В.В. Черниш

ТЕРМОЕРС В L_1-Δ_1 МОДЕЛІ ГЕРМАНІЮ ЗА СИЛЬНОГО ГІДРОСТАТИЧНОГО ТИСКУ

В.В. Черниш, Б.Ш. Куамба

(Університет Едуардо Мондлане, Мапуту, Мозамбік)

Б.Ш. Куамба

• *За наявності сильних пружних гідростатичних деформацій відбувається перехід електронів з чотирьох L_1-долин в шість еквівалентних Δ_1-долин, і енергетична структура германію n-типу стає подібною до енергетичної структури кремнію n-типу. Обчислено деформаційні потенціали й числа заповнення долин і проаналізовано їх поведінку залежно від тиску за низьких T=78 K і кімнатних T=300 K температур. Теорію анізотропного розсіювання було використано для обчислення термоЕРС. Розглянуто внутрішньодолинне змішане розсіювання електронів на акустичних фононах і іонах домішок, міждолинне нееквівалентне розсіювання електронів між L_1- і Δ_1-долинами і міждолинне еквівалентне f- і g- розсіювання між Δ_1-долинами.*

Вступ

Енергетична структура зони провідності германію добре відома [1-3]; за атмосферного тиску зайняті електронами чотири найнижчих L_1-долини зони провідності. Однак зі збільшенням гідростатичного тиску енергія чотирьох L_1-долин зростає відносно дна зони провідності недеформованого кристалу. Δ_1-долини мають від'ємний коефіцієнт тиску і опускаються в шкалі енергії [1–3]. Здебільшого розглядалися лише чотири L_1-долини у випадку недеформованих монокристалів германію або за наявності відносно невеликих деформацій (L_1-модель германію) [4–6]. За наявності сильних пружних деформацій Δ_1-долини мають включатися до розгляду ($L_1 - \Delta_1$ модель германію) [1–3, 7–9, 13, 14]. За певного тиску P_0 положення двох груп долин стає однаковим за енергетичною шкалою. У разі подальшого збільшення тиску маємо інверсію L_1- і Δ_1-долин, тобто Δ_1-долини будуть локалізовані нижче в енергетичній шкалі відносно L_1-долин. За достатньо сильних тисків практично всі вільні електрони будуть локалізовані в Δ_1-долинах (Δ_1-модель германію) і відповідно структура зони провідності германію стає подібною до структури зони провідності кремнію за атмосферного тиску. За цих умов Δ_1 долини стають доступними для прямих електричних вимірювань [2, 3] і, таким чином, теоретичний розгляд явищ переносу не чисто штучний. У цій роботі ми намагатимемось проаналізувати термоелектрорушійну силу за наявності сильного гідростатичного тиску.

Числа заповнень і хімічний потенціал

У припущенні невиродженості електронного газу рівноважний розподіл електронів у L_1- і Δ_1-долинах може бути поданий [5, 6] як

$$\overline{f}^{(i)}_{\tilde{k}} = \exp(\overline{\mu}^* - E^{(i)*}_{L_1} - \varepsilon^{(i)*}_{\tilde{k}}), \qquad \overline{f}^{(j)}_{\tilde{k}} = \exp(\overline{\mu}^* - \Delta E_0^* - E^{(j)*}_{\Delta_1} - \varepsilon^{(k)*}_{\tilde{k}}), \tag{1}$$

тут $\overline{\mu}^* = \overline{\mu}/kT$ – зведений хімічний потенціал в деформованому кристалі, $E^{(i,j)}_{L_1,\Delta_1}$ – зведений потенціал деформації L_1- і Δ_1-долин, $\Delta E_0^* = \Delta E_0/kT$ – зведена відстань по енергетичній шкалі між L_1- і Δ_1- мінімумами в недеформованому монокристалі.

Повне число електронів у кожній L_1- і Δ_1-долині відповідно

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

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

Легко знайти із (2) число електронів у кожній долині недеформованого кристалу N_{L_1,Δ_1}^0 заміною $E_{L_1,\Delta_1}^{(i,j)} = 0$, $\overline{\mu}^* \to \mu^*$, де μ^* – хімічний потенціал недеформованого кристалу.

