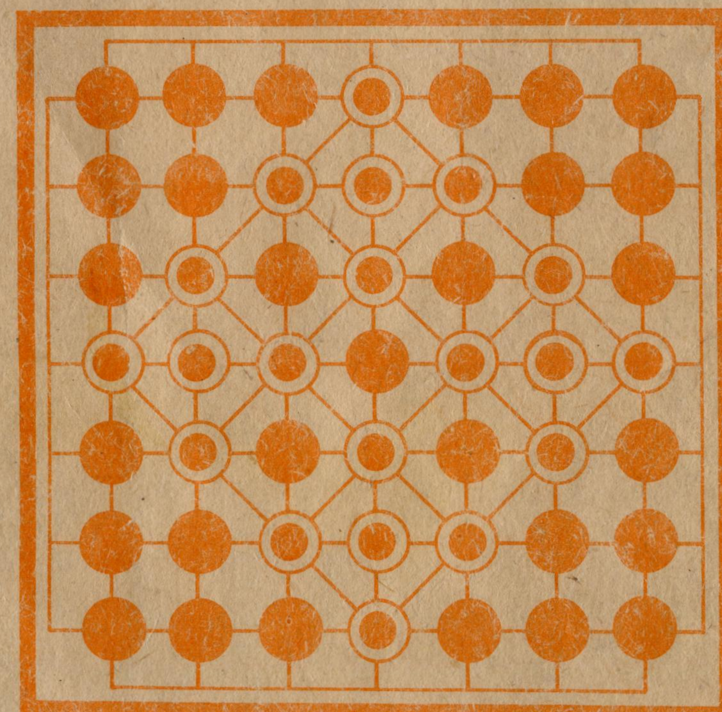
ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА. ТЕНЗОРЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ



НОВОСИБИРСК 1993

Государственный комитет Российской Федерации
по высшему образованию

Новосибирский государственный технический университет

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА.
ТЕНЗОРЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Учебное пособие
для студентов Ш–IУ курсов ФТФ
(специальности 200I и 2003)
дневной и вечерней форм обучения

Новосибирск
I993

539.2I+539.293 (075.8)

Шадрин В.С. Физика твердого тела. Тензорезистивный эффект в многодолинных полупроводниках: Учеб. пособие / Новосиб. гос. техн. ун-т. – Новосибирск, 1993. – 73 с.

ISBN 5-230-I20I0-X

В настоящем пособии излагаются вопросы влияния симметрии кристаллов на физические свойства германия и кремния n-типов проводимости, а также изменение электропроводности при изменении симметрии вследствие упругой деформации кристаллов (тензорезистивный эффект). Пособие предназначено для студентов старших курсов специальностей 2001 (физическая электроника) и 2003 (полупроводниковые приборы и микроэлектроника).

Ил. 20, табл. 3, библ. I3 назв.

Рецензент Л.М. Минкевич, канд. техн. наук, доц.

Работа подготовлена на кафедре полупроводниковых приборов и микроэлектроники

ISBN 5-230-I20I0-X

ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ

В настоящем учебном пособии рассматривается важный раздел физики твердого тела – тензорезистивный эффект в многодолинных полупроводниках. Вопрос этот достаточно сложен, в нем наиболее выпукло и органично сливаются интересы кристаллофизики, теории упругости анизотропных сред, квантовой и статистической физики.

Главная сложность, с которой сталкиваются студенты при выполнении курсовых, дипломных и научно-исследовательских работ по этой тематике, связана с отсутствием литературы. Периодическая литература, монографии, научно-популярные издания либо слишком сложны для понимания, либо не позволяют делать количественных оценок, и вместе с тем те и другие практически недоступны для студентов. Настоящее пособие восполняет этот пробел.

В пособии рассматриваются только основы явления и, естественно, никак не освещаются научные проблемы, возникающие при более глубоком знакомстве с ним, такие, например, как концентрационные эффекты и влияние статистического вырождения, расщепление примесных уровней при деформации, влияние резонансов и "хвостов" плотности состояний, механизмов рассеяния и т.д.

Тем не менее пособие может послужить отправной точкой для начала работы студентов, магистрантов, аспирантов в этом направлении.

Готовится к изданию вторая часть пособия, посвященная деформационным эффектам в полупроводниках со сложной структурой энергетического спектра.

Список обозначений

q – заряд электрона
k_0 – постоянная Больцмана
$\hbar = h/2$ – постоянная Планка
a_{mn} – элемент матрицы направляющих косинусов
A_{mn} – элемент шестимерной матрицы направляющих косинусов
A, B – отношение концентраций электронов в неэквивалентных минимумах
A_v, B_v, C_v – параметры валентной зоны
C – коэффициент квадратичной тензочувствительности
C_{mn} – составляющая тензора упругости
ε_i – энергия электрона
ε_c – энергия края зоны в точке i -го минимума
K – фактор анизотропии подвижности
$\vec{k}$ – волновой вектор, волновое число
M_{mn} – составляющая тензора эластопроводимости
m_{mn} – составляющая тензора эластосопротивления
m^* – эффективная масса
n – концентрация электронов
P_{mn} – составляющая тензора механического напряжения
S – коэффициент тензочувствительности
S_{mn} – составляющая тензора податливости
U_{mn} – составляющая тензора подвижности
Y – модуль Юнга
ε_{mn} – составляющая тензора деформации
$\varkappa$ – коэффициент Пуассона
Λ_{mn} – составляющая тензора потенциала деформации
μ – энергия Ферми
ν – число минимумов энергии в зоне проводимости
Π_{mn} – составляющая тензора пьезопроводимости
π_{mn} – составляющая тензора пьезосопротивления
ρ – удельное сопротивление
σ – удельная электропроводность

I. НАПРАВЛЕНИЕ И ПЛОСКОСТЬ В ПРОСТРАНСТВЕ

I.I. Направление в пространстве

"Направление" в пространстве можно задать вектором $\overline{N}(N_x, N_y, N_z)$, имеющим длину

$$|N| = \sqrt{N^2} = \sqrt{N_x^2 + N_y^2 + N_z^2}, \qquad \text{(I)}$$

и тремя косинусами направляющих углов α, β, γ относительно координатных осей x, y, z (рис.I):

$$\begin{aligned} \cos\alpha &= \cos(N\hat{,}x) = \frac{N_x}{|N|} = a_{N_x}; \\ \cos\beta &= \cos(N\hat{,}y) = \frac{N_y}{|N|} = a_{N_y}; \\ \cos\gamma &= \cos(N\hat{,}z) = \frac{N_z}{|N|} = a_{N_z}. \end{aligned} \qquad \text{(2)}$$

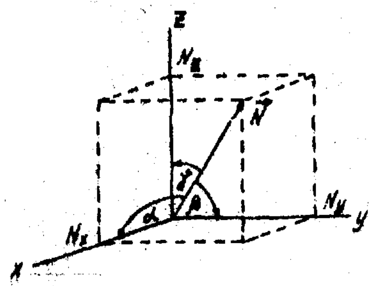


Рис.I

Из формул (I) и (2) следует, что для любого направления

$$a_{N_x}^2 + a_{N_y}^2 + a_{N_z}^2 = \frac{N_x^2}{|N|^2} + \frac{N_y^2}{|N|^2} + \frac{N_z^2}{|N|^2} = 1. \qquad \text{(3)}$$

Если косинусы направляющих углов любого другого направления $\overline{M}$ обозначить через $a_{M_x}, a_{M_y}, a_{M_z}$, то косинус угла между направлениями $\overline{N}$ и $\overline{M}$ определяется соотношением [I]:

$$a_{NM} = \cos(N\hat{}M) = a_{N_x} a_{M_x} + a_{N_y} a_{M_y} + a_{N_z} a_{M_z}. \qquad \text{(4)}$$

Для ортогональных направлений $\cos(N\hat{}M) = 0$, так что в этом случае

$$a_{N_x} a_{M_x} + a_{N_y} a_{M_y} + a_{N_z} a_{M_z} = 0. \qquad \text{(5)}$$

В качестве "направлений" $\overline{N}$ и $\overline{M}$ можно выбрать сами координатные оси x, y и z:

$$\begin{aligned} x &\left[\cos(x\hat{}x) = 1, \ \cos(x\hat{}y) = 0, \ \cos(x\hat{}z) = 0\right]; \\ y &\left[\cos(y\hat{}x) = 0, \ \cos(y\hat{}y) = 1, \ \cos(y\hat{}z) = 0\right]; \\ z &\left[\cos(z\hat{}x) = 0, \ \cos(z\hat{}y) = 0, \ \cos(z\hat{}z) = 1\right], \end{aligned}$$

т.е.

$$\cos(m\hat{}n) = \delta_{mn}, \qquad \text{(6)}$$

где δ_{mn} – символ Кронекера.

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 1, \text{ если } m = n, \\ 0, \text{ если } m \neq n, \end{cases}$$

$$m, n = x, y, z.$$

I.2. Плоскость в пространстве

"Нормальное" уравнение плоскости в пространстве задается соотношением

$$x\cos\alpha + y\cos\beta + z\cos\gamma = |N|,$$

или, что то же самое,

$$x \cdot a_{N_x} + y \cdot a_{N_y} + z \cdot a_{N_z} = |N|. \qquad \text{(7)}$$

В уравнении (7) углы α, β и γ определяют направление $\overline{N}$, нормальное рассматриваемой плоскости, величина $|N|$ равна кратчайшему расстоянию плоскости до начала координат $x, y, z = 0$. Назовем расстояние $|N|$ масштабной длиной или масштабным множителем.

Уравнение той же самой плоскости "в отрезках" дается соотношением

$$\frac{x}{a} + \frac{y}{b} + \frac{z}{c} = 1. \qquad \text{(8)}$$

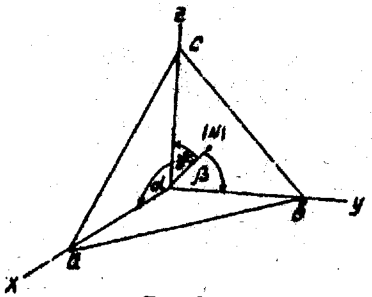


Рис.2

Величины "a", "b" и "c" есть длины отрезков, отсекаемых плоскостью на осях x, y, z (рис.2). Обычно длины a, b и c выражаются в единицах межатомных расстояний, т.е. в виде целых чисел.

I.3. Индексы Миллера

Уравнение (8) можно записать так:

$$x a^{-1} + y b^{-1} + z c^{-1} = 1.$$

Если, как это принято в кристаллофизике, длины выражать в межатомных расстояниях, то тройка чисел a^{-1}, b^{-1}, c^{-1} записывается простыми дробями. Для удобства записи эти дроби превращают в целые числа умножением на наименьший общий множитель C. Такая тройка наименьших целых чисел называется индексами Миллера и обозначается через (hkl). Все сказанное можно представить в виде правила

$$\left(\frac{1}{a}, \frac{1}{b}, \frac{1}{c}\right)C = (a^{-1}C, b^{-1}C, c^{-1}C) = (hkl). \qquad (9)$$

Например, пусть некоторая плоскость отсекает на осях x, y, z отрезки длиной 2, 3, 4 условных единицы. В соответствии с правилом (9) имеем

$$\left(\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{4}\right) 3 \cdot 4 = \left(\frac{1}{2} \cdot 12, \frac{1}{3} \cdot 12, \frac{1}{4} \cdot 12\right) = (643) = (hkl).$$

Естественно, тройка чисел (12,8,6), кратная (6,4,3) определяет новую плоскость, параллельную рассматриваемой.

Существует бесконечное множество таких параллельных плоскостей. Общим для них является направление $\vec{N}$, перпендикулярное всей системе плоскостей. Для того чтобы избежать неопределенности при рассмотрении свойств этих физически эквивалентных плоскостей, мы будем определять их тройкой наименьших целых чи-

сел (т.е. индексами Миллера) и одним, соответствующим этой тройке чисел, масштабным множителем $|N|$.

Направлению $\vec{N}$ приписывают те же самые индексы Миллера, что и плоскости, и будем обозначать их через $[hkl]$. При этом необходимо сделать следующее замечание. Хотя плоскости (hkl) и $(-h-k-l) = (\bar{h}\bar{k}\bar{l})$ параллельны, направления $[hkl]$ и $[\bar{h}\bar{k}\bar{l}]$ противоположны. Кроме того, если угол между направлениями $[h_1 k_1 l_1]$ и $[h_2 k_2 l_2]$ острый, то угол между плоскостями $(h_1 k_1 l_1)$ и $(h_2 k_2 l_2)$ тупой. Однако в последующем не будет необходимости определять углы между плоскостями, а лишь искать, как правило, углы между направлениями.

Плоскости с индексами Миллера (hkl), $(\bar{h}kl)$, $(h\bar{k}l)$, $(hk\bar{l})$ и т.д. отсекают одинаковые по величине, но различные по знаку отрезки на осях x, y, z. Эти плоскости не параллельны друг другу, но все они имеют один и тот же масштабный множитель $|N|$. Систему таких плоскостей обозначают индексами Миллера $\{hkl\}$, систему перпендикулярных им направлений – индексами Миллера $\langle hkl \rangle$.

Представляется важным найти связь индексов Миллера и косинусов направляющих углов. Сравнивая (2), (7) и (9), находим

$$h = \frac{\alpha_{N_x}}{|N|}, \quad k = \frac{\alpha_{N_y}}{|N|}, \quad l = \frac{\alpha_{N_z}}{|N|} \qquad (10)$$

или, что то же самое,

$$\alpha_{N_x} = h|N|, \; \alpha_{N_y} = k|N|, \; \alpha_{N_z} = l|N|. \qquad (11)$$

Используя соотношение (3), находим

$$h^2|N|^2 + k^2|N|^2 + l^2|N|^2 = 1. \qquad (12)$$

Отсюда масштабный множитель

$$|N| = \frac{1}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \qquad (13)$$

Как видно из формулы (13), масштабный множитель $|N|$ определяется для всей системы направлений $\langle hkl \rangle$ и всей системы плоскостей $\{hkl\}$. Например, для направлений с малыми индексами Миллера

$$\langle 100\rangle\, |N| = \frac{1}{\sqrt{1}} = 1\,; \quad \langle 110\rangle\, |N| = \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2}\,;$$

$$\langle 111\rangle\, N = \frac{1}{\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{3}\,; \quad \langle 112\rangle\, N = \frac{1}{\sqrt{6}} = \frac{\sqrt{6}}{6}$$

и т.п.

Собственно, эта одинаковость масштабных длин для всех направлений $\langle hk\ell\rangle$ и позволяет рассматривать их как единую совокупность. Косинус угла между двумя направлениями $\overline{N}$ и $\overline{M}$ с индексами Миллера $[h_N k_N \ell_N]$ и $[h_M k_M \ell_M]$ может быть найден при помощи формул (4), (II) и (I3):

$$a_{NM} = |N|\,|M|\,(h_N h_M + k_N k_M + \ell_N \ell_M). \qquad (I4)$$

Из формулы (I4) видно, почему мы назвали длину $|N|$ масштабным множителем.

Формулы (II), (I3), (I4) важны для решения практических задач. Пользуясь схемой, изображенной на рис.2, и правилом (9), нетрудно найти индексы Миллера плоскости и, следовательно, направление $\overline{N}$. Зная индексы Миллера направлений, по формуле (II) определяют их направляющие косинусы, а по формуле (I4) косинусы углов между направлениями. Для примера определим косинусы углов между направлениями:

$$\overline{N_1} = [111] \text{ и } M_1 = [110]\,;\; N_2 = [111] \text{ и } M_2 = [\bar{1}10]\,;$$

$$a_{N_1 M_1} = \frac{\sqrt{3}}{3}\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}\,(1\cdot1 + 1\cdot1 + 1\cdot0) = \frac{\sqrt{6}}{3}\,;$$

$$a_{N_2 M_2} = \frac{\sqrt{3}}{3}\,\frac{\sqrt{2}}{2}\,(\bar{1}\cdot1 + 1\cdot1 + 1\cdot0) = 0.$$

I.4. Индексы Миллера простых направлений и плоскостей

Простыми направлениями и плоскостями мы будем называть такие, индексы Миллера которых представляются совокупностью малых чисел 0, I, 2. Решим одну частную, но важную для последующего рассмотрения задачу. Найдем индексы Миллера простых плоскостей, перпендикулярных плоскости (111). Естественно, направления с теми же индексами Миллера лежат в плоскости (111).

А. Из формулы (I4) следует, что никакое направление из системы $\langle 100\rangle$ не удовлетворяет условию ортогональности, т.е. $a_{NM} \neq 0$. Следовательно, нет плоскостей $\{100\}$, перпендикулярных (111).

Б. Направления $\langle 110\rangle$ удовлетворяют условию $a_{NM} = 0$. Индексы Миллера этих направлений нетрудно определить методом простого перебора: $[01\bar{1}]$, $[0\bar{1}1]$; $[\bar{1}01]$, $[10\bar{1}]$; $[\bar{1}10]$, $[1\bar{1}0]$. Обратим внимание на то, что изменение какого-то направления на обратное равноценно замене осей координат X, Y, Z на $\bar{X}$, $\bar{Y}$, $\bar{Z}$. Операция изменения знаков осей координат называется инверсией. При инверсии X переходит в $\bar{X}$, т.е. $X \to \bar{X}$, $Y \to \bar{Y}$, $Z \to \bar{Z}$. Следовательно, индексы Миллера направления $[01\bar{1}]$ при операции инверсии $[XYZ] \to [\bar{X}\bar{Y}\bar{Z}]$ изменяются следующим образом: $[01\bar{1}] \to [\bar{0}\bar{1}\bar{\bar{1}}] = [0\bar{1}1]$. Таким образом, направления $[01\bar{1}]$ и $[0\bar{1}1]$ противоположны. Точно так же противоположны направления $[\bar{1}01]$ и $[10\bar{1}]$; $[\bar{1}10]$ и $[1\bar{1}0]$. На рис.3 изображена плоскость (111) и лежащие в ней простые направления.

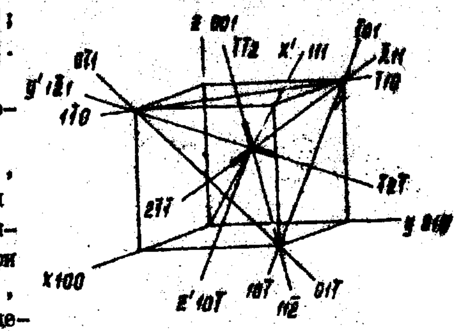


Рис.3

В. Направления $\langle 112\rangle$. Условию $a_{NM} = 0$ удовлетворяют направления $[\bar{1}\bar{1}2]$, $[11\bar{2}]$; $[\bar{1}2\bar{1}]$, $[1\bar{2}1]$; $[\bar{2}11]$, $[2\bar{1}\bar{1}]$. На рис.3 предложена новая (расчетная) система координат $X'[111]$, $Y'[1\bar{2}1]$, $Z'[10\bar{1}]$. Простой проверкой нетрудно убедиться, что новая система координат – правая, используя формулу (I4), можно проверить, что оси X', Y', Z' ортогональны. Такая проверка обязательна каждый раз, когда выбирается новая система координат. Для упрощения рис.3 индексы Миллера направлений указаны без скобок.

