



УДК 621.315.592.3

© 2012

П. І. Баранський, Г. П. Гайдар

Визначення параметра анізотропії термоерс захоплення в багатодолинних напівпровідниках

(Представлено членом-кореспондентом НАН України П. М. Томчуком)

Розглянуто один із способів визначення параметра анізотропії термоерс захоплення електронів фононами $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ у багатодолинних кристалах n -Ge і n -Si. Встановлено зв'язок термоерс у недеформованому (α_0) і в сильно деформованому (α_{∞}) кристалі (при механічному навантаженні $X \rightarrow \infty$) з поперечною фононною компонентою (α_{\perp}^{ϕ}) і з параметром анізотропії термоерс захоплення електронів фононами M , а також зв'язок термоерс захоплення у недеформованому кристалі з параметром анізотропії рухливості електронів у рамках окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$. Наведено формули для розрахунку концентраційних залежностей параметра анізотропії рухливості $K = K(n_e, N_d, N_a)$ у випадку невиродженого електронного газу в кристалах.

Внаслідок кубічної симетрії кристалів Ge і Si у природному (тобто, механічно не напруженому) стані вони характеризуються ізотропністю всіх кінетичних коефіцієнтів. Отже, всі кінетичні явища в цих кристалах (у тому числі й термоерс) описуються при названих умовах за допомогою скалярних величин. Зокрема на макрорівні (тобто на рівні кристала) скаляром є і коефіцієнт термоерс. В одновісно пружно-деформованих кристалах Ge і Si ситуація змінюється і коефіцієнт термоерс стає тензорною величиною.

На прикладі багатодолинного напівпровідника n -Ge розглянемо задачу визначення параметра анізотропії термоерс в області захоплення електронів фононами

$$M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}, \quad (1)$$

де $\alpha_{\parallel}^{\phi}$, α_{\perp}^{ϕ} — поздовжня і поперечна (відносно довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда) компоненти термоерс, обумовленої захопленням електронів, які належать одному еліпсоїду, довгохвильовими фононами. Параметр M є фундаментальним параметром теорії анізотропного розсіяння, узагальненої на випадок захоплення електронів фононами. З'ясуємо методику визначення параметра M за результатами вимірювань діагональних компонентів тензора термоерс.

Оскільки у загальному випадку експериментально вимірювані значення коефіцієнта диференційної термоерс α складаються з суми двох компонент

$$\alpha = \alpha^e + \alpha^\phi, \quad (2)$$

де α^e і α^ϕ — електронна і фононна складові термоерс відповідно, а також зважаючи на те, що в пружно-деформованому вздовж кристалографічного напрямку $[111]$ n -Ge термоерс може бути наведена у вигляді тензора другого рангу $\hat{\alpha}$ у лабораторній системі координат (пов'язаній з осями ізоенергетичного еліпсоїда, розміщеного на осі деформації) [1]

$$\hat{\alpha} = \begin{vmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{22} & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_{33} \end{vmatrix}, \quad (3)$$

де $\alpha_{11} = \alpha_{22}$ і α_{33} — діагональні члени тензора термоерс, то $\alpha_{11} = \alpha_{11}^e + \alpha_{11}^\phi$ і $\alpha_{33} = \alpha_{33}^e + \alpha_{33}^\phi$. Зауважимо, що при одновісній пружній деформації n -Ge в напрямку $[111]$ мінімум енергії, орієнтований в цьому напрямку, зміщується вниз по шкалі енергій, тоді як три останні мінімуми зміщуються вгору. Позначимо через N_1 концентрацію носіїв струму в мінімумі, який опускається, а через N_2 — концентрацію носіїв струму в будь-якому з трьох мінімумів, які піднімаються.

