



# 新型负微分电阻分子器件 和铌酸锂型铁电体 $\text{ZnTiO}_3$ 的 物性研究

XINXING FUWEIFEN DIANZU FENZI QIJIAN  
HE NISUANLIXING TIEDIANTI  $\text{ZnTiO}_3$  DE  
WUXING YANJIU

张 静 著



中国水利水电出版社  
www.waterpub.com.cn

# 新型负微分电阻分子器件 和铌酸锂型铁电体 $\text{ZnTiO}_3$ 的 物性研究

张 静 著



中国水利水电出版社  
[www.waterpub.com.cn](http://www.waterpub.com.cn)

· 北京 ·

## 内 容 提 要

近年来,新型负微分电阻分子器件和铁电材料引起了科研工作者的注意,该类功能材料可以广泛应用于自旋过滤、负微分电阻、非线性光学和自旋极化电输运器件等方面。

本书采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,对于新型铌酸锂性铁电体  $\text{ZnTiO}_3$  的铁电、压电和非线性光学等方面的物性,进行了系统的研究。此外,对于吡啶分子,也考察了其自旋极化输运性质,结果显示其呈现了有趣的负微分电阻和自旋过滤效应。

本书可供负微分电阻分子材料和铁电晶体的专业研究人员和从业人员参考使用。

## 图书在版编目(CIP)数据

新型负微分电阻分子器件和铌酸锂型铁电体  $\text{ZnTiO}_3$  的物性研究/张静著. —北京:中国水利水电出版社, 2018. 12

ISBN 978-7-5170-7297-3

I. ①新… II. ①张… III. ①电阻—器件—研究  
IV. ①O441. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 293162 号

书 名	新型负微分电阻分子器件和铌酸锂型铁电体 $\text{ZnTiO}_3$ 的物性研究 XINXING FUWEIFEN DIANZU FENZI QIJIAN HE NISUANLIXING TIEDIANTI $\text{ZnTiO}_3$ DE WUXING YANJIU
作 者	张 静 著
出版发行	中国水利水电出版社 (北京市海淀区玉渊潭南路 1 号 D 座 100038) 网址:www.waterpub.com.cn E-mail:sales@waterpub.com.cn
经 售	电话:(010)68367658(营销中心) 北京科水图书销售中心(零售) 电话:(010)88383994、63202643、68545874 全国各地新华书店和相关出版物销售网点
排 版	北京亚吉飞数码科技有限公司
印 刷	三河市元兴印务有限公司
规 格	170mm×240mm 16 开本 12.25 印张 220 千字
版 次	2019 年 4 月第 1 版 2019 年 4 月第 1 次印刷
印 数	0001—2000 册
定 价	57.00 元

凡购买我社图书,如有缺页、倒页、脱页的,本社营销中心负责调换

版权所有·侵权必究

# 前 言

近年来,负微分电阻分子材料和铁电化合物由于它们具有的重要的电荷输运和非线性光学性质,吸引了人们广泛的研究兴趣。负微分电阻一般是指 n 型的 GaAs 和 InP 等双能谷半导体中由于电子转移效应(Transferred-electron effect)而产生的一种效果——电压增大、电流减小所呈现出的电阻。铁电材料具有铁电性、压电性、热释电效应等一系列重要的特性,在铁电存储器、微电子机械系统等领域具有广泛的应用前景。基于密度泛函理论方法,研究了铈酸锂型  $\text{ZnTiO}_3$  的铁电相关的基本性质,具体研究工作如下:在这项工作中,通过基于 DFT 的第一性原理计算研究了 LN 型  $\text{ZnTiO}_3$  的电子结构,区域中心声子模式,压电和非线性光学性质。电子结构表明该化合物是宽带隙半导体。通过研究顺电相和铁电相的区域中心声子模式,发现钙钛矿顺电相中存在  $B_{2u}$  和  $B_{3u}$  有两个虚频,然而虚频在其铁电相中消失。基于 LDA 和 GGA 计算得到的自发极化分别为  $90.43\mu\text{C}/\text{cm}^2$  和  $93.14\mu\text{C}/\text{cm}^2$ ,我们的结果与实验结果吻合良好,大的自发极化表明该化合物是一种良好的铁电材料。

铈酸锂型  $\text{ZnTiO}_3$  的弹性常数满足波恩稳定条件的限制,因此该化合物的结构稳定。得到的压电张量具有四个独立元素  $e_{11}$ ,  $e_{15}$ ,  $e_{31}$  和  $e_{33}$ ,它们的值分别为  $-0.93$ ,  $1.00$ ,  $1.01$  和  $2.51\text{ C}/\text{m}^2$ ,表明该化合物是一种有前途的压电晶体。该化合物的独立非线性光学系数为  $d_{12}$ ,  $d_{15}$  和  $d_{33}$ ,它们的值分别为  $1.37$ ,  $1.46$  和  $-20.18\text{ Pm}/\text{V}$ 。结果表明,铈酸锂型  $\text{ZnTiO}_3$  比  $\text{ZnSnO}_3$  具有更优异的非线性光学性质。大的压电和非线性光学敏感性表明该化合物是一种高性能的无铅压电和非线性光学晶体。

