В.В. Черныш

ТЕРМОЭДС В L_1-Δ_1 МОДЕЛИ ГЕРМАНИЯ ПРИ СИЛЬНОМ ГИДРОСТАТИЧЕСКОМ ДАВЛЕНИИ

В. В. Черныш, Б. Ш. Куамба
(Университет Эдуардо Мондлане, Мапуту, Мозамбик)

Б.Ш. Куамба

- *В условиях сильных упругих гидростатических деформаций имеет место переход электронов из четырех L_1-долин в шесть эквивалентных Δ_1-долин и энергетическая структура германия n-типа становится подобной энергетической структуре кремния n-типа. Рассчитаны деформационные потенциалы и числа заполнения долин, а также проанализировано их поведение в зависимости от давления при низких $T = 78К$ и комнатных $T = 300$ К температурах. Теория анизотропного рассеяния была использована для вычисления термоЭДС. Рассмотрено внутридолинное смешанное рассеяние электронов на акустических фононах и ионах примеси, междолинное неэквивалентное рассеяние электронов между L_1- и Δ_1-долинами и междолинное эквивалентное f- и g-рассеяние между Δ_1-долинами.*

Введение

Энергетическая структура зоны проводимости германия хорошо известна [1–3]; при атмосферном давлении заполнены электронами четыре наинизшие L_1-долины зоны проводимости. Однако с увеличением гидростатического давления энергия четырех L_1-долин растет по отношению ко дну зоны проводимости недеформированного кристалла. Δ_1-долины имеют отрицательный коэффициент давления и опускаются по шкале энергии [1–3]. Как правило, только четыре L_1-долины рассматривались в случае недеформированных монокристаллов германия или при наличии относительно небольших деформаций (L_1-модель германия) [4–6]. При наличии сильных упругих деформаций Δ_1-долины должны быть включены в рассмотрение ($L_1-\Delta_1$-модель германия) [1-3, 7-9, 13, 14]. При определенном давлении P_0 положение двух групп долин становится одинаковым на энергетической шкале. При дальнейшем увеличении давления имеет место инверсия L_1- и Δ_1-долин, то есть Δ_1-долины будут локализованы ниже на энергетической шкале по отношению к L_1-долинам. При достаточно сильных давлениях практически все свободные электроны будут локализованы в Δ_1-долинах (Δ_1-модель германия) и, соответственно, структура зоны проводимости германия становится подобной структуре зоны проводимости кремния при атмосферном давлении. При этих условиях Δ_1-долины становятся доступными для прямых электрических измерений [2, 3] и, таким образом, теоретическое рассмотрение явлений переноса не является чисто искусственным. В этой работе мы будем стремиться проанализировать термоэлектродвижущую силу при наличии сильного гидростатического давления.

Числа заполнения и химический потенциал

В допущении невырожденности электронного газа равновесное распределение электронов в L_1- и Δ_1-долинах может быть представлено [5, 6] как

$$\overline{f}_{\vec{k}}^{(i)} = \exp(\overline{\mu}^* - E_{L_1}^{(i)*} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(i)*}),\ \overline{f}_{\vec{k}}^{(j)} = \exp(\overline{\mu}^* - \Delta E_0^* - E_{\Delta_1}^{(j)*} - \varepsilon_{\vec{k}}^{(k)*}), \qquad (1)$$

здесь $\overline{\mu}^* = \overline{\mu}/kT$ – приведенный химический потенциал в деформированном кристалле, $E^{(i,j)}_{L_1,\Delta_1}$ – приведенный потенциал деформации L_1- и Δ_1-долин, $\Delta E_0^* = \Delta E_0/kT$ – приведенное расстояние на энергетической шкале между L_1- и Δ_1-минимумами в недеформированном монокристалле.

Полное число электронов в каждой L_1- и Δ_1-долине равно соответственно

$$N_{L_1}^{(i)} = \frac{2}{(2\pi)^3}\int \overline{f}^{(i)}_{\vec{k}} d\vec{k} = 2\frac{(2\pi kT)^{\frac{3}{2}}\left[\left(m_\perp^{L_1}\right)^2 m_\parallel^{L_1}\right]^{\frac{1}{2}}}{(2\pi\hbar)^3}\cdot \exp(\overline{\mu}^* - E_{L_1}^{(i)*}),$$

$$N_{\Delta_1}^{(j)} = 2\frac{(2\pi kT)^{\frac{3}{2}}\left[\left(m_\perp^{\Delta_1}\right)^2 m_\parallel^{\Delta_1}\right]^{\frac{1}{2}}}{(2\pi\hbar)^3}\cdot \exp(\overline{\mu}^* - E_{\Delta_1}^{(j)*} - \Delta E_0^*). \quad (2)$$

Легко найти из (2) число электронов в каждой долине недеформированного кристалла $N^0_{L_1,\Delta_1}$ заменой $E^{(i,j)}_{L_1,\Delta_1} = 0$, $\overline{\mu}^* \to \mu^*$, где μ^* – химический потенциал недеформированного кристалла.

Отметим, что для нахождения деформационных потенциалов, входящих в (1)–(2), необходимо использовать теорию деформационного потенциала для кубических кристаллов [5, 6, 10]. Деформационный потенциал для *i*-долины, как следует из этой теории, в системе координат, связанной с главными осями тензора масс

$$E_i = C_1(\varepsilon_{11}^{(i)} + \varepsilon_{22}^{(i)} + \varepsilon_{33}^{(i)}) + C_2\varepsilon_{33}^{(i)},$$

где $C_1^{(i)}$ и $C_2^{(i)}$ – константы деформационного потенциала, $\varepsilon_{ll}^{(i)}$ – компоненты тензора деформации *i*-долины. Обычно все деформационные потенциалы и, следовательно, все компоненты тензора деформации должны быть выражены в одной и той же лабораторной системе координат, связанной с кристаллографическими осями [100], [010], [001]. Для их нахождения используется закон Гука в форме

$$\varepsilon_{ik} = \sum_{l,m} S'_{iklm} U_{lm},$$

где U_{lm} – тензор упругих напряжений, в случае гидростатического давления тензор напряжений имеет три диагональных компоненты, $U_{lm} = P\delta_{lm}$, $P<0$ соответствует сжатию, S'_{iklm} – тензор упругих податливостей, обычно компоненты этого тензора известны в кристаллографической системе координат [11]. В нашем случае кристаллографическая система координат совпадает с лабораторной.