Зазначимо, що для знаходження деформаційних потенціалів, які входять у (1)-(2), необхідно використовувати теорію деформаційного потенціалу для кубічних кристалів [5,6,10]. Деформаційний потенціал для *i*-долини, як випливає із цієї теорії, у системі координат, зв'язаній з головними вісями тензора мас,

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

де $C_1^{(i)}$ і $C_2^{(i)}$ – константи деформаційного потенціалу, $\varepsilon_{ll}^{(i)}$ – компоненти тензора деформації *i*-долини. Зазвичай всі деформаційні потенціали і відповідно всі компоненти тензора деформації мають бути виражені в одній і тій же лабораторній системі координат, зв'язаній з кристалографічними вісями [100], [010], [001]. Для їх знаходження використовується закон Гука у формі

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

де U_{lm} – тензор пружних напруг; у випадку гідростатичного тиску тензор напруг має три діагональні компоненти, $U_{lm} = P\delta_{lm}$, $P < 0$ відповідає стиску, S'_{iklm} – тензор пружних піддатливостей, зазвичай компоненти цього тензора відомі у кристалографічній системі координат [11]. У нашому випадку кристалографічна система координат збігається з лабораторною.

Після перетворення компонент тензора деформації кожної долини до лабораторної системи координат потенціали деформації набувають вигляду

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

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

Тут S_{ik} – матричні позначення Фойгта компонент тензора пружних піддатливостей: $S_{11} = S_{1111}$; $S_{12} = S_{1122}$. Всі деформаційні потенціали для L_1-долин рівні і додатні, тому що $C_1^{L_1} + \frac{1}{3}C_2^{L_1} < 0$ [5], $S_{11} + 2S_{12} > 0$ і $P < 0$ для стиску. Це означає, що чотири L_1-долини піднімаються по шкалі енергії зі зростанням тиску. В той же час всі деформаційні потенціали Δ_1-долин також рівні між собою і мають бути від'ємними й опускатися по шкалі енергії з ростом тиску згідно з [1–3], якщо $C_1^{\Delta_1} + \frac{1}{3}C_2^{\Delta_1} > 0$.

Використовуючи рівняння електронейтральності для недеформованого ($4N_{L_1}^0 + 6N_{\Delta_1}^0 = N_0$) і для деформованого ($4N_{L_1} + 6N_{\Delta_1} = N_0$) кристала, легко визначити співвідношення між хімпотенціалом у деформованому ($\overline{\mu}^*$) і в недеформованому (μ^*) кристалі

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

і одержати вираз для відносного числа електронів у долинах $n_r^{(i)} = N_r^{(i)} \big/ N_0$,

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

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

Тут $m_N^{L_1,\Delta_1} = \left[\left(m_\perp^{L_1,\Delta_1}\right)^2 m_\parallel^{L_1,\Delta_1}\right]^{\frac{1}{3}}$ – ефективна маса густини станів в L_1- і Δ_1-долинах. У недеформованому кристалі $P = 0$, $n_{L_1} = 0.25$, $n_{\Delta_1} \approx 0$. У випадку сильного тиску $P > P_0$ практично всі електрони локалізовані в Δ_1-долинах, $n_{L_1} \approx 0$, $n_{\Delta_1} = 1/6$. За тиску, що відповідає інверсії долин $P = P_0$, всі десять долин (L_1- і Δ_1-долин) є енергетично еквівалентні, тобто $E_{L_1} = \Delta E_0 + E_{\Delta_1}$ і з (5) випливає $n_{L_1} \Big/ n_{\Delta_1} = \left(m_N^{L_1} / m_N^{\Delta_1}\right)^{\frac{3}{2}}$. Це означає, що в цьому випадку в кожній долині буде однакова кількість електронів лише за рівності їх ефективних мас густини станів у долині кожного типу.

Із (4) і (5) не важко знайти явний вираз для хімічного потенціалу в деформованому і в недеформованому кристалах і записати їх у двох різних, але еквівалентних формах:

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

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

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

Хімічний потенціал недеформованого кристалу можна знайти відомими методами.

Дифузійна термоЕРС

Перш за все коротко зупинимось на механізмах розсіювання електронів у нашій моделі. Обмежимося в нашому розгляді процесами розсіювання за участю фононів і іонів домішок у L_1- і Δ_1-долинах. У L_1- і Δ_1-долинах електрони беруть участь у таких процесах розсіювання: внутрішньодолинне розсіювання на акустичних фононах і іонах домішок, а також нееквівалентне міждолинне розсіювання між L_1- і Δ_1-долинами. До того ж в Δ_1-долинах електрони беруть участь в еквівалентному міждолинному розсіюванні між долинами, що розміщені на одній вісі (*g*-розсіювання) і в еквівалентному міждолинному розсіюванні між долинами, розміщеними на перпендикулярних вісях (*f*-розсіювання).