Можна показати [2], що при довільному за величиною механічному навантаженні X на кристалі (n -Ge) за умови $X // J // \langle 111 \rangle$ (де J — струм)

$$\alpha_{33} - \alpha_{33}^e = \alpha_{\perp}^{\phi} \frac{M + \gamma \frac{8K + M}{3}}{1 + \gamma \frac{8K + 1}{3}}. \quad (4)$$

Тут $\gamma = N_2/N_1 = e^{-\frac{4}{9} \frac{\Xi_u S_{44}}{kT} X} = e^{-0,120 \frac{X}{T}}$ — відношення концентрацій носіїв в еліпсоїдах для довільних значень X і T ; Ξ_u — константа деформаційного потенціалу зсуву; S_{44} — коефіцієнт податливості (для n -Ge $S_{44} = 1,46 \cdot 10^{-11}$ Па $^{-1}$); K — параметр анізотропії рухливості електронів у рамках окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда. Параметр K задається виразом

$$K = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{3}{2} \frac{\rho_{\infty}}{\rho_0} - \frac{1}{2}, \quad (5)$$

де μ_{\parallel} , μ_{\perp} — рухливості носіїв заряду вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно; $\rho_0(X = 0)$ і $\rho_{\infty} = \lim_{X \rightarrow \infty} \rho(X)$ — питомий опір недеформованого (при $X = 0$) зразка і при $X \rightarrow \infty$ (тобто, $\rho = \rho(X)$ в області насичення).

З (2) видно, що фононні складові термоерс без тиску ($X = 0$) і в насиченні ($X \rightarrow \infty$), тобто α_0^{ϕ} і α_{∞}^{ϕ} , дорівнюють експериментально вимірюваним даним (α_0 і α_{∞}) без електронної складової (α_4^e і α_1^e — у випадку недеформованого і сильно деформованого кристала відповідно):

$$\begin{aligned} \alpha_0^{\phi} &= \alpha_0 - \alpha_4^e, \\ \alpha_{\infty}^{\phi} &= \alpha_{\infty} - \alpha_1^e \equiv \alpha_{\parallel}^{\phi}. \end{aligned} \quad (6)$$

Електронну (дифузійну) складову термоерс α_N^e можна визначити за формулою Писаренка [3]:

$$\alpha_N^e = \frac{k}{e} \left[2 + \ln \frac{2(2\pi m^* kT)^{3/2}}{n_0 h^3} \right], \quad (7)$$

де n_0 — концентрація носіїв заряду; e — заряд електрона; k — стала Больцмана; T — температура; h — стала Планка; $m^* = N^{2/3} \sqrt[3]{m_{\parallel} m_{\perp}^2}$ — ефективна маса густини станів; N — число ізоенергетичних еліпсоїдів, зокрема для n -Ge $N = \begin{cases} 4 & \text{при } X = 0, \\ 1 & \text{при } X = 0,6 \text{ ГПа і } T = 77 \text{ К.} \end{cases}$

За безпосередньо виміряними значеннями α_{∞} можна знайти, згідно з (6), значення $\alpha_{\parallel}^{\phi} = \alpha_{\infty} - \alpha_1^e$. А за допомогою формули (1) знаходимо поперечну фононну компоненту:

$$\alpha_{\perp}^{\phi} = \alpha_{\parallel}^{\phi} / M. \quad (8)$$

З рівнянь (6) і (8) одержимо

$$\alpha_{\infty} - \alpha^e = \alpha_{\parallel}^{\phi} = \alpha_{\perp}^{\phi} M. \quad (9)$$

При відсутності на досліджуваному зразку одновісного механічного навантаження ($X = 0$) зі співвідношення (4), опустивши індекси 33, одержимо таке рівняння:

$$\alpha_0^{\phi} = \alpha_0 - \alpha^e = \alpha_{\perp}^{\phi} \frac{2K + M}{2K + 1}. \quad (10)$$

Рівняння (10) пов'язує (через параметри анізотропії K і M) фононну термоерс усього кристала (при $X = 0$) з однією із складових фононної термоерс в окремо взятому ізоенергетичному еліпсоїді α_{\perp}^{ϕ} .

