

РОЗДІЛ I

Фізика твердого тіла

УДК 621.315.592

Володимир Коломоєць
Леонід Панасюк
Валерій Єрмаков
Сергій Федосов

Анізотропія тензорезистивних ефектів у сильно легованих кристалах p-Si(B) в області σ_2 -провідності

У статті представлено результати дослідження тензорезистивного ефекту у слабо й сильно деформованих кристалах p-Si(B) для головних кристалографічних напрямків $X||[111]$, $X||[110]$, $X||[001]$. Показано, що зміну ефективної маси важких дірок визначають два конкуруючі механізми: перший зумовлений переходом легких дірок у зону важких, другий – зменшенням ефективної маси важких дірок за рахунок зміни кривизни зони важких дірок під дією одновісного тиску.

Ключеві слова: напівпровідники, високі тиски, одновісна напруга, кристалічна структура, електропровідність, пружні властивості.

Постановка наукової проблеми та її значення. Тензорезистивний (ТР) ефект уперше експериментально виявив Сміт [10] у кристалах кремнію та германію *n*-типу.

Структура валентної зони кристалів p-Si та p-Ge набагато складніша, ніж зони провідності й складається з трьох зон, які називають зоною важких, легких дірок та спин-орбітально відщепленою зоною (рис. 1а). Перші дві валентні зони, для яких стан $J = 3/2$, вироджені за $\vec{k} = 0$, і взаємодія між ними зумовлює деформацію їх енергетичних поверхонь, які в тривимірному просторі є деформованими сферами (гофровані поверхні), вигляд яких зображено на рис. 1а [6]. Спин-орбітальна відщеплена зона $J = 1/2$ зміщена вниз на $\Delta = 0,044$ еВ [7], має сферичну енергетичну поверхню і в провідності участі не бере.

Під дією одновісної напруги відбувається зміна кубічної симетрії і валентна зона, для якої повний момент $J = 3/2$ розщеплюється на дві. Зона $M_J = \pm 1/2$ зміщується вгору, а зона $M_J = \pm 3/2$ – униз під час деформації стиску вздовж кристалографічних напрямків [001] і [111].

Під час сильної деформації, коли виродження повністю знімається, енергетичні поверхні поблизу $\vec{k} = 0$ перетворюються у витягнутий і сплюснутий еліпсоїди обертання для легких та важких дірок відповідно, осі яких збігаються з напрямком деформації, як показано на рис. 1б [6].

Зміщення енергетичних зон легких і важких дірок під час одновісної деформації приводить до перерозподілу та зміни їх концентрації при збереженні повного числа дірок провідності. Однак перерозподіл легких і важких дірок унаслідок різної їх рухливості веде до зміни провідності та опору:

$$\sigma = q^2 \cdot \tau \left(\frac{p_h}{m_h} + \frac{p_l}{m_l} \right), \quad (1)$$

де q , τ , m_h , m_l , p_h , p_l – заряд електрона, час релаксації, маса та концентрація, відповідно, важких та легких дірок.