Припустимо, що всі зазначені процеси розсіювання можуть бути описані відповідними часами релаксації і правило Матіссена справедливе в цьому випадку. Внутрішньодолинне розсіювання на акустичних фононах, як і міждолинне розсіювання на іонах домішок, можна описати діагональним тензором часів релаксації з двома компонентами, який наведений детально в [4–9]. Міждолинне розсіювання електронів спричинене взаємодією з акустичними і оптичними фононами з частотами, що відповідають температурам $T_{c1} = 320$ К (нееквівалентне міждолинне розсіювання між L_1- і Δ_1-долинами і еквівалентне міждолинне *f*-розсіювання), T_{c2} = 430 К і T_{c3} = 100 К (еквівалентне міждолинне *g*-розсіювання) описується скалярним часом релаксації [1, 4–9, 12], яке ми узагальнимо, беручи до уваги кінетику долин за наявності великого гідростатичного тиску. Всі кінетичні інтеграли мають таку ж аналітичну форму, як і в [8].

Як відомо [4-6], тензор термоЕРС визначається співвідношенням

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

Передусім розглянемо тензор питомого опору. Для його визначення спочатку розглянемо тензор питомої електропровідності. Для монокристалів германію у випадку гідростатичного стиску він може бути обчислений таким чином:

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

У цьому виразі $\sigma_{ik}^{(r)L,\Delta}$ – компоненти тензора електропровідності для L_1- і Δ_1-долин, записані в лабораторній системі координат. У головних вісях тензора мас *i*-долини тензор питомої електропровідності цієї долини має дві відмінні від нуля компоненти [5-8], які після усереднення по енергії виглядають таким чином:

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

(Всі позначення такі ж, як у [8]). Тензор питомої електропровідності кристала знаходиться зазвичай перетворенням компонент тензора електропровідності кожної долини до лабораторної системи координат, сумуючи, на додаток, по всім L_1- і Δ_1-долинам, використовуючи (8). У результаті нескладних обчислень одержимо

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

Останню формулу можна переписати в компактній формі із введенням ефективного параметра анізотропії розсіювання

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

беручи до уваги (9). У цьому випадку

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

Із експериментів з чистими кристалами відомо, що за низьких температур $T = 78$ K $K_{L_1} = 16.4$ і $K_{\Delta_1} = 4.4$ [5,13,14].

Як відомо, гідростатичний тиск не змінює симетрію кристала і в кубічних кристалах тензор електропровідності вироджується в скаляр. Цей факт відображено останньою формулою. Очевидно, що компоненти тензора електроопору можна обчислити за формулою

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

Зазначимо, що залежність від тиску в (10), (12) входить через числа заповнення і інтеграли, де час релаксації міждолинного нееквівалентного розсіювання залежить від тиску.

Для окремо взятої «*i*»-долини за наявності деформації симетрія тензора $b_{lk}^{(i)}$ збігається з симетрією тензора $\sigma_{ik}^{(i)}$, тому що [6]

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

Тут $\sigma_{lk}^{(i)}(\bar{x}, P)$ – електропровідність «*i*»-долини, спричинена групою електронів зі зведеною енергією $\bar{x}$, скаляр $\alpha^{e,(i)}(\bar{x}, P)$ – електронна термоЕРС «*i*»-долини, спричинена дифузією групи електронів зі зведеною енергією $\bar{x}$ за наявності деформації [6]: $\alpha^{e,(i)}(\bar{x},P)=(k/e)(\bar{x}-\bar{\mu}^*)$.

Компоненти тензора $b_{lk}^{(i)}$ «*i*»-долини після усереднення по енергії набувають такого вигляду:

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

Використовуючи ефективний параметр анізотропії (14) і вводячи позначення $\xi_{\perp,\parallel}^{(i)}=J_{\perp,\parallel}^{(i)}(4)/J_{\perp,\parallel}^{(i)}(3)$, вираз (15) набуває форми

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

Після перетворення компонент тензора $b_{\perp,\parallel}^{e,(i)}$ кожної долини до лабораторної системи координат і сумування за всіма групами еквівалентних долин для тензора b_{lk}^{e} матимемо

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

Беручи до уваги (11), (16) і вводячи позначення

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

матимемо вираз (17) такої форми:

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

Очевидно, що термоЕРС буде скалярною величиною також.

