ДОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

ФІЗИКА

doi: https://doi.org/10.15407/dopovidi2017.05.045

УДК 621.315.592

Г.П. Гайдар[1], П.І. Баранський[2]

[1] Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ
[2] Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, Київ
E-mail: gaydar@kinr.kiev.ua

Залежність параметра анізотропії термо-ЕРС захоплення від концентрації домішок у кристалах *n*-Ge та *n*-Si

Представлено членом-кореспондентом НАН України О.Є. Бєляєвим

При $T = 85$ K на кристалах n-Ge та n-Si досліджено концентраційні залежності параметра анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами у $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$ у широкому інтервалі концентрацій ($1{,}9 \cdot 10^{12} \leqslant n_e \equiv N_I \leqslant 4{,}6 \cdot 10^{17}$ см$^{-3}$). Показано, що в n-Ge (на відміну від n-Si) параметр M є малочутливим до наявності домішок у кристалах аж до концентрацій ~10^{15} см$^{-3}$.

Ключові слова: *кремній, германій, концентрація домішок, параметр анізотропії термо-ЕРС.*

Параметр анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$ (де $\alpha_{\parallel}^{\Phi}$, $\alpha_{\perp}^{\Phi}$ — фононні складові термо-ЕРС захоплення вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно) є одним із найбільш важливих параметрів теорії кінетики електронних процесів у багатодолинних напівпровідниках поряд із параметром анізотропії рухливості [1—3]. Різними авторами і навіть за допомогою різних методик було знайдено значення параметра M для n-Ge, але лише для умов переважно фононного розсіяння (див., наприклад, [4, 5]). Враховуючи відмінності в значеннях M, які наводяться в окремих роботах, можна вважати, що найбільш імовірне значення цього параметра відповыідає величині $M = (9 \pm 1)$ для досить чистих кристалів n-Ge.

Температурна залежність параметра анізотропії рухливості в окремо взятому ізоенергетичному еліпсоїді $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel} = K_m/K_{\tau} = f(T)$ ($\mu_{\parallel}$, $\mu_{\perp}$ — рухливості носіїв заряду вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно) для кристалів n-Ge, експериментально досліджена в роботі [6], була пояснена на основі уявлень, пов'язаних із анізотропним характером часу релаксації τ. У рамках припущення про анізотропний характер часу релаксації параметр анізотропії розсіяння $K_{\tau} = \langle\tau_{\parallel}\rangle/\langle\tau_{\perp}\rangle = K_m/K$ (а, отже, і параметр K) істотно визначається внеском домішкового розсіяння, що (при заданій температурі кристала) є еквівалентним залежності параметра K від концентрації домішки в його об'ємі. Тут

© Г.П. Гайдар, П.І. Баранський, 2017

$K_m = m_{\parallel}/m_{\perp}$ — параметр анізотропії ефективної маси; $m_{\parallel}$ і $m_{\perp}$ — ефективні маси носіїв заряду вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно; $\tau_{\parallel}$ і $\tau_{\perp}$ — компоненти тензора часу релаксації за відсутності магнітного поля в лінійному наближенні вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно.

Приймаючи до уваги те, що в приладобудуванні використовуються *n*-Ge та *n*-Si, леговані домішками в широкому інтервалі концентрацій, при розрахунку різних ефектів у таких кристалах (особливо при розрахунку термоелектричних і термомагнітних явищ на основі теорії анізотропного розсіяння, узагальненої на випадок електрон-фононного захоплення і пружної деформації) необхідно також знати значення M в області змішаного розсіяння.

Метою даної роботи було дослідження параметра анізотропії термо-ЕРС захоплення M в *n*-Ge та *n*-Si при температурі $T = 85$ K у широкому інтервалі концентрацій ($1{,}9 \cdot 10^{12} \leqslant n_e \equiv \equiv N_I \leqslant 4{,}6 \cdot 10^{17}$ см$^{-3}$), що включає як змішане, так і переважно фононне розсіяння.