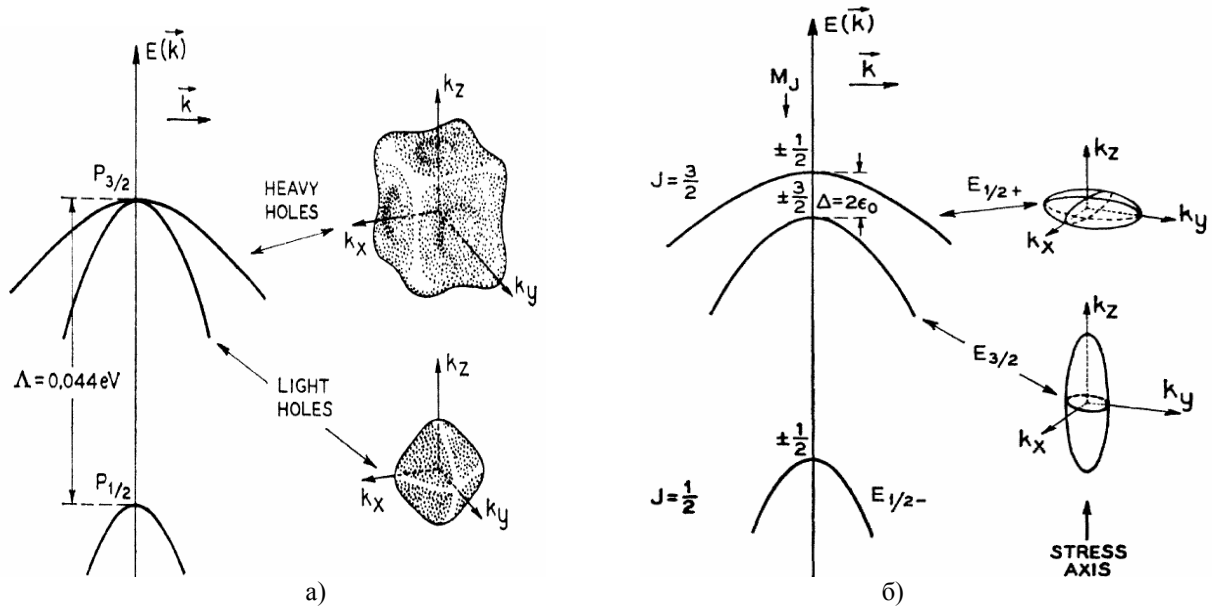


Рис. 1. Структура валентної зони кристалів кремнію та германію для недеформованих (а), в одновісно деформованих кристалах (б)

Варто зазначити, що час релаксації τ передбачається однаковим для важких і легких дірок, ізотропним та незалежним від тиску. Таким чином тензорезистивний ефект у кремнії та германії p -типу пов'язаний із різною масою і тим самим рухливістю легких та важких дірок.

Зміну питомого опору $\Delta\rho/\rho$ (або провідності $\Delta\sigma/\sigma$) можна кількісно виразити або через напругу X , або через деформацію ε . Оскільки між напругою та деформацією є визначений зв'язок, то обидва способи еквівалентні.

Домішкова провідність, яка спостерігається в напівпровідниках за низьких температур характеризується трьома енергіями активації [4; 5]. Температурна залежність питомого опору може бути представлена у вигляді:

$$\sigma = \sigma_1 \exp \frac{\varepsilon_1}{kT} + \sigma_2 \exp \frac{\varepsilon_2}{kT} + \sigma_3 \exp \frac{\varepsilon_3}{kT}, \quad (2)$$

де ε_1 – енергія іонізації акцептора (якщо говорити про матеріал p -типу); енергія ε_3 відповідає стрибковій провідності; ε_2 пов'язують із переходом носіїв з основного стану в домішкову зону, що утворюється з двократно заповнених домішкових станів (A^+ – для напівпровідників p -типу).

Залежно від концентрації домішок і ступеня компенсації під час зміни температури спостерігається той чи той тип домішкової провідності: σ_1 , σ_2 , σ_3 . Залежність домішкової провідності від деформації абсолютно різна для різних областей концентрацій. Детальний теоретичний та експериментальний огляд домішкової провідності для різних областей концентрацій можна знайти в роботі Мотта [8].

Зміну провідності кристалів p -Ge, у яких деформаційно-індукована зміна хвильової функції акцепторів відбувається за рахунок розщеплення зони легких і важких дірок, які є виродженими за відсутності деформації в точці $\vec{k} = 0$, досліджено в роботі [9]. Унаслідок різного типу виродження для екстремумів зони провідності та валентної зони спостерігається відмінність домішкової провідності від деформації для кристалів p -Ge та n -Ge.

Мета – дослідити вплив одновісного тиску на σ_2 -провідність у кристалах p -Si(B) для головних кристалографічних напрямків $X||[111]$, $X||[110]$, $X||[001]$. **Завдання** – установити механізми зміни ефективної маси важких дірок у слабо і сильно-деформованих кристалах p -Si(B) із концентрацією домішок, яка наближається до критичної концентрації N_c переходу метал-ізолятор.