I.5. Метод световых фигур

Обычно слитки германия и кремния выращиваются в направлении $[111]$, так что они образуют после выращивания и отрезания концевых частей цилиндр, основаниями которого являются две плоскости из системы $\{111\}$ с противоположными направлениями. В кристаллах германия и кремния направления $[111]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ физически не различимы, поэтому за исходное можно выбрать любое из них. Однако не следует думать, что это справедливо для любых кубических кристаллов. В соединениях A^3B^5 ($GaAs$, $GaSb$, InP и др.) направления $[111]$ и $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ физически не эквивалентны, так как одна сторона слитка сформирована атомами A^3, другая – атомами B^5, поэтому некоторые физические и химические свойства торцов одного и того же слитка могут отличаться. Существуют методы, которые позволяют привязать картину, изображенную на рис.3, к реальному слитку. Одним из таких методов идентификации направлений (плоскостей) в реальном монокристалле является метод световых фигур. На рис.4 приведена схема такого метода.

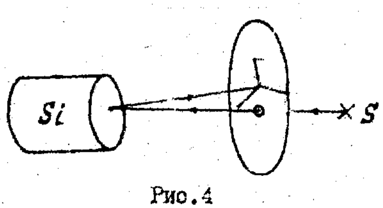


Рис.4

Пусть между слитком кремния и точечным источником света S, лучше всего лазером, расположен непрозрачный экран с отверстием. Через отверстие в экране луч лазера падает на кристалл, отражается от его торца и попадает на экран. На экране появляется световая фигура в виде трехлучевой звезды, причем центр фигуры связан не с отражением от геометрической плоскости слитка, а с отражением от кристаллографической плоскости (111). То есть, если, например, прижать плоскую стеклянную пластинку к плоскости торца, то на экране появятся одновременно яркая отраженная точка от стекла и трехлучевая фигура от монокристалла. Центр этой фигуры и отраженная от стекла точка могут не совпадать. Совпадение будет только в том сл е, если плоскость торца слитка совпадает с кристаллографической плоскостью (111) монокристалла. При вращении слитка вокруг его оси трехлучевая звезда будет поворачиваться вместе со слитком, т.е. она жестко привязана к кристаллографическим осям. Если обратиться к рис.3, то нетрудно заметить, что лучи такой звезды из соображений симметрии должны

быть ориентированы либо в направлениях $[1\bar{2}1]$, $[11\bar{2}]$, $[\bar{2}11]$, либо в обратных им направлениях $[\bar{1}2\bar{1}]$, $[\bar{1}\bar{1}2]$, $[2\bar{1}\bar{1}]$. Кстати сказать, в зависимости от вида обработки поверхности – грубой механической шлифовки, или травления в анизотропном травителе (см. ниже) лучи отраженной фигуры могут быть направлены либо в прямых, либо в обратных направлениях. Если недолго травить грубо шлифованную поверхность, то можно получить при отражении шестилучевую фигуру.

Появление лучей световой фигуры связано с отражением от микроскопических поверхностей, появляющихся на слитке в результате сколов при его грубой механической обработке или анизотропном травлении. Представим себе, что луч отражается последовательно от системы близких плоскостей (999), (788), (677), (566) и т.п. с двумя одинаковыми последними индексами. Система этих плоскостей приведена на рис.5. Отраженные от этих микроскопических плоскостей лучи образуют прямую линию, проекция которой с экрана на кристалл будет направлена вдоль оси $[2\bar{1}\bar{1}]$. Аналогично образуются два других луча. В реальной ситуации отражение происходит от большого числа случайно распределенных микросколов, так что вместо системы светлых точек на экране появляется световой луч.

Если спроектировать (перенести) световую фигуру с экрана на монокристалл, то задача ориентации слитка (идентификации его плоскостей) принципиально решена. Практические приемы, используемые при ориентации методом световых фигур, описаны в [2]. На рис. 6 показано, как нужно разрезать слиток относительно световой фигуры для выявления кристаллографических плоскостей (III), (II0), (I00). Световые фигуры проявляются и при отражении луча от плоскостей (I00) и (II0), если соответствующим образом подобрать травители. Однако они очень сильно размыты; поэтому ориентация слитков практически осуществляется по базовой плоскости (III).

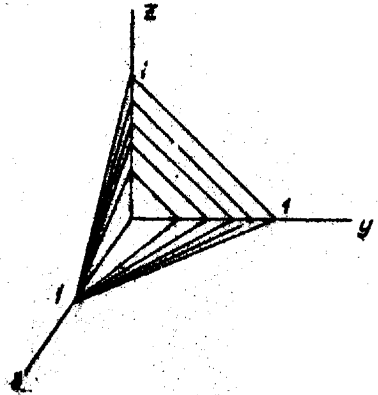


Рис.5

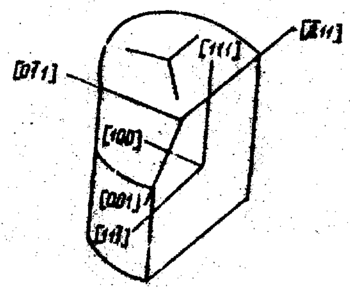


Рис.6

I.6. Анизотропное травление

Из монокристаллов кремния путем химического травления можно изготавливать монолитные детали сложной формы малых размеров и высокой степенью чистоты обработки поверхности. Метод основан на том, что в некоторых, так называемых селективных травителях, скорость травления кристалла сильно отличается в различных кристаллографических направлениях, т.е. различные плоскости травятся с разной скоростью [3] .

Кислотные травители для изотропного травления, такие, как СР-4, СР-8, протравливают кристалл кремния с одинаковой скоростью во всех направлениях, так что в зоне травления образуются углубления круглой формы.

В щелочных травителях, например в кипящем 30-процентном водном растворе КОН, кристалл растравливается анизотропно; в пластине кремния можно получать углубления с острыми кромками и углами и вертикальными стенками. При изготовлении кремниевых конструкций исходные пластины окисляются; в местах, подлежащих травлению, вскрываются окна с использованием фотолитографии.

Изотропный травитель не только вытравливает кремний в местах, не покрытых окислом, но одновременно подтравливает области под слоем маски, увеличивая диаметр углубления. Полученное таким образом углубление имеет диаметр, по крайней мере, вдвое больший, чем его глубина. Поэтому, если в пластине нужно выбрать сквозные отверстия, расстояния между краем незащищенных окислом мест

должны находиться друг от друга на расстоянии, большем толщины пластины. Анизотропные травители не подтравливают кремний под слоем окисла. Это позволяет получать углубления со строго вертикальными боковыми стенками, так как диаметр углубления не увеличивается. Благодаря этому в пластине можно вытравливать большое число близко расположенных отверстий; края рисунка фотошаблона могут располагаться настолько близко друг к другу, насколько позволяют возможности метода фотолитографии.

Форма отверстия, формируемого при травлении анизотропным травителем, зависит от кристаллографической ориентации пластины.

На рис.7 приведены профили углублений, полученные методом химического травления различных плоскостей кремниевой пластины [4] . На рис.7,а изображены результаты изотропного травления.

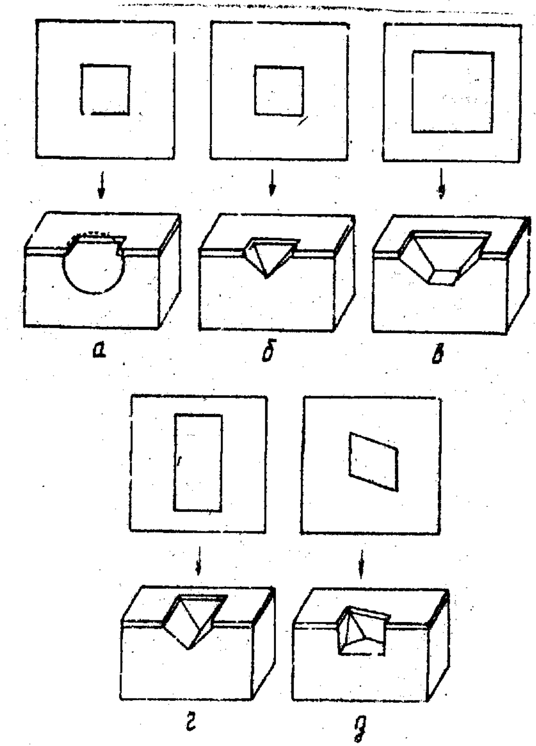


Рис.7

На рис.7,б на пластине (100) окна ориентированы в направлениях ⟨110⟩. В результате травления получены грани типа {111}. На рис.7,в при той же ориентации окон и поверхности пластины, что и на рис.7,б, окна имеют большие размеры. Такой же результат может получиться, если на схеме (рис.7,б) процесс травления остановить раньше. На рис.7,г длинное прямоугольное окно на поверхности той же самой пластины при травлении образует V-образный желоб. На рис.7,г на пластине {110} вертикальной стенки образованы плоскостями {111}, естественно, стенки не перпендикулярны друг другу. Боковые стенки, пересекающиеся под острым углом, соединены еще одной плоскостью. Плоскости с большими индексами Миллера, такие, как {221}, позволяют получить при травлении углубления сложной формы.

Экспериментально установлено, что анизотропное травление плоскостей {111} кремния происходит медленно или вообще не происходит. Плоскости {110} травятся быстро, плоскости {100} травятся со средней скоростью. Механизм, определяющий зависимость скорости анизотропного травления от кристаллографического направления до конца не ясен. Предположительно, он связан с прочностью межатомных связей в кристаллической решетке. На рис.8 изображено расположение атомов кремния на поверхностях (100), (110) и (111).

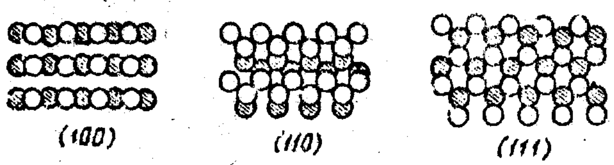


Рис.8

В плоскости (100) каждый поверхностный атом связан с двумя атомами в нижнем слое, тогда как в плоскости (111) каждый поверхностный атом связан с тремя атомами в нижележащем слое. В плоскости (110) каждый поверхностный атом связан с двумя поверхностными атомами и только с одним атомом в нижележащем слое. Возможно, это обстоятельство объясняет приведенное выше соотношение скоростей. Но это объяснение не может быть полным, так как при такой же решетке в германии последовательность скоростей травления в анизотропных травителях другая.

Одним из важных элементов кремниевой микромеханики является прямоугольная мембрана. Она получается по технологии, приведенной на рис.7,в. Однако таким методом сложно получить мембрану одинаковой толщины.

Прецизионные мембраны заданной толщины и формы можно получить, используя так называемое "стоп-травление". Идея его заключается в том, что скорость травления зависит не только от ориентации пластины, но и от уровня легирования. Существуют травители, которые быстрее травят слаболегированные участки, чем сильнолегированные (есть травители, которые действуют наоборот). Таким образом, если на поверхности пластины методом диффузии создать равномерный слой сильнолегированный примесью (например, бором), то, растравливая пластины с обратной стороны, можно добиться автоматической остановки травления на сильнолегированном слое. В этом случае толщина мембраны будет равна толщине легированного слоя. Используя последовательные операции диффузии и эпитаксии, можно получить плоские мембраны, расположенные ниже поверхности пластины, или мембраны сложного профиля. На рис.9 изображена плоская мембрана, используемая для изготовления тензочувствительных датчиков давления. На рисунке указаны кристаллографические плоскости. Углы между плоскостями при проектировании такой мембраны легко определить по формуле (14). В последующем на плоском участке мембраны в определенных ее местах методами диффузионной технологии формируется тензочувствительная схема, представляющая собой четыре тензорезистора, соединенных в схему моста Уинстона.

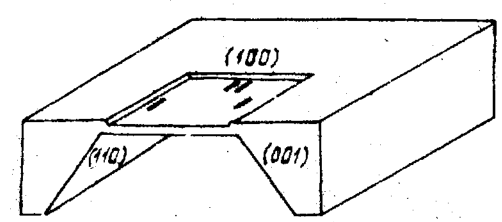


Рис.9

2. ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СИСТЕМ КООРДИНАТ. ТЕНЗОРЫ

2.I. Преобразования систем координат

Если старую систему координат x, y, z повернуть относительно начала координат так, что оси примут новое положение x', y', z' ("новая система координат"), то результат такого преобразования можно задать девятью косинусами направляющих углов a_{mn} новых (штрихованных) осей относительно старых (нештрихованных). Эти девять косинусов образуют матрицу преобразования (поворота в рассматриваемом случае), которая может быть записана следующим образом:

$$\begin{array}{ll|ccc} & & \multicolumn{3}{c}{\text{Старые оси}} \\ & & x & y & z \\ \hline \text{Новые оси} & x' & a_{x'x} & a_{x'y} & a_{x'z} \\ & y' & a_{y'x} & a_{y'y} & a_{y'z} \\ & z' & a_{z'x} & a_{z'y} & a_{z'z} \end{array} \qquad (I5)$$

Как видно, в этой матрице первый индекс обозначает строку, второй – столбец. Мы будем придерживаться правила, в котором первый индекс каждого элемента матрицы относится к новым осям, второй – к старым. Тогда матрица (I5) может быть записана следующим образом:

$$a_{mn} = \begin{bmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} \\ a_{yx} & a_{yy} & a_{yz} \\ a_{zx} & a_{zy} & a_{zz} \end{bmatrix} \qquad (I6)$$

Так как любую координатную ось можно рассматривать как "направление" в другой системе координат, то формулы (3) и (5) в обобщенном виде могут быть записаны

$$a_{mn} a_{pn} = \delta_{mp}, \quad a_{nm} a_{np} = \delta_{mp}, \qquad (I7)$$

где δ_{mp} – единичная матрица

$$\delta_{mp} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I. \qquad (I8)$$

В формуле (I7) использовано правило Эйнштейна, по которому суммирование осуществляется по повторяющемуся индексу.

Определитель, образованный из элементов матрицы (I6), для правой системы координат равен +I, для левой -I. Так как мы всегда будем пользоваться только правой системой координат, необходимо, чтобы выполнялось условие

$$\Delta_{mn} = +1. \qquad (I9)$$

Матрица (I6) является обязательным элементом преобразования тензоров из одной системы координат в другую. Для того чтобы избежать ошибок в расчетах при выборе новой системы координат, всегда необходимо убедиться в том, что соотношения (I7) и (I9) выполняются.

Кристаллы германия и кремния относятся к кубическим, группа симметрии которых для прямой решетки обозначается как $\bar{4}3m$, для обратной (см. ниже) как $43m$. Это означает, что, по крайней мере, три операции симметрии совмещают кристалл сам с собой:

а) "$\bar{4}$" – поворотная инверсионная ось 4-го порядка (т.е. если кристалл поворачивается вокруг любой оси: или x, или y, или z на 90° с последующей заменой оси вращения на обратную, например, $x \to -x$;

б) поворотная ось третьего порядка "3" – это оси $\langle III \rangle$. Если кристалл повернуть вокруг любой из них (безразлично, в какую сторону) на I20°, то он совместится сам с собой;

в) "m" – плоскость зеркального отражения. Это плоскости $\{II0\}$.

Любая комбинация этих трех операций (элементов симметрии) также совмещает кристалл сам с собой. С другой стороны, если поворачивать не кристалл, а саму систему координат, все физические свойства кристалла в этой новой системе координат останутся теми же самыми. Так, например, если на рис.3 кристалл повернуть вокруг оси $[III]$ на I20°, то свойства его не изменятся, т.е. оси $[I\bar{2}I]$, $[\bar{2}II]$ и $[II\bar{2}]$ физически эквивалентны.

Проверим это утверждение.

При повороте координатной системы X, Y, Z вокруг оси $[111]$ на 120° по часовой стрелке оси $[XYZ]$ перейдут в $[ZXY]$.

Рассмотрим действие этой операции на направления $[1\bar{2}1]$: $[1\bar{2}1] \to [\ ,\ ,\ ] = [\bar{2}11]$, далее $[\bar{2}11] \to [11\bar{2}]$.

Обращаясь к рис.3, видим, что указанные направления действительно переходят одно в другое при такой операции симметрии.

В дальнейшем нам придется при расчетах электропроводности и тензорезистивного эффекта в германии пользоваться системой координат, связанной с осями $\langle 111 \rangle$ в пространстве волновых векторов (см. ниже). Это пространство имеет группу симметрии куба $43m$. Одна новая система координат для этого случая уже предложена (см. рис.3). Это $X'[111]$, $Y'[1\bar{2}1]$, $Z'[10\bar{1}]$.

На рис.13 приведены четыре направления из системы $\langle 111 \rangle$, другие четыре направления обратны им, т.е. физически эквивалентны (кубические кристаллы центросимметричны, т.е. операция инверсии содержится в их группе симметрии). Если мы хотим построить новую систему координат, осью X' которой была бы не ось $[111]$, а ось $[1\bar{1}1]$, то можно поступить следующим образом. Если повернуть куб (рис.13) вокруг оси Z на 90° по часовой стрелке, то операцию поворота можно представить следующим образом: $[XYZ] \to [\bar{Y}XZ]$. В соответствии с этим правилом
$X'[111] \to X''[1\bar{1}1]$; $Y'[1\bar{2}1] \to Y''[\bar{2}\bar{1}1]$; $Z'[10\bar{1}] \to Z''[0\bar{1}\bar{1}]$.
Аналогичным образом можно поступить, если в качестве оси X'' выбрать направление $[\bar{1}11]$, оси X''' – направление $[11\bar{1}]$. Нетрудно убедиться в том, что если координатная система, связанная с осью $[1\bar{1}1]$ определена, то для осей $[\bar{1}11]$ и $[11\bar{1}]$ такие системы можно получить, используя операцию поворота вокруг оси $[111]$. Эти результаты можно представить в следующем виде:

X	Y	Z
$[100]$	$[010]$	$[001]$
X'	Y'	Z'
$[111]$	$[1\bar{2}1]$	$[10\bar{1}]$
$[1\bar{1}1]$	$[\bar{2}\bar{1}1]$	$[0\bar{1}\bar{1}]$
$[\bar{1}11]$	$[\bar{1}1\bar{2}]$	$[\bar{1}\bar{1}0]$
$[11\bar{1}]$	$[1\bar{2}\bar{1}]$	$[\bar{1}0\bar{1}]$

(20)

Нетрудно убедиться, используя формулу (14), в том, что все оси X', Y', Z' каждой из предложенных систем ортогональны. Если, используя ту же самую формулу, составить определитель матрицы из осей системы $X[100]$ $Y[010]$, $Z[001]$ и любой системы осей X', Y', Z', то можно убедиться в том, что $\Delta_{mn} = +1$.