Таким чином, маємо систему двох рівнянь (9) і (10) з двома невідомими величинами (α_{\perp}^{ϕ} і M). Щоб розв'язати цю систему і визначити параметр анізотропії термоерс захоплення M , потрібно спочатку знайти величину параметра анізотропії рухливості K . Це можна зробити кількома методами. По-перше, за експериментально виміряною величиною п'єзоопору в області насичення (ρ_{∞}) і величиною цього опору без механічного навантаження (ρ_0) обчислити величину параметра анізотропії рухливості K , скориставшись формулою (5). Інший можливий метод знаходження параметра K — використання формули

$$K = \frac{m_{\parallel} \langle \tau_{\perp} \rangle}{m_{\perp} \langle \tau_{\parallel} \rangle} = \frac{K_m}{K_{\tau}}, \quad (11)$$

оскільки значення параметра анізотропії ефективної маси $K_m = m_{\parallel} / m_{\perp}$ відомі з даних щодо циклотронного резонансу, а концентраційну залежність параметра анізотропії розсіяння $K_{\tau} = K_{\tau}(n_e)$ можна знайти в опублікованій літературі (див., наприклад, [2] — для n -Ge, а [3] — для n -Si). І, нарешті, незалежно від названих літературних джерел, значення K (для довільної концентрації, що не призводить ще до виродження електронного газу при температурі рідкого азоту) можна розрахувати (причому як для n -Ge, так і для n -Si) за формулами теорії анізотропного розсіяння [4]:

$$K = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{m_{\parallel} a_{\perp} I_2}{m_{\perp} a_{\parallel} I_1}, \quad (12)$$

де m_{\parallel} і m_{\perp} — циклотронні ефективні маси для окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда вздовж великої осі і перпендикулярно до неї відповідно;

$$\left. \begin{array}{l} m_{\parallel} = 1,580m_0 \\ m_{\perp} = 0,082m_0 \end{array} \right\} \text{ для } n\text{-Ge} \quad \text{і} \quad \left. \begin{array}{l} m_{\parallel} = 0,910m_0 \\ m_{\perp} = 0,191m_0 \end{array} \right\} \text{ для } n\text{-Si};$$

m_0 — маса вільного електрона; a_{\parallel} і a_{\perp} — числові коефіцієнти, різні для кристалів n -Ge і n -Si [2].

Інтеграли I_1 та I_2 у випадку невідродженого електронного газу для n -Ge і n -Si задаються формулами [2]:

$$I_1 = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x} x^3 dx}{x^2 + b_0}; \quad I_2 = \int_0^{\infty} \frac{e^{-x} x^3 dx}{x^2 + b_1};$$

$$b_0 = \begin{cases} 2,65 \cdot 10^5 \frac{a_{\parallel} N}{T^3} \left(32,0 + \ln \frac{T^2 x}{n'} + 1,26 \cdot 10^{-14} \frac{n'}{T^2 x} \right) & \text{для } n\text{-Ge,} \\ 9,68 \cdot 10^5 \frac{a_{\parallel} N}{T^3} \left(32,0 + \ln \frac{T^2 x}{n'} + 10^{-14} \frac{n'}{T^2 x} \right) & \text{для } n\text{-Si,} \end{cases}$$

$$b_1 = \begin{cases} 3,23 \cdot 10^6 \frac{a_{\perp} N}{T^3} \left(31,0 + \ln \frac{T^2 x}{n'} + 2,8 \cdot 10^{-14} \frac{n'}{T^2 x} \right) & \text{для } n\text{-Ge,} \\ 3,47 \cdot 10^6 \frac{a_{\perp} N}{T^3} \left(31,4 + \ln \frac{T^2 x}{n'} + 1,46 \cdot 10^{-14} \frac{n'}{T^2 x} \right) & \text{для } n\text{-Si,} \end{cases}$$

де $N = N_d + N_a$ — загальна концентрація домішок у кристалі; n_e — концентрація електронів у зоні провідності; N_d і N_a — концентрація донорних і акцепторних домішок у кристалі. Величина $n' = n_e + (n_e + N_a)(1 - (n_e + N_a)/N_d)$ враховує вплив компенсуючої домішки на екранування. Так, при відсутності компенсуючих домішок $N_a = 0$ і $n' = n_e = N$. Видно, що b_0 і b_1 залежать від температури, загальної концентрації домішок у кристалі, ступеня їх компенсації та є різними для n -Ge і n -Si.