Відомо декілька методів визначення параметра M в *n*-Ge та *n*-Si, однак, імовірно, найбільш надійним і точним з них є метод, який дозволяє розраховувати значення M на основі результатів вимірів тензоопору і тензотермо-ЕРС уздовж кристалографічного напрямку, що збігається з напрямком довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда, а саме: вздовж напрямку [111] в *n*-Ge та вздовж [100] в *n*-Si (тобто, в *n*-Ge за умов $\vec{X} \,//\, \vec{J}$, $\nabla T \,//\, [111]$, а в *n*-Si — за умов $\vec{X} \,//\, \vec{J}$, $\nabla T \,//\, [100]$, де X — механічне напруження на кристалі; J — струм; ∇T — градієнт температури).

Відомо [1, 7], що в умовах переважно фононного розсіяння між компонентами тензора питомого опору $\hat{\rho}$ і тензора термо-ЕРС захоплення $\hat{\alpha}^{\Phi}$ в одновісно деформованих багатодолинних напівпровідниках існує зв'язок, який визначається співвідношенням

$$\frac{\alpha_{ik}^{\Phi}(X)}{\alpha_0^{\Phi}} = \frac{(M-K)(2K+1)}{(1-K)(2K+M)}\delta_{ik} + \frac{\rho_{ik}(X)}{\rho_0}\frac{3K(M-1)}{(K-1)(2K+M)}, \tag{1}$$

де $\alpha_{ik}^{\Phi}(X)/\alpha_0^{\Phi}$ і $\rho_{ik}(X)/\rho_0$ — компоненти фононної частини тензотермо-ЕРС і тензоопору, віднесені до відповідних значень тих же параметрів у недеформованому кристалі; δ_{ik} — дельта-функція.

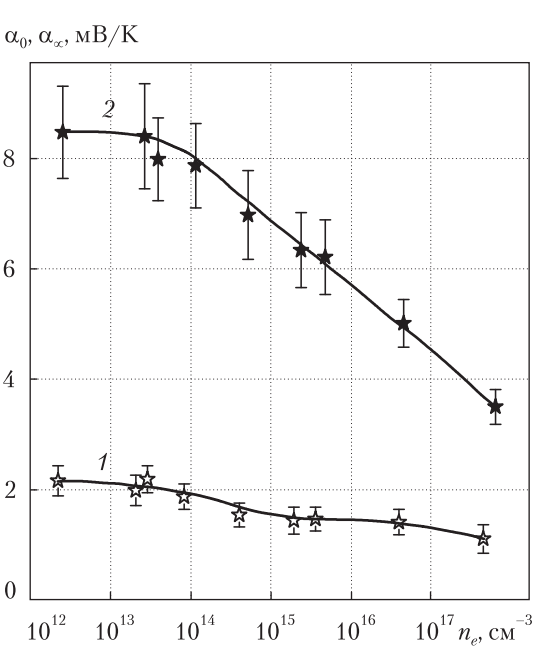
Слід зазначити, що вираз (1) застосовний не лише в області фононного, але також і в області змішаного розсіяння, в якій для параметра K [8] залишається справедливою формула

$$K = \frac{3}{2}\frac{\rho_{\infty}^{[lpt]}}{\rho_0} - \frac{1}{2}. \tag{2}$$

Тоді, як це було зроблено для розсіяння на фононах, базуючись на (1), можна записати вираз, що пов'язує параметр M з експериментально вимірюваними величинами α_0, α_{∞} і ρ_0, ρ_{∞}:

$$M = \frac{2K}{(2K+1)\dfrac{\alpha_0 - \alpha^e}{\alpha_{\infty} - \alpha^e} - 1} = \frac{2K}{(2K+1)\dfrac{\alpha_0^{\Phi}}{\alpha_{\infty}^{\Phi}} - 1}, \tag{3}$$

де α_0 і α_{∞} — значення термо-ЕРС в недеформованих і в деформованих зразках відповідно; α_0^{Φ} і α_{∞}^{Φ} — фононні складові термо-ЕРС, виміряні в недеформованому і пружно деформо-



