

УДК 621.315.592

С.В. Луньов, О.В. Бурбан, П.Ф. Назарчук, Л.В. Ящинський
Луцький національний технічний університет

ВПЛИВ ДЕФОРМАЦІЙНОЇ ПЕРЕБУДОВИ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ КРИСТАЛІВ n-Ge НА РУХЛИВІСТЬ НОСІЇВ ЗАРЯДУ

На основі теорії анізотропного розсіяння при $T=77$ К одержано концентраційні залежності рухливості носіїв заряду для L_1 та Δ_1 - мінімумів зони провідності кристалів n-Ge. Показано, що інверсії типу L_1 - Δ_1 абсолютного мінімуму, обумовлена одновісним тиском кристалів n-Ge вздовж кристалографічного напрямку $[100]$, суттєво зменшує величину рухливості носіїв заряду та змінює характер анізотропії розсіяння.

Прогрес твердотільної електронної техніки в сучасних умовах обумовлюється в першу чергу поступом нанотехнологій, теоретичним фундаментом для яких є фізика конденсованого стану. Особливе місце тут належить фізиці напівпровідників, так як саме ця галузь знань обґрунтовує можливості створення елементної бази більшості сучасних електронних пристроїв, причому більше як 95 % у глобальному виробництві сировинним матеріалом залишається кремній. Проте такий напівпровідниковий матеріал, як германій, незважаючи на всебічну вивченість його властивостей, і надалі залишається бути в багатьох випадках перспективним матеріалом для створення різного роду приладів та сенсорів.

Оскільки всі фізичні властивості матеріалу в згадуваному вище сенсі визначаються особливостями його

зонної будови, то на цьому аспекті для подальшого розуміння ідеї роботи слід зупинитися детальніше.

Зонна структура германію має багатодолинний характер (рис.1). Найнижчими (основними мінімумами) за шкалою енергій ϵ в n -Ge 4 мінімуми із симетрією L_1 , які беруть участь в різних кінетичних та оптичних ефектах та визначають роботу багатьох електронних приладів, в яких використовується германій. Тому параметри даних мінімумів на сьогодні є достатньо добре вивченими. Вище за шкалою енергій на $0,14$ eB знаходиться один мінімум із симетрією Γ_2 і на $0,18$ eB шість мінімумів із симетрією Δ_1 . Найвищий мінімум (Γ_{15}) знаходиться на відстані приблизно $2,5$ eB.

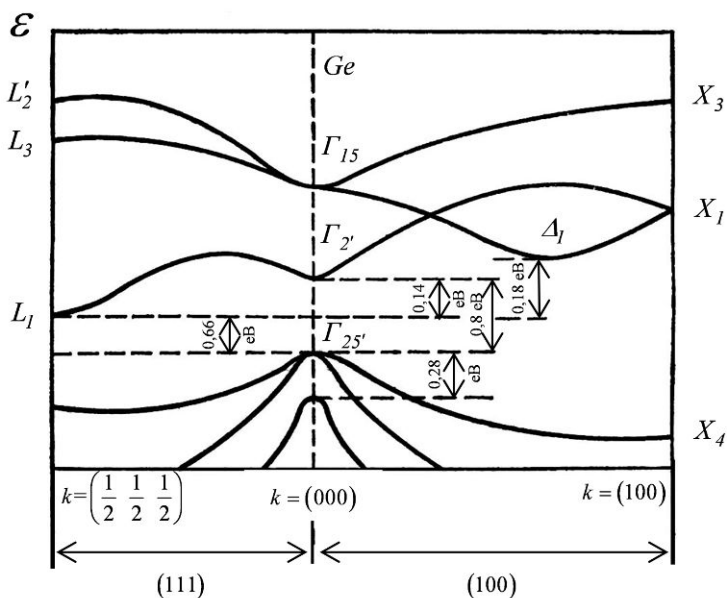


Рис.1. Зонна структура кристалів германію

Значна віддаленість даних мінімумів від основних як по енергії, так і по квазіімпульсу не сприяла дослідженням впливу їх при малих фізичних збуреннях на властивості

матеріалу. Але в екстремальних умовах направленої дії значних електричних, деформаційних, оптичних та температурних полів дані мінімуми можуть вносити суттєвий вклад, а то й визначальний у відповідні ефекти. А це в свою чергу відкриває перспективи створення на основі германію різного роду електронних приладів та датчиків, які можуть працювати в таких екстремальних умовах. Наприклад, в роботі [1] було показано, що інверсію L_1 - Δ_1 -типу абсолютного мінімуму можна реалізувати при гідростатичному тиску порядку 4 ГПа. Пізніше виявилось [2], що дана інверсія можлива при одновісному тиску порядку 2,8 ГПа вздовж кристалографічного напрямку $[100]$. При цьому для випадку гідростатичного тиску можна отримати шестиеліпсоїдну Δ_1 -модель зони провідності кристалів n -Ge, а при одновісному стиску – двохеліпсоїдну. Як в першому, так і в другому випадках така інверсія буде впливати на енергетичний спектр локальних енергетичних рівнів в забороненій зоні, на ефект екранування та змінювати характер розсіяння носіїв заряду.

