

УДК 621.315.592

С.В. Луньов, П.Ф. Назарчук, Л.І. Панасюк

Луцький національний технічний університет

КОНСТАНТИ ДЕФОРМАЦІЙНОГО ПОТЕНЦІАЛУ Δ_1 -МІНІМУМУ n -Ge

Запропоновано метод розрахунку зміни положення Δ_1 -мінімуму зони провідності n -Ge при дії одновісної пружної деформації. На основі даного методу та експериментальних даних поздовжнього п'єзоопору сильно легованих кристалів n -Ge визначено комбінацію констант деформаційного потенціалу Ξ_u^Δ та Ξ_d^Δ для Δ_1 -мінімуму зони провідності n -Ge.

Розвиток теоретичних і експериментальних досліджень у фізиці напівпровідників та напівпровідниковому матеріалознавстві показує, що такий матеріал, як германій, незважаючи на всебічну вивченість його властивостей, і надалі залишається модельним об'єктом при поясненні як знову відкритих, так і відомих процесів і явищ в об'ємі та на поверхні. З точки зору розуміння електрофізичних властивостей германію головним є надійно встановлена зонна енергетична структура цього матеріалу. В n -Ge крім основних L_1 – мінімумів зони провідності існують додаткові (неосновні) Δ_1 -мінімуми, розміщені по шкалі енергій на $0,18 \text{ eV}$ вище основних в напрямку $\langle 100 \rangle$. Значна віддаленість Δ_1 -мінімумів від основних як по енергії, так і по квазіімпульсу не сприяла дослідженням впливу їх при малих фізичних збуреннях на властивості матеріалу. Саме цим фактором пояснюється майже відсутність даних про параметри цих мінімумів. Проте в екстремальних умовах направленої дії електричних, деформаційних, оптичних та температурних

полів Δ_I -мінімуми вносять суттєвий вклад у відповідні величини, а інколи стають визначальними в енергетичному спектрі кристалу.

Вперше радикальної перебудови зонного спектру n -Ge за рахунок інверсії типу абсолютного мінімуму зони провідності при дії сильних одновісних пружних деформацій було досягнуто в [1]. Як наслідок спостерігався деформаційно-індукований фазовий перехід метал-діелектрик. Відомо, що при критичній концентрації домішки Sb ($\approx 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) в n -Ge настає фазовий перехід діелектрик – метал. Раніше на основі інших фізичних механізмів при температурах $T \approx 2 - 4 \text{ K}$ отримували деформаційно індукований фазовий перехід діелектрик – метал для рівнів легування, що не перевищували критичну концентрацію більше, ніж на 10%. Механізм перебудови зонного спектру за рахунок інверсії типу абсолютного мінімуму зони провідності дозволив в кілька разів ($N_D \approx 4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) збільшити інтервали концентрацій та температур, в межах яких спостерігається фазовий перехід метал-діелектрик.

Для кількісного пояснення обговорюваного ефекту потрібно мати параметри Δ_I -мінімуму зони провідності n -Ge, який стає домінуючим у енергетичному спектрі напівпровідника після інверсії. Визначальними тут є константи деформаційного потенціалу Ξ_u^Δ та Ξ_d^Δ , компоненти (поздовжня і поперечна) тензора ефективних мас m_{\parallel} і m_{\perp} та компоненти тензора часу релаксації імпульсу τ_{\parallel} і τ_{\perp} . Зауважимо, що всі перераховані параметри для L_I -мінімуму зони провідності n -Ge надійно встановлені. Знайдені в [4] на основі [2, 3] константи деформаційного потенціалу Ξ_u^Δ та Ξ_d^Δ ($\Xi_u^\Delta = 10,4 \pm 1,0 \text{ eV}$, $\Xi_d^\Delta = 0,53 \pm 0,06 \text{ eV}$) для Δ_I -мінімуму

викликають певний сумнів, оскільки похибка результату на порядок перевищує точність вимірів та розрахунків. Крім того, в згаданій роботі [2] комбінація цих констант $0,35\Xi_d^\Delta + 0,77\Xi_u^\Delta = (8,2 \pm 0,2) \text{ eV}$ отримана на основі далеко не очевидного допущення про найбільшу ефективність пружного розсіяння електронів між зонами L_I і Δ_I у випадку розміщення мінімумів цих зон на одному енергетичному рівні.