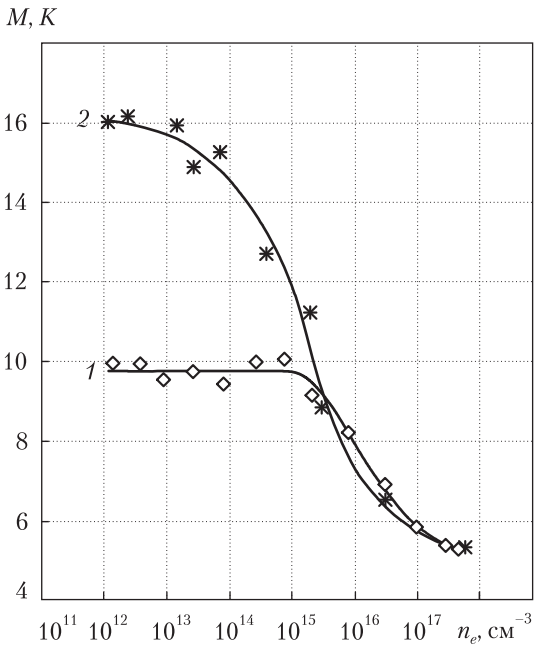


Рис. 1. Концентраційні залежності (при $T = 85$ K) термо-ЕРС кристалів n-Ge: *1* — недеформованого ("чотиридолинного"); *2* — деформованого ("однодолинного") за умов $X = 0{,}8$ ГПа, $\vec{X} \,//\, \vec{J}, \nabla T \,//\, [111]$

Рис. 2. Залежності (при $T = 85$ K) параметрів анізотропії термоЕРС захоплення $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$ (*1*) та анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$ (*2*) від концентрації домішок $n_e \equiv N_I$ у кристалах n-Ge за умов $\vec{X} \,//\, \vec{J}, \nabla T \,//\, [111]$

ваному кристалі; ρ_0, $\rho_{\infty}^{[lpt]}$ — питомий опір недеформованого $\rho(X = 0) \equiv \rho_0$ і одновісно пружно деформованого $\rho(X \to \infty) \equiv \rho_{\infty}$ [ρ_{∞} відповідає області насичення функції $\rho = \rho(X)$] кристала в кристалографічному напрямку $[l\,p\,t] \to \begin{cases} [111] & - \text{ для } n\text{-Ge} \\ [100] & - \text{ для } n\text{-Si} \end{cases}$; α^e — дифузійна (електронна) складова термо-ЕРС, величина якої розраховується за формулою Писаренка [9]. Однак необхідно приймати до уваги, що при збільшенні концентрації домішки змінюються умови розсіяння носіїв. У цьому випадку в формулу для обчислення α^e вводиться поправка на залежність ефективної довжини пробігу від концентрації іонізованих домішок при змішаному розсіянні. Тоді формула Писаренка матиме наступний вигляд:

$$\alpha^e = \frac{k}{e}\left[\varphi(\gamma) + \ln\frac{2\,(2\pi m^* kT)^{3/2}}{n_0 h^3}\right], \tag{4}$$

де φ — деяка функція від $\gamma = \sqrt{\dfrac{6\rho_I}{\rho_L}}$; ρ_L і ρ_I — фононна і домішкова складові питомого опору при змішаному розсіянні, формули для їх розрахунку наведено в [8]; n_0 — концентрація носіїв заряду; e — заряд електрона; k — стала Больцмана; T — температура; h — стала Планка; $m^* = N^{3/2}\sqrt[3]{m_{\parallel}\, m_{\perp}^2}$ — ефективна маса густини станів; N — число ізоенергетичних еліпсоїдів,

зокрема

$$\text{для } n\text{-Ge } N = \begin{cases} 4 & \text{при } X = 0, \\ 1 & \text{при } X \geqslant 0{,}6\ \text{ГПа і } T = 77\ \text{K}, \end{cases}$$

$$\text{для } n\text{-Si } N = \begin{cases} 6 & \text{при } X = 0, \\ 2 & \text{при } X \geqslant 0{,}6\ \text{ГПа і } T = 77\ \text{K}, \end{cases}$$

