ПАРАМЕТРИ ВИСОКОЕНЕРІ ЕТИЧНОГО Δ_1 -МІНІМУМУ ЗОНИ ПРОВІДНОСТІ *n*-Ge

С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, О. В. Бурбан Луцький національний технічний університет вул. Львівська, 75, Луцьк, 43018, Україна (Отримано 26 жовтня 2012 р.; в остаточному вигляді — 23 липня 2013 р.)

На основі експериментальних даних поздовжнього п'єзоопору кристалів *n*-Ge та теорій деформаційного потенціалу й анізотропного розсіяння знайдено комбінацію констант деформаційного потенціалу, ефективну масу густини станів, компоненти тензора ефективної маси для Δ_1 -мінімуму зони провідності кристалів *n*-Ge. Показано, що характер екранування і відповідно розсіяння змінюється при реалізації в кристалах германію з використанням одновісного тиску вздовж кристалографічного напрямку [100] інверсії типу ($L_1 - \Delta_1$) абсолютного мінімуму. Це пояснюється різними значеннями радіуса екранування й екрануючого множника для L_1 та Δ_1 -мінімуму.

Ключові слова: деформація, п'єзоопір, анізотропія розсіяння.

PACS number(s): 72.20.Fr, 72.10.-d

Сучасний науково-технічний проґрес електронної техніки пов'язаний з освоєнням та розробкою нових матеріалів, які можна використати в різноманітних складних пристроях мікро- та наноелектроніки. Такий напівпровідниковий матеріал, як германій, незважаючи на всебічну вивченість його властивостей, і надалі є перспективним матеріалом для створення різних приладів та сенсорів. В екстремальних умовах дії значних зовнішніх електричних, деформаційних, оптичних та температурних полів участь у різних кінетичних та оптичних ефектах можуть брати не лише мінімуми зони провідності кристалів германію із симетрією L_1 , а також високоенерґетичні мінімуми Γ_2 , Δ_1 та Γ_{15} . Наприклад, радикальну перебудову зонної будови кристалів n-Ge з домінуючим внеском Δ_1 мінімуму, який є вище за шкалою енергій на 0.18 еВ від L_1 -мінімуму, можна реалізувати при сильних гідростатичних або одновісних тисках. Це своєю чергою відкриває перспективи для створення на основі германію різних електронних приладів та датчиків, які можуть працювати в таких екстремальних умовах. Зокрема в роботі [1] виявлено різке зростання інтенсивності екситонного поглинання в кристалах германію при гідростатичному тиску, більшому від 0.6 ГПа, що може бути використано у фотодетекторах.

Дослідження різних кінетичних ефектів у сильно деформованих кристалах n-Ge є актуальним також з погляду вивчення властивостей наноструктур. Як показує літературний огляд сучасних праць, в наноструктурах із компонентою германію виникає гігантське збільшення рухливості порівняно з недеформованими кристалами n-Ge та n-Si, яке має широке практичне використання в CMOS-приладах [2, 3]. Висока рухливість електронів дає змогу також створювати транзистори з високопровідними каналами [4, 5]. Час перемикання таких транзисторів може становити пікосекунди. Така значна зміна рухливості пов'язана з суттєвою деформаційною перебудовою зонної структури кристалів германію за рахунок значних внутрішніх напруг, які виникають у цих наноструктурах. Прикладом напруженого германію є також гетерострукутури Si/Ge. У таких наноструктурах кластери германію є пружно деформованими, оскільки параметри кристалічних ґраток германію та кремнію відрізняються приблизно на 4 відсотки [6]. Використання наноструктур із самоіндукованими Ge/Si наноострівцями відкриває нові перспективи для розвитку оптота наноелектроніки [7]. Масиви Ge(GeSi) квантових точок з успіхом можна застосувати для виготовлення фотодетекторів для ближнього інфрачервоного діапазону та світловипромінювальних діодів для цієї ж спектральної області, оскільки вони мають певні переваги над традиційними Ge/Si структурами з квантовими ямами [8]. Просторове впорядкування таких наноострівців залежить також від розподілу деформаційних полів у цих наноструктурах [9]. Однією з основних проблем при заданих необхідних електрофізичних властивостях таких наноструктур є якраз урахування впливу деформацій на кількісні характеристики шарів цих наноструктур, зокрема таких, як співвідношення товщин яма-бар'єр, розподіл компонентного складу, процеси дифузії [10].

Для кількісного трактування фізичних явищ при кардинальній перебудові зонного спектра матеріалу необхідно мати параметри активних енерґетичних мінімумів зони провідності, одними з яких є ефективна маса й компоненти тензорів ефективної маси та деформаційного потенціалу.

На сьогодні відомі поодинокі роботи з розрізненими даними щодо значень компонент тензора ефективної маси, параметра анізотропії ефективних мас та комбінації констант деформаційного потенціалу для Δ_1 мінімумів в *n*-Ge [11–13]. Спільним для цих праць є те, що остаточний результат отриманий на основі використання даних неспоріднених досліджень інших авторів, що може вносити додаткові похибки в значення шуканих параметрів.