После преобразования компонент тензора деформации каждой долины к лабораторной системе координат потенциалы деформации приобретают вид

$$E_{L_1}^{(1-4)} = 3\left(C_1^{L_1} + \tfrac{1}{3}C_2^{L_1}\right)\left(S_{11} + 2S_{12}\right)P,$$

$$E_{\Delta_1}^{(1-6)} = 3\left(C_1^{\Delta_1} + \tfrac{1}{3}C_2^{\Delta_1}\right)\left(S_{11} + 2S_{12}\right)P. \quad (3)$$

Здесь S_{ik} – матричные обозначения Фойгта компонент тензора упругих податливостей: $S_{11} = S_{1111}$; $S_{12} = S_{1122}$. Все деформационные потенциалы для L_1-долин равны и положительны, потому что $C_1^{L_1} + \frac{1}{3}C_2^{L_1} < 0$ [5], $S_{11} + 2S_{12} > 0$ и $P<0$ для сжатия. Это означает, что четыре L_1-долины поднимаются по шкале энергий с ростом давления. В то же время все деформационные потенциалы Δ_1-долин также равны между собой и должны быть отрицательными и опускаться по шкале энергии с ростом давления согласно [1–3], если $C_1^{\Delta_1} + \frac{1}{3}C_2^{\Delta_1} > 0$.

Используя уравнение электронейтральности для недеформированного ($4N_{L_1}^0 + 6N_{\Delta_1}^0 = N_0$) и для деформированного ($4N_{L_1} + 6N_{\Delta_1} = N_0$) кристалла, легко получить соотношение между химпотенциалом в деформированном ($\bar{\mu}^*$) и в недеформированном ($\mu*$) кристалле

$$e^{\bar{\mu}*} = \left[4 + 6(m_N^{\Delta_1} / m_N^{L_1})^{3/2} e^{-\Delta E_0^*}\right]\left[4 + 6(m_N^{\Delta_1} / m_N^{L_1})^{3/2} e^{E_{L_1}^* - E_{\Delta_1}^* - \Delta E_0^*}\right]^{-1} e^{\mu*}, \tag{4}$$

а также получить выражение для относительного числа электронов в долинах $n_r^{(i)} = N_r^{(i)} / N_0$

$$n_{L_1} = \left\{4 + 6\left(\frac{m_N^{\Delta_1}}{m_N^{L_1}}\right)^{3/2} \cdot \exp\left(E_{L_1}^* - E_{\Delta_1}^* - \Delta E_0^*\right)\right\}^{-1},$$

$$n_{\Delta_1} = \left\{4\left(\frac{m_N^{L_1}}{m_N^{\Delta_1}}\right)^{3/2} \cdot e^{\Delta E_0 + E_{\Delta 1}^* - E_{L_1}^*} + 6\right\}^{-1}. \tag{5}$$

Здесь $m_N^{L_1,\Delta_1} = \left[\left(m_\perp^{L_1,\Delta_1}\right)^2 m_\parallel^{L_1,\Delta_1}\right]^{\frac{1}{3}}$ – эффективная масса плотности состояний в L_1- и Δ_1-долинах. В недеформированном кристалле $P = 0$, $n_{L_1} = 0.25$, $n_{\Delta_1} \approx 0$. В случае сильного давления $P > P_0$ практически все электроны локализованы в Δ_1-долинах, $n_{L_1} \approx 0$, $n_{\Delta_1} = 1/6$. При давлении, соответствующем инверсии долин $P = P_0$, все десять долин (L_1- и Δ_1-долин) являются энергетически эквивалентными, то есть $E_{L_1} = \Delta E_0 + E_{\Delta_1}$ и из (5) следует, что $n_{L_1} / n_{\Delta_1} = \left(m_N^{L_1} / m_N^{\Delta_1}\right)^{\frac{3}{2}}$. Это означает, что в данном случае в каждой долине будет одинаковое количество электронов только при равенстве их эффективных масс плотности состояний в долине каждого типа.

Из (4) и (5) нетрудно найти явное выражение для химического потенциала в деформированном и в недеформированном кристаллах и записать их в двух разных, но эквивалентных формах:

$$\bar{\mu}^* = \mu^* + E_{L_1}^* + \ln(n_{L_1} / n_0),$$

$$\bar{\mu}^* = \mu^* + E_{\Delta_1}^* + \Delta E_0^* + \ln(n_{\Delta_1} / n_0) + (3/2)\ln(m_N^{L_1} / m_N^{\Delta_1}). \tag{6}$$

Отметим, что $n_0 = \left[4 + 6(m_N^{L_1} / m_N^{\Delta_1})^{3/2} e^{-\Delta E_0^*}\right]^{-1}$.

Химический потенциал недеформированного кристалла может быть найден известными методами.

Диффузионная термоЭДС

Прежде всего кратко остановимся на механизмах рассеяния электронов в нашей модели. Ограничимся рассмотрением процессов рассеяния с участием фононов и ионов примеси в L_1- и Δ_1-долинах. В L_1- и Δ_1-долинах электроны принимают участие в следующих процессах рассеяния: внутридолинное рассеяние на акустических фононах и ионах примеси и также неэквивалентное междолинное рассеяние между L_1- и Δ_1-долинами. К тому же в Δ_1-долинах электроны принимают участие в эквивалентном междолинном рассеивании между долинами, расположенными на одной оси (g-рассеяние) и в эквивалентном междолинном рассеивании между долинами, расположенными на перпендикулярных осях (f-рассеяние).

Предположим, что все указанные процессы рассеяния могут быть описаны соответствующими временами релаксации и правило Матиссена справедливо в этом случае. Внутридолинное рассеяние на акустических фононах, как и междолинное рассеяние на ионах примеси, может быть описано диагональным тензором времен релаксации с двумя компонентами, который приведен в [4–9]. Междолинное рассеяние электронов обусловлено взаимодействием с акустическими и оптическими фононами с частотами, соответствующими температурам $T_{c1} = 320$ К (неэквивалентное междолинное рассеяние между L_1- и Δ_1-долинами и эквивалентное междолинное *f*-рассеяние), $T_{c2} = 430$ К и $T_{c3} = 100$ К (эквивалентное междолинное *g*-рассеяние) может быть описано скалярным временем релаксации [1, 4–9, 12], которое мы обобщим, принимая во внимание кинетику долин при наличии большого гидростатического давления. Все кинетические интегралы имеют такую же аналитическую форму, как и в [8].