我们研究了夹在两个金电极之间的基于吡啶的“基团- $\sigma$ -基团”分子自旋电子器件的自旋极化传输特性。该器件对平行和反平行磁性配置均显示出明显的自旋过滤和负微分电阻效应。该装置还显示出明显的磁阻效应并且发现异常现象,具体地说,磁阻比率首先增加然后随着偏压而减小。这些传输特性起源于由偏置驱动的费米能级周围分子轨道的轨道重建。对于平行磁性配置,随着偏压的增加,离域前沿分子轨道被耗尽为局部轨道。对于反平行磁性配置,局部前沿分子轨道首先被推动到离域轨道中,然后随着偏

差进一步增加而逐渐耗尽到局部轨道。该研究为设计未来的高性能多功能分子自旋电子器件提供了很大的希望。

本书共 6 章,第 1 章绪论,第 2 章为材料模拟计算的基本理论研究方法,第 3 章为铌酸锂型  $\text{ZnTiO}_3$  的铁电和光学性质研究,第 4 章为基于吡啶基的分子自旋电子器件的输运性质研究,第 5 章为“鳄鱼夹”型负微分电阻分子材料的输运性质研究,第 6 章为总结与国内外最新的研究进展。

本书作者张静系华北水利水电大学现任物理教师,在本书的编写过程中得到了物理与电子学院领导的指导和大力支持。本人所在物理实验教研室的老师也给与了很大的帮助,在此表示衷心的感谢!本书的出版得到了国家自然科学基金项目(11104072)的支持,在此表示感谢!由于本人水平有限,本书的错误和不妥之处在所难免,敬请专家及同行提出批评和指正。

张静

于华北水利水电大学

2018 年 9 月

# 目 录

前言

第 1 章 绪 论	1
1.1 铁电晶体的基本概念	1
1.2 铁电晶体的应用和研究进展	4
1.3 负微分电子分子材料的基本概念和应用	37
第 2 章 材料模拟计算的基本理论研究方法	47
2.1 密度泛函(微扰)理论	47
2.2 赝势平面波和全势线性缀加平面波方法	63
第 3 章 铈酸锂型 $\text{ZnTiO}_3$ 的铁电和光学性质研究	81
3.1 $\text{ZnTiO}_3$ 的晶体结构和计算参数	81
3.2 $\text{ZnTiO}_3$ 的铁电性质研究	84
3.3 $\text{ZnTiO}_3$ 的压电性质研究	89
3.4 $\text{ZnTiO}_3$ 的非线性光学性质研究	90
3.5 本章小结	93
第 4 章 基于吡啶基的分子自旋电子器件的输运性质研究	95
4.1 吡啶基分子器件的简介和计算参数	97
4.2 吡啶基分子自旋电子器件的输运性质研究	101
4.3 本章小结	105
第 5 章 “鳄鱼夹”型负微分电阻分子材料的输运性质研究	106
5.1 “鳄鱼夹”型负微分电阻分子材料的计算参数	110
5.2 “鳄鱼夹”型负微分电阻分子材料的输运性质研究	112
5.3 本章小结	114
第 6 章 总结与展望	116
6.1 总结	116
6.2 国内外最新的研究进展	117
参考文献	183

# 第 1 章 绪 论

## 1.1 铁电晶体的基本概念

铁电性(ferroelectricity)是某些介电晶体所具有的性质。在一些电介质晶体中,晶胞的结构使正负电荷中心不重合而出现电偶极矩,产生不等于零的电极化强度,使晶体具有自发极化,且电偶极矩方向可以因外电场而改变,呈现出类似于铁磁体的特点,晶体的这种性质叫铁电性。在一些电介质晶体中,晶体的极化程度与电场强度呈现出非线性关系。由于极化程度与电场强度的关系曲线与铁磁体的磁滞回线形状类似,所以人们把这类晶体称为铁电体(其实晶体中并不含有铁)。

1894年泡克耳斯(Pockels)发现罗息盐具有异常大的压电常数,1920年瓦拉塞克(Valasek)发现罗息盐晶体(斜方晶系)铁电电滞回线,又于1935年和1942年分别发现了磷酸二氢钾( $\text{KH}_2\text{PO}_4$ )及其类似晶体中的铁电性、钛酸钡( $\text{BaTiO}_3$ )陶瓷的铁电性。迄今为止,已发现的具有铁电性的材料有一千多种。通常,铁电体自发极化的方向不相同,但在一个小区域内,各晶胞的自发极化方向相同,这个小区域就称为铁电畴(ferroelectric domains)。两畴之间的界壁称为畴壁,根据两个电畴的自发极化方向,可分为 $90^\circ$ 畴壁、 $180^\circ$ 畴壁等。畴壁通常位于晶体缺陷附近,因为缺陷区存在内应力,畴壁不易移动。铁电畴与铁磁畴有着本质的差别:①铁电畴壁的厚度很薄,大约是几个晶格常数的量级,但铁磁畴壁则很厚,可达到几百个晶格常数的量级(例如Fe的磁畴壁厚约1000);②在磁畴壁中自发磁化方向可逐步改变,而铁电体则不可能。

一般来说,如果铁电晶体种类已经明确,则其畴壁的取向就可确定。电畴壁的取向可由下列条件来确定:①晶体形变:电畴形成的结果使得沿畴壁而切割晶体所产生的两个表面是等同的(即使考虑了自发形变)。②自发极化:两个相邻电畴的自发极化在垂直于畴壁方向的分量相等。如果条件①不满足,则电畴结构会在晶体中引起大的弹性应变。若条件②不满足,则在