Дифузійну термоЕРС в явному вигляді можемо одержати без труднощів, використовуючи (7), (12) і (13). Насамкінець одержуємо

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

У випадку недеформованого кристала $n_{\Delta_1}\approx 0$ і з останнього виразу випливає

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

За наявності тільки акустичного розсіювання формула (20) дає $\alpha_{ii}^{(e)}=\frac{k}{e}\left(2-\bar{\mu}^*\right)\delta_{ii}$.

У випадку сильної деформації після інверсії долин практично всі електрони будуть локалізовані в Δ_1-долинах ($n_{L_1}\approx 0$, $n_{\Delta_1}=1/6$) і формула (20) буде справедлива із заміною індексів $L_1\to\Delta_1$.

ТермоЕРС захоплення

Відомо [4, 6, 8], що компоненти кінетичного тензора $b_{ik}^{f,(i)}$ «*i*»-долини, спричинені захопленням фононами електронів, можна визначити як

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

Тут $\alpha_{lk}^{f,(i)}(x)$ – тензор термоЕРС захоплення, спричиненої захопленням групи електронів зі зведеною енергією x довгохвильовими фононами всіх поляризацій. Як показано в [6], для двохвісної ізоенергетичної поверхні тензор $\alpha_{lk}^{f,(i)}(x)$ повинен мати симетрію мінімуму, тобто тензор $\alpha_{lk}^{f,(i)}(x)$ має дві незалежні компоненти:

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

і

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

У вищенаведених виразах сумування проводиться за поляризаціями фононів, A_{n_j} – константи, що визначаються шляхом порівняння експериментальних даних і теоретичних обчислень, метод одержання їх описаний в [15,16], константи β_{n_j} і інтеграли $I_{\perp,\|,n_j}$ залежать від характеристик енергетичних долин і кристала в цілому і наведені в явній формі в [6], параметр n_j був знайдений в [14,15] і для германію $n_l = 0.25$, $n_t = 0.5$.

Вводячи позначення

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

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

і проводячи усереднення за енергіями електронів, для компонент кінетичного тензора однієї долини в системі координат, зв’язаній з головними вісями тензора мас, маємо

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

Для L_1- і Δ_1-долин у відповідних множниках будуть введені індекси, що вказують тип долини.

Після перетворення компонент $b_{\perp,\|}^{f(i)}$ кінетичного тензора кожної долини до лабораторної системи координат і сумування по всім групам еквівалентних долин не важко одержати вираз для компонент кінетичного тензора кристала. Для спрощення одержаного виразу зручно використати таке позначення:

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

де $\alpha_{\perp,\|}^{f}$ – поперечна чи поздовжня компоненти тензора термоЕРС захоплення, що обумовлені захопленням електронів, які належать одній долині, $\bar{M}$ – усереднений параметр анізотропії термоЕРС захоплення.

Підкреслимо, що в наведених вище виразах усі величини пов’язані з певною групою долин (L_1 чи Δ_1) і в подальшому відповідні індекси будуть вказані.

Використовуючи (12) для компонент кінетичного тензора кристала в лабораторній системі координат, можна одержати такий вираз:

$$b_{11}^{f} = b_{33}^{f} = 4 n_{L_1} \sigma_{\perp}^{L_1} \alpha_{\perp,L_1}^{f} \frac{2K_{L_1} + \bar{M}_{L_1}}{3K_{L_1}} + 6 n_{\Delta_1} \sigma_{\perp}^{\Delta_1} \alpha_{\perp,\Delta_1}^{f} \frac{2K_{\Delta_1} + \bar{M}_{\Delta_1}}{3K_{\Delta_1}} . \qquad (28)$$

Неважко одержати аналітичний вираз для тензора термоЕРС захоплення, враховуючи всі L_1- і Δ_1-долини, оскільки $\alpha_{ii}^f = b_{ii}^f / \sigma_{ii}$,

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

тобто α^f, так як і α^e, вироджується в скаляр завдяки кубічній симетрії кристала.

Співвідношення (29) дає можливість легко розглянути ряд часткових випадків.

Для недеформованого кристала вкладом Δ_1-долин можна знехтувати (це очевидно) і можна одержати добре відому формулу для термоЕРС захоплення недеформованого кристала *n-Ge*:

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

У випадку сильної деформації, після інверсії долин, практично всі електрони локалізовані в Δ_1-долинах ($n_{L_1} \approx 0$, $n_{\Delta_1} = 1/6$) і формула (30) справедлива в разі заміни індексів $L_1 \to \Delta_1$.