Как известно [4–6], тензор термоЭДС определяется соотношением

$$\alpha_{ik} = \rho_{il} b_{lk} . \tag{7}$$

Прежде всего рассмотрим тензор удельного сопротивления. Для его определения сначала рассмотрим тензор удельной электропроводности. Для монокристаллов германия в случае гидростатического давления он может быть вычислен следующим образом:

$$\sigma_{ik} = \sum_{r=1}^{4} \sigma_{ik}^{(r)L} + \sum_{r=1}^{6} \sigma_{ik}^{(r)\Delta} . \tag{8}$$

В этом выражении $\sigma_{ik}^{(r)L,\Delta}$ – компоненты тензора электропроводности для L_1- и Δ_1-долин, записанные в лабораторной системе координат. В главных осях тензора масс *i*-долины тензор удельной электропроводности этой долины имеет две отличные от нуля компоненты [5-8], которые после усреднения по энергии имеют следующий вид:

$$\sigma_{11=22,33}^{(i)} = \sigma_{\perp,\parallel}^{(i)} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{N_0' e^2}{T\sqrt{kT}} \frac{a_{\perp,\parallel}^{(i)}}{m_{\perp,}^{(i)}} J_{\perp,\parallel}^{(i)}(3) . \tag{9}$$

(Все обозначения такие же, как в (8)). Тензор удельной электропроводности кристалла находится, как обычно, преобразованием компонент тензора электропроводности каждой долины к лабораторной системе координат, суммируя, в добавление, по всем L_1- и Δ_1-долинам, используя (8). В результате несложных вычислений получим

$$\sigma_{\alpha\beta} = \frac{8}{9\sqrt{\pi}} \cdot \frac{N_0 e^2}{T\sqrt{kT}} \cdot \left\{ 2n_{L_1} \left(2\frac{a_\perp^{L_1}}{a_\perp^{L_1}} J_\perp^{L_1} + \frac{a_\parallel^{L_1}}{m_\parallel^{L_1}} J_\parallel^{L_1} \right) + 3n_{\Delta_1} \left(2\frac{a_\perp^{\Delta_1}}{m_\perp^{\Delta_1}} J_\perp^{\Delta_1} + \frac{a_\parallel^{\Delta_1}}{m_\parallel^{\Delta_1}} J_\parallel^{\Delta_1} \right) \right\} \delta_{\alpha\beta} . \tag{10}$$

Последнюю формулу можем переписать в компактной форме, вводя эффективный параметр анизотропии рассеяния

$$K_{L_1,\Delta_1} = \frac{m_\parallel^{L_1,\Delta_1} a_\perp^{L_1,\Delta_1}}{m_\perp^{L_1,\Delta_1} a_\parallel^{L_1,\Delta_1}} \cdot \frac{J_\perp^{L_1,\Delta_1}(3)}{J_\parallel^{L_1,\Delta_1}(3)} = K_a^{L_1,\Delta_1} \cdot \frac{J_\perp^{L_1,\Delta_1}(3)}{J_\parallel^{L_1,\Delta_1}(3)} , \tag{11}$$

принимая во внимание (9). В этом случае

$$\sigma_{\alpha\beta} = \left\{ 4n_{L_1} \sigma_\perp^{L_1} \frac{2K_{L_1}+1}{3K_{L_1}} + 6n_{\Delta_1} \sigma_\perp^{\Delta_1} \frac{2K_{\Delta_1}+1}{3K_{\Delta_1}} \right\} \delta_{\alpha\beta} . \tag{12}$$

Из экспериментов с чистыми кристаллами известно, что при низких температурах *T=78K* $K_{L_1} = 16.4$ и $K_{\Delta_1} = 4.4$ [5, 13, 14].

Как хорошо известно, гидростатическое давление не изменяет симметрию кристалла и в кубических кристаллах тензор электропроводности вырождается в скаляр. Этот факт отражен последней формулой. Очевидно, что компоненты тензора электросопротивления могут быть вычислены согласно формулы

$$\rho_{ii} = 1/\sigma_{ii} \,. \tag{13}$$

Отметим, что зависимость от давления в (10), (12) входит через числа заполнения и интегралы, где время релаксации междолинного неэквивалентного рассеяния зависит от давления.

Для отдельно взятой «i»-долины при наличии деформации симметрия тензора $b_{lk}^{(i)}$ совпадает с симметрией тензора $\sigma_{ik}^{(i)}$, поскольку, согласно [6]

$$b_{lk}^{e,(i)} = -\left\langle \sigma_{lk}^{(i)}(\bar{x},P)\cdot \alpha^{e,(i)}(\bar{x},P)\right\rangle . \tag{14}$$

Здесь $\sigma_{lk}^{(i)}(\bar{x},P)$ – электропроводность «i»-долины обусловлена группой электронов с приведенной энергией $\bar{x}$, скаляр $\alpha^{e,(i)}(\bar{x},P)$ – электронная термоЭДС «i»-долины, обусловленная диффузией группы электронов с приведенной энергией $\bar{x}$ при наличии деформации [6]: $\alpha^{e,(i)}(\bar{x},P) = (k/e)(\bar{x}-\bar{\mu}^*)$.