Методика й техніка експерименту. Для реалізації експериментальних вимірювань було вдосконалено лабораторний варіант установки [2] для досліджень фізичних властивостей твердого тіла під час одновісних деформацій задля розширення діапазону одновісних тисків (до 6 ГПа) й автома-

тизації експерименту на базі ЕОМ. Спеціально розроблена електрична схема давала змогу проводити вимірювання в широкому діапазоні зміни струмів ($0,1 \text{ мкА} \div 100 \text{ мА}$) за незмінного коефіцієнта стабілізації у всьому діапазоні й температурній незалежності вихідних величин, що значно спрощує та прискорює процес вимірювання в разі великої зміни опору.

Для дослідження тензоефектів при великих одновісних тисках використовували гантелеподібні циліндричні зразки. Особливістю цих зразків було те, що струмові контакти наносились на краї потовщень. Це давало змогу виводити їх із зони екстремального механічного навантаження, а для зразків у формі прямокутного паралелепіпеда струмові контакти знаходилися на торцях зразка й були, отже, розміщені безпосередньо в зоні впливу механічного тиску. Гантелеподібні циліндричні зразки виготовлялися за допомогою спеціально розробленого устаткування і мали такі розміри: діаметр тонкого перешийка – $(0,5 \div 0,6) \text{ мм}$; довжина тонкого перешийка – $(1,5 \div 2,0) \text{ мм}$; діаметр потовщень – $\approx 2,5 \text{ мм}$; їх довжина – $\approx 2 \text{ мм}$.

Використання зразків такої форми давало змогу не тільки виключити інжекцію неосновних носіїв струму, що важливо під час дослідження явищ транспорту в сильних електричних полях, а й досягти гранично високих значень одновісного тиску кристалів, оскільки в цьому разі контакти винесені із зони високого тиску у вузькій області зразка.

Зразки для досліджень вирізалися із монокристалічних зливків n-Si, вирощених за методом Чохральського в певних кристалографічних напрямках. Точність методу рентгенівської кристалографічної орієнтації $\pm 15''$. Дезорієнтація прикладеної напруги щодо кристалографічної осі була не більше $\pm 30'$ [2].

З урахуванням підвищеної хрупкості кремнію за температур, нижчих за 300 К , потрібно було забезпечити досить плавне збільшення та зняття механічного навантаження на кристал. Таке навантаження досягалося за допомогою води, швидкість витікання якої могла змінюватись у досить широкому інтервалі. Окрім цього, треба було вимірювальний модуль за потреби охолоджувати до температури рідкого азоту чи рідкого гелію. Отже, нині така установка дає змогу одержувати за вказаних температур для кристалів кремнію одновісні напруги (тиски) до $6,5 \text{ ГПа}$ [2].

Виклад основного матеріалу й обґрунтування отриманих результатів дослідження. На рис. 2 представлені залежності $\rho_X/\rho_0 = f(X)$ для кристалів кремнію з концентрацією домішок бору $N_B = 3,5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$, яка наближається до величини критичної концентрації переходу метал-ізолятор у цих кристалах. Так ми дослідили область σ_2 -провідності (див. рівняння 2). Експериментальні залежності були отримані для основних кристалографічних напрямків $X \parallel [111]$, $X \parallel [110]$, $X \parallel [001]$ при $T = 4,2 \text{ К}$.