Виміри термо-ЕРС і тензотермо-ЕРС проводили при температурі 85 K на кристалах n-Ge та n-Si в інтервалі концентрацій $1{,}9 \cdot 10^{12} - 4{,}6 \cdot 10^{17}$ см$^{-3}$, а виміри холлівських параметрів (представлені у таблиці) і тензоопору — при $T = 77$ K. Спочатку вимірювали питомий опір без тиску ρ_0 і термо-ЕРС α_0, після чого зразки n-Ge та n-Si переводили в "одно-" та "дводолинний" стан відповідно і вимірювали значення ρ_∞ і α_∞. Досліджувані зразки переводили в "одно-" та "дводолинний" стан накладанням на них механічного напруження $X = 0{,}8$ ГПа: в умовах $\vec{X} \,//\, \vec{J}$, $\nabla T \,//\, [111]$ — у випадку n-Ge; в умовах $\vec{X} \,//\, \vec{J}$, $\nabla T \,//\, [100]$ у випадку n-Si.

Експериментально визначені α_0 і α_∞, представлені на рис. 1, значення параметра K, одержані в результаті вимірів ρ_∞ і ρ_0 за формулою (2) (рис. 2 та 3, криві *2*), і розрахована за виразом (4) величина дифузійної (електронної) складової термо-ЕРС дозволили обчислити параметр анізотропії термо-ЕРС захоплення $M = \alpha_\parallel^\Phi / \alpha_\perp^\Phi = f(n_e)$ для кристалів n-Ge (рис. 2, крива *1*) та n-Si (рис. 3, крива *1*) у припущенні, що $n_e \equiv N_I$.

Як випливає з рис. 2, значення M для n-Ge (крива *1*) залишається сталим [на відміну від n-Si (див. рис. 3, крива *1*)] у досить широкому концентраційному інтервалі ($1{,}9 \cdot 10^{12} \leqslant n_e \leqslant 10^{15}$ см$^{-3}$) і складає приблизно 9,8, що непогано узгоджується з відомими даними для цього параметра в області переважно фононного розсіяння.

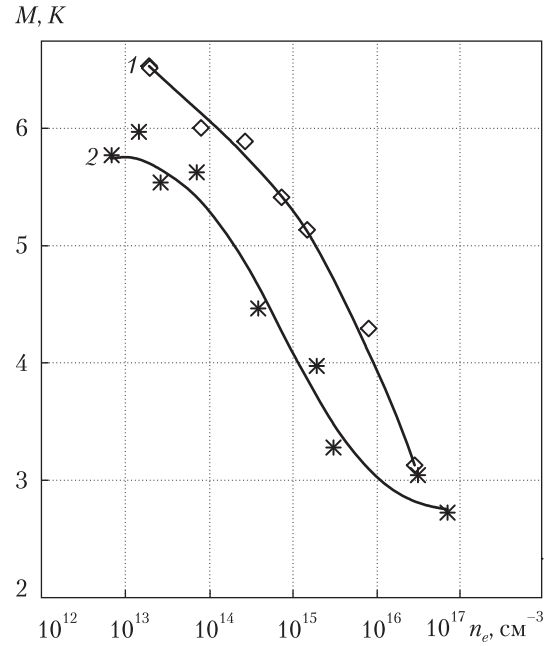


Рис. 3. Залежності (при $T = 85$ K) параметрів анізотропії термо-ЕРС захоплення $M = \alpha_\parallel^\Phi / \alpha_\perp^\Phi$ (*1*) та анізотропії рухливості $K = \mu_\perp / \mu_\parallel$ (*2*) від концентрації домішок $n_e \equiv N_I$ у кристалах n-Si за умов $\vec{X} \,//\, \vec{J}$, $\nabla T \,//\, [111]$