Компоненты тензора $b_{lk}^{(i)}$ «i»-долины после усреднения по энергии принимают следующий вид:

$$b_{11=22,33}^{e,(i)} = b_{\perp,\parallel}^{e,(i)} = -\frac{k}{e}\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\frac{N_0' e^2}{T\sqrt{kT}} n_i \frac{a_{\perp,\parallel}^{(i)}}{m_{\perp,\parallel}^{(i)}}\left[J_{\perp,\parallel}^{(i)}(4) - \bar{\mu}^* J_{\perp,\parallel}^{(i)}(3)\right]. \tag{15}$$

Если используем эффективный параметр анизотропии (14) и введем обозначение $\xi_{\perp,\parallel}^{(i)} = J_{\perp,\parallel}^{(i)}(4)/J_{\perp,\parallel}^{(i)}(3)$, выражение (15) приобретает форму

$$b_{\perp}^{e,(i)} = -\frac{k}{e} n_i \sigma_{\perp}^{(i)}\left(\xi_{\perp}^{(i)} - \bar{\mu}^*\right), \quad b_{\parallel}^{e,(i)} = -\frac{k}{e} n_i \sigma_{\perp}^{(i)}\frac{1}{K_i}\left(\xi_{\parallel}^{(i)} - \bar{\mu}^*\right). \tag{16}$$

После преобразования компонент тензора $b_{\perp,\parallel}^{e,(i)}$ каждой долины к лабораторной системе координат и суммирования по всем группам эквивалентных долин для тензора b_{lk}^{e} получим

$$b_{11}^{e} = b_{22}^{e} = b_{33}^{e} = \frac{4}{3}\left(2b_{\perp}^{L_1} + b_{\parallel}^{L_1}\right) + 2\left(2b_{\perp}^{\Delta_1} + b_{\parallel}^{\Delta_1}\right). \tag{17}$$

Принимая во внимание (11), (16) и вводя обозначение

$$r_{L_1,\Delta_1} = \frac{J_{\parallel}^{L_1,\Delta_1}(4)}{J_{\perp}^{L_1,\Delta_1}(4)}\frac{J_{\perp}^{L_1,\Delta_1}(3)}{J_{\parallel}^{L_1,\Delta_1}(3)},$$

преобразуем выражение (17) в такой вид:

$$b_{ii}^{(e)} = -\frac{k}{e}\left[4n_{L_1}\sigma_{\perp}^{L_1}\left(\xi_{\perp}^{L_1}\frac{2K_{L_1}+r_{L_1}}{3K_{L_1}} - \bar{\mu}^*\frac{2K_{L_1}+1}{3K_{L_1}}\right) + 6n_{\Delta_1}\sigma_{\perp}^{\Delta_1}\left(\xi_{\perp}^{\Delta_1}\frac{2K_{\Delta_1}+r_{\Delta_1}}{3K_{\Delta_1}} - \bar{\mu}^*\frac{2K_{\Delta_1}+1}{3K_{\Delta_1}}\right)\right]\delta_{ii}\,. \tag{18}$$

Очевидно, что термоЭДС также будет скалярной величиной.

Диффузионную термоЭДС в явном виде можем получить, используя (7), (12) и (13). Окончательно получаем

$$\alpha_{ii}^{(e)} = \frac{k}{e}\frac{4n_{L_1}\sigma_{\perp}^{L_1}\left(\xi_{\perp}^{L_1}\frac{2K_{L_1}+r_{L_1}}{3K_{L_1}} - \bar{\mu}^*\frac{2K_{L_1}+1}{3K_{L_1}}\right) + 6n_{\Delta_1}\sigma_{\perp}^{\Delta_1}\left(\xi_{\perp}^{\Delta_1}\frac{2K_{\Delta_1}+r_{\Delta_1}}{3K_{\Delta_1}} - \bar{\mu}^*\frac{2K_{\Delta_1}+1}{3K_{\Delta_1}}\right)}{4n_{L_1}\sigma_{\perp}^{L_1}\frac{2K_{L_1}+1}{3K_{L_1}} + 6n_{\Delta_1}\sigma_{\perp}^{\Delta_1}\frac{2K_{\Delta_1}+1}{3K_{\Delta_1}}}\delta_{ii}\,. \tag{19}$$

В случае недеформированного кристалла $n_{\Delta_1} \approx 0$ и из последнего выражения следует

$$\alpha_{ii}^{(e)} = \frac{k}{e}\left(\xi_{\perp}^{L_1}\frac{2K_{L_1}+r_{L_1}}{2K_{L_1}+1} - \bar{\mu}^*\right)\delta_{ii}\,. \tag{20}$$

При наличии только акустического рассеяния формула (20) дает $\alpha_{ii}^{(e)}=\dfrac{k}{e}\left(2-\bar{\mu}^*\right)\delta_{ii}$.

В случае сильной деформации после инверсии долин практически все электроны будут локализованы в Δ_1-долинах ($n_{L_1}\approx 0$, $n_{\Delta_1}=1/6$) и формула (20) будет справедлива с заменой индексов $L_1\to\Delta_1$.

ТермоЭДС увлечения

Известно [4, 6, 8], что компоненты кинетического тензора $b_{ik}^{f,(i)}$ «*i*»-долины, обусловленные увлечением фононами электронов, могут быть определены как

$$b_{ik}^{f,(i)}=-\left\langle \sigma_{il}^{(i)}(x)\alpha_{lk}^{f,(i)}(x)\right\rangle. \tag{21}$$

Здесь $\alpha_{lk}^{f,(i)}(x)$ – тензор термоЭДС увлечения, обусловленной увлечением группы электронов с приведенной энергией x длинноволновыми фононами всех поляризаций. Как показано в [6], для двухосной изоэнергетической поверхности тензор $\alpha_{lk}^{f,(i)}(x)$ должен иметь симметрию минимума, то есть тензор $\alpha_{lk}^{f,(i)}(x)$ имеет две независимых компоненты:

$$\alpha_{\perp}^{f}(x)=(k/e)f_{\perp}(x),\quad \alpha_{\parallel}^{f}(x)=(k/e)(m_{\parallel}/m_{\perp})f_{\parallel}(x), \tag{22}$$

$$f_{\perp}(x)=\sum_j A_{n_j}\beta_{n_j}x^{n_j-1/2}I_{\perp,n_j},\quad f_{\parallel}(x)=\sum_j A_{n_j}\beta_{n_j}x^{n_j-1/2}I_{\parallel,n_j}. \tag{23}$$

В приведенных выше выражениях суммирование производится по поляризациям фононов, A_{n_j} – константы, определяемые путем сравнения экспериментальных данных и теоретических расчетов (метод получения их описан в [15, 16]), константы β_{n_j} и интегралы $I_{\perp,\parallel,n_j}$ зависят от характеристик энергетических долин кристалла в целом и приведены в явной форме в [6], параметр n_j был найден в [14, 15] и для германия $n_l=0.25$, $n_t=0.5$.