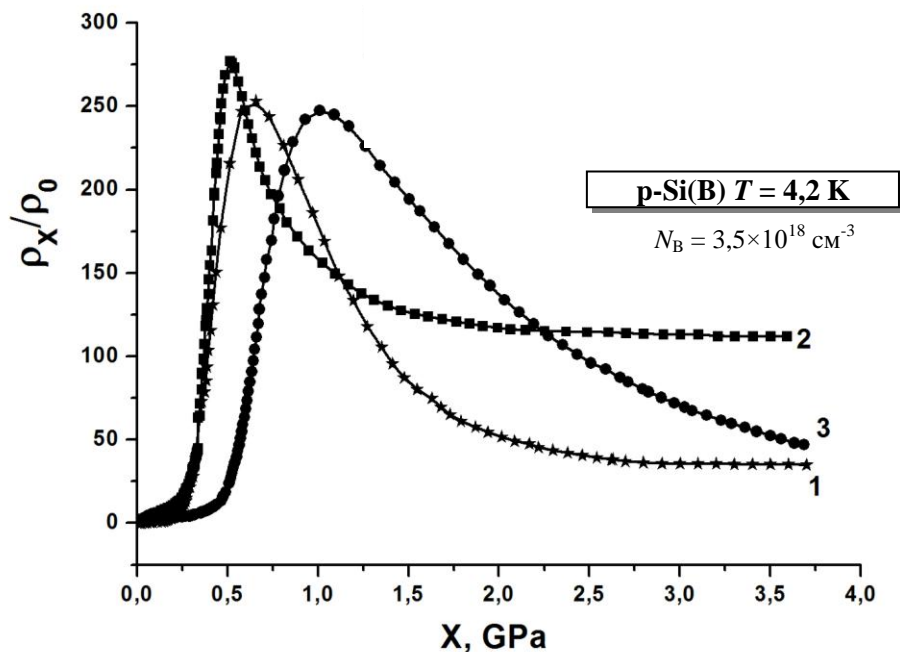


Рис. 2. Залежності питомого опору з тиском $\rho_X/\rho_0 = f(X)$ для кристалів p-Si(B) із концентрацією домішки бору $N_B = 3,5 \times 10^{18} \text{ см}^{-3}$ при орієнтації: 1 – $X \parallel [111]$, 2 – $X \parallel [100]$, 3 – $X \parallel [110]$

Збільшення питомого опору при зростанні одновісного тиску в кристалах кремнію, легованого бором, пов'язано з перебудовою основного стану енергетичного рівня акцепторної домішки при сильному одновісному тиску, який описується в наближенні ефективної маси [1]:

$$E_0 = -\frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \chi^2}. \quad (3)$$

Потрібно розглядати спостережуване зростання опору при збільшенні тиску як наслідок трансформації хвильової функції основного стану акцепторної домішки з менш локалізованої в більш локалізовану. Сильний одновісний тиск знімає виродження краю валентної зони, змінює спин-орбітальне розщеплення і розщеплює акцепторний рівень на два двократно вироджених енергетичних рівня. Зазначимо, що у p-Si(B) ці перетворення відбуваються внаслідок зміни величини ефективної маси носіїв струму – важких дірок. Це видно з рис. 3, на якому зображено зміну питомого опору кристалу з тиском $\rho_X/\rho_0 = f(X)$ для виродженого p-кремнію з концентрацією акцепторів $N_B = 1,0 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

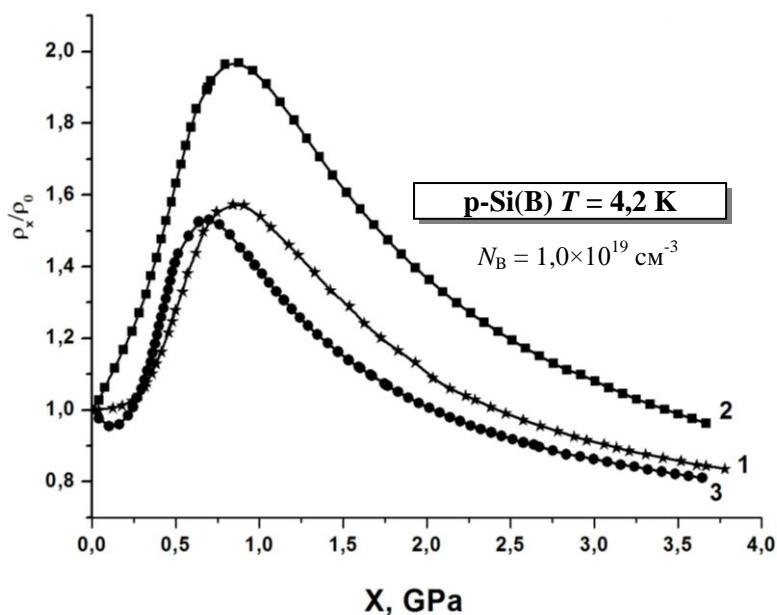


Рис. 3. Залежності питомого опору з тиском $\rho_X/\rho_0 = f(X)$ для кристалів p-Si(B) з концентрацією домішки бору $N_B = 1,0 \times 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при орієнтації: 1 – $X \parallel [111]$, 2 – $X \parallel [100]$, 3 – $X \parallel [110]$