Параметри досліджуваних зразків n-Ge

№	n_0, см$^{-3}$	μ_{77K}, см^2/В · с	α^e, мкВ/град
1	$1{,}9 \cdot 10^{12}$	34 800	1340
2	$1{,}8 \cdot 10^{13}$	33 400	1147
3	$2{,}8 \cdot 10^{13}$	33 300	1109
4	$7{,}5 \cdot 10^{13}$	32 000	1024
5	$3{,}8 \cdot 10^{14}$	27 700	910
6	$1{,}7 \cdot 10^{15}$	21 100	808
7	$3{,}5 \cdot 10^{15}$	20 000	760
8	$3{,}3 \cdot 10^{16}$	13 000	609
9	$4{,}6 \cdot 10^{17}$	4950	424

Звертає на себе увагу різний характер впливу збільшення концентрації легуючої домішки на електронну і фононну підсистеми в *n*-Ge та *n*-Si. Якщо зміни параметра анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$ в *n*-Ge і *n*-Si зі збільшенням концентрації якісно ідентичні (див. рис. 2 і 3, криві *2*), то зміни параметра анізотропії термо-ЕРС захоплення *M* істотно відрізняються (див. рис. 2 і 3, криві *1*).

Таким чином, експериментально встановлено, що в *n*-Si із підвищенням концентрації носіїв заряду n_e параметр анізотропії термо-ЕРС захоплення *M* змінюється монотонно, тоді як в *n*-Ge після значення концентрації ~ 10^{15} см$^{-3}$ спостерігається його різкий спад. Зменшення параметра *M* пов'язане з підвищенням ефективності розсіювання як електронів (що захоплюються фононами) на домішкових іонах, так і фононів на електронах провідності в полі іонізованої домішки. Відсутність зниження параметра *M* в *n*-Ge (в інтервалі концентрацій 10^{12}—10^{15}) пов'язана, імовірно, з особливостями фононної підсистеми в цьому матеріалі.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Gaidar G.P., Baranskii P.I. Thermoelectric properties of transmutation doped silicon crystals. *Phys. B: Condensed Matter*. 2014. **441**. P. 80—88.
2. Баранський П.І., Бєляєв О.Є., Гайдар Г.П., Кладько В.П., Кучук А.В. Проблеми діагностики реальних напівпровідникових кристалів. Київ: Наук. думка, 2014. 462 с.
3. Gaidar G., Baranskii P. Optimization of the thermoelectric figure of merit in the transmutation-doped and ordinary n-Si crystals. *Phys. Status Solidi A*. 2015. **212**, № 10. P. 2146—2153.
4. Herring C., Geballe T.H., Kunzler J.E. Analysis of Phonon-Drag Thermomagnetic Effects in *n*-Type Germanium. *Bell System Tech. J*. 1959. **38**, № 3. P. 657—747.
5. Баранский П.И., Буда И.С., Коломоец В.В., Самойлович А.Г., Сусь Б.А. Исследование анизотропии эффекта увлечения электронов фононами в *n*-Ge. *ФТП*. 1974. **8**, № 11. С. 2159—2163.
6. Laff R.A., Fan H.Y. Magnetoresistance in *n*-Type Germanium at Low Temperatures. *Phys. Rev*. 1958. **112**, № 2. P. 317—321.
7. Гайдар Г.П. Механізми формування анізотропії термоелектричних і термомагнітних явищ у багатодолинних напівпровідниках. *Фізика і хімія твердого тіла*. 2013. **14**, № 1. С. 7—20.
8. Баранский П.И., Буда И.С., Даховский И.В., Коломоец В.В. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках. Киев: Наук. думка, 1977. 270 с.
9. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. Москва: Наука, 1977. 672 с.