Подібна ситуація склалася і при визначенні компонент тензора ефективної маси Δ_I -мінімуму. На даний час оцінка значень m_{\parallel} і m_{\perp} проведена тільки в роботах [5] та [6]. По визначеній методом ударної іонізації відносній глибині залягання енергетичного рівня, що вноситься домішкою сурми, і який зв'язаний із двома долинами, розміщеними в напрямку $\langle 100 \rangle$, знайдено значення компоненти поперечної ефективної маси m_{\perp} для електронів цієї долини $m_{\perp}^{\langle 100 \rangle} = 0,45m_0$, де m_0 – маса вільного електрона [5]. Слід зауважити, що описаний підхід, навіть в рамках еліпсоїдальної моделі, викликає питання щодо правомірності використання у формулі для визначення енергії іонізації мілкового донорного енергетичного рівня

$$\varepsilon_i = \Gamma \frac{m_{\perp}^{\langle 100 \rangle} e^4}{2\hbar^2 \chi^2} \quad (1)$$

саме маси m_{\perp} (Γ – числовий коефіцієнт, χ – діелектрична проникність). Крім того, орієнтація еліпсоїдів «кремнієвого типу» в $n\text{-Ge}$ на даний час не встановлена.

Допущення про те, що параметр анізотропії розсіяння

$$K_{\tau} = \frac{\langle \tau_{\parallel} \rangle}{\langle \tau_{\perp} \rangle} \quad \text{для } \Delta_I\text{-мінімуму рівний одиниці [2] через}$$

близькість до одиниці ($K_{\tau} = 1,2$) для L_I -мінімуму в $n\text{-Ge}$ і

для основного мінімуму в $n\text{-Si}$ ($K_\tau=0,8$) в області переважно фононного розсіювання ($T=77\text{ K}$, $n=1,6\cdot 10^{13}\text{ см}^{-3}$) є досить таки грубим. А це означає, що компоненти тензора часу релаксації імпульсу для Δ_I -мінімуму в $n\text{-Ge}$ не визначені з достатньою точністю.

Незважаючи на приведені вище зауваження, перераховані параметри Δ_I -мінімуму близькі до істинних, але потребують постійних уточнень. Тому було досліджено ефект п'єзоопору в кристалографічному напрямку $\langle 100 \rangle$ для легованих сурмою до рівня $n=2,0\cdot 10^{18}\text{ см}^{-3}$ монокристалів германію в області виключно юнного розсіювання носіїв струму ($T=4,2\text{ K}$) (рис.1.). Результати експерименту, використані в розрахунках, представлені на рисунку.

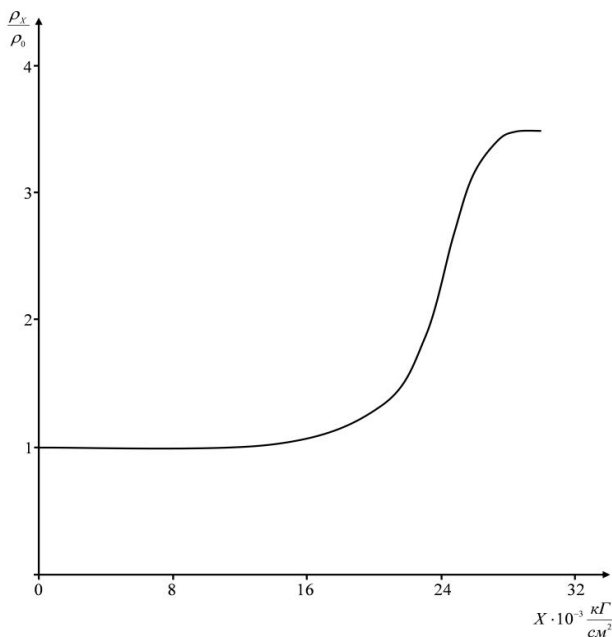


Рис.1. Залежність поздовжнього п'єзоопору $n\text{-Ge}\langle\text{Sb}\rangle$ від величини одновісного стиску X для кристалографічного напрямку $\langle 100 \rangle$ при $T=4,2\text{ K}$.