Зрозуміло, що в такому p-Si(B) зміна опору кристалу відбувається фактично за рахунок зміни ефективної маси дірок. Зміна ефективної маси важких дірок зі збільшенням тиску, як видно з рис. 3, визначається двома конкуруючими механізмами. Перший механізм зміни ефективної маси пов'язаний із переселенням легких дірок із відповідної зони в зону з більшою ефективною масою – зона важких дірок. Як видно з рис. 2, цей механізм переважає при тисках, які не перевищують значень ~ 1 ГПа. А механізм, який починає переважати при одновісних тисках $X > 1$ ГПа, це зменшення величини ефективної маси важких дірок за рахунок зростання з тиском кривизни цієї зони. Зазначимо, що в невироджених кристалах, крім зміни ефективної маси, потрібно враховувати також і зміну рухливості носіїв струму.

Зауважимо, що для сильних одновісних тисків, як це видно з порівняння рис. 2, 3, необхідно здійснювати поправку до величини енергії σ_2 -провідності. Оскільки для p-кремнію спин-орбітальне розщеплення мале $\Delta = 0,044 \text{ eV}$, то третя валентна зона сильно впливає на явища транспорту саме при сильних одновісних тисках. Якщо для області слабких тисків маємо відтворення залежності ефективної маси від тиску, то для області сильних одновісних тисків збільшення питомого опору з тиском не повторює хід залежностей величини ефективної маси від тиску, тобто за рахунок впливу з тиском зони, відщепленої спин-орбітальною взаємодією, зміна ТР ефекту в області сильних тисків $X > 1$ ГПа лише якісно буде відтворювати хід залежностей ефективної маси від тиску. Причому ТР ефекти в цій області мають різну анізотропію представлених залежностей, яка не повторює анізотропію залежностей ефективних мас і відображує анізотропію впливу одновісної деформації на зону відщеплену спин-орбітальною взаємодією. Цей факт – додаткове свідчення того, що вперше виявлена анізотропія впливу сильної одновісної деформації на третю валентну зону.

Отже, немонотонні залежності $\rho_X/\rho_0 = f(X)$ поздовжнього ТР ефекту для головних кристалографічних орієнтацій та їх анізотропія визначаються зміною ефективних мас важких дірок з тиском, зумовленою відповідними закономірностями перебудови енергетичного спектру валентної зони за рахунок зняття виродження зон важких і легких дірок при одноосному тиску. Отож у невироджених, але сильно легованих та одноосно-деформованих кристалах р-Si(B) зміна ефективної маси важких дірок і визначає зміну енергії активації σ_2 -провідності.

Висновки та перспективи подальшого дослідження. Експериментально досліджено в слабко ізоляторних кристалах р-кремнію анізотропію поздовжнього тензорезистивного ефекту. Показано, що для областей слабких і сильних тисків спостерігаються відмінні закономірності ТР ефекту. Так, для області слабких тисків хід залежностей питомого опору від тиску повторює хід залежностей зміни ефективної маси, на відміну від області сильних тисків. Отже, в області сильних одноосних тисків залежності $\rho_X/\rho_0 = f(X)$ лише якісно відтворюють залежності $m_X/m_0 = f(X)$. Ефект цей пов'язаний із малим значенням спин-орбітального розщеплення валентної зони р-Si. Варто зазначити, що треба враховувати поправки за рахунок спин-орбітально відщепленої зони у зв'язку з тим, що величина розщеплення при сильних одноосних тисків складає суттєву долю спин-орбітального розщеплення цих кристалів [1]. Уперше виявлено анізотропію впливу одноосної деформації на зону відщеплену спин-орбітальною взаємодією.