Дослідження різних кінетичних ефектів в сильно деформованих кристалах n -Ge є актуальним також з точки зору вивчення властивостей наноструктур. Як показує літературний огляд сучасних робіт, в наноструктурах з компонентою германію виникає гігантське збільшення рухливості порівняно з недеформованими кристалами n -Ge та n -Si, яке має широке практичне використання в CMOS приладах [3]. Така значна зміна рухливості пов'язана з деформаційною перебудовою зонної структури кристалів германію за рахунок значних внутрішніми напруг, які виникають в цих наноструктурах. Іншим прикладом використання напруженого германію є наноструктури Si/Ge [4]. В таких наноструктурах кластери германію є пружно деформованими, оскільки параметри кристалічних

грашок германію та кремнію відрізняються приблизно на 4 відсотки. Ці напруження можуть бути за величиною такими, що відбувається суттєва перебудова зонної структури кристалів германію. Однією з основних проблем при задані необхідних електрофізичних властивостями таких наноструктур є якраз врахування впливу деформацій на їх кількісні характеристики.

Для оцінки впливу інверсії типу L_1 - Δ_1 , обумовленої одновісним тиском кристалів n - Ge вздовж кристалографічного напрямку $[100]$, на зміну електричних властивостей даного матеріалу нами на основі теорії анізотропного розсіяння були проведені розрахунки рухливості носіїв заряду для різної концентрації домішки. Ми обмежились при цьому випадком невинродженого електронного газу та розсіюванням електронів на акустичних фонах та іонах домішки. При цьому одержанні результати будуть справедливими для кристалів достатньо високої чистоти з відносно малими концентраціями електронів, а тому можна буде знехтувати також електрон – електронним розсіюванням.

Оскільки ізоенергетичні поверхні для L_1 та Δ_1 - мінімумів є еліпсоїдами обертання, то рухливість носіїв заряду в довільному напрямку визначається із співвідношення [5]:

$$\mu = \mu_{\perp} \sin^2 \theta + \mu_{\parallel} \cos^2 \theta, \quad (1)$$

де θ - кут між розглядуваним напрямком і головною віссю еліпсоїда; μ_{\perp} і μ_{\parallel} - рухливість носіїв заряду поперек і вздовж осі еліпсоїда.

Для випадку, коли одновісний тиск X та струм J направлені вздовж кристалографічного напрямку $[100]$, то, згідно з (1), для L_1 мінімуму

$$\mu^L = \frac{1}{3} \mu_{\parallel}^L + \frac{2}{3} \mu_{\perp}^L, \quad (2)$$

а для Δ_I – мінімуму

$$\mu^\Delta = \mu_\parallel^\Delta \quad (3)$$

З іншої сторони компоненти тензорів рухливості можна виразити через компоненти тензорів часів релаксації та ефективної маси для відповідних мінімумів:

$$\mu_\parallel^L = \frac{e}{m_\parallel^L} \langle \tau_\parallel^L \rangle, \quad \mu_\perp^L = \frac{e}{m_\perp^L} \langle \tau_\perp^L \rangle, \quad \mu_\parallel^\Delta = \frac{e}{m_\parallel^\Delta} \langle \tau_\parallel^\Delta \rangle \quad (4)$$

На основі теорії анізотропного розсіяння запишемо вирази для τ_\parallel та τ_\perp в умовах змішаного розсіяння [6]:

$$\tau_\parallel = \frac{a_\parallel}{\sqrt{k_B T^2}^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{x^{\frac{3}{2}}}{x^2 + b_0}, \quad \tau_\perp = \frac{a_\perp}{\sqrt{k_B T^2}^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{x^{\frac{3}{2}}}{x^2 + b_1}, \quad (5)$$

$$\text{де } a_\parallel = \frac{\pi C_{11} \hbar^4}{k \Xi_d^2 \sqrt{2 m_\parallel m_\perp^2}} \cdot \frac{1}{\Phi_{0a}}, \quad a_\perp = \frac{\pi C_{11} \hbar^4}{k \Xi_d^2 \sqrt{2 m_\parallel m_\perp^2}} \cdot \frac{1}{\Phi_{1a}}, \quad (6)$$