Чисельні результати

Для обчислень необхідно знати ряд параметрів кристала поряд з параметрами L_1- і Δ_1-долин. Всі параметри, що використовуються для опису внутрішньодолинного розсіювання в L_1-долинах, добре відомі [4–6]. Параметри, необхідні для опису міждолинного розсіювання, наведені в [1–3, 8, 9]. Різні значення ефективних мас і постійних деформаційного потенціалу для Δ_1-долин були оцінені в [1–3, 9, 13, 14]. На жаль, відсутні експериментальні дані з термоЕРС у випадку сильних пружних деформацій. З цієї причини були використані значення ефективних мас і постійних деформаційного потенціалу з [9], тому що ці значення дають якісний збіг з експериментальними результатами для п'єзоопору за сильного гідростатичного тиску. Таким чином, ми використали такі значення ефективних мас в Δ_1-долинах: $m_\perp^{\Delta_1}/m_0 = 0.225$, $m_\parallel^{\Delta_1}/m_0 = 0.612$ і констант потенціалу деформації: $C_1^{\Delta_1} = 0.1$ еВ, $C_2^{\Delta_1} = 12.0$ еВ. Ми також використали значення $C_1^{\Delta_1} = 0.18$ еВ і $C_2^{\Delta_1} = 8.636$ еВ, тому що вони описують кількісно інверсію L_1- і Δ_1-долин. На малюнках, наведених нижче, суцільні лінії відповідають першій парі констант і штрихові – другій парі констант. Було використано значення пружних констант із [17]. Наведемо результати розрахунків дифузійної термоЕРС і термоЕРС захоплення, використовуючи ці й інші параметри і константи із [5,6,18]. На рисунках, наведених нижче, показано результати обчислень для деформаційних потенціалів, чисел заповнення, дифузійної термоЕРС і термоЕРС захоплення для двох температур – $T = 78$ К і $T = 300$ К. Концентрація електронів $N_0' = 4.7\cdot10^{13}$ см$^{-3}$.

Деформаційні потенціали залежать від температури лише через залежність компонент тензора пружних піддатливостей від температури. Ці залежності слабкі, і на рис. 1 наведені лише для $T = 300$ К. Тиск P_0' відповідає експериментально спостережуваній інверсії долин [3].

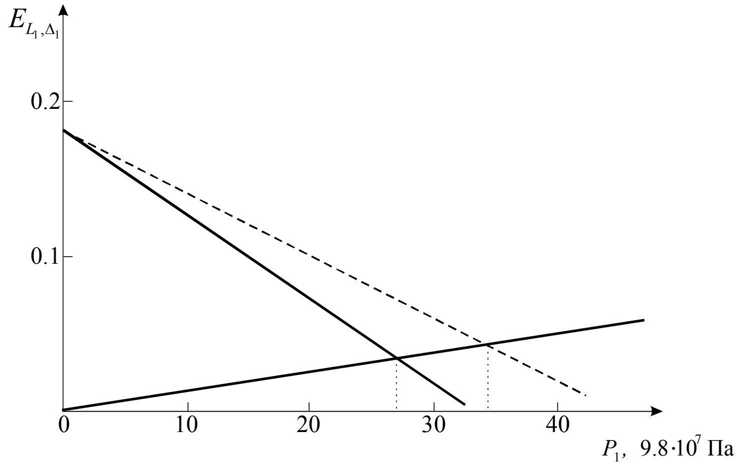

Рис. 1. Деформаційні потенціали залежно від Р. Т=300 К.