畴壁上会出现表面电荷,从而增大静电能,在能量上是不稳定的。电畴结构与晶体结构有关。 $\text{BaTiO}_3$  的铁电相晶体结构有四方、斜方、菱形三种晶系,它们的自发极化方向分别沿 $[001]$ 、 $[011]$ 、 $[111]$ 方向,这样,除了 $90^\circ$ 和 $180^\circ$ 畴壁外,在斜方晶系中还有 $60^\circ$ 和 $120^\circ$ 畴壁,在菱形晶系中还有 $71^\circ$ 、 $109^\circ$ 畴壁。

铁电畴在外电场作用下,总是要趋向于与外电场方向一致,称作电畴“转向”。电畴转向是在外电场作用下通过新畴的出现、发展以及畴壁的移动来实现。实验发现,在电场作用下, $180^\circ$ 畴的“转向”是通过许多尖劈形新畴的出现、发展而实现的,尖劈形新畴迅速沿前端向前发展。对 $90^\circ$ 畴的“转向”虽然也产生针状电畴,但主要是通过 $90^\circ$ 畴壁的侧向移动来实现。实验证明,这种侧向移动所需要的能量比产生针状新畴所需要的能量还要低。一般在外电场作用下(人工极化), $180^\circ$ 电畴转向比较充分,同时由于“转向”时结构畸变小,内应力小,因而这种转向比较稳定。而 $90^\circ$ 电畴的转向是不充分的,所以这种转向不稳定。当外加电场撤去后,有小部分电畴偏离极化方向,恢复原位,大部分电畴则停留在新转向的极化方向上,这叫剩余极化。

具有铁电性的晶体可按照结晶状态、极化轴、相态、微观结构、维度模型等标准进行分类。结晶状态:含有氢键的晶体,如磷酸二氢钾(KDP)、三甘氨酸硫酸盐(TGS)、罗息盐(RS)等,这类晶体通常是从水溶液中生长出来的,故常被称为水溶性铁电体,又叫软铁电体;双氧化物晶体,如 $\text{BaTiO}_3$  ( $\text{BaO-TiO}_2$ )、 $\text{KNbO}_3$  ( $\text{K}_2\text{O-Nb}_2\text{O}_5$ )、 $\text{LiNbO}_3$  ( $\text{Li}_2\text{O-Nb}_2\text{O}_5$ )等,这类晶体是从高温熔体或熔盐中生长出来的,又称为硬铁电体,它们可以归结为 $\text{ABO}_3$ 型, $\text{Ba}^{2+}$ 、 $\text{K}^+$ 、 $\text{Na}^+$ 离子处于A位置,而 $\text{Ti}^{4+}$ 、 $\text{Nb}^{5+}$ 、 $\text{Ta}^{5+}$ 离子则处于B位置。极化轴:沿一个晶轴方向极化的铁电体,如罗息盐(RS)、KDP等;沿几个晶轴方向极化的铁电晶体,如 $\text{BaTiO}_3$ 、 $\text{Cd}_2\text{Nb}_2\text{O}_7$ 等。非铁电相无对称中心:钽铌酸钾(KTN)和磷酸二氢钾(KDP)族的晶体,由于无对称中心的晶体一般是压电晶体,故它们都是具有压电效应的晶体;非铁电相有对称中心:不具有压电效应,如 $\text{BaTiO}_3$ 、TGS(硫酸三甘肽)以及与它们具有相同类型的晶体。位移型转变的铁电体:这类铁电晶体的转变是与一类离子的亚点阵相对于另一亚点阵的整体位移相联系。属于位移型铁电晶体的有 $\text{BaTiO}_3$ 、 $\text{LiNbO}_3$ 等含氧的八面体结构的双氧化物;有序-无序型转变的铁电体:其转变是同离子个体的有序化相联系的,有序-无序型铁电体包含有氢键的晶体,这类晶体中质子的运动与铁电性有密切关系,如磷酸二氢钾(KDP)及其同型盐就是如此。维度模型:“一维型”——铁电体极性反转时,其每一个原子的位移平行于极轴,如 $\text{BaTiO}_3$ ;“二维型”——铁电体极性反转



时,各原子的位移处于包含极轴的平面内,如  $\text{NaNO}_2$ ;“三维型”——铁电体极性反转时,在所有三维方向具有大小相近的位移,如  $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 。

对铁电体的初步认识是它具有自发极化。铁电体有上千种,不可能都具体描述其自发极化的机制,但可以说自发极化的产生机制与铁电体的晶体结构密切相关。其自发极化的出现主要是晶体中原子(离子)位置变化的结果。已经查明,自发极化机制有:氧八面体中离子偏离中心的运动;氢键中质子运动有序化;氢氧根集团择优分布;含其他离子集团的极性分布等。一般情况下,自发极化包括两部分:一部分来源于离子直接位移;另一部分是由于电子云的形变,其中,离子位移极化占总极化的 39%。当前关于铁电相起源,特别是对位移式铁电体的理解已经发展到从晶格振动频率变化来理解其铁电相产生的原理,即所谓“软模理论”。