При зміні питомого опору $\rho_{300\text{K}}$ у зразках n -Si в діапазоні від 250 до 0,05 Ом·см параметр анізотропії термоерс захоплення електронів фононами M зменшується трохи більше, ніж у два рази (приблизно від 6,5 до 3,2, як показали проведені нами виміри при температурі ~ 85 К, а також літературні дані).

Оскільки термоерс захоплення пропорційна довжині вільного пробігу довгохвильових фононів (l^{ϕ}) [3], одержане експериментально зниження параметра $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ (пов'язане з більш ефективним зменшенням $\alpha_{\parallel}^{\phi}$, ніж α_{\perp}^{ϕ} з ростом $n_e \equiv N_d$) є наслідком зменшення l^{ϕ} зростаючою ефективністю розсіяння фононів на домішкових атомах. Концентраційна залежність параметра анізотропії термоерс захоплення електронів фононами $M = M(n_e \equiv N_d)$ в n -Si була досліджена авторами [5] в діапазоні $1,9 \cdot 10^{13} \leq n_e \equiv N_d \leq 2,6 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$, а зміна термоерс в L_1 - Δ_1 моделі Ge при сильних гідростатичних тисках теоретично досліджена в роботі [6]. Дані щодо концентраційної залежності параметра анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel} = K(n_e)$ для широкого діапазону $3 \cdot 10^{12} \leq n_e \equiv N_d \leq 8 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ в n -Si можна знайти в [7], а для n -Ge — в роботах [8, 9].

Використання системи двох рівнянь (9) і (10) при переході до вивчення n -Si (замість n -Ge) пов'язано з деформуванням цього кристала в напрямку [100] (за умов $X//J//\langle 100 \rangle$) замість умов експериментів $X//J//\langle 111 \rangle$, що використовуються при дослідженні n -Ge.

Загальний вираз для визначення коефіцієнта диференційної термоерс, пов'язаної з дифузією електронів α^e (що входить до рівнянь (9) і (10)) залежно від концентрації n_e знаходять, при потребі, у роботі [10]. Відповідно до кінетичної теорії

$$\alpha^e = \frac{\int_0^{\infty} x^{3/2} \tau(x) \frac{\partial n}{\partial x} \alpha(x) dx}{\int_0^{\infty} x^{3/2} \frac{\partial n}{\partial x} \tau(x) dx}, \quad (13)$$

де $\alpha(x) \equiv \frac{k}{e} \left(\frac{E - \zeta_0}{kT} \right)$ — коефіцієнт термоерс групи електронів (дірок) з енергією E ; $\tau(x)$ — загальний час релаксації носіїв струму; ζ_0 — хімічний потенціал.

На закінчення можна зробити такі висновки.

1. У роботі розглянуто фононну та електронну компоненти тензора термоерс і їхні зв'язки з параметром анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$ та з параметром анізотропії термоерс захоплення електронів фононами $M = \alpha_{\parallel}^{\phi}/\alpha_{\perp}^{\phi}$.

2. Встановлено зв'язок термоерс у недеформованому (α_0) і в сильно деформованому (α_{∞}) кристалі з поперечною фононною компонентою (α_{\perp}^{ϕ}) і з параметром анізотропії термоерс захоплення M , а також зв'язок термоерс захоплення у недеформованому кристалі (α_0) з параметром анізотропії рухливості K .

3. Наведено формули для розрахунку концентраційних залежностей параметра анізотропії рухливості $K = K(n_e, N_d, N_a)$, а також аналітичний вираз для обчислення електронної (дифузійної) складової термоерс $\alpha^e = \alpha^e(n_e)$.