Питому електропровідність деформованого зразка можна представити у вигляді

$$\sigma = e(4n_L\mu_L + 2n_\Delta\mu_\Delta) \quad (2)$$

Тут і надалі індексами L та Δ будемо позначати параметри відповідних енергетичних мінімумів. Крім того, $4n_L + 2n_\Delta = n_e = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} = \text{const}$ для будь-якої точки кривої п'єзоопору. Сумісний розв'язок цих співвідношень дає роздільну концентрацію електронів у відповідних долинах:

$$n_L = \frac{\sigma - n_e\mu_\Delta e}{4e(\mu_L - \mu_\Delta)}, \quad n_\Delta = \frac{n_e\mu_\Delta e - \sigma}{2e(\mu_L - \mu_\Delta)} \quad (3)$$

Динаміка статистики електронного газу в долинах така, що для області початкового росту питомого опору кристалу з тиском в L -мінімумах він є виродженим, а в Δ -мінімумах - невиродженим. Для області насичення ситуація змінюється на протилежну, причому саме плато залежності означає повну відсутність електронів в L -мінімумах. Тому аналітичні залежності концентрацій електронів в L - і Δ -мінімумах визначатимуться як

$$n_L = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_L}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_F - E_L)^{\frac{3}{2}}, \quad n_\Delta = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_\Delta}{kT}\right), \quad (4)$$

де E_F , E_L , E_Δ – енергії Фермі та відповідних мінімумів деформованого кристалу відносно нульового рівня, яким є енергетичне положення дна зони провідності недеформованого кристалу і позначатиметься індексом 0;

$$N_C = \frac{2}{\hbar^2} \left(\frac{m_\Delta kT}{2\pi} \right)^{\frac{3}{2}} - \text{ефективна густина енергетичних станів}$$

в Δ -мінімумах. З наведених виразів для концентрацій носіїв струму можна знайти енергетичне положення рівня Фермі та зміщення дна Δ -мінімуму як функції величини одновісного стиску:

$$E_F = \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_L} \left(\frac{\sigma - n_e \mu_{\Delta} e}{4e(\mu_L - \mu_{\Delta})} \right)^{\frac{2}{3}} + \Delta E_L, \quad (5)$$

$$\Delta E_{\Delta} = -(E_{\Delta_0} - E_{L_0}) + \Delta E_L + kT \ln N_C - kT \ln \frac{n_e \mu_{\Delta} e - \sigma}{2e(\mu_L - \mu_{\Delta})} +$$

$$+ \left(\frac{3}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_L} \left(\frac{\sigma - n_e \mu_{\Delta} e}{4e(\mu_L - \mu_{\Delta})} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (6)$$

Тут ΔE_L – деформаційне зміщення L -мінімуму.

З іншої сторони, деформаційне зміщення двох Δ_I -мінімумів знаходиться із виразу [7]

$$\Delta E_{\Delta} = -(\Xi_d^{\Delta} + \frac{1}{3}\Xi_u^{\Delta})(S_{11} - S_{12})X - \frac{2}{3}\Xi_u^{\Delta}(S_{11} - S_{12})X \quad (7)$$

де S_{11} і S_{12} – константи жорсткості, X – механічне напруження.