Матрицы a_{mn} любой из предложенной пары координатных систем составляются по формуле (14). Приведенная в (20) система координат конечно не единственная. Таких систем координат можно предложить бесконечное множество. Рис.3 дает возможность выбрать другие, столь же удобные системы. При преобразовании тензоров высокого ранга для упрощения расчетов можно использовать представление о многомерном пространстве. В частности, для преобразования составляющих тензора эластосопротивления удобно ввести шестимерное пространство координат X, Y, Z, U, V, W. В этом случае матрица направляющих косинусов A_{mn} будет иметь 36 составляющих

$$A_{mn} = \begin{bmatrix} a_{xx} & a_{xy} & a_{xz} & a_{xu} & a_{xv} & a_{xw} \\ a_{yx} & \cdot & \cdot & a_{yu} & \cdot & \cdot \\ a_{zx} & \cdot & \cdot & a_{zu} & \cdot & \cdot \\ a_{ux} & a_{uy} & a_{uz} & a_{uu} & a_{uv} & a_{uw} \\ a_{vx} & \cdot & \cdot & a_{vu} & \cdot & \cdot \\ a_{wx} & \cdot & \cdot & a_{wu} & \cdot & a_{ww} \end{bmatrix} \qquad (21)$$

или

$$A_{mn} = \left[\begin{array}{c|c} b_{mn} & c_{mn} \\ \hline d_{mn} & f_{mn} \end{array}\right]. \qquad (22)$$

Конкретный вид матриц $b_{mn}, c_{mn}, d_{mn}, f_{mn}$, каждая из которых содержит 3×3 элементов, определяется соотношениями между одними и теми же составляющими тензоров четвертого ранга в матричном и тензорном обозначениях [5].

2.2. Тензоры

Физические свойства кристаллов или внешние воздействия на них могут быть выражены величинами, называемыми тензорами. Тензорами называются величины T_{mn}, которые при преобразовании системы координат из старой x, y, z в новую $x'y'z'$ изменяются по закону

$$T'_{m'n'p'q'} = a_{m'r}a_{n's}a_{p't}a_{q'u}T_{rstu}\ldots$$

Если в соответствии с принятым правилом опустить штрихи у индексов новых координат m, n, p, q, то

$$T'_{mnpq\ldots} = a_{mr}a_{ns}a_{pt}a_{qu}\ldots T_{rstu\ldots} \qquad (23)$$

Здесь $m, n, p, q = x', y', z'$; $r, s, t, u = x, y, z$. Число индексов $mnpq\ldots$ называется рангом тензора.

Тензор без индексов T_0 – тензор нулевого ранга – есть скаляр. Тензор с одним индексом T_m – тензор первого ранга – вектор. Число компонентов (составляющих) тензора равно 3^k, где k – ранг тензора. Так, тензор второго ранга имеет девять составляющих:

$$T_{mn} = \begin{vmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{yx} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{zx} & T_{zy} & T_{zz} \end{vmatrix}. \qquad (24)$$

Обычно тензор высокого ранга выражается через тензоры более низкого ранга. Например, тензор второго ранга электропроводности σ_{mn} в законе Ома

$$j_m = \sigma_{mn} \cdot E_n \qquad (25)$$

связывает тензор первого ранга плотности электрического тока j_m и тензор первого ранга напряженности электрического поля E_n. Формула (25), в частности, позволяет ориентироваться в происхождении составляющих σ_{mn} при той или иной ориентации векторов j_m и E_n. Например, составляющая σ_{xz} измеряется в случае, когда электрическое поле направлено вдоль оси z, а плотность тока измеряется в направлении оси y.

В общем случае различают тензоры полевые и материальные. Полевые тензоры определяют внешние воздействия на кристалл – электрическое поле, плотность тока, механическое напряжение, деформация и т.п.

Материальные тензоры определяют собственные, присущие только данному кристаллу свойства, такие, например, как электропроводность, диэлектрическая постоянная, упругость и т.п. Каждый материальный тензор T связывает два полевых тензора A и B. Тензоры A и B могут быть разных рангов. Ранг тензора T равен сумме рангов тензоров A и B.

Все материальные тензоры второго ранга не изменяются при перестановке индексов. Это связано с фундаментальным положением о термодинамической обратимости физических процессов, известным как принцип Онзагера. Таким образом,

$$T_{mn} = T_{nm}. \qquad (26)$$

Материальные тензоры более высокого ранга, связанные с двумя тензорами второго ранга, симметричны относительно перестановки внутри каждой пары индексов, например:

$$T_{mnpq} = T_{nmpq} = T_{mnqp}. \qquad (27)$$

В [6] доказывается очень важное положение о том, что произведение координат преобразуется при переходе от старой системы координат в новую как тензор соответствующего ранга. Так, произведение двух координат преобразуется как тензор второго ранга, трех – третьего и т.д. Например, закон преобразования произведения трех координат записывается следующим образом:

$$x'_m x'_n x'_p = a_{mq}a_{nr}a_{ps}x_q x_r x_s. \qquad (28)$$

Другими словами, соотношение (28) свидетельствует о том, что произведение координат $x_m x_n x_p$ при переходе к другой системе координат преобразуется так же, как составляющая тензора T_{mnp}. Это положение позволяет исследовать структуру материального тензора, определить число его независимых составляющих или найти нулевые составляющие, используя операции симметрии кристалла так, как это делали при выборе координатных систем в разд.2.1.

Проиллюстрируем это положение на примере любого материального тензора второго ранга T_{mn} для кубического кристалла.

Во-первых, вследствие симметрии относительно перестановки индексов имеем

$$T_{xy} = T_{yx}, \quad T_{xz} = T_{zx}, \quad T_{yz} = T_{zy},$$

в результате чего из девяти составляющих тензора T_{mn} остается только шесть. Далее используем операцию поворота системы координат вокруг оси [III] на I20° по часовой стрелке. Эта операция приводит к следующей замене координатных осей: $[xyz] \to [zxy]$. Отсюда следует, что

$$x \cdot x \to z \cdot z \to y \cdot y, \text{ т.е. } T_{xx} = T_{yy} = T_{zz}.$$

Эта же операция приводит к тому, что $x \cdot y \to zx \to yz$, т.е. $T_{xy} = T_{zx} = T_{yz}$ и $x \cdot z \to z \cdot y \to yx$, т.е. $T_{xz} = T_{zy} = T_{yx}$.

Использование поворотной оси четвертого порядка [00I] изменяет координаты по правилу $[xyz] \to [\bar{y}xz]$. В этом случае произведение координат изменится так, что $x \cdot y \to -y \cdot x = x \cdot y$, т.е. $x \cdot y = 0$, $T_{xy} = -T_{xy} = 0$. Таким образом, нулю равны все составляющие тензора: $T_{xy} = T_{yx} = T_{xz} = T_{zx} = T_{yz} = T_{zy} = 0$. Следовательно, любой материальный тензор второго ранга для кубических кристаллов имеет вид

$$T_{mn} = \begin{vmatrix} T_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & T_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & T_{xx} \end{vmatrix} = T \cdot \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} \qquad (29)$$

Итак, все свойства, определяемые материальными тензорами второго ранга в кубических кристаллах, не зависят от кристаллографического направления.

Рассматривая свойства тензоров, приведем полезные и очевидные соотношения. Для векторов

$$\delta_{mn} \cdot T_m = T_n. \qquad (30)$$

Для тензоров второго ранга

$$\delta_{mn} T_{np} = T_{mp}, \qquad (31)$$

$$\delta_{mp} T_{pn} = T_{mn}.$$

Если в некоторой системе координат тензор имеет диагональный вид, то оси этой системы координат называются главными. Тензор второго ранга в этом случае имеет вид

$$T_{mn} = \begin{vmatrix} T_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & T_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & T_{zz} \end{vmatrix} \qquad (32)$$

О тензоре вида (32), у которого составляющие ориентированы только вдоль осей x, y, z, говорят, что они записаны в главных осях.

Используя операции симметрии для кубических кристаллов, нетрудно показать, что для всех материальных тензоров второго ранга оси симметрии кристалла являются главными осями. Это означает, что если один из векторов, связанных с материальным тензором, направлен вдоль оси симметрии, то в силу того, что сам материальный тензор имеет в этом случае вид (32), второй вектор должен иметь ту же самую ориентацию.

При практическом использовании тензорезисторов приходится, как правило, ориентировать главные оси полевых тензоров второго ранга (деформации, механического напряжения) вдоль осей симметрии кристалла, так как в этом случае наблюдается максимальный тензорезистивный эффект. При такой ориентации тензоры деформации и напряжения, естественно, имеют диагональный вид в системе координат, связанной с осями симметрии.

Полезно отметить следующее важное свойство тензоров: при любом преобразовании системы координат шпур тензора (т.е. сумма диагональных составляющих) не изменяется:

$$Sp\, T_{mn} = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz} = const. \qquad (33)$$

Это правило является дополнительным условием, позволяющим оценить правильность произведенных расчетов.

2.3. Матричные обозначения

Симметрия тензоров по каждой паре индексов позволяет, во-первых, упростить их запись, во-вторых, позволяет использовать для их преобразования методы матричной алгебры. Мы уже обратили внимание на то, что, как правило, для тензоров второго ранга $T_{xy} = T_{yx}$, $T_{yz} = T_{zy}$, $T_{zz} = T_{zx}$

$$T_{mn} = \begin{vmatrix} T_{xx} & T_{xy} & T_{xz} \\ T_{xy} & T_{yy} & T_{yz} \\ T_{zz} & T_{yz} & T_{zz} \end{vmatrix}.$$

В тензоре T_{mn} остались только шесть компонентов, симметрично расположенных относительно диагонали. Пронумеруем оси x = I, y = 2, z = 3. Тогда

$$T_{mn} = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{12} & T_{22} & T_{23} \\ T_{13} & T_{23} & T_{33} \end{vmatrix} \tag{33}$$

У нас появилась возможность вместо двойных индексов использовать одиночные по следующей схеме:

$$T_m = \begin{vmatrix} 1 & 6 & 5 \\ 6 & 2 & 4 \\ 5 & 4 & 3 \end{vmatrix} \tag{34}$$

Здесь m = I, 2, 3, 4, 5, 6.

Сравнивая (33) и (34), имеем II → I, 22 → 2, 33 → 3, 23 = = 32 → 4, I3 = 3I → 5, I2 = 2I → 6, т.е.

$$T_m = \begin{vmatrix} T_1 & T_6 & T_5 \\ T_6 & T_2 & T_4 \\ T_5 & T_4 & T_3 \end{vmatrix} \tag{35}$$

Тензор T_m можно записать в виде строчки (6 x I)

$$T_m = |T_1 \; T_2 \; T_3 \; T_4 \; T_5 \; T_6| \tag{36}$$

или в виде столбца

$$T_m = \begin{vmatrix} T_1 \\ T_2 \\ \vdots \\ T_6 \end{vmatrix} \tag{37}$$

Не останавливаясь на деталях, приведем правила действий с матрицами. Матрицы складываются и вычисляются по закону

$$C_{mn} = A_{mn} \pm B_{mn}.$$

При этом они, естественно, должны иметь одинаковое число строк и одинаковое число столбцов. Матрицы умножаются по правилу

$$C_{mn} = A_{mp} B_{pn}, \tag{38}$$

т.е. каждый элемент новой матрицы C_{mn} представляет собой сумму попарных произведений соответствующей строки на соответствующий столбец, например, C_{35} есть сумма произведений элементов третьей строки матрицы A и пятого столбца матрицы B. При умножении матриц должно выполняться следующее условное правило о числе строк и столбцов:

$$(m \times n) = (m \times p)(p \times n),$$

где первая цифра – число строк матрицы, вторая – число столбцов. Матрица называется транспонированной, если n-я строка этой матрицы является n-м столбцом исходной. Транспонированную матрицу будем обозначать A^t_{mn}. Например,

$$A_{mn} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}; \quad A^t_{mn} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & A_{31} \\ A_{12} & A_{22} & A_{32} \\ A_{13} & A_{23} & A_{33} \end{bmatrix}. \tag{39}$$

Транспонированной матрицей для матрицы столбца является матрица-строка

$$A_n = \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ A_6 \end{bmatrix} \qquad A^t_n = [A_1 \; A_2 \dots A_6].$$

Обратной матрицей назовем такую, произведение которой на исходную равно единичной, т.е.

$$A_{mn} A^{-1}_{np} = I,$$

где I – единичная матрица. Обратными являются матрицы электропроводности σ_m и удельного сопротивления ρ_m, податливости S_{mn} и упругости C_{mn}. Без доказательства приведем следующие важные свойства матриц:

1. Величина T, характеризующая свойство в данном направлении $\overline{N}$, равна

$$T=\left[a_{N_x}a_{N_y}a_{N_z}\right]\cdot\begin{vmatrix}T_{11} & T_{12} & T_{13}\\ T_{12} & T_{22} & T_{23}\\ T_{13} & T_{23} & T_{33}\end{vmatrix}\cdot\begin{bmatrix}a_{N_x}\\ a_{N_y}\\ a_{N_z}\end{bmatrix}, \tag{40}$$

где $a_{N_x}, a_{N_y}, a_{N_z}$ – направляющие косинусы.

Если "свойство" определяется тензором четвертого ранга, то матрица направляющих косинусов должна быть записана в шестимерном пространстве в соответствии с формулой (22).

2. Поворот осей координат. Результат, который дает формула (23), можно получить в матричном виде

$$T'_{mn}=a_{mp}T_{pr}a^t_{rn}, \tag{41}$$

где a_{mp} и a^t_{rn} – прямая и транспонированная матрицы направляющих косинусов.

В случае тензоров четвертого ранга в качестве a_{mp} используется матрица направляющих косинусов в шестимерном пространстве (22).

Нетрудно заметить, что результат (40) является частным случаем более общего результата (41). Действительно, (40) является первым элементом (икс-иксовым) результирующей матрицы T'_{mn}, если $K'=\overline{N}$.

3. СПЕКТР ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В ГЕРМАНИИ И КРЕМНИИ

3.1. Прямая и обратная решетки

Основным свойством кристаллической решетки является трансляционная симметрия. Она означает, что существуют три некомпланарных вектора $\overline{a}_1, \overline{a}_2, \overline{a}_3$, таких, что при смещении всего кристалла как целого на любой из этих векторов или на вектор

$$\overline{a}_n=n_1\overline{a}_1+n_2\overline{a}_2+n_3\overline{a}_3, \tag{42}$$

он совмещается сам с собой. В (42) n_1, n_2 и n_3 – целые числа. Параллелепипед, построенный на векторах $\overline{a}_1$, $\overline{a}_2$ и $\overline{a}_3$, называется элементарной ячейкой. Объем элементарной ячейки Ω_0 равен

$$\Omega_0=(\overline{a}_1[\overline{a}_2\cdot\overline{a}_3])=(\overline{a}_3[\overline{a}_1\cdot\overline{a}_2])=(\overline{a}_2[\overline{a}_3\overline{a}_1]), \tag{43}$$

где прямые скобки означают векторное, круглые – скалярное произведение.

В квантовой механике, физике твердого тела удобно использовать понятия обратного пространства и обратной решетки. Идея построения обратной решетки связана с необходимостью ввести при решении задач вектора $\overline{b}_g$ такого, чтобы скалярное произведение векторов $\overline{a}_n$ и $\overline{b}_g$ было равно целому числу, т.е.

$$(\overline{a}_n\cdot\overline{b}_g) = \text{целое число}. \tag{44}$$

Так как целое число безразмерно, то размерность $\overline{b}_g$ – обратная длина, отсюда и происхождение названия вектора $\overline{b}_g$. Вектора $\overline{b}_1$, $\overline{b}_2$ и $\overline{b}_3$, так же, как и вектора $\overline{a}_1$, $\overline{a}_2$ и $\overline{a}_3$, образуют пространственную решетку в обратном – фазовом пространстве. То есть в обратном пространстве можно построить вектор трансляции $\overline{b}_g$ такой, что смещение обратной решетки как целого на вектор $\overline{b}_g$ совместит ее саму с собой:

$$\overline{b}_g=g_1\overline{b}_1+g_2\overline{b}_2+g_3\overline{b}_3, \tag{45}$$

где g_1, g_2 и g_3 – целые числа.

Соотношение (44) не дает правила построения обратной решетки. Для того чтобы оно выполнялось, можно предложить следующую структуру векторов $\overline{b}_1$, $\overline{b}_2$ и $\overline{b}_3$:

$$\overline{b}_1=\frac{[\overline{a}_2\cdot\overline{a}_3]}{\Omega_0};\quad \overline{b}_2=\frac{[\overline{a}_3\overline{a}_1]}{\Omega_0};\quad \overline{b}_3=\frac{[\overline{a}_1\cdot\overline{a}_2]}{\Omega_0}. \tag{46}$$

Для ортогональных решеток

$$\begin{aligned}&|[a_2a_3]|=a_2a_3\sin(a_2\hat{}a_3)=a_2\cdot a_3;\\ &|\overline{b}_1|=\frac{|[a_2a_3]|}{|(a_1[a_2\cdot a_3])|}=\frac{a_2\cdot a_3}{a_1\cdot a_2\cdot a_3}=\frac{1}{a_1}\end{aligned} \tag{47}$$

Отсюда, в частности, следует правило построения обратных решеток. Так как Ω_{φ} – скаляр, $\bar{b}_1$ совпадает по направлению с векторным произведением $[\bar{a}_2 \cdot \bar{a}_3]$, т.е. с направлением $\bar{a}_1$. Если направление $\bar{a}_1$ совпадает с направлением X (рис.10), то направление $\bar{b}_1$ также совпадает с направлением X. Если повернуть $\bar{a}$ -пространство, то точно так же повернется и $\bar{b}$ -пространство.

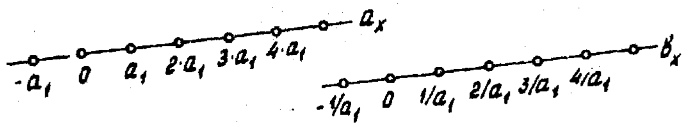


Рис.10

По формуле (47) определяется величина $|\bar{b}_1|$, выбирается произвольно начало отсчета и откладывается в направлении b_x, т.е. в направлении X величины $b_1 = \frac{1}{a_1}$; $2 \cdot b_1 = \frac{2}{a_1}$; $3 b_1 = \frac{3}{a_1}$ и т.д.

