение  $E_g$  при возрастании температуры от 150 К до 400 К.

10. В образце *Si* (собственная проводимость) действует электрическое поле  $= 400$  В / м, а подвижности электронов и дырок равны соответственно  $0,12 \text{ м}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$  и  $0,025 \text{ м}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$ . Вычислить: а) скорости дрейфа электронов и дырок; б) удельное сопротивление, считая, что концентрация собственных носителей заряда составляет  $2,5 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$ ; в) плотность дрейфового тока, если поперечное сечение равно  $3 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2$ .

## Занятие 5

1. Через медную пластинку с прямоугольным поперечным сечением течет ток с силой 20 А. После помещения ее в магнитное поле с индукцией 2 Тл на стенках, отстоящих друг от друга на расстоянии  $b$ , появляется разность потенциалов  $U = 6,2$  мВ. Рассчитать: а) концентрацию электронов проводимости; б) подвижность электронов. Размеры пластины: высота = 0,5 мм, ширина  $b = 10,0$  мм, удельное сопротивление меди  $\rho = 1,7 \cdot 10^{-8}$  Ом·м.

2. Определить значение напряжения Холла и напряженность поля Холла в проводнике из алюминия шириной 15 см и толщиной 4 мм, через который течет ток 200 А. Проводник помещен в магнитное поле  $B = 1,5$  Тл под углом  $45^\circ$  к линиям индукции.

3. Определить постоянную Холла для меди и алюминия.

4. Зная значение постоянной Холла для материала, определить число электронов, участвующих в электропроводности ( $R_H = -0,34 \cdot 10^{-10}$  м<sup>3</sup> / Кл).

5. Тонкая пленка серебра  $d = 10^{-7}$  м помещена в магнитное поле с индукцией  $B = 0,3$  Тл. При пропускании через нее тока  $I = 10^{-2}$  А возникает ЭДС Холла  $U_H = 3$  мкВ. Найти коэффициент Холла.

6. Вывести общее выражение для постоянной Холла полупроводника. Как упростится это выражение для собственного полупроводника?

7. Удельное сопротивление монокристалла Si  $p$ -типа при  $T = 300$  К составляет  $9 \cdot 10$  Ом·м. Вычислить постоянную Холла, если подвижность дырок  $\mu_p = 0,04$  м<sup>2</sup> / В·с.

8. Найти постоянную Холла для кристалла германия, содержащего  $10^{23}$  м<sup>-3</sup> индия и  $10^{24}$  м<sup>-3</sup> сурьмы.

9. Постоянная Холла для полупроводника  $R_H = -3,66 \cdot 10^{-4}$  м<sup>3</sup> / Кл, его удельное сопротивление  $8,93 \cdot 10^{-3}$  Ом·м. Полупроводник поместили в магнитное поле  $B = 0,5$  Тл. Определить значение угла Холла.

10. В образце германия подвижность электронов  $\mu_n = 0,38$  м<sup>2</sup> / В·с, подвижность дырок  $\mu_p = 0,16$  м<sup>2</sup> / В·с. Явление Холла не наблюдается. Какая часть проводимости обусловлена движением дырок?

## ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ ДЛЯ УПРАВЛЯЕМОЙ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ (УСР)

### Занятие 1

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- резерфордовская модель атома и ее трудности;
- постулаты Бора;
- условие квантования Бора – Зоммерфельда;
- строение ядра.

### Занятие 2

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- уравнение Шредингера;
- расчет энергетических уровней водородоподобного атома;
- атомы щелочных металлов;
- описание состояний атома без учета спина.

### Занятие 3

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- электронные оболочки и подоболочки атомов;
- основные методы расчета строения многоэлектронных атомов;
- заполнение оболочек и подоболочек в соответствии с принципами минимума энергии и запрета Паули;
- объяснение периодического закона элементов Менделеева.

### Занятие 4

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- типы связей атомов в молекулах;
- обменный характер сил в молекулах с гомеопольярной связью;
- колебательные и вращательные степени свободы;
- молекулярные спектры.

### Занятие 5

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- возникновение свободных электронов в металлических кристаллах;
- свойства электронного газа;
- модель потенциальной ямы Шоттки;
- невырожденный и вырожденный электронный газ, критерии вырождения, уровень Ферми.

**Занятие 6**

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- экспериментальные данные по термоЭДС;
- объяснение термоэлектрических явлений на основе электронной теории;
- применение термоэлектрических явлений.

**Занятие 7**

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- эффект Холла в металлах;
- эффект Холла в полупроводниках;
- применение эффекта Холла в исследовательских и прикладных целях.

**Занятие 8**

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- поглощение света в проводящей среде;
- поглощение света в полупроводниках с собственной и примесной проводимостью;
- собственная и примесная фотопроводимость.

**Занятие 9**

Рассматриваемые на занятии вопросы:

- электрическая ионизация;
- термоэлектрическая ионизация;
- ударная ионизация.

## **ИТОГОВЫЙ ТЕСТ**

Скачайте и выполните, пожалуйста, этот тест!

**СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Василевский, А. С. Физика твердого тела : учеб. пособие / А. С. Василевский. – М. : Мир, 2010. – 455 с.
2. Витайкин, Б. Е. Физика твердого тела : учеб. пособие / Б. Е. Витайкин. – М. : Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2006. – 360 с.
3. Мирдель, Г. Электрофизика / Г. Мирдель. – М. : Мир, 2002. – 608 с.
4. Павлов, П. В. Физика твердого тела / П. В. Павлов, А. Ф. Хохлов. – М. : Высш. шк., 2000. – 494 с.
5. Стильбанс, Л. С. Физика полупроводников / Л. С. Стильбанс. – М. : Наука, 2014. – 452 с.
6. Харрисон, У. А. Электронная структура и свойства твердых тел / У. А. Харрисон. – М. : Мир, 2012. – 712 с.