Вводя обозначения

$$\alpha_{\perp,L_1,\Delta_1}^{(j)}(T)=(k/e)A_{n_j}\beta_{n_j,L_1,\Delta_1}I_{\perp,n_j}^{L_1,\Delta_1}, \tag{24}$$

$$\alpha_{\parallel,L_1,\Delta_1}^{(j)}(T)=(k/e)(m_{\parallel}^{L_1,\Delta_1}/m_{\perp}^{L_1,\Delta_1})A_{n_j}\beta_{n_j,L_1,\Delta_1}I_{\parallel,n_j}^{L_1,\Delta_1} \tag{25}$$

и проводя усреднение по энергиям электронов, для компонент кинетического тензора одной долины в системе координат, связанной с главными осями тензора масс, имеем

$$b_{11,33}^{f(i)}=b_{\perp,\parallel}^{f(i)}=\frac{4}{3\sqrt{\pi}}\frac{N_0' e^2}{T\sqrt{kT}}n_i\frac{a_{\perp,\parallel}^{(i)}}{m_{\perp,\parallel}^{(i)}}\alpha_{\perp,\parallel}^{(j,i)}(T)J_{\perp,\parallel}^{(i)}(5/2+n_j). \tag{26}$$

Для L_1- и Δ_1-долин в соответствующих множителях будут введены индексы, указывающие тип долины.

После преобразования компонент $b_{\perp,\parallel}^{f(i)}$ кинетического тензора каждой долины к лабораторной системе координат и суммирования по всем группам эквивалентных долин не трудно получить выражение для компонент кинетического тензора кристалла. Для упрощения полученного выражения удобно использовать следующие обозначения:

$$\alpha_{\perp,\parallel}^{f}=\sum_j \alpha_{\perp,\parallel}^{(j)}(T)\frac{J_{\perp,\parallel}(5/2+n_j)}{J_{\perp,\parallel}(3)},\quad \bar{M}=\frac{\alpha_{\parallel}^{f}}{\alpha_{\perp}^{f}}, \tag{27}$$

где $\alpha^f_{\perp,\parallel}$ – поперечная или продольная компоненты тензора термоЭДС увлечения, обусловленной увлечением электронов, принадлежащих одной долине, $\bar{M}$ – усредненный параметр анизотропии термоЭДС увлечения.

Подчеркнем, что в приведенных выше выражениях все величины связаны с определенной группой долин (L_1 или Δ_1) и в дальнейшем будут указаны соответствующие индексы.

Используя (12) для компонент кинетического тензора кристалла в лабораторной системе координат, можно получить следующее выражение:

$$b^f_{11} = b^f_{33} = 4n_{L_1}\sigma^{L_1}_{\perp}\alpha^f_{\perp,L_1}\frac{2K_{L_1}+\bar{M}_{L_1}}{3K_{L_1}} + 6n_{\Delta_1}\sigma^{\Delta_1}_{\perp}\alpha^f_{\perp,\Delta_1}\frac{2K_{\Delta_1}+\bar{M}_{\Delta_1}}{3K_{\Delta_1}}. \tag{28}$$

Нетрудно получить аналитическое выражение для тензора термоЭДС увлечения, принимая во внимание все L_1- и Δ_1-долины, так как $\alpha^f_{ii} = b^f_{ii}/\sigma_{ii}$,

$$\alpha^f_{ii} = \frac{4n_{L_1}\sigma^{L_1}_{\perp}\alpha^f_{\perp,L_1}\dfrac{2K_{L_1}+\bar{M}_{L_1}}{3K_{L_1}} + 6n_{\Delta_1}\sigma^{\Delta_1}_{\perp}\alpha^f_{\perp,\Delta_1}\dfrac{2K_{\Delta_1}+\bar{M}_{\Delta_1}}{3K_{\Delta_1}}}{4n_{L_1}\sigma^{L_1}_{\perp}\dfrac{2K_{L_1}+1}{3K_{L_1}} + 6n_{\Delta_1}\sigma^{\Delta_1}_{\perp}\dfrac{2K_{\Delta_1}+1}{3K_{\Delta_1}}}\delta_{ii}, \tag{29}$$

то есть α^f, так же как и α^e, вырождается в скаляр вследствие кубической симметрии кристалла.

Соотношение (29) позволяет легко рассмотреть ряд частных случаев.

Для недеформированного кристалла вкладом Δ_1-долин можно пренебречь (это очевидно) и можно получить хорошо известную формулу для термоЭДС увлечения недеформированного кристалла *n-Ge*:

$$\alpha^f_{11} = \alpha^f_{33} = \alpha^f_{\perp,L_1}\frac{2K_{L_1}+\bar{M}_{L_1}}{2K_{L_1}+1}. \tag{30}$$

В случае сильной деформации (после инверсии долин) практически все электроны локализованы в Δ_1-долинах ($n_{L_1}\approx 0$, $n_{\Delta_1}=1/6$) и формула (30) справедлива при замене индексов $L_1 \to \Delta_1$.

Численные результаты

Для проведения вычислений необходимо знать ряд параметров кристалла наряду с параметрами L_1- и Δ_1-долин. Все параметры, используемые для описания внутридолинного рассеяния в L_1-долинах, хорошо известны [4–6]. Параметры, необходимые для описания междолинного рассеяния, приведены в [1–3, 8, 9]. Разные значения эффективных масс и постоянных деформационного потенциала для Δ_1-долин были оценены в [1–3, 9, 13, 14]. К сожалению, отсутствуют экспериментальные данные по термоЭДС в случае сильных упругих деформаций. По этой причине были использованы значения эффективных масс и постоянных деформационного потенциала из [9], поскольку эти значения дают качественное совпадение с экспериментальными результатами для пьезосопротивления при сильном гидростатическом давлении. Таким образом, мы использовали такие значения эффективных масс в Δ_1-долинах: $m^{\Delta_1}_{\perp}/m_0 = 0.225$, $m^{\Delta_1}_{\perp}/m_0 = 0.612$ и констант потенциала деформации: $C^{\Delta_1}_1 = 0.1$ эВ, $C^{\Delta_1}_2 = 12.0$ эВ. Мы также использовали значения $C^{\Delta_1}_1 = 0.18$ эВ и $C^{\Delta_1}_2 = 8.636$ эВ, потому что они описывают количественно инверсию L_1- и Δ_1-долин. На рисунках, приведенных ниже, сплошные линии соответствуют первой паре констант и штриховые – второй паре констант. Были использованы значения упругих констант из [17]. Приведем результаты расчета диффузионной термоЭДС и термоЭДС увлечения, используя эти и другие параметры и константы из [5, 6, 18]. На рисунках, приведенных ниже, показаны результаты вычислений для деформационных потенциалов, чисел заполнения, диффузионной термоЭДС и термоЭДС увлечения для двух температур $T = 78$ К и $T = 300$ К. Концентрация электронов $N_0' = 4.7 \cdot 10^{13}$ см$^{-3}$.