电滞回线(ferroelectric hysteresis loop)(见图 1.1)是铁电畴在外电场作用下运动的宏观描述。铁电体的极化随着电场的变化而变化,极化强度与外加电场之间呈非线性关系。当电场施加于晶体时,沿电场方向的电畴扩展,晶体极化程度变大,而与电场反平行方向的电畴则变小,这样,极化强度随外电场增加而增加。在电场很弱时,极化线性地依赖于电场,此时可逆的畴壁移动占主导地位。当电场增强时,新畴成核,畴壁运动成为不可逆的,极化随电场的增加比线性快。当电场强度继续增大,达到相应于  $B$  点的值,使晶体电畴方向都趋于电场方向,类似于单畴,极化强度趋于饱和。由于感应极化的增加,总极化仍然有所增加( $BC$ 段)。此时再增加电场, $P$ 与 $E$ 呈线性关系(类似于单个弹性偶极子),将这线性部分外推至 $E=0$ 时的情况,此时在纵轴上的截距称为饱和极化强度或自发极化强度 $P_s$ 。实际上 $P_s$ 为原来每个单畴的自发极化强度,是对每个单畴而言的。如果电场从图 1.1 中  $C$  处开始降低,晶体的极化强度亦随之减小。在零电场处,仍存在极化,称为剩余极化强度 $P_r$ (remanent polarization)。这是因为电场减低时,部分电畴由于晶体内应力的作用偏离了极化方向。但当 $E=0$ 时,大部分电畴仍停留在极化方向,因而宏观上还有剩余极化强度。由此,剩余极化强度 $P_r$ 是对整个晶体而言。当反向电场继续增大到某一值时,剩余极化才全部消失,此时电场强度称为矫顽场 $E_c$ (coercive field)。反向电场超过 $E_c$ ,极化强度才开始反向。如果它大于晶体的击穿场强,那么在极化强度反向前,晶体就被击穿,则不能说该晶体具有铁电性。以上过程使电场在正负饱和值之间循环一周,极化与电场的关系如图 1.1 所示,此曲线称为电滞回线。

由于极化的非线性,铁电体的介电常数不是常数。一般以  $OA$  在原点的斜率来代表介电常数。所以在测量介电常数时,所加的外电场(测试电

场)应很小。另外,有一类物体在转变温度以下时,邻近的晶胞彼此沿反平行方向自发极化,这类晶体叫反铁电体。反铁电体一般宏观无剩余极化强度,但在很强的外电场作用下,可以诱导成铁电相,其  $P-E$  曲线呈双电滞回线。反铁电体也具有临界温度-反铁电居里温度。在居里温度附近,也具有介电反常特性。

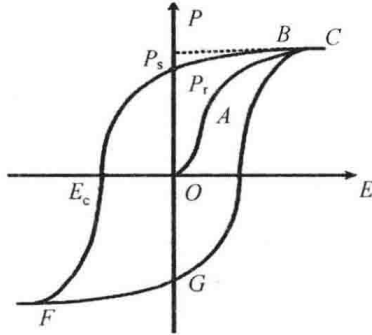


图 1.1 电滞回线示意图

## 1.2 铁电晶体的应用和研究进展

铁电体具有以下介电特性:

1)非线性。铁电体的非线性是指介电常数随外加电场强度非线性地变化。从电滞回线也可看出这种非线性关系。在工程中,常采用交流电场强度  $E_{max}$  和非线性系数  $N$  来表示材料的非线性。非线性的影响因素主要是材料结构。可以用电畴的观点来分析非线性。当所有电畴都沿外电场方向排列定向时,极化达到最大值。在低电场强度作用下,电畴转向主要取决于  $90^\circ$  和  $180^\circ$  畴壁的位移。

2)高介电常数。钙钛矿型铁电体具有很高的介电常数。纯钛酸钡陶瓷的介电常数在室温时约 1 400;而在居里点( $20^\circ\text{C}$ )附近,介电常数增加很快,可高达 6 000~10 000。室温下  $\epsilon_r$  随温度变化比较平坦,可以用来制造小体积大容量的陶瓷电容器。为了提高室温下材料的介电常数,可添加其他钙钛矿型铁电体,形成固溶体。在实际制造中需要解决调整居里点和居里点处介电常数的峰值问题,这就是所谓“移峰效应”和“压峰效应”。压峰效应是为了降低居里点处的介电常数的峰值,即降低  $\epsilon-T$  非线性,也使工作状态相应于  $\epsilon-T$  平缓区。例如,在  $BaTiO_3$  中加入  $CaTiO_3$  可使居里峰值下降。常用的压峰剂(或称展宽剂)为非铁电体。如在  $BaTiO_3$  加入  $Bi_{2/3}SnO_3$ ,其居里点几乎完全消失,显示出直线性的温度特性,可认为是加入非

铁电体后,破坏了原来的内电场,使自发极化减弱,即铁电性减小。在铁电体中引入某种添加物生成固溶体,改变原来的晶胞参数和离子间的相互联系,使居里点向低温或高温方向移动,这就是“移峰效应”。其目的是为了在工作情况下(室温附近)材料的介电常数和温度的关系尽可能平缓,即要求居里点远离室温温度,如加入  $\text{PbTiO}_3$  可使  $\text{BaTiO}_3$  居里点升高。陶瓷材料晶界特性的重要性不亚于晶粒本身的特性。例如  $\text{BaTiO}_3$  铁电材料,由于晶界效应,可以表现出各种不同的半导体特性。