Чрезвычайно важным для нас является положение о том, что "направления" в прямом и обратном пространствах совпадают (естественно, они имеют одинаковые индексы Миллера). При решении задач мы будем пользоваться не пространством обратной решетки, а связанным с ним пространством волновых векторов. Пространство волновых векторов в 2π раз больше обратного пространства, а именно,

$$\bar{k} = 2\pi \bar{b}_g .$$

В пространстве волновых векторов особый физический смысл имеют плоскости, проходящие перпендикулярно векторам $\bar{k}_1$, $\bar{k}_2$ и $\bar{k}_3$ через их середину. Эти плоскости называются границами зон Бриллюэна. Замкнутая область $\bar{k}$ -пространства, ограниченная такими ближайшими к центру плоскостями (центр совпадает с одним из узлов $\bar{k}_g$ -пространства), называется первой зоной Бриллюэна. В первой зоне Бриллюэна (как и в любой другой, - второй, третьей и т.д.) размещается столько разрешенных состояний для электронов, сколько атомов содержится в рассматриваемом объеме кристалла.

Прямая решетка алмазоподобных полупроводников германия и кремния является гранецентрированной кубической. Можно показать [7], что обратная ей решетка есть объемноцентрированная кубическая. Для такой обратной решетки первая зона Бриллюэна показана на рис.11. На этом же рисунке изображен (штриховая линия) куб, с которым мы в последующем для простоты будем связывать координаты k_x, k_y и k_z, параллельные, как было показано, осям X, Y и Z прямой решетки.

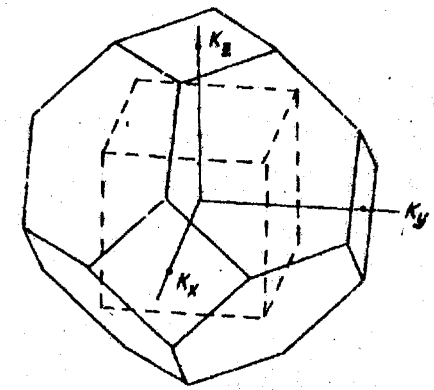


Рис.11

3.2. Спектр энергии электронов и дырок в кремнии и германии

Главным свойством твердого тела, определяющим многие его особенности, является зависимость энергии электрона $\mathcal{E}$ от волнового вектора $\bar{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \bar{n}$, которая называется спектром энергии электрона. В определении волнового вектора λ – длина волны электрона, $\bar{n}$ – единичный вектор, ориентированный вдоль направления распространения электронной волны, $\bar{k}$ – текущий волновой вектор, который может быть равен векторам $\bar{k}_1$, $\bar{k}_2$ и $\bar{k}_3$, определяемым через вектора прямой решетки, может быть как больше, так и меньше их в зависимости от λ.

Зависимость $\mathcal{E}(\bar{k})$ в зоне Бриллюэна удобнее всего рассматривать вдоль какого-то определенного направления в $\bar{k}$ -пространстве. Наибольший интерес эти зависимости представляют для направлений, совпадающих с осями симметрии [100] и [111].

Для зоны проводимости германия и кремния в системе координат, связанной с осями симметрии, эти зависимости имеют вид

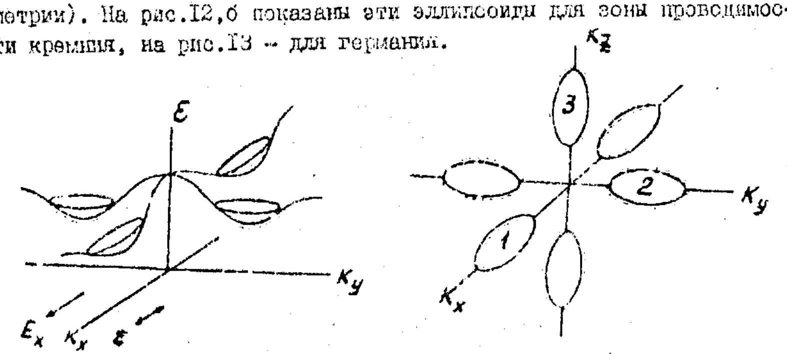
$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{m^*_{xx}} + \frac{k_y^2}{m^*_{yy}} + \frac{k_z^2}{m^*_{zz}}\right), \qquad (48)$$

где $1/m^*_{xx}$, $1/m^*_{yy}$, $1/m^*_{zz}$ – составляющие тензора обратной эффективной массы:

$$\frac{1}{m^*_{pq}} = \frac{1}{\hbar^2}\,\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial k_p\, \partial k_q}. \qquad (49)$$

$\hbar = h/2\pi$ – постоянная Планка.

Геометрический смысл соотношений (48) и (49) следующий. Если принять $\mathcal{E} = const$, то уравнение (48) при положительных значениях m^* есть уравнение эллипсоида, т.е. поверхностью равной энергии в $\vec{k}$-пространстве, является эллипсоид. Соображения симметрии требуют, чтобы это был эллипсоид вращения. Это можно проверить, как мы уже неоднократно делали, используя операции симметрии для кубического кристалла. Таким образом, $m^*_{xx} = m^*_{\parallel}$, $m^*_{yy} = m^*_{zz} = m_{\perp}$. Индексы $\parallel$ и $\perp$ означают: параллельно или перпендикулярно большой оси эллипсоида (или соответствующей оси симметрии). На рис.12,б показаны эти эллипсоиды для зоны проводимости кремния, на рис.13 – для германия.



а б

Рис.12

В точках, соответствующих центрам эллипсоидов, энергия электронов минимальна. В кремнии шесть эллипсоидов равной энергии локализуются на осях ⟨100⟩ внутри зоны Бриллюэна; т.е. в зоне проводимости имеется шесть минимумов; в германии внутри первой зоны Бриллюэна находится восемь половинок эллипсоидов, т.е. в зоне проводимости германия есть четыре минимума, локализованные на границе первой зоны Бриллюэна.

Если уравнение (48) записать как уравнение эллипсоида в каноническом виде, то видно, что длина полуосей эллипсоида должна быть пропорциональна $(m^*)^{1/2}$.

Соотношение (49) свидетельствует о том, что эффективная масса m^* пропорциональна радиусу кривизны поверхности $\mathcal{E}(\vec{k})$ в рассматриваемом направлении $\vec{k}$-пространства.

Зависимость $\mathcal{E}(k_x, k_y)$ для кремния имеет вид, приведенный на рис.12,а, который, естественно, соответствует рис.12,б, если в последнем ось $\vec{k}_z$ заменить на ось $\mathcal{E}$. Как видно из рисунка, зона проводимости вблизи минимума имеет вид ложбинки (долины). В соответствии с этим кремний и германий называются многодолинными полупроводниками или полупроводниками со многими минимумами (экстремумами). В недеформированном полупроводнике электроны распределены (разлиты) равномерно по минимумам.

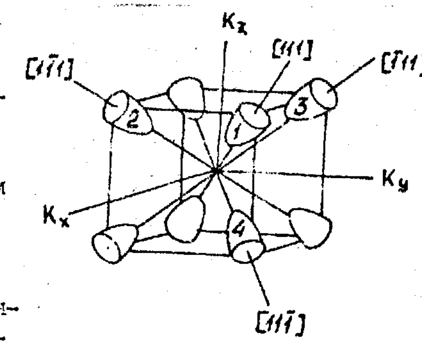


Рис.13

При приложении к кристаллу электрического поля в направлении X электрон будет изменять свою скорость в этом же направлении. Это значит, что в минимумах, лежащих на осях k_x, изображающая точка (т.е. состояние в $\vec{k}$-пространстве, занятое электроном) будет смещаться в направлении k_x. В этом случае эффективная масса электрона будет большой, так как в направлении k_x для этого минимума велик радиус кривизны поверхности $\mathcal{E}(\vec{k})$ (см. рис. 12,а). В минимумах, лежащих на осях k_y (так же, как и в не изображенных на рисунке минимумах k_z), в направлении k_x – направлении электрического поля радиус кривизны мал, следовательно, мала эффективная масса. Из этого примера видно, что вклад электронов разных минимумов в общую электропроводность кристалла будет различным. При расчетах электропроводности мы будем пользоваться не тензором обратной эффективной массы, а обратным ей тензором подвижности электронов, которая определяется соотношением

$$u_{mn} = q \cdot \frac{\tau}{m^*_{mn}},$$

где τ – время релаксации, в первом приближении слабо зависящая от направления величина, так что

$$\frac{u_\perp}{u_\parallel} = \frac{m_\parallel}{m_\perp} = k \qquad (50)$$

Величина k, называемая фактором анизотропии эффективных масс, равна 5,1 для кремния и 20 – для германия.

Удельная электропроводность, как известно, связана с подвижностью соотношением

$$\sigma_{mn} = q \cdot n \cdot u_{mn},$$

где n – концентрация электронов.
В системе координат, связанной с осями симметрии (главными осями), тензор подвижности имеет вид

$$u_{mn} = \begin{vmatrix} u_\parallel & 0 & 0 \\ 0 & u_\perp & 0 \\ 0 & 0 & u_\perp \end{vmatrix} \qquad (51)$$

В общем случае для минимумов, локализованных на осях симметрии, тензор подвижности может быть записан

$$u^i_{mn} = u_\perp \delta_{mn} + a_N{}^i{}_m\, a_N{}^i{}_n (u_\parallel - u_\perp), \qquad (52)$$

где $\overline{N}^i$ – направление в $\overline{k}$-пространстве, на котором лежит i-й минимум.

Спектр энергии дырок для германия и кремния записывается следующим образом:

$$\mathcal{E}(k) = -\frac{h^2}{2m_0}\left\{A_V k^2 \pm B_V k^2\left[1 + \frac{C_V^2}{B_V^2}\left(a^2_{N_x} a^2_{N_y} + a^2_{N_y} a^2_{N_z} + a^2_{N_z} a^2_{N_x}\right)\right]^{1/2}\right\}, \qquad (53)$$

где a_{N_x} – косинус угла заданного направления относительно оси K_x; A_V, B_V и C_V – зонные параметры; m_0 – масса свободного электрона.

Зависимости $\mathcal{E}(k)$ и изоэнергетические линии в плоскости (K_x, K_y), соответствующие формуле (53), приведены на рис.14. Нижняя зона (знак "+"), имеющая меньший радиус кривизны, называется зоной легких дырок, верхняя (знак "–") – зона тяжелых дырок. В точке $K_x, K_y = 0$ в недеформированном кристалле зоны вырождены. На рис.14 кривая I соответствует зоне тяжелых дырок, кривая 2 – зоне легких дырок.

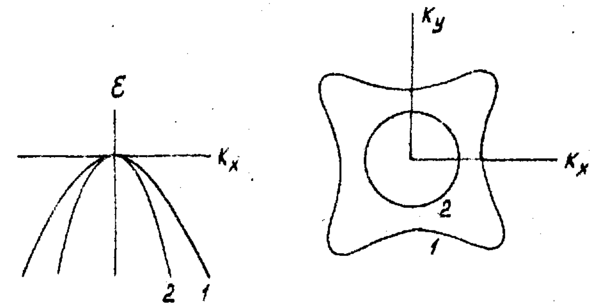


Рис.14

3.3. Концентрация носителей заряда

При расчетах удельной электропроводности и тензорезистивного эффекта необходимо знать концентрацию носителей заряда.

Концентрация электронов в вырожденных полупроводниках (общий случай) выражается через энергию Ферми $\mu^* = \mu / k_0 T$ и эффективную массу плотности состояний m^*_{dn} следующим образом:

$$n_0 = \frac{2(2\pi m^*_{dn} k_0 T)^{3/2}}{h^3} F_{1/2}(\mu^* - \mathcal{E}^*_c), \qquad (54)$$

где $\mathcal{E}^*_c = \mathcal{E}_c / k_0 T$ – энергия, соответствующая краю зоны проводимости. Интегралы Ферми индекса n равны

$$F_n(\mu^* - \mathcal{E}^*_c) = \frac{1}{\Gamma(n+1)} \int_0^\infty \frac{x^n\, dx}{e^{x-(\mu^*-\mathcal{E}^*_c)} + 1}, \qquad (55)$$

где $\Gamma(n+1)$ – гамма-функция, $x = \frac{\mathcal{E} - \mathcal{E}_c}{k_0 T}$. Эффективная масса плотности состояний для многодолинных полупроводников выражается через составляющие тензора эффективной массы следующим образом:

$$m^*_{dn} = \nu^{2/3} (m^*_\parallel \cdot m^{*2}_\perp)^{1/3}, \qquad (56)$$

где ν – число минимумов. В кремнии $m^*_{dn} = 1{,}08\, m_0$, в германии $m^*_{dn} = 0{,}55\, m_0$.

Формула (54) записывается в виде

$$n_0 = N_c F_{1/2}(\mu^* - \varepsilon_c^*) , \tag{57}$$

где $N_c = \frac{2(2\pi m_{dn}^* k_0 T)^{3/2}}{h^3}$ – приведенная плотность состояний.

Для невырожденного полупроводника, когда функция распределения Ферми-Дирака

$$f_n = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{k_0 T}} + 1} , \tag{58}$$

переходит в экспоненту $f_n = e^{\mu^* - \varepsilon_c^*}$, т.е. становится функцией Максвелла-Больцмана,

$$n_0 = N_c e^{\mu^* - \varepsilon_c^*} . \tag{59}$$

В [8] приведены таблицы интегралов Ферми, дифференциальные и интегральные соотношения, связывающие интегралы Ферми разных индексов, а также приближенные формулы представления интегралов Ферми экспонентами.

В недеформированном полупроводнике концентрация электронов в одном минимуме равна $n^i = n_0/\nu$. В случае, когда минимумы не эквивалентны, плотность состояний в i-м минимуме в ν раз меньше общей плотности состояний, так что

$$n^i = \frac{1}{\nu} N_c \cdot e^{\mu^* - \varepsilon_c^{*i}} . \tag{60}$$

Для определения энергии Ферми в полупроводнике составляется уравнение электронейтральности, свидетельствующее о том, что твердое тело в нормальных условиях не может быть электрически заряжено, т.е. что в нем сумма всех отрицательных зарядов должна быть равна сумме всех положительных зарядов.

Для примесного полупроводника n-типа, содержащего N_d уровней, n_d из которых заняты электронами, уравнение электронейтральности имеет вид

$$n_0 = N_d - n_d , \tag{61}$$

где

$$n_d = \frac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\varepsilon_d^* - \varepsilon_c^* - (\mu^* - \varepsilon_c^*)} + 1} , \tag{62}$$

$\varepsilon_d^* - \varepsilon_c^*$ – энергия донорных уровней, деленная на $k_0 T$.

При упругих деформациях смещение минимумов невелико по сравнению с шириной запрещенной зоны. Это означает, во-первых, что концентрация электронов не изменяется за счет переходов из валентной зоны в зону проводимости, во-вторых, не изменяется эффективная масса электронов, т.е. N_c остается постоянным. Кроме того, так как примесные уровни обязаны своим существованием зоне проводимости, т.е. они отщепились от зоны в точке соответствующего минимума, – при деформации не изменяется $\varepsilon_d^* - \varepsilon_c^{*i}$.

При таких условиях уравнение нейтральности в деформированном полупроводнике имеет вид

$$n_0 = \sum_{i=1}^{\nu} n^i . \tag{63}$$

Если уравнение (61) позволяет найти энергию Ферми в недеформированном полупроводнике, то (63) – найти изменение энергии Ферми при деформации.

3.4. Влияние деформации на электропроводность многодолинных полупроводников (физическая модель)

Мы не будем рассматривать влияние деформации на изменение концентрации носителей заряда, обусловленное изменением ширины запрещенной зоны. Эти эффекты являются определяющими в собственных полупроводниках, у которых температурные зависимости электропроводности и тензорезистивных коэффициентов очень велики, что затрудняет их практическое использование.

В примесных полупроводниках влияние эффектов, связанных с изменением ширины запрещенной зоны несущественно. В этом случае определяющими являются эффекты, обусловленные изменением симметрии зоны проводимости при действии сдвиговой деформации – минимумы зоны проводимости становятся неэквивалентными, они смещаются относительно друг друга. Как следствие, в соответствии с формулой (60) концентрация электронов в поднявшихся минимумах (увеличилась величина $\mathcal{E}_c^i$) уменьшится, в опустившихся минимумах число электронов увеличится. Так как общее количество электронов в зоне проводимости не изменяется, то можно говорить о перетекании электронов из поднявшихся минимумов в опустившиеся. Хотя эффект перетекания является определяющим, не он один ответствен за изменение проводимости. Представим себе, что изоэнергетические поверхности вблизи минимумов не эллипсоиды, а сферы. В этом случае подвижность электронов в минимуме в любом направлении одинакова; так как общая концентрация электронов не изменяется и перетекание не приводит к изменению подвижности, то не изменится и электропроводность всего кристалла.

На рис.12,а изображена зонная схема кремния при деформации растяжения вдоль оси [100]. Как показывают теоретические расчеты, при деформации растяжения минимумы, лежащие на осях, вдоль которых осуществляется растяжение, поднимаются, в других направлениях опускаются.

На рис.12,б показано, как при этом изменяются изоэнергетические поверхности в k-пространстве. При указанном на рисунке направлении электрического поля изображающие точки будут смещаться в направлении k_x как в минимумах [100], так и в минимумах [010] и [001]. Для минимумов, лежащих на оси k_x в направлении электрического поля, подвижность электронов мала, так как велика эффективная масса. Для других четырех минимумов в направлении электрического поля подвижность электронов велика. В результате в кристалле уменьшится число электронов с малой подвижностью (в минимумах, лежащих на оси k_x) и увеличится число электронов с большой подвижностью в минимумах k_y и k_z за счет эффекта перетекания. Таким образом, общая подвижность электронов увеличится, электропроводность кристалла возрастает.

Такой механизм влияния одноосной деформации на электропроводность хорошо объясняет все экспериментальные факты.

1. Чем больше смещение минимумов относительно друг друга при одной и той же деформации (чем больше потенциал деформации), тем больше тензорезистивный эффект.

2. Чем больше анизотропия подвижности $k = u_\perp / u_\parallel$ в минимуме, тем больше изменение проводимости.

3. Если направление одноосной деформации симметрично относительно положения минимумов, например, кремний растягивается в [111], германий в [100] направлении, то минимумы смещаются одинаково и эффекта перетекания не будет, т.е. тензорезистивный эффект будет равен нулю. И, напротив, он будет максимален, если кристалл деформируется вдоль осей, на которых лежат минимумы.

4. В металлах при одноосном растяжении увеличивается длина образца и уменьшается его поперечное сечение, вследствие чего сопротивление возрастает. В металле тензорезистивный эффект считается положительным. В кремнии и германии n-типа сопротивление образцов при растяжении уменьшается, т.е. эффект отрицателен. Кроме того, он почти в 100 раз больше, чем в кристаллах. Следует отметить, что в кремнии и германии p-типа тензорезистивный эффект положителен и тоже очень большой. Механизм изменения проводимости в материалах p-типа будет изложен в другом пособии.

4. МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ

4.1. Тензоры напряжения и деформации

Механическое напряжение является мерой внутренних сил, возникающих в деформированном теле под влиянием внешних воздействий. Если через любую точку тела 0 провести сечение, то взаимодействие соприкасающихся по сечению частей тела можно заменить силами. Пусть на элементарную площадку dS, окружающую точку 0, действует сила $d\bar{F}$. Совокупность всех векторов силы $d\bar{F}$ для всех площадок dS, проходящих через точку 0, характеризует напряженное состояние в точке. Оно полностью определяется тензором напряжений P_{mn}, который можно определить через вектор силы $d\bar{F}$ и вектор площадки $d\bar{S} = dS \cdot \bar{\ell}$ соотношением

$$dF_m = P_{mn} \cdot dS_n , \tag{64}$$

где $dS_n = dS\ \ell_n$, $\bar{\ell}$ – единичный вектор, нормальный площадке dS. Если выделить вблизи точки 0 элементарный параллелепипед объемом $dV = dx \cdot dy \cdot dz$, то три составляющие силы dF_x, dF_y, dF_z, нормальные площадкам $dS_x = dy \cdot dz$, $dS_y = dx \cdot dz$, $dS_z = dx \cdot dy$, определяют нормальные напряжения P_{xx}, P_{yy}, P_{zz}. Шесть других составляющих тензора напряжений определяются через составляющие силы, касательные к площадкам, например через силу dF_x и площадку dS_y. Такие напряжения называются касательными. Очевидно, что элементарный параллелепипед должен находиться в состоянии статического равновесия, вследствие чего должно выполняться условие $P_{mn} = P_{nm}$, т.е. тензор напряжения должен быть симметричен [6].

Таким образом, тензор напряжения имеет шесть независимых составляющих и может быть записан в виде матрицы-столбца или матрицы-строки.

В качестве конкретного примера приведем вид тензора напряжения для одноосного растяжения и двуосно-напряженного состояния:

$$\text{а)}\ P_{mn} = \begin{vmatrix} P_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}; \qquad \text{б)}\ P_{mn} = \begin{vmatrix} P_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & P_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \tag{65}$$

Последний случай реализуется, когда тонкая пластинка кремния (тензорезистор) жестко приклеена на материал с другими механическими свойствами (с другим, чем у кремния, коэффициентом Пуассона $\varkappa_M$), например на сталь, и вся конструкция испытывает одноосное растяжение. Естественно, оси x и y в этом случае должны быть направлены вдоль и перпендикулярно оси растяжения.

В случае гидростатического давления

$$P_{mn} = \begin{vmatrix} P & 0 & 0 \\ 0 & P & 0 \\ 0 & 0 & P \end{vmatrix}, \tag{66}$$

где P – давление.

В результате приложения внешних сил кристалл деформируется. Наиболее просто смысл деформации можно пояснить на примере одномерного кристалла длиной ℓ. Если в результате приложения силы он удлиняется на величину $\Delta\ell$, то деформация определяется безразмерным отношением $\Delta\ell/\ell$, положительным в случае растяжения и отрицательным в случае сжатия. Если один из концов такого кристалла выбрать в качестве начала отсчета координаты x, координату другого конца обозначить через X_x, то изменение длины можно записать как смещение U_x точки X_x в направлении его длины. Тогда относительное смещение, которое мы будем называть деформацией, равно

$$\frac{\partial U_x}{\partial X_x} \approx \frac{\Delta\ell}{\ell} = \varepsilon. \tag{67}$$

В трехмерном случае направление элемента X_m в твердом теле может не совпадать с направлением смещения U_n. В теории упругости показано, что в этом случае тензор деформации может быть определен следующим образом:

$$\varepsilon_{mn} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial U_m}{\partial X_n} + \frac{\partial U_n}{\partial X_m}\right). \tag{68}$$

Формула (68) совпадает с (67) в одномерном случае. В общем случае тензор деформации имеет вид

$$\varepsilon_{mn} = \begin{vmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{vmatrix}. \tag{69}$$

Как видно из формулы (68) тензор (69) симметричен относительно перестановки индексов, т.е. имеет шесть независимых составляющих и может быть записан в виде матрицы-столбца или матрицы-строки. Если оси симметрии являются главными осями тензора напряжения, то эти оси являются главными и для тензора деформации.

4.2. Закон Гука. Тензоры деформации для практически важных случаев

Связь полевых тензоров напряжения и деформации может быть записана в виде закона Гука:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{mn} &= S_{mnrt} \cdot P_{rt}; \\ P_{mn} &= C_{mnrt} \cdot \varepsilon_{rt}. \end{aligned} \tag{70}$$

Тензор четвертого ранга S_{mnrt} называется тензором податливости кристалла, тензор C_{mnrt} – тензором упругости.

Вследствие симметрии по перестановке внутри каждой пары индексов и между парами тензоры четвертого ранга S_{mnrt} и C_{mnrt} из 81 составляющих имеют 36 независимых. Использование операций симметрии для кубических кристаллов приводит к тому, что из 36 остается только три. Покажем, например, что составляющая $S_{xyyz}=0$. Действительно, эта составляющая преобразуется при операциях симметрии как произведение $x \cdot y \cdot y \cdot z$.

Поворотная ось четвертого порядка z преобразует систему координат по правилу $[x\ y\ z] \to [\bar{y}\,x\,z]$. В нашем случае $xyyz \to \bar{y}xxz$. Ось третьего порядка [111] преобразует систему координат по правилу $[xyz] \to [zxy]$. Тогда $xyyz \to zxxy = xzyx$. Так как тензор четвертого ранга симметричен относительно перестановки индексов как внутри каждой пары, так и между парами, то окончательно имеем

$$S_{xyyz} = -S_{xyyz} = 0$$

Тензоры S_{mn} и C_{mn} в матричных обозначениях имеют вид

$$S_{mn} = \begin{vmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{vmatrix} \qquad (71)$$

При введении матричных обозначений нужно иметь в виду одно очень важное обстоятельство. Матрицы S_{mn} и C_{mn} имеют одинаковый вид (71) только при том условии, что

$S_{mnpq} = S_{rt}$, если r и t равны I,2 или 3;

$2S_{mnpq} = S_{rt}$, если или r или t равны 4,5 и 6; (72)

$4S_{mnpq} = S_{rt}$, если и r и t равный 4,5 и 6.

При этом для тензоров C_{mnpq} не нужно вводить множитель 2 или 4, т.е. всегда

$$C_{mnpq} = C_{rt}, \qquad (73)$$

где r, t = I,2,3,4,5,6.

Построенные таким образом матрицы S_{rt} и C_{rt} позволяют использовать при расчетах правила матричной алгебры (40) и (4I). Матрицы S_{rt} и C_{rt} являются обратными в том смысле, что их матричное произведение равно единичной матрице. Следует отметить, что в справочной литературе обычно приводится матричные значения констант S_{rt} и C_{rt}, в то время как при расчетах по формуле (23) необходимо пользоваться тензорными обозначениями. Приведем значения S и C для кремния и германия (см. табл.I).

Таблица I

Материал	S_{II}	S_{I2}	S_{44}	C_{II}	C_{I2}	C_{44}	Примечание
Кремний	0,768	-0,214	I,256	I,660	0,640	0,790	$S_{rt}, \cdot 10^{-11} м^2/Н$
Германий	0,979	-0,264	I,497	I,290	0,480	0,670	$C_{rt}, \cdot 10^{11} Н/м^2$

Формулы (23) и (4I) дают правила преобразования тензоров S и C при переходе из одной системы координат в другую, так что любую составляющую тензора в новой системе координат можно выразить через три независимых составляющих, записанных в кристаллографической системе в табл.I.

В работах [9, I0] показано, что результаты этих преобразований для кубических кристаллов можно выразить компактными соотношениями

$$S'_{mnpq} = S_{12}\delta_{mn}\delta_{pq} + \frac{S_{44}}{2}(\delta_{mp}\delta_{nq} + \delta_{mq}\delta_{np}) + \left(S_{11} - S_{12} - \frac{S_{44}}{2}\right)\sum_{k=1}^{3} \alpha_{mk}\alpha_{nk}\alpha_{pk}\alpha_{qk}, \qquad (74)$$

$$C'_{mnpq} = C_{12}\delta_{mn}\delta_{pq} + C_{44}(\delta_{mp}\delta_{nq} + \delta_{mq}\delta_{np}) + (C_{11} - C_{12} - 2C_{44})\sum_{k=1}^{3} \alpha_{mk}\alpha_{nk}\alpha_{pk}\alpha_{qk}. \qquad (75)$$

При расчетах обычно проще задать тензор напряжений, имеющий более наглядный физический смысл. Тензор деформации находится использованием закона Гука (70), константы податливости определяются из соотношения (74).

Тензоры S_{mnpq} и C_{mnpq} являются обратными в том смысле, что их матричное произведение равно единичной матрице. Это позволяет выразить составляющие одного тензора через составляющие другого. Для заданного направления N закон Гука может быть записан в более простом виде:

$$\varepsilon = P \cdot S'_{xx}$$

Величина $1/S'_{xx}$ называется модулем Юнга. Для кубических кристаллов

$$Y^{-1} = S'_{xx} = S_{11} + (-2S_{11}+2S_{12}+S_{44}) \times$$
$$\times (\alpha^2_{N_x}\alpha^2_{N_y} + \alpha^2_{N_y}\alpha^2_{N_z} + \alpha^2_{N_z}\alpha^2_{N_x}).$$

Для кремния: $Y_{[100]} = 1,30\cdot 10^{11}$ Н/м^2; $Y_{[111]} = 1,88\cdot 10^{11}$ Н/м^2.
Для германия: $Y_{[100]} = 1,02\cdot 10^{11}$ Н/м^2; $Y_{[111]} = 1,54\cdot 10^{11}$ Н/м^2.
Вследствие того, что тензоры S и C являются обратными,

$$S_{mnpq}\cdot C_{pqrt} = C_{mnpq}\cdot S_{pqrt} = \delta_{mp}\delta_{nt}.$$

Задачей данного пособия является вычисление коэффициента тензочувствительности как физической величины, т.е. определение его температурных концентрационных, деформационных и ориентационных зависимостей. Для этого прежде всего необходимо определить тензор деформации. Расчеты тензора деформации будем осуществлять в такой последовательности.

1. Задаемся величиной деформации, скажем, деформацией растяжения кристалла кремния, например $\varepsilon = +1\cdot 10^{-3}$ или $\varepsilon = -3\cdot 10^{-3}$, или любым другим значением в направлении его длинной оси, которая совпадает с осью симметрии.

2. Определяется структура тензора напряжения P'_{xx} в заданной системе координат x', y', z'. Если кристалл растягивается одноосно, то тензор напряжения имеет вид (65), т.е. в направлении y' и z' кристалл свободен (напряжения отсутствуют); в случае плоско напряженного состояния тензор напряжений имеет вид (65б).

3. Находится вид тензора деформации, соответствующий тензору напряжения в выбранной нами новой системе координат.

4. Так как заданная в пункте I деформация

$$\varepsilon = \varepsilon'_{xx} = S'_{xxxx}\cdot P'_{xx}, \quad \text{то} \quad P'_{xx} = \varepsilon / S'_{xxxx}.$$

Величина S'_{xxxx} рассчитывается по формуле (74). Значение P'_{xx} войдет множителем во все составляющие ε'_{mn}, поэтому деформация ε будет общим множителем для всех составляющих тензора деформации. Покажем это на конкретном примере кремния, растягиваемого вдоль оси [100], и германия, растягиваемого вдоль оси [111]. Решение этой задачи имеет большое значение для последующих расчетов.

I. Пусть образец кремния в виде параллелепипеда растягивается силой F вдоль оси [100] (рис.15). Кристаллографическая система координат x, y, z (старая) и расчетная x', y', z' ориентированы так, как изображено на рисунке. Матрица направляющих косинусов в этом случае имеет вид

	Старые оси x [100]	y [010]	z [001]
Новые оси x'[100]	1	0	0
y'[010]	0	1	0
z'[001]	0	0	1

(76)

В расчетной системе координат тензор напряжения следующий:

$$P'_{mn} = \begin{vmatrix} P'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}.$$

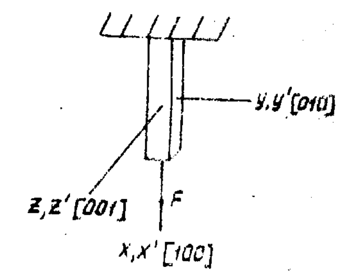


Рис.15

Определим составляющие тензора деформации в системе координат x', y', z' из закона Гука (70):

$$\varepsilon'_{mn} = S'_{mnrt}\, P'_{rt}.$$

В этом соотношении все индексы m, n, r, t принимают значения x', y', z'. Имеем

$$\varepsilon'_{xx} = S'_{xxxx}P'_{xx}; \quad \varepsilon'_{xy} = \varepsilon'_{yx} = S'_{xxxx}P'_{xx};$$
$$\varepsilon'_{xz} = \varepsilon'_{zx} = S'_{xzxx}P'_{xx}; \quad \varepsilon'_{yz} = \varepsilon'_{zy} = S'_{yxxx}P'_{xx};$$
$$\varepsilon'_{yy} = S_{yyxx}P'_{xx}; \quad \varepsilon'_{zz} = S'_{zzxx}\, P'_{xx}.$$

По условию задачи нам известно, что $\varepsilon'_{xx} = \varepsilon$. Таким образом, первое из приведенных соотношений позволяет определить P'_{xx} и исключить его из дальнейшего рассмотрения:

$$\varepsilon = \varepsilon'_{xx} = S'_{xxxx}\cdot P'_{xx}.$$

Величину S'_{xxxx} найдем по формуле (74), используя матрицу преобразующих косинусов (76):

$$S'_{xxxx} = S_{12} + \frac{1}{2}S_{44} + \left(S_{11} - S_{12} - \frac{1}{2}S_{44}\right)\left(\alpha^4_{x'x} + \alpha^4_{x'y} + \alpha^4_{x'z}\right) = S_{11}.$$

Отсюда $P'_{xx} = \varepsilon / S_{11}$.

Аналогичным образом определим все составляющие тензора ε'_{mn}:

$$\varepsilon'_{xy} = \varepsilon'_{yx} = \varepsilon'_{xz} = \varepsilon'_{zx} = \varepsilon'_{yz} = \varepsilon'_{zy} = 0;$$

$$\varepsilon'_{yy} = S'_{yyxx}P'_{xx} = S_{12}\frac{\varepsilon}{S_{11}} = \varepsilon\frac{S_{12}}{S_{11}};$$

$$\varepsilon'_{zz} = S'_{zzxx}P'_{xx} = S_{12}\frac{\varepsilon}{S_{11}} = \varepsilon\frac{S_{12}}{S_{11}},$$

Окончательно имеем

$$\varepsilon'_{mn} = \varepsilon \cdot \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & S_{12}/S_{11} & 0 \\ 0 & 0 & S_{12}/S_{11} \end{vmatrix} \qquad (77)$$

Как видно, отношение S_{12}/S_{11} в данном случае имеет смысл коэффициента Пуассона. Для кремния $\varkappa_{Si} = S_{12}/S_{11} = -0,279$. Нетрудно убедиться в том, что для любой ориентации осей y', z' вид тензора будет тот же самый. Действительно, для всех недиагональных составляющих ε'_{mn} матрица косинусов (76) дает нулевые составляющие, так же как и сумма

$$\sum_{k=1}^{3} \alpha_{mk}\alpha_{nk}\alpha_{pk}\alpha_{rk} = 0.$$

Для диагональных составляющих эта сумма также равна нулю. Из формулы (74) получим

$$S'_{yyxx} = S'_{zzxx} = S_{12}.$$

Итак, в рассматриваемом случае при любой ориентации осей y', z' тензор деформации имеет диагональный вид и равен (77).

2. Ориентация образца германия и расчетные оси x', y', z' показаны на рис.16. Тензор напряжения в системе координат x', y', z' имеет такой же вид, как и при расчете тензора деформации

в кремнии. Матрица направляющих косинусов в соответствии с формулой (14) равна

	x [100]	y [010]	z [001]
x' [111]	$\sqrt{3}/3$	$\sqrt{3}/3$	$\sqrt{3}/3$
y' [$1\bar{2}1$]	$\sqrt{6}/6$	$-\sqrt{6}/3$	$\sqrt{6}/6$
z' [$10\bar{1}$]	$\sqrt{2}/2$	0	$-\sqrt{2}/2$

(78)

Для определения составляющих тензора деформации ε'_{xx}, $\varepsilon'_{xz} = \varepsilon'_{zx}$, $\varepsilon'_{xy} = \varepsilon'_{yx}$ и др. найдем составляющие тензора податливости по формуле (74) в системе координат x', y', z':

$$S'_{xxxx} = S_{12} + 1/2\, S_{44} + 1/3\, S^*,$$

$$S'_{xyxx} = 0,\quad S'_{xzxx} = 0,$$

$$S'_{yyxx} = S_{12} + 1/3\, S^*,\quad S'_{zyxx} = 0,$$

$$S'_{zzxx} = S_{12} + 1/3\, S^*,$$

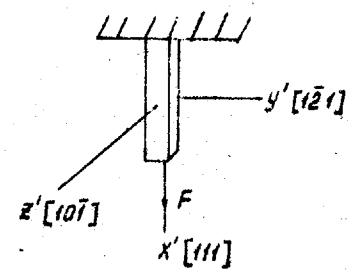


Рис.16

где $S^* = S_{11} - S_{12} + 1/2\, S_{44}$. Так как $\varepsilon'_{xx} = \varepsilon = S'_{xxxx}P'_{xx}$, то $P'_{xx} = \varepsilon / S'_{xxxx}$. Окончательно тензор деформации принимает вид

$$\varepsilon'_{mn} = \varepsilon \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \varkappa_{Ge} & 0 \\ 0 & 0 & \varkappa_{Ge} \end{vmatrix}, \qquad (79)$$

где

$$\varkappa_{Ge} = \frac{S_{12} + 1/3\, S^*}{S_{12} + 1/2\, S_{44} + 1/3\, S^*} = -0,156.$$

Можно показать, что для любых других направлений y', z' тензор ε'_{mn} имеет тот же самый вид. Это следует из свойств матрицы направляющих косинусов (78), в которой все элементы первой строки одинаковы. Раскрыв сумму $\sum_{k=1}^{3}$ в формуле (74), убеждаемся, что она одинакова для любых y', z'.