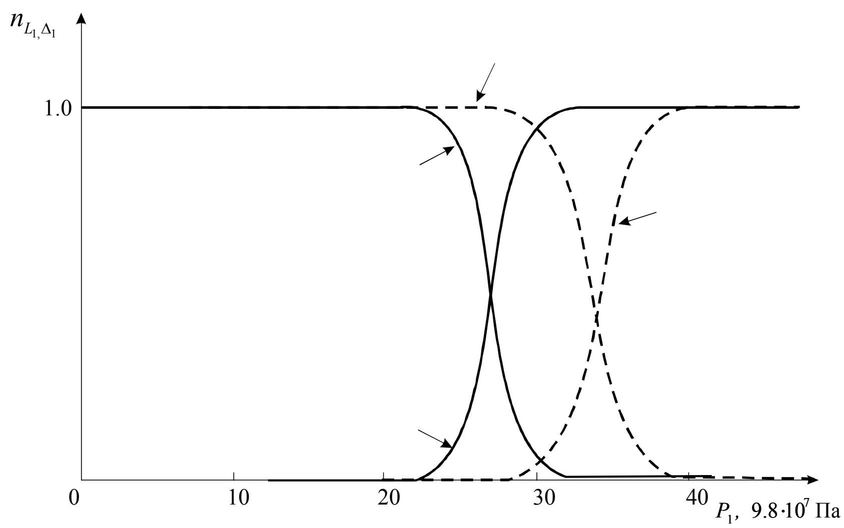

Рис. 2. Числа заповнень для L_1 - і Δ_1 -долин залежно від Р. Т=78 К.

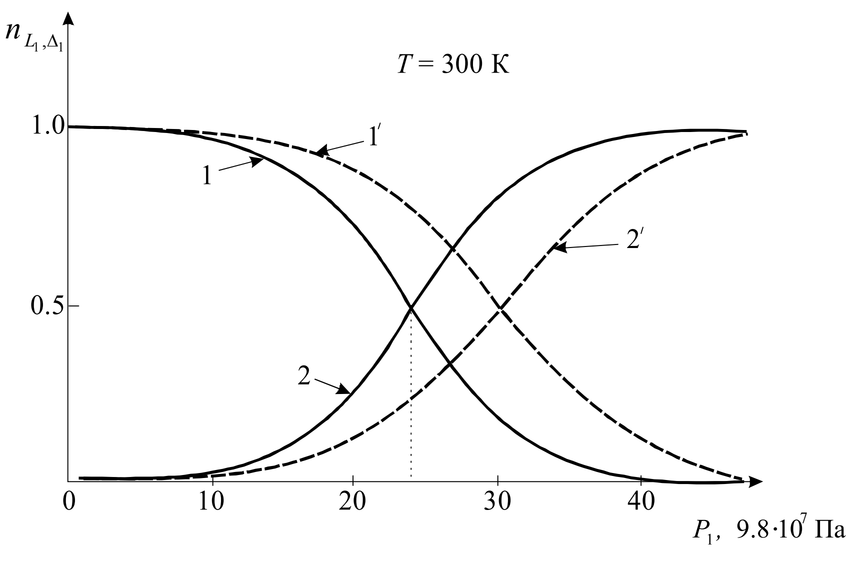

Рис. 3. Числа заповнень для L_1 - і Δ_1 -долин залежно від Р. Т=300 К.

Результати чисельного розрахунку дифузійної термоЕРС в залежності від прикладеного гідростатичного тиску показано на рис. 4, 5. Значення дифузійної термоЕРС в недеформованому кристалі за вказаних температур відповідно $\alpha^e(0;78\text{К}) = 1074$ мВ/К і $\alpha^e(0;300\text{К}) = 1234$ мВ/К. Пояснення наявності максимуму в [8] для одновісного стиску (рис. 3,4) і в цьому випадку також справедливе.