基于铁电性中的电滞现象,可利用铁电畴在电场下反转形成高极化电荷,或无反转形成低极化电荷来判别存储单元是在“1”或“0”状态,进而制作铁电存储器。由于铁电体有剩余极化强度,因而可用于图像显示。当前已经研制出一些透明铁电陶瓷器件,如显示器件、光阀、全息照相器件等,就是利用外加电场使铁电畴作一定的取向。当前得到应用的是掺镧的锆钛酸铅(PLZT)透明铁电陶瓷以及  $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$  铁电薄膜。由于铁电体的极化随  $E$  而改变。因而晶体的折射率也将随  $E$  改变。这种由于外电场引起晶体折射率的变化称为电光效应。利用晶体的电光效应可制作光调制器、晶体光阀、电光开关等光器件。当前应用到激光技术中的晶体很多是铁电晶体,如  $\text{LiNbO}_3$ 、 $\text{LiTaO}_3$ 、KTN(钽铌酸钾)等。强非线性铁电陶瓷可以用于制造电压敏感元件、介质放大器、脉冲发生器、稳压器、开关、频率调制等方面。已获得应用的材料有  $\text{BaTiO}_3$ - $\text{BaSnO}_3$ 、 $\text{BaTiO}_3$ - $\text{BaZrO}_3$  等。

非中心对称晶体在机械力作用下产生形变,使带电质点发生相对位移,从而在晶体表面出现正、负束缚电荷,这样的晶体称为压电晶体。压电晶体极轴两端产生电势差的性质称为压电性。有一类十分有趣的晶体,当对它挤压或拉伸时,它的两端就会产生不同的电荷。这种效应被称为压电效应。能产生压电效应的晶体就叫压电晶体。水晶( $\alpha$ -石英)是一种有名的压电晶体。常见的压电晶体还有闪锌矿、方硼石、电气石、红锌矿、GaAs、钛酸钡及其衍生结构晶体、 $\text{KH}_2\text{PO}_4$ 、 $\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (罗息盐)、食糖等。压电晶体是用量仅次于单晶硅的电子材料,用于制造选择和控制频率的电子元器件,广泛应用于电子信息产业各领域,如彩电、空调、电脑、DVD、无线电通信等,尤其在高性能电子设备及数字化设备中的应用日益广泛。低腐蚀隧道密度压电晶体是生产 SMD 频率片、手机频率片的必需材料。压电晶体产品品种主要有 Z 棒、Y 棒、厚度片、频率片。某些晶体,当沿着一定方向受到外力作用时,内部会产生极化现象,使带电质点发生相对位移,从而在晶体表面上产生大小相等符号相反的电荷;当外力去掉后,又恢复到不带电状态。晶体受力所产生的电荷量与外力的大小成正比。这种现象叫压电效应。反之,如对晶体施加电场,晶体将在一定方向上产生机械变形;当外加

电场撤去后,该变形也随之消失。这种现象称为逆压电效应,也称作电致伸缩效应。压电性产生的原因与晶体结构有关。原本重合的正、负电荷重心受压后产生分离而形成电偶极子,从而使晶体特定方向的两端带有符号不同的电荷量。压电晶体的共同特点是晶体点群(对称型)没有对称中心。晶体的 32 个点群中,21 个点群不具有对称中心,但点群 432 的晶体不显压电性,故有 20 个点群的晶体具有压电性。

根据晶振的功能和实现技术的不同,压电晶体广泛用作晶体振荡器。石英晶体振荡器分非温度补偿式晶体振荡器、温度补偿晶体振荡器(TCXO)、电压控制晶体振荡器(VCXO)、恒温控制式晶体振荡器(OCXO)和数字化/ $\mu\text{P}$ 补偿式晶体振荡器(DCXO/MCXO)等几种类型。普通晶体振荡器(SPXO):这是一种简单的晶体振荡器,通常称为钟振,其工作原理为去除“压控”“温度补偿”部分,完全是由晶体的自由振荡完成。这类晶振主要应用于稳定度要求不高的场合。压控晶体振荡器(VCXO):这是根据晶振是否带压控功能来分类,带压控输入引脚的一类晶振叫 VCXO。恒温晶体振荡器(OCXO):这类型晶振对温度稳定性的解决方案采用了恒温槽技术,将晶体置于恒温槽内,通过设置恒温工作点,使槽体保持恒温状态,在一定范围内不受外界温度影响,达到稳定输出频率的效果。这类晶振主要用于各种类型的通信设备,包括交换机、SDH 传输设备、移动通信直放机、GPS 接收机、电台、数字电视及军工设备等领域。根据用户需要,该类型晶振可以带压控引脚。恒温晶体振荡器原理的主要优点是,由于采用了恒温槽技术,频率温度特性在所有类型晶振中是最好的,由于电路设计精密,其短稳和相位噪声都较好。主要缺点是功耗大、体积大,需要 5 min 左右的加热时间才能正常工作等。温度补偿晶体振荡器(TCXO):其对温度稳定性的解决方案采用了一些温度补偿手段,主要原理是通过感应环境温度,将温度信息做适当变换后控制晶振的输出频率,达到稳定输出频率的效果。传统的 TCXO 是采用模拟器件进行补偿,随着补偿技术的发展,很多数字化补偿的 TCXO 开始出现,这种数字化补偿的 TCXO 又叫 DTCXO,用单片机进行补偿时称之为 MCXO,由于采用了数字化技术,这一类型的晶振在温度特性上达到了很高的精度,并且能够适应更宽的工作温度范围,主要应用于军工领域和使用环境恶劣的场合。