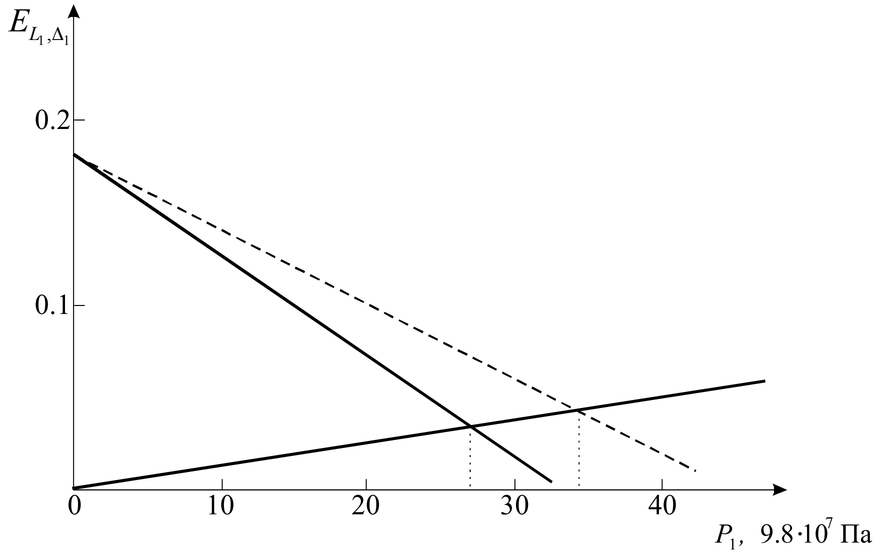

Рис. 1. Деформационные потенциалы в зависимости от P. T = 300 K.

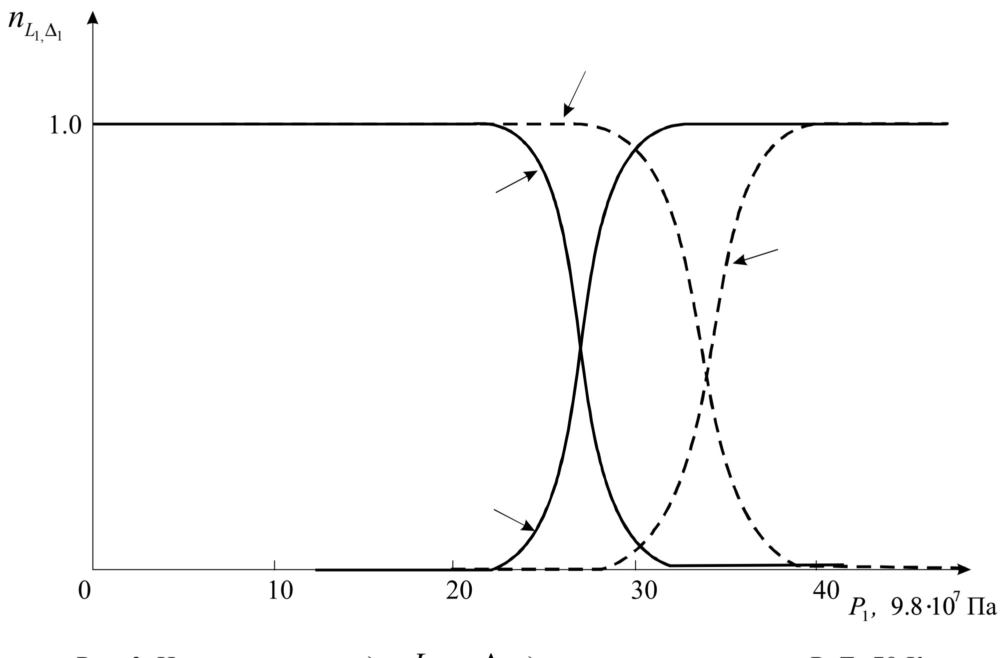

Рис. 2. Числа заполнения для L_1 - и Δ_1 -долин в зависимости от P. T=78 K.

Деформационные потенциалы зависят от температуры только через зависимость компонент тензора упругих податливостей от температуры. Эти зависимости слабые и на рис. 1 приведены только для $T = 300$ К. Давление P_0' соответствует экспериментально наблюдаемой инверсии долин [3].

Результаты численного расчета диффузионной термоЭДС в зависимости от приложенного гидростатического давления показаны на рис. 4, 5. Значения диффузионной термоЭДС в недеформированном кристалле при указанных температурах соответствуют

$\alpha^e\left(0;78\,\text{K}\right)=1074$ мкВ/К и $\alpha^e\left(0;300\,\text{K}\right)=1234$ мкВ/К. Существование максимума (рис. 3, 4) объяснено в [8] для одноосного сжатия и в этом случае также справедливо.