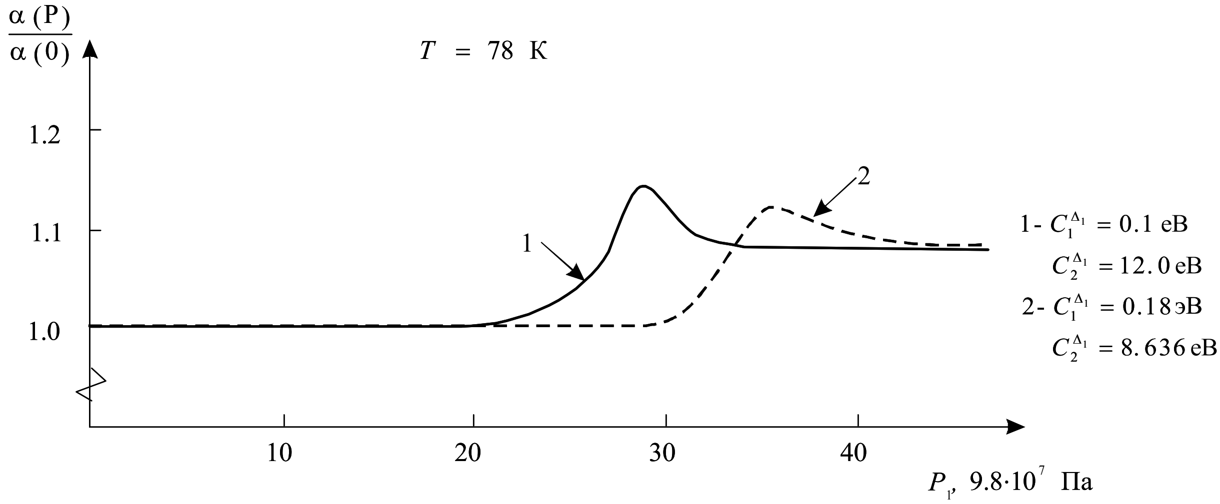

Рис. 4.

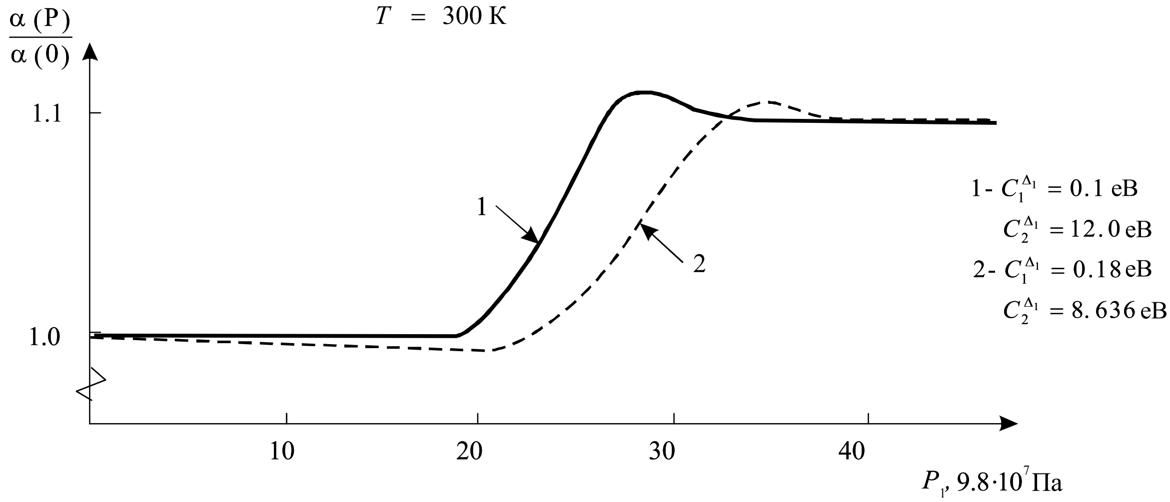

Рис. 5.
Зміна дифузійної термоЕРС з тиском P. T=78 K (рис. 4), T=300 K (рис. 5).

Всі параметри, необхідні для розрахунку термоЕРС захоплення, вибрані, як і в [8]. На рисунках 6, 7 наведено результати чисельного розрахунку термоЕРС захоплення в $L_1 - \Delta_1$-моделі германію за сильного гідростатичного тиску. Поведінка залежностей подібна до поведінки п'єзоопору в цій моделі [1–3]. Очевидно, що в області високих температур $T = 300$ К перехід електронів між L_1- і Δ_1-долинами починається за менших значень P і, таким чином, інтервал переходу між L_1- і Δ_1-долинами стає розмитішим.