$$b_0 = \frac{a_\parallel \cdot \Phi_{0i}}{\sqrt{k T^2}^{\frac{3}{2}} \tau_{0i}(kT)}, \quad b_1 = \frac{a_\perp \cdot \Phi_{1i}}{\sqrt{k T^2}^{\frac{3}{2}} \tau_{0i}(kT)}, \quad (7)$$

$$\tau_{0i}(kT) = \frac{\sqrt{2 m_\perp} \varepsilon^2 (kT)^{\frac{3}{2}}}{\pi N e^4 \sqrt{m_\parallel}}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{1a} = & 1 + \frac{1 + \beta^2}{\beta^2} \left(2 + \frac{3}{\beta^2} - \frac{3(1 + \beta^2)}{\beta^3} \alpha \right) \frac{\Xi_u}{\Xi_d} + \\ & \frac{(1 + \beta^2)}{\beta^4} \frac{\Xi_u^2}{\Xi_d^2} \left((1 + \beta^2) \left(1 + \frac{15}{4\beta^2} - \frac{3}{4\beta^3} (5 + 3\beta^2) \alpha \right) + \right. \\ & \left. + \frac{C_{11}}{4C_{44}} \left(-13 - \frac{15}{\beta^2} + \frac{3(1 + \beta^2)}{\beta^3} (5 + \beta^2) \alpha \right) \right) \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{0a} = & 1 + \frac{2(1+\beta^2)}{\beta^2} \left(1 - \frac{3}{\beta^2} + \frac{3}{\beta^3} \alpha \right) \frac{\Xi_u}{\Xi_d} + \\ & + \frac{(1+\beta^2)}{\beta^4} \frac{\Xi_u^2}{\Xi_d^2} \left((1+\beta^2) \left(1 - \frac{6}{\beta^2} - \frac{3}{2\beta^2(1+\beta^2)} + \frac{15\alpha}{2\beta^3} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{C_{11}}{C_{44}} \left(2 + \frac{15}{2\beta^2} - \frac{3}{2\beta^3} (5 + 3\beta^2) \alpha \right) \right) \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{0i} = & \frac{3}{2\beta^3} \left(\left(\frac{\beta}{1+\beta^2} - \alpha \right) \ln \gamma^2 - \alpha \ln(1+\beta^2) + \right. \\ & \left. + 2L(a) + \frac{\beta\gamma^2}{2} \left(\frac{\beta^2-1}{\beta^2+1} + \frac{\alpha(\beta^2+1)}{\beta} \right) \right) \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{1i} = & \frac{3}{4\beta^3} \left(((1-\beta^2)\alpha - \beta) \ln \gamma^2 + 2(\beta^2-1)L(a) - 2\beta^2\alpha - \right. \\ & \left. - (\beta^2-1)\alpha \ln(1+\beta^2) + \frac{\gamma^2}{2} (\beta(1+3\beta^2) + \alpha(3\beta^4 + 2\beta^2 - 1)) \right) \end{aligned} \quad (12)$$

де $\alpha = \arctg \beta$, $\beta = \frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{m_{\perp}}$, $\gamma = \sqrt{\frac{\pi \hbar^2 e^2 N}{2m_{\parallel} \varepsilon \varepsilon_0 k T}}$,

$L(a) = -\int_0^a \ln \cos \varphi d\varphi$ – функція Лобачевського,

N – концентрація домішки.

Тоді остаточно вирази для компонент тензора часів релаксації матимуть вигляд:

$$\langle \tau_{\parallel} \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^{\frac{3}{2}} e^{-x} \tau_{\parallel}, \quad \langle \tau_{\perp} \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^{\frac{3}{2}} e^{-x} \tau_{\perp} \quad (13)$$

Враховуючи значення констант деформаційного та компонент тензора ефективної маси для L_I - мінімуму ($\Xi_d = -6,4 \text{ eB}$, $\Xi_u = 16,4 \text{ eB}$, $m_{\parallel} = 1,58m_0$, $m_{\perp} = 0,082m_0$) [6]

і відповідні параметри, які були знайдені в роботі [7], для Δ_I - мінімуму ($\Xi_d = 0,1 eB$, $\Xi_u = 12 eB$, $m_{\parallel} = 0,6m_0$, $m_{\perp} = 0,225m_0$), можна на основі виразів (2) та (3) з врахуванням (4-13) отримати концентраційні залежності рухливості носіїв заряду для L_I та Δ_I - мінімуму (рис. 2)