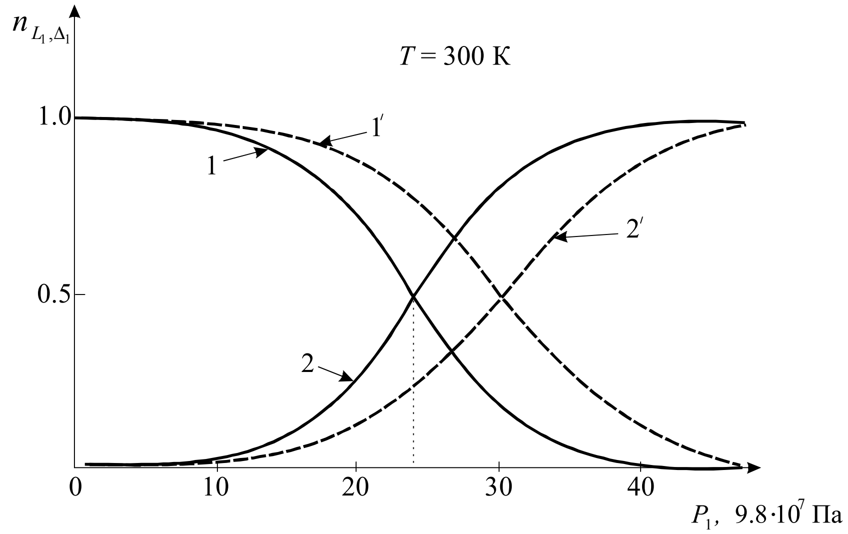

Рис. 3. Числа заполнения для L_1- и Δ_1-долин в зависимости от P. T = 300 K.

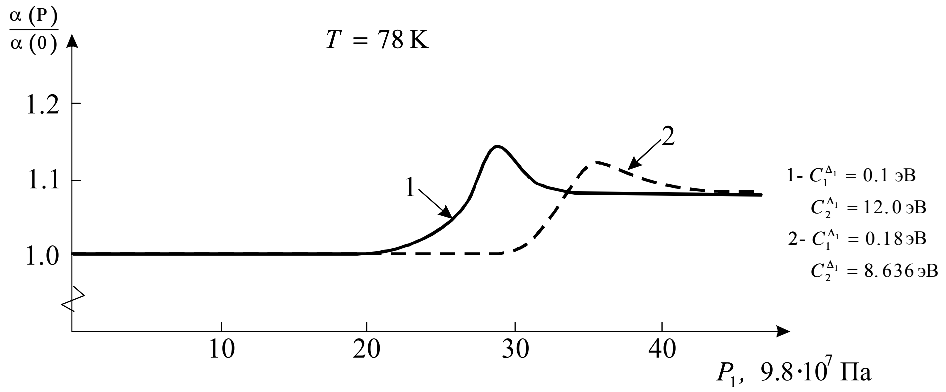

Рис. 4.

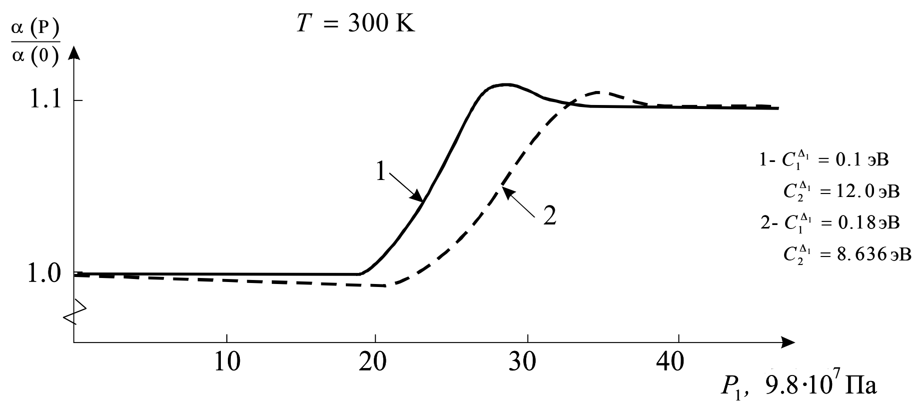

Рис. 5.
Изменение диффузионной термоЭДС с давлением P, T = 78 K (рис.4), T = 300 K (рис.5).

Все параметры, необходимые для расчета термоЭДС увлечения, выбраны, как и в [8]. На рис. 6, 7 приведены результаты численного расчета термоЭДС увлечения в $L_1-\Delta_1$ модели германия при сильном гидростатическом давлении.

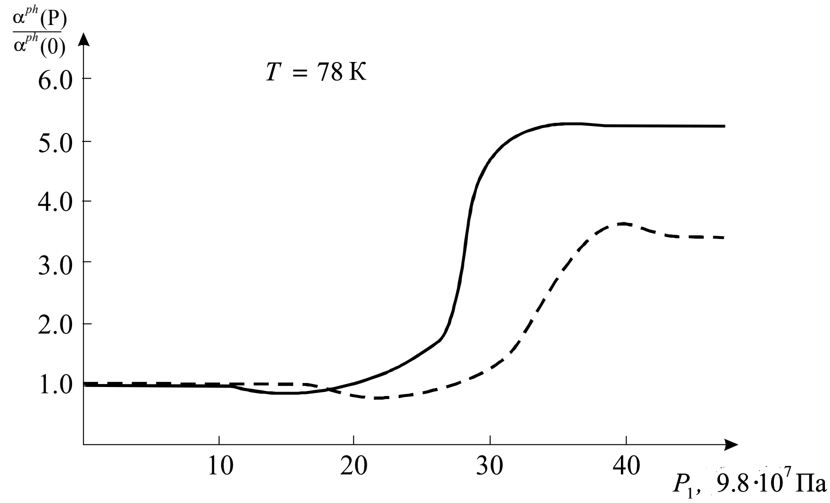

Рис. 6.

Поведение зависимостей подобно поведению пьезосопротивления в этой модели [1–3]. Очевидно, что в области высоких температур (T = 300 К) переход электронов между L_1- и Δ_1-долинами начинается при меньших значениях P и, таким образом, интервал перехода между L_1- и Δ_1-долинами становится более размытым.