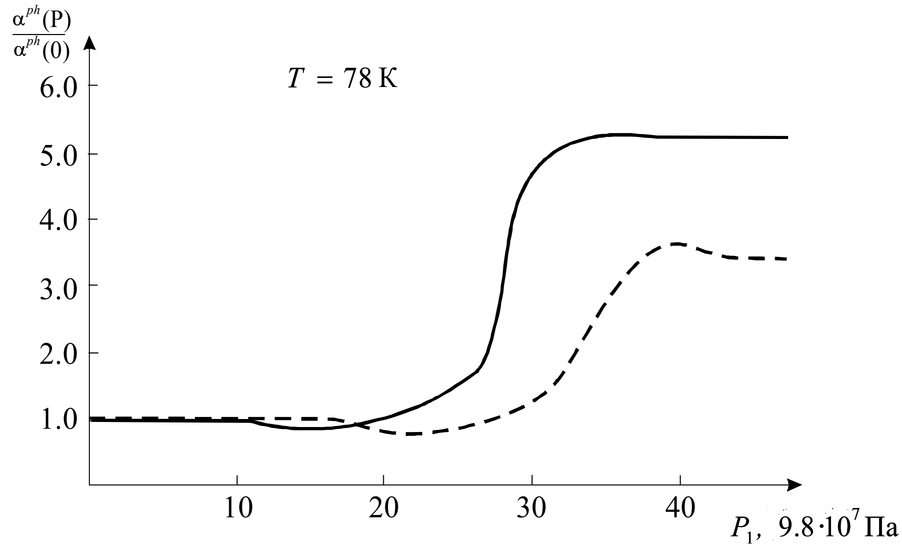

Рис. 6.

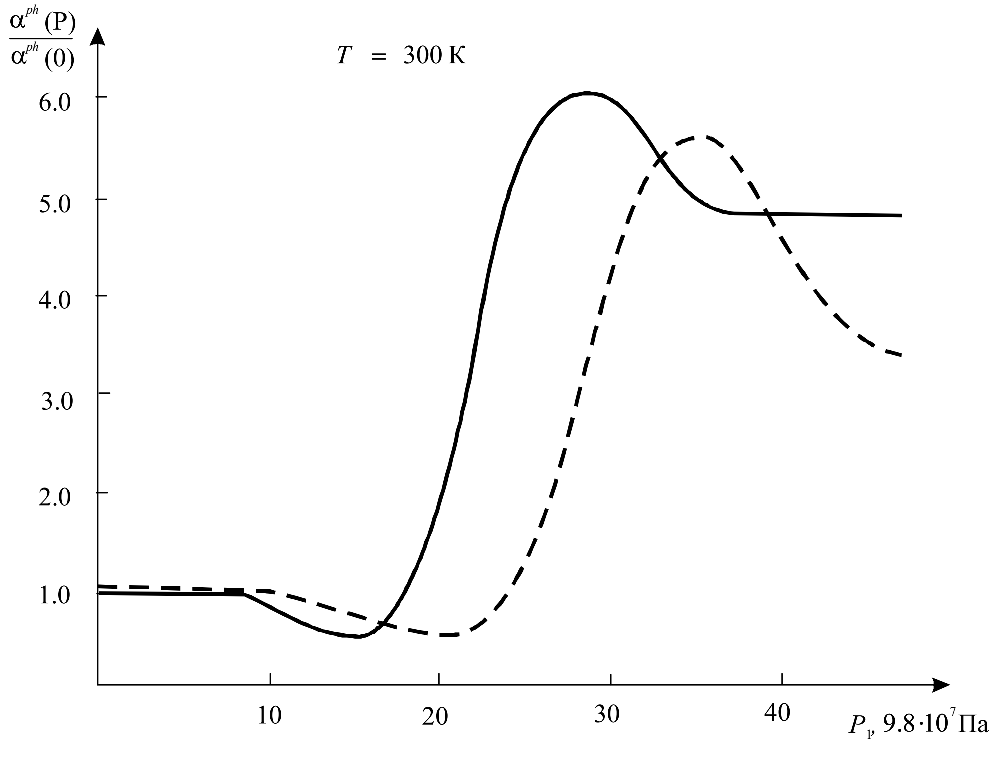

Рис. 7.

Зміна фононної темоЕРС із тиском Р. Т=78 К (рис. 6), Т=300 К (рис. 7),
$\alpha^{ph}\left(0;78\text{ К}\right) \approx 1000$ мВ/К, $\alpha^{ph}\left(0;300\text{ К}\right) \approx 6.0$ мВ/К. *Суцільна лінія відповідає* $C_1^{\Delta_1} = 0.1$ *еВ,* $C_2^{\Delta_1} = 12.0$ *еВ, штрихова лінія відповідає* $C_1^{\Delta_1} = 0.18$ *еВ,* $C_2^{\Delta_1} = 8.636$ *еВ.*

На закінчення автори висловлюють щиру подяку проф. Баранському П.І. (Інститут фізики напівпровідників Національної Академії Наук України) і проф. Бурдейному В.П. (Департамент фізики Університету Едуардо Мондлане) за корисні поради і обговорення.

Автори вдячні за фінансову підтримку шведському агентству SIDA / SAREC і дослідницькій групі з відновлюваних джерел енергії Університету Едуардо Мондлане в Мапуту, Мозамбік.

Література

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. 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.

Надійшла до редакції 10.02.09.