压电晶体所能产生的稳定不变的振动正是无线电技术中控制频率所必需的。家中的彩色电视机等许多电器设备中都有用压电晶片制作的滤波器,保证了图像和声音的清晰度。手上戴的石英电子表中有一个核心部件叫石英振子,就是这个关键部件保证了石英表比其他机械表更高的走时准确度。装有压电晶体元件的仪器使技术人员研究蒸汽机、内燃机及各种化

工设备中压力的变化成为现实。利用压电晶体甚至可以测量管道中流体的压力、大炮炮筒在发射炮弹时承受的压力以及炸弹爆炸时的瞬时压力等。压电晶体还广泛应用于声音的再现、记录和传送。安装在麦克风上的压电晶片会把声音的振动转变为电流的变化。声波一碰到压电薄片,就会使薄片两端电极上产生电荷,其大小和符号随着声音的变化而变化。这种压电晶片上电荷的变化,再通过电子装置,可以变成无线电波传到遥远的地方。这些无线电波为收音机所接收,并通过安放在收音机喇叭上的压电晶体薄片的振动,又变成声音回荡在空中。是不是可以这样说,麦克风中的压电晶片能“听得见”声音,而扬声器上的压电晶体薄片则会“说话”或“唱歌”。

传感器(transducer/sensor)是一种检测装置,能感受到被测量的信息,并能将感受到的信息按一定规律转换成电信号或其他所需形式的信息输出,以满足信息的传输、处理、存储、显示、记录和控制等要求。传感器的特点包括微型化、数字化、智能化、多功能化、系统化、网络化。传感器的存在和发展,让物体有了触觉、味觉和嗅觉,让物体慢慢活了起来。通常根据其基本感知功能分为热敏元件、光敏元件、气敏元件、力敏元件、磁敏元件、湿敏元件、声敏元件、放射线敏感元件、色敏元件和味敏元件等十大类。国家标准《传感器通用术语》(GB7665—1987)对传感器下的定义是:“能感受规定的被测量件并按照一定的规律(数学函数法则)转换成可用信号的器件或装置,通常由敏感元件和转换元件组成”。“传感器”在新韦式大词典中定义为:“从一个系统接受功率,通常以另一种形式将功率送到第二个系统中的器件。”人们为了从外界获取信息,必须借助于感觉器官。而单靠人们自身的感觉器官,在研究自然现象和规律以及生产活动中它们的功能远远不够。为适应这种情况,就需要传感器。因此可以说,传感器是人类五官的延伸,又称之为电五官。

新技术革命的到来,世界开始进入信息时代。在利用信息的过程中,首先要解决的就是要获取准确可靠的信息,而传感器是获取自然和生产领域中信息的主要途径与手段。在现代工业生产尤其是自动化生产过程中,要用各种传感器来监视和控制生产过程中的各个参数,使设备工作在正常状态或最佳状态,并使产品达到最好的质量。因此可以说,没有众多的优良的传感器,现代化生产也就失去了基础。在基础学科研究中,传感器更具有突出的地位。现代科学技术的发展,进入了许多新领域:例如在宏观上要观察上千光年的茫茫宇宙,微观上要观察小到微小的粒子世界,纵向上要观察长达数十万年的天体演化,短到瞬间反应。此外,还出现了对深化物质认识、开拓新能源、新材料等具有重要作用的各种极端研究技术,如超高温、超低温、超高压、超高真空、超强磁场、超弱磁场等等。显然,要获取大量人类感

官无法直接获取的信息,没有相适应的传感器是不可能的。许多基础科学研究的障碍,首先就在于对象信息的获取存在困难,而一些新机理和高灵敏度的检测传感器的出现,往往会导致该领域内的突破。一些传感器的发展,往往是一些边缘学科开发的先驱。传感器早已渗透到诸如工业生产、宇宙开发、海洋探测、环境保护、资源调查、医学诊断、生物工程、甚至文物保护等领域。可以毫不夸张地说,从茫茫的太空,到浩瀚的海洋,以至各种复杂的工程系统,几乎每一个现代化项目,都离不开各种各样的传感器。由此可见,传感器技术在发展经济、推动社会进步方面有重要作用。世界各国都十分重视传感器技术的发展。相信不久的将来,传感器技术将会出现一个飞跃,达到与其重要地位相称的新水平。传感器不仅促进了传统产业的改造和更新换代,而且还可能建立新型工业,成为 21 世纪新的经济增长点。传感器的微型化是建立在微电子机械系统(MEMS)技术基础上的,已成功应用在硅器件上做成硅压力传感器。

传感器一般由敏感元件、转换元件、变换电路和辅助电源四部分组成,如图 1.2 所示。敏感元件直接感受被测量,并输出与被测量有确定关系的物理量信号;转换元件将敏感元件输出的物理量信号转换为电信号;变换电路负责对转换元件输出的电信号进行放大调制;转换元件和变换电路一般还需要辅助电源供电。