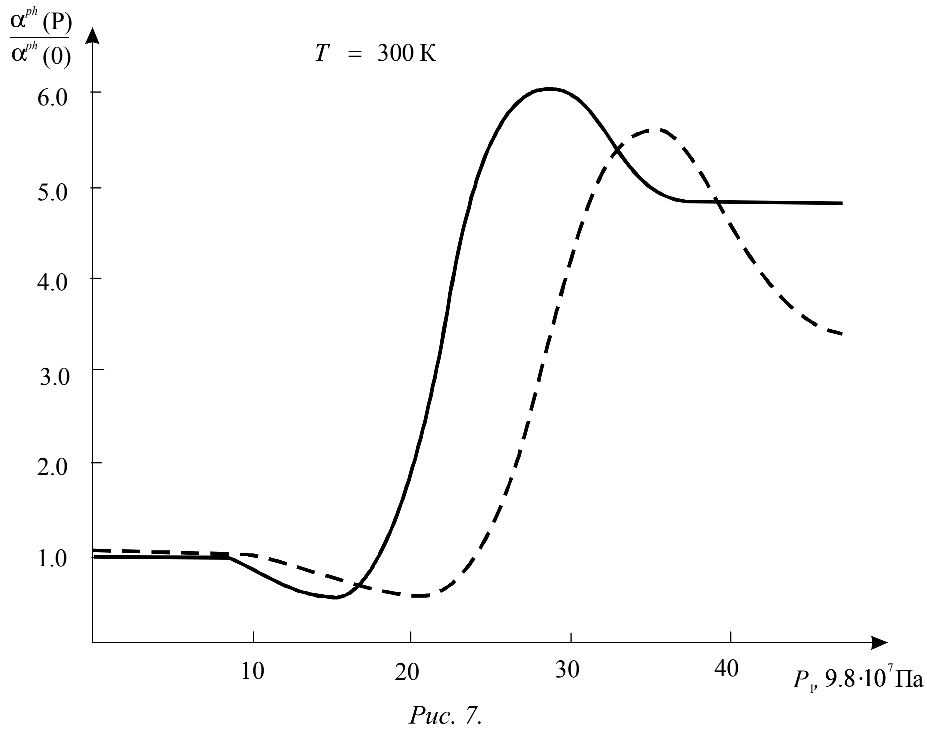

Рис. 7.

Изменение фононной термоЭДС с давлением Р. Т=78 К (рис. 6), Т=300 К, $\alpha^{ph}\left(0;78\text{ K}\right)\approx 1000$ мкВ/К, $\alpha^{ph}\left(0;300\text{ K}\right)\approx 6.0$ мкВ/К. *Сплошная линия соответствует* $C_1^{\Delta_1}=0.1$ эВ, $C_2^{\Delta_1}=12.0$ эВ, *штриховая линия соответствует* $C_1^{\Delta_1}=0.18$ эВ, $C_2^{\Delta_1}=8.636$ эВ.

В заключение авторы выражают искреннюю благодарность проф. Баранскому П. И. (Институт физики полупроводников Национальной академии наук Украины) и проф. Бурдейному В.П. (Департамент физики Университета Эдуардо Мондлане) за полезные советы и обсуждение.

Авторы также искренне благодарны за финансовую поддержку шведскому агентству SIDA/SAREC и исследовательской группе по возобновляемым источникам энергии Университета Эдуардо Мондлане в Мапуту, Мозамбик.

Литература

1. Fawcett W., Paige E.G.S. Negative differential mobility of electrons in germanium // J. Phys. C: Solid St. Phys. – 1971. – Vol.4. – P. 1801.
2. Fletcher K. and Pitt G.D. Intervalley scattering in n type Ge from a Hall effect experiment to high pressures // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1971. – V.4. – P.1822.
3. Ahmad C.N., Adams A.R. and Pitt G.D. Temperature dependence of the electron mobility in the Δ_{1c} minima of Germanium // J. Phys. C: Sol. State Phys. – 1979. – V.12, N 10. – P L379.
4. Самойлович А.Г., Буда И.С., Даховский И.В. Теория анизотропного рассеяния // ФТП. – 1973. – Т.7. – №4. – С.859.
5. Баранский П. И., Буда И. С., Даховский И. В., Коломоец В. В. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках. – К.: Наук. думка, 1977, 270 с.
6. Баранский П. И., Буда И. С., Даховский И. В. Теория термоэлектрических и термомагнитных явлений в анизотропных полупроводниках. – К.: Наук. думка, 1987. – 272 с.
7. Черныш В. В., Самойлович А. Г. и исследование явлений переноса в упруго деформированном германии // Термоэлектричество. – 2006. – №3. – С.14.
8. Черныш В. В., Куамба Б. Ш. ТермоЭДС в $L_1 - \Delta_1$ -модели германия // Термоэлектричество. – 2007. – № 3. – С.29.
9. Chernysh V., Burdeynyy V., Tomo F. Peculiarity of Piezoresistance in L_1-Δ_1 Model of Germanium // Proceedings of SPIE (USA). – 2001. – V.4425. – P. 362.
10. Herring C. Transport properties of many-valley semiconductors // Bell System Techn. J. – 1956. – V.34. – №1. – P.237.
11. Nye J.P. Physical properties of crystals. – Oxford at the Clarendon press, 1964. – 322 p.
12. Москалюк В.О. Фізика електронних процесів. – К.: Політехніка, 2004. – 180 с.
13. Баранский П. И., Коломоец В. В., Федосов А. В. Пьезосопротивление, возникающее в условиях симметричной ориентации оси деформации по отношению ко всем изоэнергетическим эллипсоидам // ФТП. – 1979. – Т.13, №10. – С. 815.
14. Баранский П. И., Коломоец В.В., Сусь Б.А., Шаповалов В.П. Некоторые характеристики энергетических минимумов <100> типа в *n-Ge* // ФТП. – 1979. – Т.13, №3. – С. 602.
15. Черныш В. В. Анизотропия пьезотермомагнитных явлений в области эффекта увлечения. Автореф. Дис. …канд.физ.-мат. наук., Черновцы, 1977. – 20 с.
16. Баранский П. И., Буда И. С., Коломоец В. В., Самойлович А. Г., Сусь Б. А., Черныш В. В. Фонон-фононная релаксация при эффектах увлечения в *n-Ge* // ФТП. – 1975. – Т.9, № 9. – С.1680.
17. McSkimin H.J. and Andreatch P. Elastic Moduli of Germanium Versus Hydrostatic Pressure at 25 ºC and –195.8 ºC // J.Applied Phys. – 1963. – V. 34. – № 3. – P. 651.
18. Баранский П. И., Клочков В. П., Потыкевич И. В. Полупроводниковая электроника. – К.: Наук. думка, 1975. – 704 с.

Поступила в редакцию 10.02.09.