1. Баранський П. И., Буда И. С., Даховский И. В. Теория термоэлектрических и термомагнитных явлений в анизотропных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1987. — 272 с.
2. Баранський П. И., Буда И. С., Даховский И. В., Колмоєц В. В. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1977. — 270 с.
3. Стильбанс Л. С. Физика полупроводников. — Москва: Сов. радио, 1967. — 452 с.
4. Самойлович А. Г., Буда И. С., Даховский И. В. Теория анизотропного рассеяния // Физика и техника полупроводников. — 1973. — 7, № 4. — С. 859.
5. Баранський П. И., Савяк В. В., Щербина Л. А. Определение параметров анизотропии термоэдс увлечения в n -кремнии // Там же. — 1979. — 13, № 6. — С. 1219–1221.
6. Черныш В. В., Куамба Б. Ш. Термоэдс в $L_1 - \Delta_1$ модели германия при сильном гидростатическом давлении // Термоэлектричество. — 2009. — № 1. — С. 31–41.
7. Баранський П. И., Бабич В. М., Доценко Ю. П. и др. Влияние термообработки на электрофизические свойства обычных и нейтронно-легированных кристаллов кремния // Физика и техника полупроводников. — 1980. — 14, № 8. — С. 1546–1549.
8. Baranskii P. I., Buda I. S., Kolomoets V. V., Suss B. A. Piezothermoelectromotive force of elastically deformed n -Ge in [111] direction considering the phonon-drag effect // Phys. Stat. Sol. — 1975. — 27. — P. K103-K108.
9. Баранський П. И., Федосов А. В., Гайдар Г. П. Неоднорідності напівпровідників і актуальні задачі між-дефектної взаємодії в радіаційній фізиці і нанотехнології. — Київ; Луцьк: Ред.-вид. відділ Луцького держ. техн. ун-ту, 2007. — 316 с.
10. Баранський П. И., Буда И. С., Савяк В. В. Термоэлектрические и термомагнитные явления в многодолинных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1992. — 268 с.

Інститут фізики напівпровідників
ім. В. Є. Лашкарьова НАН України, Київ
Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ

Надійшло до редакції 30.01.2012

П. И. Баранский, Г. П. Гайдар

Определение параметра анизотропии термоэдс увлечения в многодолинных полупроводниках

Рассмотрен один из способов определения параметра анизотропии термоэдс увлечения электронов фононами $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ в многодолинных кристаллах n-Ge и n-Si. Установлена связь термоэдс в недеформированном (α_0) и сильно деформированном (α_{∞}) кристалле (при механической нагрузке $X \rightarrow \infty$) с поперечной фононной компонентой (α_{\perp}^{ϕ}) и с параметром анизотропии термоэдс увлечения электронов фононами M , а также связь термоэдс увлечения в недеформированном кристалле с параметром анизотропии подвижности электронов в рамках отдельно взятого изоэнергетического эллипсоида $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$. Представлены формулы для расчета концентрационных зависимостей параметра анизотропии подвижности $K = K(n_e, N_d, N_a)$ в случае невырожденного электронного газа в кристаллах.

P. I. Baranskii, G. P. Gaidar

Determination of the anisotropy parameter of thermoelectromotive-drag in multivalley semiconductors

One of the ways of determining the anisotropy parameter of thermoelectromotive electron-phonon drag $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ in the multivalley crystals of n-Ge and n-Si is considered. The relationship of the thermoelectromotive forces in unstrained (α_0) and strongly deformed (α_{∞}) crystals (under a mechanical stress $X \rightarrow \infty$) with the transverse phonon component (α_{\perp}^{ϕ}) and with the anisotropy parameter of thermoelectromotive electron-phonon drag M and the relationship of the thermoelectromotive-drag in an unstrained crystal with the anisotropy parameter of electron mobility $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$ in the framework of a single isoenergetic ellipsoid are established. The formulas for calculating the concentration dependences of the anisotropy parameter of mobility $K = K(n_e, N_d, N_a)$ in the case of a non-degenerate electron gas in crystals are presented.