图 1.2 传感器的组成

常将传感器的功能与人类的 5 大感觉器官相比拟:光敏传感器/视觉,声敏传感器/听觉,气敏传感器/嗅觉,化学传感器/味觉,压敏、温敏传感器、流体传感器/触觉。敏感元件的分类:物理类,基于力、热、光、电、磁和声等物理效应;化学类,基于化学反应的原理;生物类,基于酶、抗体和激素等分子识别功能。

电阻式传感器是将被测量,如位移、形变、力、加速度、湿度、温度等这些物理量转换成电阻值的一种器件,主要有电阻应变式、压阻式、热电阻、热敏、气敏、湿敏等电阻式传感器件。变频功率传感器通过对输入的电压、电流信号进行交流采样,再将采样值通过电缆、光纤等传输系统与数字量输入二次仪表相连,数字量输入二次仪表对电压、电流的采样值进行运算,可以获取电压有效值、电流有效值、基波电压、基波电流、谐波电压、谐波电流、有功功率、基波功率、谐波功率等参数。称重传感器是一种能够将重力转变为



电信号的力-电转换装置,是电子衡器的一个关键部件,能够实现力-电转换的传感器有多种,常见的有电阻应变式、电磁力式和电容式等。电磁力式主要用于电子天平,电容式用于部分电子吊秤,而绝大多数衡器产品所用的还是电阻应变式称重传感器。电阻应变式称重传感器结构简单,准确度高,适用面广,能够在相对比较差的环境下使用,因此电阻应变式称重传感器在衡器中得到了广泛的运用。

传感器中的电阻应变片具有金属的应变效应,即在外力作用下产生机械形变,从而使电阻值随之发生相应的变化。电阻应变片主要有金属和半导体两类,金属应变片有金属丝式、箔式、薄膜式之分。半导体应变片具有灵敏度高(通常是丝式、箔式的几十倍)、横向效应小等优点。压阻式传感器是根据半导体材料的压阻效应在半导体材料的基片上经扩散电阻而制成的器件,其基片可直接作为测量传感元件,扩散电阻在基片内接成电桥形式。当基片受到外力作用而产生形变时,各电阻值将发生变化,电桥就会产生相应的不平衡输出。用作压阻式传感器的基片(或称膜片)材料主要为硅片和锗片,硅片为敏感材料而制成的硅压阻传感器越来越受到人们的重视,尤其是以测量压力和速度的固态压阻式传感器应用最为普遍。

热电阻测温是基于金属导体的电阻值随温度的增加而增加这一特性来进行温度测量的。热电阻大都由纯金属材料制成,目前应用最多的是铂和铜,此外,已开始采用镍、锰和铑等材料制造热电阻。热电阻传感器主要是利用电阻值随温度变化而变化这一特性来测量温度及与温度有关的参数。在温度检测精度要求比较高的场合,这种传感器比较适用。较为广泛的热电阻材料为铂、铜、镍等,它们具有电阻温度系数大、线性好、性能稳定、使用温度范围宽、加工容易等特点,用于测量 $-200\sim 500^{\circ}\text{C}$ 范围内的温度。热电阻传感器分类:①NTC热电阻传感器。该类传感器为负温度系数传感器,即传感器阻值随温度的升高而减小。②PTC热电阻传感器。该类传感器为正温度系数传感器,即传感器阻值随温度的升高而增大。

利用激光技术进行测量的传感器:它由激光器、激光检测器和测量电路组成。激光传感器是新型测量仪表,它的优点是能够实现无接触远距离测量,速度快,精度高,量程大,抗光、电干扰能力强等。激光传感器工作时,先由激光发射二极管对准目标发射激光脉冲。经目标反射后激光向各方向散射,部分散射光返回到传感器接收器,被光学系统接收后成像到雪崩光电二极管上。雪崩光电二极管是一种内部具有放大功能的光学传感器,因此它能检测极其微弱的光信号,并将其转化为相应的电信号。利用激光的高方向性、高单色性和高亮度等特点可实现无接触远距离测量。激光传感器常用于长度、距离、振动、速度、方位等物理量的测量,还可用于探测和大气污



染物的监测等。

霍尔传感器是根据霍尔效应制作的一种磁场传感器,广泛地应用于工业自动化技术、检测技术及信息处理等方面。霍尔效应是研究半导体材料性能的基本方法。通过霍尔效应实验测定的霍尔系数,能够判断半导体材料的导电类型、载流子浓度及载流子迁移率等重要参数。霍尔传感器分为线性型霍尔传感器和开关型霍尔传感器两种:①线性型霍尔传感器由霍尔元件、线性放大器和射极跟随器组成,它输出模拟量。②开关型霍尔传感器由稳压器、霍尔元件、差分放大器、斯密特触发器和输出级组成,它输出数字量。霍尔电压随磁场强度的变化而变化,磁场越强,电压越高,磁场越弱,电压越低。霍尔电压值很小,通常只有几个毫伏,但经集成电路中的放大器放大,就能使该电压放大到足以输出较强的信号。

若使霍尔集成电路起传感作用,需要用机械的方法来改变磁场强度。用一个转动的叶轮作为控制磁通量的开关,当叶轮叶片处于磁铁和霍尔集成电路之间的气隙中时,磁场偏离集成片,霍尔电压消失。这样,霍尔集成电路的输出电压的变化,就能表示出叶轮驱动轴的某一位置,利用这一工作原理,可将霍尔集成电路片用作点火正时传感器。霍尔效应传感器属于被动型传感器,它要有外加电源才能工作,这一特点使它能检测转速低的运转情况。