3. Найдем тензор деформации для двуосно-напряженных тонких пластинок кремния (тензорезисторов), жестко приклеенных на поверхность стальной балки с коэффициентом Пуассона $\varkappa_M$, которая растягивается вдоль длинной оси тензорезистора (рис.17). Оси x', y' лежат в плоскости приклейки. Если тензорезистор воспринимает деформацию конструкции, на которую он наклеен "без потерь", то деформация тензорезистора задается деформацией поверхности конструкции; в третьем направлении, перпендикулярном плоскости приклейки, он свободен и деформируется в соответствии с механическими свойствами кремния. Составляющая тензора деформации может быть найдена из условия равенства нулю составляющей тензора напряжения $p'_{zz} = 0$. Полагаем, что деформации ε'_{xx} и ε'_{yy} нам известны, они равны деформации поверхности стальной конструкции $\varepsilon'_{xx} = \varepsilon$, $\varepsilon'_{yy} = \varkappa_M \cdot \varepsilon$. Пусть образцы вырезаны из слитка кремния в направлении [100] (рис.18), т.е. плоскости x', y' имеют различные кристаллографические ориентации. Тензор деформации поверхности конструкции (например, балки равного сопротивления изгибу) имеет заданный вид:

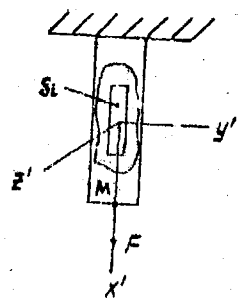


Рис.17

$$\varepsilon^{M}_{mn} = \varepsilon \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \varkappa_M & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}. \qquad (80)$$

Тензор деформации тензорезистора

$$\varepsilon'_{mn} = \varepsilon \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \varkappa_M & 0 \\ 0 & 0 & b_{zz} \end{vmatrix}, \qquad (81)$$

где $\varepsilon \cdot b_{zz} = \varepsilon'_{zz}$.

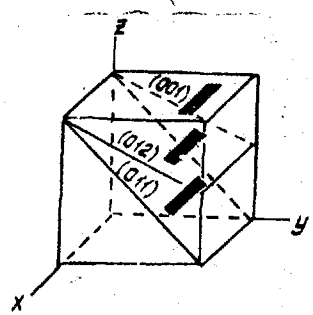


Рис.18

Наша задача заключается в определении ε'_{zz}.

А. Плоскости приклейки (001) и (010). Так как ось x [100] является осью симметрии, то результаты расчетов для этих плоскостей будут, естественно, одинаковы. Выберем расчетную систему координат x' [100], y' [010], z' [001]. Составляющие тензора напряжений в этой системе имеют значения p'_{xx}, p'_{yy} и $p'_{zz} = 0$.

Для определения искомой деформации ε'_{zz} воспользуемся законом Гука

$$p'_{zz} = C'_{zzxx}\varepsilon'_{xx} + C'_{zzyy}\varepsilon'_{yy} + C'_{zzzz}\varepsilon'_{zz} = 0. \qquad (82)$$

Используя (75) для выбранной системы координат, имеем $C'_{zzxx} = C_{12}$, $C'_{zzyy} = C_{12}$, $C'_{zzzz} = C_{11}$. Из (82) находим

$$\varepsilon'_{zz} = -\varepsilon \frac{C_{12}}{C_{11}}(1+\varkappa_M) = -\varepsilon \cdot 0{,}385(1+\varkappa_M). \qquad (83)$$

В рассматриваемом случае тензор деформации имеет вид

$$\varepsilon'_{mn} = \varepsilon \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \varkappa_M & 0 \\ 0 & 0 & -\dfrac{C_{12}}{C_{11}}(1-\varkappa_M) \end{vmatrix}. \qquad (84)$$

Б. Плоскость приклейки (012). Расчетные оси x' [100], y' [02$\bar{1}$], z' [012]. Для этого случая

$$C'_{zzyy} = \frac{1}{25}(17C_{12} + 8C_{11} - 16C_{44});$$

$$C'_{zzxx} = C_{12}; \quad C'_{zzzz} = \frac{1}{25}(17C_{11} - 8C_{12} + 16C_{44});$$

$$\varepsilon'_{zz} = -\varepsilon \frac{25C_{12} + (8C_{11} + 17C_{12} - 16C_{44})\varkappa_M}{17C_{11} + 8C_{12} + 16C_{44}} = -\varepsilon \cdot 0{,}250(1{,}392 + \varkappa_M)$$

В. Плоскость приклейки (011). Расчетные оси x' [100], y' [0$\bar{1}$1], z' [011]. Постоянные упругости, входящие в соотношение (82), находим по формуле (75): $C'_{zzxx} = C_{12}$;

$$C'_{zzyy} = \frac{1}{2}(C_{11} + C_{12} - 2C_{44}), \quad C'_{zzzz} = \frac{1}{2}(C_{12} + C_{12} + 2C_{44}),$$

так что

$$\varepsilon'_{zz} = -\varepsilon \frac{2C_{12} + (C_{11} + C_{12} - 2C_{44})\varkappa_M}{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}} = -\varepsilon \cdot 0{,}186(1{,}777 + \varkappa_M).$$

Г. Плоскость приклейки (02I). Расчетные оси $X'[100]$, $Y'[01\bar{2}]$ и $Z'[021]$. Находим $C'_{zzxx}=C_{12}$;

$$C'_{zzyy}=C_{12}+\frac{8}{25}\left(C_{11}-C_{12}-2C_{44}\right);$$

$$C_{zzzz}=C_{12}+2C_{44}+\frac{17}{25}\left(C_{11}-C_{12}-2C_{44}\right);$$

$$\varepsilon'_{zz}=-\varepsilon\,\frac{25C_{12}+(8C_{11}+17C_{12}-16C_{44})\varkappa_M}{17C_{11}+8C_{12}+16C_{44}}=-\varepsilon\cdot 0{,}250(1{,}392+\varkappa_M),$$

т.е. в этой системе координат коэффициенты такие же, как и для плоскости (0I2). Такой результат понятен, так как плоскости (1I0) являются плоскостями зеркального отражения и являются элементом симметрии для кубического кристалла. Численные расчеты дают следующие значения деформации $\varepsilon'_{zz}/\varepsilon = b_{zz}$ для различных значений коэффициента Пуассона металла $\varkappa_M$ (см. табл.2).

Таблица 2

Плоскость приклейки	$b_{zz}=\varepsilon'_{zz}/\varepsilon$			
	$\varkappa_M=-0{,}2$	$\varkappa_M=-0{,}279=\frac{S_{12}}{S_{11}}$	$\varkappa_M=-0{,}3$	$\varkappa_M=-0{,}4$
(00I), (0I0)	–0,308	–0,278	–0,269	–0,23I
(0II)	–0,293	–0,278	–0,274	–0,255
(0I2), (02I)	–0,298	–0,278	–0,273	–0,248

В табл.2 следует обратить внимание на столбец с $\varkappa_M = -0{,}279$. Это значение взято для проверки правильности расчетов, так как коэффициент Пуассона, как было показано выше, для такой ориентации длинной оси X' тензорезистора и любой ориентации $Y'Z'$ равен $S_{12}/S_{11} = -0{,}279$. Равенство $\varkappa_M = S_{12}/S_{11}$ указывает на то, что кремниевый тензорезистор связан с кремниевой же балкой (клеем, диффузионным или эпитаксиальным способом – безразлично). В этом случае тензор деформации для тензорезистора должен быть таким же, как и для неприклеенного (свободного) образца, изображенного на рис.15. Выбор конструктивного материала наиболее заметным образом сказывается на деформации тензорезистора ε'_{zz} в том случае, когда он приклеивается на балку плоскостью (00I).

4.3. Потенциалы деформации. Смещение минимумов

При деформации ε_{mn} энергия, соответствующая краю i-го минимума зоны проводимости, изменяется, т.е. минимум смещается. Изменение энергии $\mathcal{E}_c^i$ i-го минимума описывается при помощи тензора второго ранга потенциала деформации [II]:

$$\Lambda^i_{mn}=\frac{\partial\mathcal{E}^i_c}{\partial\varepsilon_{mn}}. \qquad (85)$$

Смещение минимумов зоны проводимости германия и кремния может быть определено через две составляющие этого тензора Λ_d и Λ_u. В системе координат, связанных с кристаллографическими осями, тензор Λ^i_{mn} может быть представлен формулой, аналогичной (52):

$$\Lambda^i_{mn}=\Lambda_d\,\delta_{mn}+a_{N^i m}\,a_{N^i n}\,\Lambda_u, \qquad (86)$$

где N^i – направление в k-пространстве, в котором лежит i-й минимум.

Формула (85) позволяет определить смещение любого минимума по известным Λ_d и Λ_u. Переходя от бесконечно малых к конечным величинам, запишем (85) в виде

$$\delta\mathcal{E}^i_c=\Lambda^i_{mn}\varepsilon_{mn}. \qquad (87)$$

Естественно, тензоры Λ^i_{mn} и ε_{mn} должны быть записаны в одной и той же системе координат.

Определим для примера, на сколько сместится минимум, лежащий на оси [I00] k-пространства при деформации осевого сдвига, заключающегося в растяжении вдоль оси X и сжатии в двух других направлениях, т.е. деформации вида

$$\varepsilon_{mn}=\varepsilon\begin{vmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -0{,}5 & 0\\ 0 & 0 & -0{,}5\end{vmatrix}$$

В соответствии с формулой (86) тензор потенциала деформации в этом случае имеет вид

$$\Lambda_{mn}^{[100]} = \begin{vmatrix} \Lambda_d + \Lambda_u & 0 & 0 \\ 0 & \Lambda_d & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda_d \end{vmatrix} . \qquad (88)$$

Смещение минимума будет равно

$$\delta \mathcal{E}_c^{[100]} = \Lambda_{mn}^{[100]} \cdot \varepsilon_{mn} = \Lambda_u \cdot \varepsilon ,$$

т.е. Λ_u характеризует осевой сдвиг вдоль осей $\langle 100 \rangle$. Аналогичным образом можно выяснить смысл константы Λ_d. Оказывается, что Λ_d определяет сдвиг края зоны при расширении кристалла в двух направлениях, перпендикулярных оси [100]. Действительно, если

$$\varepsilon_{mn} = \varepsilon \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,5 & 0 \\ 0 & 0 & 0,5 \end{vmatrix} ,$$

то смещение того же минимума

$$\delta \mathcal{E}_c^{[100]} = \Lambda_{mn}^{[100]} \varepsilon_{mn} = \Lambda_d \varepsilon .$$

Естественно, другие минимумы сместятся по другому, так как тензор Λ_{mn}^{i} в соответствии с формулой (86) будет другим.

В работе [11] приведены значения составляющих потенциала деформации для кремния и германия.

Кремний: $\Lambda_d = -4,99$ эВ; $\Lambda_u = 9,57$ эВ.

Германий: $\Lambda_d = -11,95$ эВ; $\Lambda_u = 17,25$ эВ.

У тензора второго ранга потенциала деформации в принципе отличны от нуля все компоненты. Аналогично тензору подвижности этот тензор можно привести к главным осям в соответствующей системе координат. При этом главные оси U_{mn} и Λ_{mn} в общем случае не совпадают. В случаях наиболее интересных для нас, когда направления главных осей определяются осями симметрии, главные оси для обоих тензоров совпадают. В этом случае тензор U_{mn} имеет вид (51), а тензор Λ_{mn} записывается выражением (88).

Так как тензор деформации определяется для всего кристалла, а тензор потенциала деформации индивидуальный для каждого минимума, то для включения $\delta \mathcal{E}_c^{i}$ мы будем приводить тензор потенциала деформации в минимуме к осям, в которых записан тензор деформации ε.

Найдем смещение минимумов зоны проводимости кремния и германия для записанных в разделе 4.2 тензоров деформации. В кремнии, если одноосная деформация растяжения-сжатия осуществляется вдоль оси [100], минимумы, лежащие на осях [100], смещаются в одну сторону, четыре перпендикулярных минимума смещаются в другую на одну и ту же величину, так как коэффициент Пуассона, как мы показали, не зависит от направления в плоскости y', z'. Поэтому нам каждый раз необходимо рассчитывать смещение двух групп минимумов $\delta \mathcal{E}_c^{(1)}$, лежащих на осях, вдоль которых осуществляется растяжение-сжатие, и $\delta \mathcal{E}_c^{(2)}$ – на других четырех осях, перпендикулярных [100].

В германии мы также будем определять смещение $\delta \mathcal{E}_c^{(1)}$ минимума, лежащего на оси [111], и $\delta \mathcal{E}_c^{(2)}$ для трех других, расположенных на неортогональных осях $\langle 111 \rangle$. Однако эти три других минимума будут смещаться одинаковым образом вследствие симметрии их расположения относительно оси [111]. Относительное смещение минимумов определится как разность $\delta \mathcal{E}_c^{(1)} - \delta \mathcal{E}_c^{(2)}$. При определении смещений $\delta \mathcal{E}_c^{i}$ будем придерживаться того же порядка, который был принят в разд. 4.2.

1. Для ситуации, изображенной на рис.15 (кремний), потенциалы деформации в соответствии с формулой (86) имеют вид

$$\Lambda_{mn}^{(1)} = \begin{vmatrix} \Lambda_d + \Lambda_u & 0 & 0 \\ 0 & \Lambda_d & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda_d \end{vmatrix} ; \quad \Lambda_{mn}^{(2)} = \begin{vmatrix} \Lambda_d & 0 & 0 \\ 0 & \Lambda_d + \Lambda_u & 0 \\ 0 & 0 & \Lambda_d \end{vmatrix}$$

Используя (77), находим

$$\delta \mathcal{E}_c^{(1)} = \varepsilon \left[\Lambda_u + \Lambda_d (1 + 2 \varkappa_{si}) \right] ;$$

$$\delta \mathcal{E}_c^{(2)} = \varepsilon \left[\Lambda_u \varkappa_{si} + \Lambda_d (1 + 2 \varkappa_{si}) \right] ; \qquad (89)$$

$$\delta \mathcal{E}_c^{(1)} - \delta \mathcal{E}_c^{(2)} = \varepsilon \Lambda_u (1 - \varkappa_{si}) .$$

при расчетах необходимо помнить, что $\varkappa_{Si}$ – отрицательная величина.

2. Для германия (рис.16) выберем нумерацию минимумов так, как показано на рис.13. Для первого минимума расчетная система координат в соответствии с правилом (20) есть $x'[111]$, $y'[1\bar{2}1]$, $z'[10\bar{1}]$, для второго – $x'[1\bar{1}1]$, $y'[2\bar{1}1]$, $z'[0\bar{1}\bar{1}]$. Как уже было показано, в каждой из этих систем тензор потенциала деформации имеет один и тот же вид (88). Так как тензор деформации построен в системе x', y', z', то для определения смещения минимума i = 1 перестраивать что-либо нет необходимости, т.е.

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} = \varepsilon\left[\Lambda_u + \Lambda_d(1 + 2\varkappa_{Ge})\right] \qquad (90)$$

Тензор потенциала деформации второго минимума должен быть перестроен из системы x'', y'', z'' (обозначим ее, как старую x, y, z) в систему x', y', z' (новую). В соответствии с правилами преобразования тензоров второго ранга

$$\Lambda'^{(2)}_{mn} = a_{mp}\, a_{nq}\, \Lambda_{pq} .$$

Матрица направляющих косинусов такого преобразования имеет вид

$$a_{mn} = \begin{bmatrix} 1/3 & -\sqrt{2}/3 & -\sqrt{6}/3 \\ 2\sqrt{2}/3 & 1/6 & \sqrt{3}/6 \\ 0 & -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix}$$

Таким образом, диагональные составляющие тензора потенциала деформации $\Lambda'^{(2)}_{mn}$:

$$\Lambda'^{(2)}_{xx} = \Lambda_d + \frac{1}{9}\Lambda_u ;\quad \Lambda'^{(2)}_{yy} = \Lambda_d + \frac{8}{9}\Lambda_u ;\quad \Lambda'^{(2)}_{zz} = \Lambda_d .$$

Недиагональные составляющие тензора $\Lambda'^{(2)}_{mn}$ считать нет необходимости. В результате получим

$$\delta\mathcal{E}_c^{(2)} = \varepsilon\left[\Lambda_u \frac{1}{9}(1 + 8\varkappa_{Ge}) + \Lambda_d(1 + 2\varkappa_{Ge})\right] ; \qquad (91)$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} - \delta\mathcal{E}_c^{(2)} = \varepsilon\Lambda_u \frac{8}{9}(1 - \varkappa_{Ge}) .$$

Для тензорезисторов, вырезанных из монокристалла кремния в соответствии с рис.18 и приклеенных на балку с коэффициентом

Пуассона $\varkappa_M$, легко получить по приведенной выше схеме следующие значения смещения минимумов.

А. Плоскости приклейки (001) и (010):

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} = \varepsilon\left[\Lambda_u + \Lambda_d(1 + \varkappa_M + b_{zz})\right] ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(2)} = \varepsilon\left[\varkappa_M\Lambda_u + \Lambda_d(1 + \varkappa_M + b_{zz})\right] ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(3)} = \varepsilon\left[\Lambda_u b_{zz} + \Lambda_d(1 + \varkappa_M + b_{zz})\right] ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} - \delta\mathcal{E}_c^{(2)} = \varepsilon\Lambda_u(1 - \varkappa_M) ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} - \delta\mathcal{E}_c^{(3)} = \varepsilon\Lambda_u(1 - b_{zz}) .$$

Все три группы минимумов смещаются различным образом. Расчет осуществляется для тензора деформации (81); тензор потенциалов деформации перестраивается из осей, связанных с осями эллипсоида равной энергии, к осям, в которых записан тензор деформации (81).

Б. Плоскость приклейки (110):

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} = \varepsilon\left[\Lambda_u + \Lambda_d(1 + \varkappa_M + b_{zz})\right] ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(2)} = \delta\mathcal{E}_c^{(3)} = \varepsilon\left[\frac{1}{2}\Lambda_u(\varkappa_M + b_{zz}) + \Lambda_d(1 + \varkappa_M + b_{zz})\right] ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} - \delta\mathcal{E}_c^{(2)} = \delta\mathcal{E}_c^{(1)} - \delta\mathcal{E}_c^{(3)} = \varepsilon\frac{\Lambda_u}{2}(2 - \varkappa_M - b_{zz}) .$$

В. Плоскости приклейки (012), (021)

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} = \varepsilon\left[\Lambda_u + \Lambda_d(1 + \varkappa_M + b_{zz})\right] ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(2)} = \varepsilon\left[\Lambda_u(4/5\,\varkappa_M + 1/5\,b_{zz}) + \Lambda_d(1 + \varkappa_M + b_{zz})\right] ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(3)} = \varepsilon\left[\Lambda_u(1/5\,\varkappa_M + 4/5\,b_{zz}) + \Lambda_d(1 + \varkappa_M + b_{zz})\right] ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} - \delta\mathcal{E}_c^{(2)} = \varepsilon\frac{\Lambda_u}{5}(5 - 4\varkappa_M - b_{zz}) ;$$

$$\delta\mathcal{E}_c^{(1)} - \delta\mathcal{E}_c^{(3)} = \varepsilon\frac{\Lambda_u}{5}(5 - \varkappa_M - 4b_{zz}) .$$

На рис.19 изображена схема расположения эллипсоидов равной энергии относительно продольной оси приклеиваемого тензорезистора, который растягивается вдоль этой оси и сжимается в перпендикулярном направлении. На рисунке видно, что в случае приклейки тензорезистора плоскостями (00I) и (0I2) края зон $\mathcal{E}_c^{(2)}$ и $\mathcal{E}_c^{(3)}$ должны смещаться различным образом; при приклейке тензорезистора плоскостью (0II) минимумы $\mathcal{E}_c^{(2)}$ и $\mathcal{E}_c^{(3)}$ должны смещаться одинаково. Приведенные выше результаты расчетов подтверждают эти выводы. Определение смещений минимумов зоны проводимости для приклеенных образцов германия осуществляется по такой же схеме.