Прирівнявши праві частини виразів (6) і (7) для початкового росту функції $\frac{\rho_X}{\rho_0} = f(X)$ можна знайти

значення комбінації констант деформаційного потенціалу Δ_I -мінімуму. Для цього потрібно використати всі відомі і надійно встановлені параметри L_I -мінімуму та значення констант жорсткості для кристалів германію [8, 9] ($\Xi_u^L = 16,4 \text{ eV}$, $\Xi_d^L = -6,4 \text{ eV}$, $S_{11} = 0,769 \cdot 10^{-11} \text{ Па}^{-1}$,

$S_{12} = -0,21 \cdot 10^{-11} \text{ Па}^{-1}$). Значення ефективної густини енергетичних станів N_C для Δ_I -мінімуму знаходилось із врахування як даних роботи [7]

($m_{\perp}^{<100>} = 0,45m_0$, $m_{\parallel}^{<100>} = 2,0m_0$), так і значень роботи [8]

($m_{\perp}^{<100>} = 0,29m_0$, $m_{\parallel}^{<100>} = 1,35m_0$). Розбіжність цих величин

фактично не впливає на остаточний результат комбінації

констант. Величини $\mu_L = 780 \frac{\text{см}^2}{\text{Вс}}$ і $\mu_\Delta = 220 \frac{\text{см}^2}{\text{Вс}}$ знайдені за відомими значеннями концентрації носіїв струму та провідності недеформованого і сильно деформованого кристалу (плато експериментальної залежності). В результаті отримана така комбінація констант деформаційного потенціалу для Δ_I -мінімуму $0,35\Xi_d^\Delta + 0,77\Xi_u^\Delta = (8,65 \pm 0,05)eB$

Таким чином, використовуючи тільки дані експерименту по визначенню величини поздовжнього п'єзоопору на ділянці одновісних стисків, коли починається «деформаційне підмішування» енергетичних станів Δ_I -мінімуму, можна достатньо надійно визначити комбінацію констант деформаційного потенціалу для цього мінімуму.

Література:

1. Инверсия энергетических зон под влиянием предельно больших одноосных упругих деформаций в п-Ge в условиях перехода металл-полупроводник (переход Мотта) / П.И. Баранский, В.Н. Ермаков, В.В. Колomoец, П.Ф. Назарчук // 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.

2. Некоторые характеристики энергетических минимумов типа $\langle 100 \rangle$ в п-Ge / П.И. Баранский, В.В. Колomoец, Б.Н. Сусь, В.И. Шаповалов // Физика и техника полупроводников.- 1979, т.13, № 3.- С. 602 – 604.

3. Arizumi T. Uniaxial Stress effect on (000) and (100) conduction-band minima of germanium / T. Arizumi, A. Yoshida, N. Savaki – J. Jap. of Appl. Phys.- 1969, v.8, № 6. - p. 700 – 703.

4. Ermakov V.N. The deformation potentials Ξ_u^Δ , Ξ_d^Δ of the X-Valleys of the germanium conduction band / V.N. Ermakov, V.V. Kolomoets, V.S. Timochuk.- Phys.st. sol.(b). - 1983, v.116, № 2.- p. K77 – K78.

5. Энергия ионизации примесных уровней Sb в Ge, связанных с долинами <100> с-зоны. В.В. Байдаков, Н.Н. Григорьев, В.Н. Ермаков, В.В. Коломоец, Т.А. Кудыкина - // Физика и техника полупроводников.- 1983, т.17, № 12. - С. 370– 371.

6. Ahmad C. Temperature dependence of the electron mobility in the Δ_{1c} minima of Germanium / C. Ahmad, A. Adams, G. Pitt– J. Phys. C: Sol. State Phys.- 1979, v.12, № 10.- p. 1379 -1383.

7. Полякова А.Л. Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов / А.Л. Полякова – М. : Наука - 1979 р.- 168 с.

8. Баранский П.И. Определение константы деформационного потенциала Ξ_u в сильно легированных кристаллах *n*-германия / П.И. Баранский, А.И. Елизаров, В.В. Коломоец.- Физика и техника полупроводников. - 1974, т.8, №4.- С. 806-808.

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