1) 室温管温传感器。室温传感器用于测量室内和室外的环境温度,管温传感器用于测量蒸发器和冷凝器的管壁温度。室温传感器和管温传感器的形状不同,但温度特性基本一致。按温度特性划分,美的使用的室温管温传感器有两种类型。常数  $B$  值为  $4\ 100\ K \pm 3\%$ , 基准电阻为  $25^\circ\text{C}$  对应电阻  $10\text{k}\Omega \pm 3\%$ 。在  $0^\circ\text{C}$  和  $55^\circ\text{C}$  对应电阻公差约为  $\pm 7\%$ ; 而  $0^\circ\text{C}$  以下及  $55^\circ\text{C}$  以上,对于不同的供应商,电阻公差会有一定的差别。温度越高,阻值越小;温度越低,阻值越大。离  $25^\circ\text{C}$  越远,对应电阻公差范围越大。

2) 排气温度传感器。排气温度传感器用于测量压缩机顶部的排气温度,常数  $B$  值为  $3\ 950\ K \pm 3\%$ , 基准电阻为  $90^\circ\text{C}$  对应电阻  $5\ \text{k}\Omega \pm 3\%$ 。

3) 模块温度传感器。模块温度传感器用于测量变频模块 (IGBT 或 IPM) 的温度,用的感温头的型号是 602F-3500F, 基准电阻为  $25^\circ\text{C}$  对应电阻  $6\ \text{k}\Omega \pm 1\%$ 。几个典型温度的对应阻值分别是:  $-10^\circ\text{C}$  对应  $(25.897 \sim 28.623)\ \text{k}\Omega$ ;  $0^\circ\text{C}$  对应  $(16.324\ 8 \sim 17.716\ 4)\ \text{k}\Omega$ ;  $50^\circ\text{C}$  对应  $(2.326\ 2 \sim 2.515\ 3)\ \text{k}\Omega$ ;  $90^\circ\text{C}$  对应  $(0.667\ 1 \sim 0.756\ 5)\ \text{k}\Omega$ 。

温度传感器的种类很多,经常使用的有热电阻:PT100、PT1000、Cu50、Cu100;热电偶:B、E、J、K、S等。温度传感器不但种类繁多,而且组合形式多样,应根据不同的场所选用合适的产品。测温原理:根据电阻阻值、热电

偶的电势随温度不同发生有规律的变化原理,可以得到所需要测量的温度值。无线温度传感器将控制对象的温度参数变成电信号,并对接收终端发送无线信号,对系统实行检测、调节和控制。可直接安装在一般工业热电阻、热电偶的接线盒内,与现场传感元件构成一体化结构。通常和无线中继、接收终端、通信串口、电子计算机等配套使用,这样不仅节省了补偿导线和电缆,而且减少了信号传递失真和干扰,从而获得了高精度的测量结果。无线温度传感器广泛应用于化工、冶金、石油、电力、水处理、制药、食品等自动化行业。例如:高压电缆上的温度采集;水下等恶劣环境的温度采集;运动物体上的温度采集;不易连线通过的空间传输传感器数据;单纯为降低布线成本选用的数据采集方案;没有交流电源的工作场合的数据测量;便携式非固定场所数据测量。

智能传感器的功能是通过模拟人的感官和大脑的协调动作,结合长期以来测试技术的研究和实际经验而提出来的。是一个相对独立的智能单元,它的出现对原来硬件性能苛刻要求有所减轻,而靠软件帮助可以使传感器的性能大幅度提高。

1)信息存储和传输。随着全智能集散控制系统(smart distributed system)的飞速发展,对智能单元要求具备通信功能,用通信网络以数字形式进行双向通信,这也是智能传感器关键标志之一。智能传感器通过测试数据传输或接收指令来实现各项功能。如增益的设置、补偿参数的设置、内检参数设置、测试数据输出等。

2)自补偿和计算功能。多年来从事传感器研制的工程技术人员一直为传感器的温度漂移和输出非线性作大量的补偿工作,但都没有从根本上解决问题。而智能传感器的自补偿和计算功能为传感器的温度漂移和非线性补偿开辟了新的道路。这样,放宽传感器加工精密度要求,只要能保证传感器的重复性好,利用微处理器对测试的信号通过软件计算,采用多次拟合和差值计算方法对漂移和非线性进行补偿,从而能获得较精确的测量结果压力传感器。

3)自检、自校、自诊断功能。普通传感器需要定期检验和标定,以保证它在正常使用时足够的准确度,这些工作一般要求将传感器从使用现场拆卸送到实验室或检验部门进行。对于在线测量传感器出现异常则不能及时诊断。采用智能传感器情况则大有改观,首先自诊断功能在电源接通时进行自检,诊断测试以确定组件有无故障。其次根据使用时间可以在线进行校正,微处理器利用存在 EPROM 内的计量特性数据进行对比校对。

4)复合敏感功能。观察周围的自然现象,常见的信号有声、光、电、热、力、化学等。敏感元件测量一般通过两种方式:直接和间接的测量。而智能