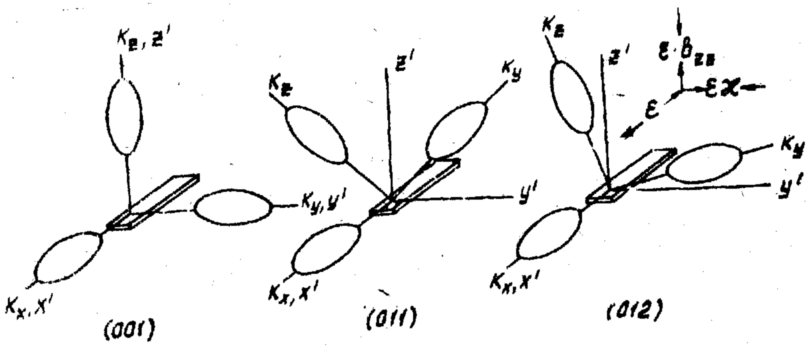


Рис.I9

5. ТЕНЗОРЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

5.I. Электропроводность многодолинных полупроводников

Выше было показано, что все материальные тензоры второго ранга для кубических кристаллов имеют одну независимую составляющую. Можно показать, что обратная электропроводность также образует тензор второго ранга:

$$\left(\frac{1}{\sigma}\right)_{mn} = \rho_{mn} . \qquad (92)$$

Рассчитаем электропроводность кремния и германия n-типа, полагая, что электроны в зоне проводимости распределены по минимумам неравномерно, так что концентрация их в каждом минимуме равна n^i.

$$\sigma_{mn} = q \sum_{i=1}^{\nu} n^i u^i_{mn} = \sum_i \sigma^i_{mn} . \qquad (93)$$

Тензор подвижности u^i_{mn} в системе координат, связанной с осями симметрии, имеет две составляющие $u_\parallel$ и $u_\perp$ (52):

$$u^i_{mn} = u_\perp \delta_{\alpha\beta} + a_{N^i m} a_{N^i n} (u_\parallel - u_\perp) .$$

В кремнии (рис.I9,б) тензор подвижности для различных минимумов может быть записан так:

$$u^{(1)}_{mn} = \begin{vmatrix} u_\parallel & 0 & 0 \\ 0 & u_\perp & 0 \\ 0 & 0 & u_\perp \end{vmatrix} ;$$

$$u^{(2)}_{mn} = \begin{vmatrix} u_\perp & 0 & 0 \\ 0 & u_\parallel & 0 \\ 0 & 0 & u_\perp \end{vmatrix} ; \qquad (94)$$

$$u^{(3)}_{mn} = \begin{vmatrix} u_\perp & 0 & 0 \\ 0 & u_\perp & 0 \\ 0 & 0 & u_\parallel \end{vmatrix} .$$

Если электрическое поле и плотность электрического тока направлены вдоль оси X, то из (93) находим

$$\sigma_{xx} = 2q (n^{(1)} u_\parallel + n^{(2)} u_\perp + n^{(3)} u_\perp) .$$

Для случая, когда $n^{(2)} = n^{(3)}$,

$$\sigma_{xx} = 2q (n^{(1)} u_\parallel + 2 n^{(2)} u_\perp) . \qquad (95)$$

В недеформированном кремнии

$$\sigma_0 = q \frac{n_0}{\nu} 2 (u_\parallel + 2u_\perp) = q n_0 \frac{1}{3} (u_\parallel + 2u_\perp) . \qquad (96)$$

Рассчитаем для германия σ'_{xx} в направлении оси симметрии третьего порядка [1I1]. Пронумеруем минимумы так, как показано на рис.I3. Поскольку минимумы $i = 2,3,4$ расположены симметрично относительно оси [III], подвижность электронов для этих трех минимумов в направлении [III] будет одинакова. В системе координат $X'[111]$, $Y'[1\bar{2}1]$, $Z'[10\bar{1}]$, т.е. в главных осях, тензор подвижности имеет вид

$$u^{(1)}_{mn} = \begin{vmatrix} u_{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & u_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & u_{\perp} \end{vmatrix} . \tag{97}$$

В минимуме $i = 2$ тензор подвижности в осях $X''[\bar{1}\bar{1}1]$, $Y''[\bar{2}11]$, $Z'[0\bar{1}1]$ имеет точно такой же вид (97). Для того чтобы найти подвижность электронов минимума $i = 2$ в расчетном направлении $[111]$, тензор (97) необходимо преобразовать из системы X'', Y'', Z'' в новую систему X', Y', Z' (по формуле (23).

Матрица направляющих косинусов такого преобразования равна

$$a_{mn} = \begin{vmatrix} 1/3 & \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{3} & 1/6 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{6}}{3} & \frac{\sqrt{6}}{3} & 1/2 \end{vmatrix}$$

Осуществляя преобразования, имеем

$$u^{1(2)}_{xx} = a^2_{xx}u_{xx} + a^2_{xy}u_{yy} + a^2_{xz}u_{zz} = \frac{1}{9}(u_{\parallel} + 8u_{\perp}) .$$

Таким образом, электропроводность германия n-типа в направлении $[111]$ равна

$$\sigma'_{xx} = q\left[n^{(1)}u_{\parallel} + n^{(2)}\frac{1}{9}(u_{\parallel}+8u_{\perp}) + n^{(3)}\frac{1}{9}(u_{\parallel}+8u_{\perp}) + n^{(4)}\frac{1}{9}(u_{\parallel}+8u_{\perp})\right].$$

Если $n^{(2)} = n^{(3)} = n^{(4)}$, то

$$\sigma'_{xx} = q\left[n^{(1)}u_{\parallel} + n^{(2)}\frac{1}{3}(u_{\parallel}+8u_{\perp})\right]. \tag{98}$$

Для недеформированного кристалла германия $n^{i} = n^{0}/4$ и поэтому

$$\sigma'_{xx} = q n_0 \frac{1}{3}(u_{\parallel} + 2u_{\perp}) = \sigma_0 .$$

5.2. Тензорезистивные коэффициенты

При количественном описании тензорезистивного эффекта полупроводниковых материалов используют систему связанных друг с другом тензорезистивных коэффициентов.

В случае изотропного материала при деформации одноосного растяжения-сжатия вдоль длинной оси образца продольные тензорезистивные коэффициенты можно определить следующим образом.

Коэффициентом пьезосопротивления называют коэффициент пропорциональности между относительным изменением удельного сопротивления материала и величиной механического напряжения

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = \pi P, \tag{99}$$

где $\Delta\rho = \rho - \rho_0$ – изменение удельного сопротивления образца при нагружении. Коэффициент пьезосопротивления имеет размерность обратного напряжения ($м^2/Н$). Коэффициентом эластосопротивления называют коэффициент пропорциональности между относительным изменением удельного сопротивления и относительной деформации

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} = m \cdot \varepsilon . \tag{100}$$

Коэффициент эластосопротивления m –безразмерная величина. Так как деформация и напряжение связаны друг с другом законом Гука

$$P = Y \cdot \varepsilon , \tag{101}$$

где Y – модуль Юнга, то коэффициенты эластосопротивления и пьезосопротивления также связаны:

$$m = \pi \cdot Y .$$

При теоретических расчетах удобнее использовать удельную электропроводность вместо удельного сопротивления. Это связано с тем, что электропроводность – аддитивная величина, т.е. вклад в общую электропроводность носителей заряда разных типов (относящихся к разным зонам, подзонам, минимумам) определяется через сумму электропроводностей носителей заряда каждого типа.

Коэффициент пьезопроводимости определяется соотношением

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = \Pi \cdot P , \tag{102}$$

где $\Delta\sigma = \sigma - \sigma_0$ – разность удельных электропроводностей деформированного и недеформированного образца. В дальнейшем мы будем рассчитывать коэффициент эластопроводимости, который определяется соотношением

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = M \cdot \varepsilon . \qquad (103)$$

Коэффициенты пьезопроводимости и эластопроводимости связаны друг с другом:

$$M = \Pi \cdot Y . \qquad (104)$$

Кроме того, при малых изменениях удельного сопротивления и удельной электропроводности при деформации

$$\frac{\Delta\rho}{\rho} = -\frac{\Delta\sigma}{\sigma} , \qquad (105)$$

так как $\rho = 1/\sigma$. Соотношения (101) и (105) позволяют выразить все тензорезистивные коэффициенты друг через друга

$$M = \Pi Y = -m = -\pi Y . \qquad (106)$$

В практической тензометрии удобно использовать безразмерный коэффициент, определяющий изменение полного сопротивления образца R при деформации ε, который называется коэффициентом тензочувствительности:

$$\frac{\Delta R}{R} = S \cdot \varepsilon . \qquad (107)$$

Коэффициент тензочувствительности S связан с коэффициентом эластосопротивления простым соотношением. Так как

$$R = \rho \cdot \frac{\ell}{a \cdot b} , \qquad (108)$$

где ℓ – длина образца; $a \cdot b$ – его поперечное сечение, то

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{\Delta\rho}{\rho} + \frac{\Delta\ell}{\ell} - \frac{\Delta a}{a} - \frac{\Delta b}{b} .$$

Отношения

$$\frac{\Delta\ell}{\ell} = \varepsilon , \quad \frac{\Delta a}{a} = \varkappa\varepsilon , \quad \frac{\Delta b}{b} = \varkappa\varepsilon ,$$

отсюда

$$S = \frac{\Delta R}{R \cdot \varepsilon} = m + (1 - 2\varkappa) . \qquad (109)$$

В металлах величина m мала, коэффициент тензочувствительности в этом случае равен

$$S \approx 1 - 2\varkappa \approx 1,6 .$$

В полупроводниках $m \approx 100$. Для них коэффициент тензочувствительности совпадает с $m = -M \approx S$.

В нелинейном по деформации приближении удельное сопротивление можно разложить в ряд по малым деформациям:

$$\rho_\varepsilon = \rho_0 + \frac{d\rho_\varepsilon}{d\varepsilon}\varepsilon + \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2\rho_\varepsilon}{d\varepsilon^2}\varepsilon^2 + \ldots$$

или

$$\frac{1}{\rho_0} \cdot \frac{\Delta\rho}{\varepsilon} = \frac{1}{\rho_0}\frac{d\rho_\varepsilon}{d\varepsilon} + \frac{1}{\rho_0}\frac{d^2\rho_\varepsilon}{d\varepsilon^2} + \ldots \qquad (110)$$

Величина $\frac{1}{\rho_0}\frac{d\rho_\varepsilon}{d\varepsilon}$ есть не что иное, как дифференциальный коэффициент эластосопротивления (тензочувствительность), определяемый через тангенс угла наклона кривой $\rho_\varepsilon / \rho_0 = f(\varepsilon)$ в заданной точке ε.

Коэффициент $C = \frac{1}{2}\frac{1}{\rho_0}\frac{d^2\rho_\varepsilon}{d\varepsilon^2}$ называют квадратичным коэффициентом эластосопротивления (тензочувствительности). При малых деформациях в разложении можно ограничиться тремя первыми членами:

$$\frac{1}{\rho_0}\frac{\Delta\rho}{\varepsilon} = S + C \cdot \varepsilon . \qquad (111)$$

В случае анизотропного материала линейные тензорезистивные коэффициенты являются тензорами четвертого ранга, квадратичные – тензорами шестого ранга. Не представляет никакого труда все приведенные выше соотношения записать в тензорном виде. В частности,

$$\frac{\Delta\sigma_{mn}}{\sigma_0} = M_{mnpq} \cdot \varepsilon_{pq} . \qquad (112)$$

Симметрия тензора четвертого ранга M_{mnpq} по перестановке внутри каждой пары индексов и между каждой парой сокращает число независимых переменных с 81 до 36. Условия симметрии кристаллической решетки сокращают для кубических кристаллов число независимых составляющих до трех, так что структура тензора M_{mnpq} совпадает со структурой тензора податливости C_{mnpq}. Переход от тензорных обозначений к матричным для тензора эластопроводимости определяется соотношением

$$M_{mnpq} = M_{rt},$$

где m, n, p, q = 1,2,3; r, t = 1,2,...,6, т.е. по правилу, совпадающему с правилом для тензора упругости.

Для тензора пьезосопротивления переход от тензорных обозначений к матричным производится по правилу: $\pi_{mnpq} = \pi_{rt}$, если r и t равны 1,2 или 3, и $2\pi_{mnpq} = \pi_{rt}$, если r и t равны 4,5 или 6. Значения составляющих тензоров π_{mnpq} и M_{mnpq} в любой системе координат могут быть выражены через составляющие в кристаллографической системе формулами, аналогичными (74) и (75) [10] :

$$\pi'_{mnpq} = \pi_{12}\delta_{mn}\delta_{pq} + \frac{\pi_{44}}{2}(\delta_{mp}\delta_{nq} + \delta_{mq}\delta_{np}) + (\pi_{11} - \pi_{12} - \pi_{44})\sum_{k=1}^{3} \alpha_{mk}\alpha_{nk}\alpha_{pk}\alpha_{qk}; \qquad (113)$$

$$M'_{mnpq} = M_{12}\delta_{mn}\delta_{pq} + M_{44}(\delta_{mp}\delta_{np} + \delta_{mq}\delta_{np}) + (M_{11} - M_{12} - 2M_{44})\sum_{k=1}^{3} a_{mk}a_{nk}a_{pk}a_{qk}. \qquad (114)$$

Заметим, что результаты, которые получаются при использовании формул (113) и (114), можно получить при помощи формулы (41) с матрицей вида (71) и матрицей направляющих косинусов (22) в шестимерном пространстве.

5.3. Электропроводность кремния и германия в линейном по деформации приближении

Покажем, как рассчитываются коэффициенты эластопроводимости кремния и германия M_{11}, M_{12} и M_{44}. По определению

$$M_{11} = M_{xxxx} = \frac{1}{\sigma_0}\frac{d\sigma_{xx}}{d\varepsilon_{xx}} = \frac{1}{\sigma_0}\frac{\Delta\sigma_{xx}}{\varepsilon_{xx}}. \qquad (115)$$

У тензора ε_{mn}(77) составляющая $\varepsilon_{xx} = \varepsilon$. Изменение проводимости

$$\Delta\sigma_{xx} = q\sum_{i=1}^{\nu} \delta n^i u^i_{xx}. \qquad (116)$$

Осуществляя суммирование по всем минимумам зоны проводимости кремния (см. рис. 12,б), имеем

$$\Delta\sigma_{xx} = 2q\left[\delta n^{(1)}u^{(1)}_{xx} + \delta n^{(2)}u^{(2)}_{xx} + \delta n^{(3)}u^{(3)}_{xx}\right],$$

где из (94) $u^{(1)}_{xx} = u_{\parallel}$, $u^{(2)}_{xx} = u^{(3)}_{xx} = u_{\perp}$.

Изменение концентраций $\delta n^{(1)}$ и $\delta n^{(2)}$ найдем из уравнения нейтральности, предполагая, что общая концентрация электронов при деформации не изменяется:

$$n_0 = 2n^{(1)} + 4n^{(2)}, \quad \delta n^{(1)} + 2\delta n^{(2)} = 0. \qquad (117)$$

Выражая $\delta n^{(2)}$ через $\delta n^{(1)}$ и подставляя в $\Delta\sigma_{xx}$, находим

$$\Delta\sigma_{xx} = 2q(u_{\parallel} - u_{\perp})\delta n^{(1)}.$$

Изменение энергии Ферми в общем случае находится из уравнения нейтральности (117), если дифференцировать формулу (60),

$$\delta\mu = \frac{1}{\nu}\sum_{i=1}^{\nu} \delta\varepsilon^i_c. \qquad (118)$$

Для кремния величины $\delta\varepsilon^i_c$ определяются по формулам (89). Дифференцируя (60), находим

$$\delta n^{(1)} = \frac{n^{(1)}}{k_0 T}\left[\delta\mu - \delta\varepsilon^{(1)}_c\right]$$

Суммирование (II8) дает

$$\delta\mu = \frac{2}{\nu}\left[\delta\mathcal{E}_c^{(1)} + 2\delta\mathcal{E}_c^{(2)}\right] = \varepsilon\,\frac{2}{\nu}(1+\varkappa_{si})(\Lambda_u + 3\Lambda_d)\,,$$

так что разность

$$\delta\mu - \delta\mathcal{E}_c^{(1)} = -\frac{2}{3}\,\varepsilon\,(1-\varkappa_{si})\Lambda_u\,.$$

Поскольку электропроводность недеформированного кристалла

$$\sigma_0 = n_0\, q\, \frac{1}{3}\,(u_{\parallel} + 2u_{\perp})\,,$$

а изменение электропроводности

$$\Delta\sigma_{xx} = -2q\,(u_{\parallel} - u_{\perp})\,\frac{n^{(1)}}{k_0 T}\,\frac{2}{3}\,(1-\varkappa_{si})\Lambda_u\cdot\varepsilon\,, \qquad (II9)$$

то, учитывая, что $n^{(1)} = n_0/\nu$, находим

$$\frac{1}{\sigma_0}\,\frac{\Delta\sigma_{xx}}{\varepsilon_{xx}} = \frac{1}{k_0 T}\,\frac{2}{3}\,\frac{(K-1)}{(2K+1)}\,(1-\varkappa_{si})\Lambda_u\,.$$

Окончательный результат для M_{11} в кремнии записывается выражением

$$M_{11} = \frac{1}{k_0 T}\,\frac{2}{3}\,\frac{(K-1)}{(2K+1)}\,\Lambda\,, \qquad (I20)$$

где $\Lambda = \Lambda_u(1-\varkappa_{si}) = 12{,}24$ эВ – приведенный потенциал деформации.

При расчете составляющей $M_{12} = M_{xxyy}$, когда $\varepsilon_{yy} = \varepsilon$, тензор деформации имеет вид

$$\varepsilon_{mn} = \varepsilon\begin{vmatrix} \varkappa_{si} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \varkappa_{si} \end{vmatrix}$$

В этом случае

$$M_{12} = M_{xxyy} = -\frac{1}{3}\,\frac{(K-1)}{(2K+1)}\,\frac{\Lambda_u}{k_0 T}\,(1-\varkappa_{si})\,; \qquad (I2I)$$

$$M_{44} = M_{xyxy} = M_{yzyz} = M_{xzxz} = 0\,. \qquad (I22)$$

Схема расчета коэффициентов эластопроводимости германия аналогична, только с тем отличием, что тензоры подвижности и потенциалов деформации должны быть преобразованы из осей симметрии [III], где они имеют диагональный вид, к осям [I00], после чего осуществляется суммирование изменения проводимости по всем минимумам.