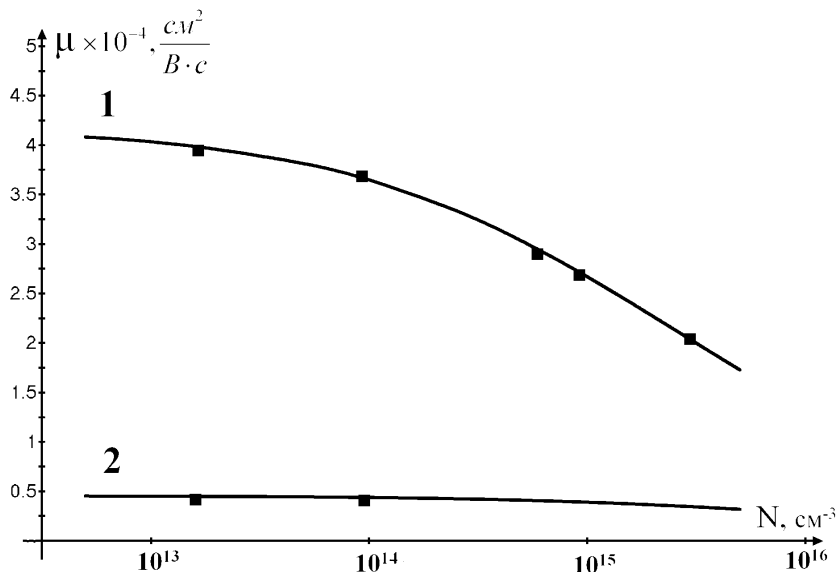


Рис. 2. Залежності рухливості електронів від концентрації домішки для L_I та Δ_I -мінімумів зони провідності кристалів $n-Ge$ при $T=77 K$: 1 - для L_I - мінімуму, 2 - для Δ_I -мінімуму; ■ - експериментальні результати [8].

Згідно з рис. 2, для різної концентрації домішки інверсія типу L_I - Δ_I абсолютного мінімуму в $n-Ge$ призводить до суттєвого зменшення рухливості носіїв заряду, що пов'язано, перш за все, зменшенням часу релаксації, оскільки ефективні маси для електронів різних мінімумів мало відрізняються ($m_L = 0,55m_0$,

$m_{\Delta} = m_{\parallel} = 0,6m_0$). Також, як видно з рис. 2, рухливість електронів для L_{1c} - мінімуму є більш чутливою до збільшення концентрації домішки порівняно з Δ_{1c} - мінімумом. Це можна пояснити тим, що для L_{1c} - мінімуму параметр анізотропії ефективних мас $K_m = \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}}$ є набагато більшим, ніж для Δ_{1c} - мінімуму ($K_m^L = 19,3$; $K_m^{\Delta} = 2,7$).

Тому в доповнення усталеного висновку, що на ефективність розсіяння носії заряду в анізотропних напівпровідниках впливає лише дія конкретного механізму, потрібно додати дуже суттєву поправку про велику роль ступеня анізотропії окремих параметрів самого кристалу.

Література:

1. Ahmad S. N., Adams A. R. Electron transport and pressure coefficients associated with the L_{1c} and Δ_{1c} minima of germanium // Phys. Rev. – 1986, В 34, №4. – p. 2319–2328.
2. Баранский П.И., Ермаков В.Н., Коломеец В.В., Назарчук П.Ф. Инверсия энергетических зон под влиянием предельно больших одноосных упругих деформаций в n -Ge в условиях перехода металл-полупроводник (переход Мотта) // Тезисы докладов XI Международной конференции МАРИВД, Киев, 12- 17 июля. – В кн. Высокие давления в науке и технике. – Киев, ИСМ АН УССР.- 1987. – 127 с.
3. Murphy-Armando F. and Fahy S., Giant enhancement of n-type carrier mobility in highly strained germanium nanostructures // Journal of Applied Physics. – 2011. – Volume 109, Issue 11, p. 113703 – 113703-5.
4. Brunner K. Si/Ge nanostructures // Rep. Prog. Phys. – 2002. – Vol. 65, №1. – P. 27–72.

5. Бир Г. Л. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. – М. : Наука, 1972. – 584 с.

6. Баранский П. И., Буда И. С., Даховский И. В., Коломоец В. В.. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках. – К., Наукова думка, 1977. – 269 с.

7. Черниш В.В. А.Г. Самойлович і дослідження явищ переносу в пружно деформованому германії // Термоелектрика. – 2006. - №3. с. 15 – 25.

8. Баранський П.І., Федосов А.В., Гайдар Г.П. Фізичні властивості кристалів кремнію та германію в полях ефективного зовнішнього впливу. - Луцьк. “Надстир’я”, 2000.- 280 с.