Надійшло до редакції 11.01.2017

REFERENCES

1. Gaidar, G. P. & Baranskii, P. I. (2014). Thermoelectric properties of transmutation doped silicon crystals. Physica B: Condensed Matter, 441, pp. 80-88.
2. Barans'kyi, P. I., Bieliaiev, O. Ye., Gaidar, G. P., Klad'ko, V. P. & Kuchuk, A. V. (2014). Problems of diagnosis actual semiconductor crystals. Kiev: Naukova Dumka (in Ukrainian).
3. Gaidar, G. & Baranskii, P. (2015). Optimization of the thermoelectric figure of merit in the transmutation-doped and ordinary *n*-Si crystals. Phys. Status Solidi A, 212, No. 10, pp. 2146-2153.
4. Herring, C., Geballe, T. H. & Kunzler, J. E. (1959). Analysis of Phonon-Drag Thermomagnetic Effects in *n*-Type Germanium. Bell System Tech. J., 38, No. 3, pp. 657-747.
5. Baranskiy, P. I., Buda, I. S., Kolomoets, V. V., Samoylovich, A. G. & Sus', B. A. (1974). Study of the anisotropy of the entrainment of electrons by phonons in *n*-Ge. Fizika i tekhnika poluprovodnikov, 8, No. 11, pp. 2159-2163 (in Russian).
6. Laff, R. A. & Fan, H. Y. (1958). Magnetoresistance in *n*-Type Germanium at Low Temperatures. Phys. Rev., 112, No. 2, pp. 317-321.

7. Gaidar, G. P. (2013). Mechanisms of the Anisotropy Formation of Thermoelectric and Thermomagnetic Phenomena in the Multi-valley Semiconductors. Fizyka i khimiia tverdogo tila, 14, No. 1, pp. 7-20 (in Ukrainian).
8. Baranskiy, P. I., Buda, I. S., Dakhovskiy, I. V. & Kolomoets, V. V. (1977). Electrical and galvanomagnetic phenomena in anisotropic semiconductors. Kiev: Naukova Dumka (in Russian).
9. Bonch-Bruevich, V. L. & Kalashnikov, S. G. (1977). Physics of semiconductors. Moskva: Nauka (in Russian).

Received 11.01.2017

Г.П. Гайдар[1], *П.И. Баранский*[2]

[1] Институт ядерных исследований НАН Украины, Киев
[2] Институт физики полупроводников им. В. Е. Лашкарева НАН Украины, Киев
E-mail: gaydar@kinr.kiev.ua

ЗАВИСИМОСТЬ ПАРАМЕТРА АНИЗОТРОПИИ ТЕРМОЭДС УВЛЕЧЕНИЯ ОТ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСЕЙ В КРИСТАЛЛАХ *n*-Ge И *n*-Si

При $T = 85$ K на кристаллах *n*-Ge и *n*-Si исследованы концентрационные зависимости параметра анизотропии термо-ЭДС увлечения электронов фононами $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi}/\alpha_{\perp}^{\Phi}$ в широком интервале концентраций ($1{,}9 \cdot 10^{12} \leqslant n_e \equiv N_I \leqslant 4{,}6 \cdot 10^{17}$ см$^{-3}$). Показано, что в *n*-Ge (в отличие от *n*-Si) параметр M является малочувствительным к наличию примесей в кристаллах вплоть до концентраций ~10^{15} см$^{-3}$.

Ключевые слова: *кремний, германий, концентрация примесей, параметр анизотропии термо-ЭДС.*

G.P. Gaidar[1], *P.I. Baranskii*[1]

[1] Institute for Nuclear Research of NAS of Ukraine, Kiev
[2] V.Ye. Lashkaryov Institute of Semiconductor Physics of NAS of Ukraine, Kiev
E-mail: gaydar@kinr.kiev.ua

DEPENDENCE OF THE ANISOTROPY PARAMETER OF DRAG THERMAL E.M.F. ON THE CONCENTRATION OF IMPURITIES IN *n*-Ge AND *n*-Si CRYSTALS

At $T = 85$ K, the concentration dependences of the anisotropy parameter of electron-phonon drag thermal e.m.f. in a wide range of concentrations ($1.9 \cdot 10^{12} \leqslant n_e \equiv N_I \leqslant 4.6 \cdot 10^{17}$ cm^{-3}) are investigated on *n*-Ge and *n*-Si crystals. It is shown that the parameter M is insensitive in *n*-Ge (unlike *n*-Si) to the presence of impurities in the crystals up to concentrations ~10^{15} cm^{-3}.

Keywords*: silicon, germanium, impurity concentration, anisotropy parameter of thermal e.m.f.*