В германии

$$M_{11} = M_{12} = 0\,,\quad M_{44} = \frac{1}{3}\,\frac{(K-1)}{(2K+1)}\,\frac{\Lambda_u}{k_0 T}\,\frac{8}{T_8}\,(1-\varkappa_{Ge})\,. \qquad (I23)$$

Для вырожденных полупроводников [I2] в случае, когда время релаксации τ зависит от энергии, по закону

$$\tau = \tau_0\,\mathcal{E}^{r}\,,$$

где показатель степени r определяется механизмом рассеяния носителей заряда,

$$M_{mn} = M^{0}_{mn}\,\frac{(r+1/2)}{(r+3/2)}\,\frac{F_{r-1/2}(\mu^*)}{F_{r+1/2}(\mu^*)}\,. \qquad (I24)$$

Показатель степени r равен $-1/2$ при рассеянии электронов на акустических колебаниях решетки, $r = 3/2$ при рассеянии на ионизированных примесях, M^{0}_{mn} – коэффициент эластопроводимости невырожденного полупроводника.

5.4. Нелинейная модель тензорезистивного эффекта в кремнии и германии

Уравнение нейтральности (II8) получается путем разложения в ряд экспонент, определяющих концентрацию носителей заряда в минимумах, по малому параметру $(\delta\mu - \delta\mathcal{E}_c^{1})/k_0 T$ с последующим пренебрежением членами более высокого порядка разложения. Оценка показывает, что в практически интересных случаях этот параметр не мал и ряд сходится плохо или совсем не сходится.

Существует более общий метод расчета тензорезистивного эффекта, в котором рассмотренный случай малых деформаций является частным.

Пусть кристаллу кремния приложена растягивающая нагрузка в направлении [I00], так что концентрация электронов $n^{(1)}$

уменьшается, $n^{(2)}$ увеличивается вследствие эффектов перетекания. Обозначим отношение концентрации $n^{(2)}$ к $n^{(1)}$ через A, т.е.

$$A = \frac{n^{(2)}}{n^{(1)}} \tag{125}$$

При деформации примесного полупроводника общая концентрация электронов в зоне проводимости не изменяется:

$$2n^{(1)} + 4n^{(2)} = n_0 . \tag{126}$$

Электропроводность такого деформированного кристалла равна

$$\sigma_\varepsilon = q\left[2n^{(1)}u_\parallel + 4n^{(2)}u_\perp\right] . \tag{127}$$

Решая совместно (125) и (126), находим

$$n^{(1)} = \frac{n_0}{2+4A} \quad , \quad n^{(2)} = \frac{An^0}{2+4A} . \tag{128}$$

Если кристалл не нагружен, то $A = 1$ и электропроводность равна

$$\sigma_0 = q\,n_0\,\frac{1}{3}\left(u_\parallel + 2u_\perp\right) . \tag{129}$$

Используя (127) и (129), находим окончательно

$$\frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0} = \frac{\sigma_0}{\sigma_\varepsilon} = \frac{(1+2K)(1+2A)}{3(1+2AK)} \tag{130}$$

Таким образом, для определения зависимости удельного сопротивления от деформации нужно найти зависимость от деформации величины A. Для невырожденного полупроводника

$$A = \frac{e^{\mu_0^* - \varepsilon_{c0}^{*(2)} + \delta\mu^* - \delta\varepsilon_c^{*(2)}}}{e^{\mu_0^* - \varepsilon_{c0}^{(1)} + \delta\mu^* - \delta\varepsilon_c^{*(1)}}} = e^{\frac{\delta\varepsilon^{(1)} - \delta\varepsilon_c^{(2)}}{k_0 T}} \tag{131}$$

В разделе 4.3 мы определили разность

$$\delta\varepsilon_c^{(1)} - \delta\varepsilon_c^{(2)} = \varepsilon\Lambda \tag{132}$$

для рассматриваемого случая.

На рис.20 приведены зависимости удельного сопротивления кремния, построенные по формулам (130) и (132) для различных температур. Обращают на себя внимание следующие особенности этих зависимостей.

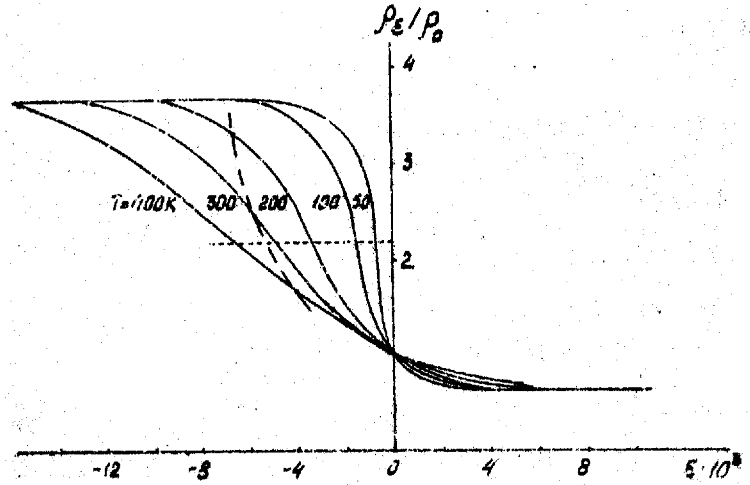


Рис.20

1. Кривые $\rho_\varepsilon / \rho_0 = f(\varepsilon)$ имеют насыщение при больших отрицательных и больших положительных деформациях. Предельные значения $\rho_\varepsilon / \rho_0$ легко находятся по формуле (130):

$$\lim_{\varepsilon \to \infty} \frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0} = \frac{1+K}{3K} = 0{,}734 \; , \; \lim_{\varepsilon \to -\infty} \frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0} = \frac{1+2K}{3} = 3{,}66 \; ,$$

если $K = 5{,}1$.

2. Кривые $\rho_\varepsilon / \rho_0$ имеют точку перегиба. Значение $\rho_\varepsilon / \rho_0$ в точке перегиба определяется также только фактором анизотропии подвижности

$$\left.\frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0}\right|_{\varepsilon_{пер}} = \frac{(1+2K)(1+K)}{6K} = 2{,}2 .$$

Этому сопротивлению соответствует деформация

$$\varepsilon_{пер} = \frac{k_0 T}{\Lambda} \cdot \ln\frac{1}{2K} .$$

Эластосопротивление при любой деформации можно определить, используя формулу (110):

$$m = \frac{d}{d\varepsilon}\left(\frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0}\right) = \frac{(1+2k)2A(1-k)}{3(1+2Ak)^2}\,\frac{\Lambda}{k_0T}$$

При деформации $\varepsilon = 0$, когда $A = 1$,

$$m_0 = -\frac{2}{3}\,\frac{(k-1)}{2k+1}\,\frac{\Lambda}{k_0T}. \qquad (133)$$

В точке перегиба $A = \frac{1}{2k}$ коэффициент эластосопротивления максимален и равен

$$m_{max} = \frac{(1-k)(1+2k)}{12k}\,\frac{\Lambda}{k_0T}.$$

Аналогичным образом может быть определен коэффициент квадратичной тензочувствительности для любой деформации:

$$C = \frac{1}{2}\,\frac{d^2(\rho_\varepsilon/\rho_0)}{d\varepsilon^2}$$

Решение этой задачи предлагается осуществить самостоятельно. Естественно, при $\varepsilon = \varepsilon_{пер}$ $C = 0$.

В германии при деформации растяжения сжатия вдоль оси [111] уравнение нейтральности имеет вид

$$n_0 = n^{(1)} + 3n^{(2)}$$

Если $A = n^{(2)}/n^{(1)}$, то

$$n^{(1)} = \frac{n_0}{1+3A}, \quad n^{(2)} = \frac{n_0 A}{1+3A}$$

Используя формулу (98), находим

$$\frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0} = \frac{\sigma_0}{\sigma_\varepsilon} = \frac{(1+2k)(1+3A)}{[3+A(8k+1)]}. \qquad (134)$$

Характер зависимостей ρ_ε/ρ_0 от деформации такой же, как и в кремнии, однако сопротивление насыщения при отрицательной деформации заметно больше:

$$\lim_{\varepsilon\to\infty}\frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0} = \frac{3(1+2k)}{(1+8k)} = 0{,}764, \quad \lim_{\varepsilon\to-\infty}\frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0} = \frac{1+2k}{3} = 13{,}67$$

при K = 20.

Точка перегиба в германии определяется соотношением

$$\varepsilon_{пер} = \frac{k_0T}{\Lambda}\ln\frac{3}{1+8K}.$$

Сопротивление в точке перегиба

$$\left.\frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0}\right|_{\varepsilon_{пер}} = \frac{(2K+1)(4K+5)}{3(8K+1)} = 7{,}215.$$

Эластосопротивление при любой деформации

$$m = \frac{d(\rho_\varepsilon/\rho_0)}{d\varepsilon} = \frac{8A(1-K)(1+2K)}{[3+A(8K+1)]^2}\cdot\frac{\Lambda}{k_0T}$$

В точке $\varepsilon = 0$

$$m_0 = \frac{1}{2}\,\frac{(1-K)}{(1+2K)}\,\frac{\Lambda}{k_0T}.$$

В точке перегиба

$$m_{max} = \frac{2}{3}\,\frac{(1-K)(1+2K)}{(1+8K)}\,\frac{\Lambda}{k_0T}.$$

Напомним, что в германии $\Lambda = \Lambda_u(1-\varkappa_{Ge}) = 17{,}72$ эВ. При деформации всестороннего сжатия, когда $\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}=\varepsilon_{zz} = 1$, т.е. когда $\varkappa_{Si,Ge} = 1$, приведенные потенциалы Λ равны нулю и тензорезистивный эффект отсутствует. При такой деформации симметрия кристалла не изменяется и перетекания электронов из минимума в минимум нет.

При одноосной деформации кристалла вдоль симметричных относительно минимумов направлений ([111] в кремнии и [100] в германии) тензорезистивный эффект отсутствует, так как все минимумы смещаются одинаково. В этом легко убедиться, используя формулу (114) и значения постоянных тензора эластосопротивления (120), (121), (122) и (123). Для приклеиваемых тензорезисторов $\delta\varepsilon_t^{(1)}$,

$\delta\varepsilon_c^{(2)}$ и $\delta\varepsilon_c^{(3)}$ в общем случае не равны друг другу, т.е. не равны $n^{(1)}$, $n^{(2)}$ и $n^{(3)}$. Пусть

$$A = \frac{n^{(2)}}{n^{(1)}} = e^{\delta\varepsilon_c^{*(1)} - \delta\varepsilon_c^{*(2)}}, \quad B = \frac{n^{(3)}}{n^{(1)}} = e^{\delta\varepsilon_c^{*(1)} - \delta\varepsilon_c^{*(2)}}$$

Уравнение нейтральности принимает вид

$$n_0 = 2\left[n^{(1)} + n^{(2)} + n^{(3)}\right] = 2n^{(1)}(1 + A + B).$$

Отсюда

$$n^{(1)} = \frac{n_0}{2(1+A+B)}, \quad n^{(2)} = \frac{A n_0}{2(1+A+B)}, \quad n^{(3)} = \frac{B n_0}{2(1+A+B)}.$$

Электропроводность деформированного полупроводника равна

$$\sigma_\varepsilon = q n_0 \frac{\left[u_\parallel + (A+B) u_\perp\right]}{(1+A+B)}$$

и недеформированного, когда $A = B = 1$,

$$\sigma_0 = q n_0 \frac{1}{3}(u_\parallel + 2u_\perp).$$

Окончательно

$$\frac{\rho_\varepsilon}{\rho_0} = \frac{\sigma_0}{\sigma_\varepsilon} = \frac{1}{3}\,\frac{(1+2K)(1+A+B)}{\left[1+(A+B)K\right]}$$

Дифференциальное эластосопротивление

$$\frac{d(\rho_\varepsilon/\rho_0)}{d\varepsilon} = \frac{(1+2K)(1-K)}{3\left[1+(A+B)K\right]^2}\cdot\frac{d(A+B)}{d\varepsilon}$$

В наиболее простом случае, когда $\varepsilon = 0$ $A = B = 1$, для всех плоскостей приклейки (001), (110), (012) получается один и тот же результат:

$$m_0 = \frac{1}{3k_0T}\,\frac{(1+K)}{(1+2K)}\,\Lambda_u(2 - \varkappa_M - \beta_{zz}).$$

Нетрудно видеть, что этот результат совпадает с m_0 для неприклеенного образца, если $\varkappa_M = \beta_{zz} = \varkappa_{Si}$. Коэффициент $(2-\varkappa_M-\beta_{zz})$ практически одинаков для всех плоскостей приклейки. Таким образом, учет различий в деформациях ε_{yy} и ε_{zz} для приклеенных тензорезисторов дает малый вклад в изменение сопротивления.

Особенности характеристик реальных приклеиваемых тензорезисторов в значительно большей мере определяются деформацией их предварительного сжатия, обусловленной приклейкой. Действительно, полимеризация клея (цемента) осуществляется при температурах 150 °C...300 °C; разница коэффициентов линейного термического расширения стали и кремния приводит к предварительной деформации сжатия тензорезистора при остывании конструкции. Эксперименты показывают, что приклейка тензорезисторов на сталь клеем с температурой полимеризации 180 °C приводит к предварительной деформации, равной $\varepsilon_T = -1\cdot 10^{-3}$ отн.единиц. На рис.20 пунктирной линией показано изменение $\rho_\varepsilon / \rho_0$ вследствие такой деформации. Пунктирная кривая может проходить при некоторой температуре через точки перегиба зависимостей $\rho_\varepsilon / \rho_0 = f(\varepsilon)$; в этом случае $S = S_{max}$ и на кривой зависимости коэффициента тензочувствительности от температуры появляется максимум. Такой максимум наблюдается при температурах жидкого азота.

В условиях, когда температура при измерениях остается постоянной, коэффициент нелинейности в точке перегиба равен нулю. Это обстоятельство может оказаться полезным в практических применениях, тем более, что деформацию сжатия можно задавать по желанию, приклеивая тензорезистор на предварительно деформированную поверхность или используя для приклейки цемент с другой температурой полимеризации.

Из приведенного выше качественного описания следует, что полупроводниковые тензорезисторы являются весьма сложными измерительными приборами.

Для вырожденного кремния и германия зависимость удельного сопротивления от деформации также определяется формулами (130) и (134). Коэффициент A в этом случае равен

$$A = \frac{F_{1/2}\left(\mu_0^* - \varepsilon_{c0}^* + \delta\mu^* - \delta\varepsilon_c^{*(2)}\right)}{F_{1/2}\left(\mu_0^* - \varepsilon_{c0}^* + \delta\mu^* - \delta\varepsilon_c^{*(1)}\right)}.$$

Как видно, в A не сокращаются ни $\mu_0^* - \varepsilon_{c0}^*$, ни $\delta\mu^*$. Процедура расчета в этом случае существенно усложняется.

1. Решается уравнение нейтральности для недеформированного кристалла. Это трансцендентное уравнение относительно $\mu_0^* - \varepsilon_{c0}^*$ решается либо на ЭВМ, либо графически с использованием таблиц интегралов Ферми [8].

2. Решается трансцендентное уравнение нейтральности для деформированного кристалла относительно $\delta\mu$:

$$F_{1/2}(\mu_o^* - \mathcal{E}_{co}^*) = \frac{1}{\nu}\sum_{i=1}^{\nu} F_{1/2}(\mu_o^* - \mathcal{E}_{co}^* + \delta\mu^* - \delta\mathcal{E}_c^{*i})$$

по ранее найденным значениям $\mu_o^* - \mathcal{E}_{co}^*$ и величинам смещений минимумов $\delta\mathcal{E}_c^{(1)}$ и $\delta\mathcal{E}_c^{(2)}$.

3. Определяется величина A, затем $\rho_\mathcal{E}/\rho_o$. Графическим или машинным дифференцированием $\rho_\mathcal{E}/\rho_o = f(\mathcal{E})$ находятся линейные и квадратичные коэффициенты тензочувствительности, их температурные, концентрационные и деформационные зависимости.

Реальные проблемы полупроводниковой тензометрии неизмеримо сложнее предложенной в данном пособии модели, которая, естественно, дает только качественное описание эффекта.

Теоретические вопросы тензорезистивного эффекта в полупроводниках изложены в книге [13] ; результаты экспериментальных исследований - в межвузовских сборниках научных трудов НЭТИ и НГУ "Полупроводниковая тензометрия" за 1968-1993 гг., к которым и отсылаются заинтересованные читатели.

Литература

1. Мусхелишвили Н.И. Аналитическая геометрия. - М.; Л.: Гостехиздат, 1947.

2. Ориентация слитков методом световых фигур: Метод. руководство / Сост. Р.П.Дикарева. - Новосиб. электротехн. ин-т. - Новосибирск, 1981.

3. Файнштейн С.М. Обработка поверхности полупроводниковых приборов. - М.; Л.: Энергия, 1966.

4. Джеймс Б., Энджелл, Стефан С. Терри, Филипп У. Барт. В мире науки. - М.: Мир, 1983. - № 6.

5. Андре Анго. Математика для электро- и радиоинженеров. - М.: Физматгиз, 1965.

6. Най Дж. Физические свойства кристаллов. - М.: И.Л., 1960. 1960.

7. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. - М.; Л.: Физматгиз, 1962.

8. Блекмор Дж. Статистика электронов в полупроводниках. - М.: Мир, 1964.

9. T.J.Thomas Proceedings of the National Academy of Sciences of USA v.55 P.2359, 1966.

10. Механика сплошной (анизотропной) среды: Метод указания / Л.М.Минкевич. - Новосиб. электротехн. ин-т. - Новосибирск, 1973.

11. Проблемы физики полупроводников / Под ред. В.Л.Бонч-Бруевича. - М.: И.Л., 1957.

12. Шадрин В.С., Городецкий А.Ф. ФТТ, 1963. - № 11. - С.3081.

13. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. - М.: Физматгиз, 1972.

Владимир Степанович Шадрин

ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА.
ТЕНЗОРЕЗИСТИВНЫЙ ЭФФЕКТ В МНОГОДОЛИННЫХ
ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Учебное пособие

Редактор Л.Н.Ветчакова

Подписано в печать 18 октября 1993 г. Формат 84 х 60 х 1/16.
Бумага оберточная. Тираж 150 экз. Усл.печ.л.5,25. Уч.-изд.л.4,6.
Изд. № 259. Заказ № 817 С(41)

Отпечатано на участке оперативной полиграфии
Новосибирского государственного технического университета
630092, г.Новосибирск, пр.К.Маркса