Джерела та література

1. Бир Г. Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках / Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. – М. : Наука, 1972. – 584 с.
2. Патент 2040785 Россия, МКИ F16 G01 M3/18. Установка для создания одноосных деформаций твердых тел / В. В. Коломоец, В. Н. Ермаков, Б. А. Сусь, В. Е. Родионов (Украина); Ин-т физики полупроводников НАНУ. – № 4303989.
3. Cao J. X. Giant piezoresistance and its origin in Si(111) nanowires: First-principles calculations / J. X. Cao, X. G. Gong, R. Q. Wu // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 75, № 23. – P. 233302.
4. Fritzsche H. Effect of Uniaxial Compression on Impurity Conduction in n-Type Germanium / H. Fritzsche // Phys. Rev. – 1962. – Vol. 125, № 5. – P. 1552–1560.
5. Fritzsche H. Resistivity and Hall Coefficient of Antimony Doped Germanium at Low Temperature / H. Fritzsche // J. Phys. Chem. Solids. – 1958. – Vol. 6, № 1. – P. 69–80.
6. Hensel J. C. Cyclotron Resonance Experiments in Uniaxially Stressed Silicon: Valence Band Inverse Mass Parameters and Deformation Potentials / J. C. Hensel, G. Fecher // Phys. Rev. – 1963. – Vol. 129, № 3. – P. 1041–1062.
7. Internal Impurity Levels in Semiconductors: Experiments in p-Type Silicon / S. Zwerdling, K. J. Button, B. Lax, L. M. Roth // Phys. Rev. Lett. – 1960 – Vol. 4, № 4. – P. 173–176.
8. Mott N. F. The Theory of Impurity Conduction / N. F. Mott, W. D. Twose // Advan. Phys. – 1961. – Vol. 10, № 38. – P. 107–163.
9. Pollak F. H. Effect of Uniaxial Compression on Impurity Conduction in p-Germanium / F. H. Pollak // Phys. Rev. – 1965. – Vol. 138, № 2A. – P. A618.
10. Smith C. S. Piezoresistance Effect in Germanium and Silicon / C. S. Smith // Phys. Rev. – 1954. – Vol. 94, № 1. – P. 42–49.

Коломоец Владимир, Панасюк Леонид, Ермаков Валерий, Федосов Сергей. Анизотропия тензорезистивных эффектов в сильно легированных кристаллах р-Si(B) в области σ_2 -проводимости. В статье представлены результаты исследований тензорезистивного эффекта у слабо и сильно деформированных кристаллов р-Si(B) для главных кристаллографических направлений X||[111], X||[110] и X||[001]. Показано, что изменение эффективной массы тяжелых дырок определяется двумя конкурирующими механизмами: первый механизм обусловлен переходом легких дырок в зону тяжелых дырок, другой – уменьшением эффективной массы тяжелых дырок за счет изменения кривизны зоны тяжелых дырок под действием одноосного сжатия.

Ключевые слова: полупроводники, высокие давления, одноосное сжатие, кристаллическая структура, электропроводность, упругие свойства.

Kolomoets Volodymyr, Panasjuk Leonid, Ermakov Valerii, Fedosov Sergii. Anisotropy Tensoresistive Effects in Heavily Doped Crystals p-Si(B) in Area σ_2 -conductivity. The article deals with research of tensoresistance effect in weakly and strongly deformed crystals p-Si(B) for the main crystallographic directions X||[111], X||[110] and X||[001]. It is shown that the change in the effective mass of heavy holes is determined by two competing mechanisms: the first mechanism is caused by transition of light holes in the band of heavy holes, the second – decreasing the effective mass of heavy holes by changing the curvature of the band of heavy holes under the action of uniaxial stress.

Key words: semiconductors, high pressure, uniaxial stress, crystal structure, electrical conductivity, elastic properties.

Стаття надійшла до редколегії
08.12.2014 р.