Тому ми дослідили ефект поздовжнього п'єзоопору

в кристалографічному напрямку [100] для леґованих сурмою до рівня $n = 2.0 \cdot 10^{18} \, \text{см}^{-3}$ монокристалів германію в ділянці виключно йонного розсіювання носіїв заряду $(T = 4.2 \,\mathrm{K})$. Результати експерименту, які використовували в розрахунках, показані на рис. 1.



Рис. 1. Залежність поздовжнього п'єзоопору n-Ge(Sb)від величини одновісного тиску вздовж кристалографічного напрямку $\langle 100 \rangle$ при T = 4.2 К.

При деформації вздовж кристалографічного напрямку [100] чотири L₁-долини зміщуватимуться вгору, а дві Δ_1 -долини вниз за шкалою енергій. Тоді питому електропровідність деформованого зразка можна записати у вигляді:

$$\sigma = e(4n_L\mu_L + 2n_\Delta\mu_\Delta). \tag{1}$$

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

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

Статистика електронного газу в долинах така, що для області початкового зростання питомого опору кристала з тиском в L_1 -мінімумах він є виродженим, а в Δ_1 -мінімумах — невиродженим. Для області насичення ситуація змінюється на протилежну, причому саме плато залежності означає повну відсутність електронів в L₁-мінімумах. Тому аналітичні залежності концентрацій електронів в L_1 - і Δ_1 -мінімумах визначатимуться як

$$n_L = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{2m_L}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E_{\rm F} - E_L)^{\frac{3}{2}},$$

$$n_\Delta = N_C \exp\left(\frac{E_{\rm F} - E_\Delta}{kT}\right),$$
(3)

де $E_{\rm F}, E_L, E_\Delta$ — енергії Фермі та відповідних мінімумів деформованого кристала відносно нульового рів-

Тоді, враховуючи (5) та (7),

ня, яким є енерґетичне положення дна зони провідності недеформованого кристала й позначається індексом "0"; $N_C = 2\left(\frac{2\pi m_{\Delta}kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}$ — ефективна густина енергетичних станів для Δ_1 -мінімуму. З наведених виразів для концентрацій носіїв заряду можна знайти енерґетичне положення рівня Фермі та зміщення дна Δ_1 -мінімуму як функції величини одновісного тиску:

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

$$\Delta E_{\Delta} = -(E_{\Delta_0} - E_{L_0}) + \Delta E_L + kT \ln N_C$$
(5)
$$-kT \ln \frac{n_e \mu_L e - \sigma}{2e(\mu_L - \mu_\Delta)} + \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_L} \left(\frac{\sigma - n_e \mu_\Delta e}{4e(\mu_L - \mu_\Delta)}\right)^{\frac{2}{3}}.$$

Тут ΔE_L — деформаційне зміщення L_1 -мінімуму; $(E_{\Delta_0} = 0.18 \,\mathrm{eB}, \ \mathrm{a} \ E_{L_0} = 0).$

Для обчислення зміни положення Δ_1 -мінімуму при одновісному тиску потрібно використати всі відомі й надійно встановлені параметри L_1 -мінімуму та значення констант жорсткості для кристалів германію:

$$\begin{aligned} \Xi_u^L &= 16.4 \, \mathrm{eB}, \quad \Xi_d^L = -6.4 \, \mathrm{eB}, \\ S_{11} &= 0.769 \cdot 10^{-11} \, \mathrm{\Pi a}^{-1}, \quad S_{12} = -0.21 \cdot 10^{-11} \, \mathrm{\Pi a}^{-1}. \end{aligned}$$

Величини $\mu_L = 780 \, \text{см}^2/\text{Bc}$ і $\mu_\Delta = 220 \, \text{см}^2/\text{Bc}$ можна знайти за відомими значеннями концентрації носіїв струму та провідності недеформованого й сильно деформованого кристала (плато експериментальної залежності).

Як показують відповідні розрахунки, згідно з (5), зміщення ΔE_{Δ} дна Δ_1 -мінімуму добре апроксимується лінійною функцією тиску, що також узгоджується з теорією деформаційного потенціалу [14], використовуючи яку, деформаційне зміщення двох Δ_1 мінімумів можна записати у вигляді:

$$\Delta E_{\Delta} = -\alpha X,\tag{6}$$

ле

$$\alpha = \left(\Xi_d^{\Delta} + \frac{1}{3}\Xi_u^{\Delta}\right)(S_{11} + 2S_{12}) + \frac{2}{3}\Xi_u^{\Delta}(S_{11} - S_{12}) = \text{const.}$$

Ураховуючи вирази (5) та (6), можна знайти комбінацію констант деформаційного потенціалу для Δ_1 -мінімуму: $0.35 \Xi_d^{\Delta} + 0.77 \Xi_u^{\Delta} = 8.65 \text{ eB}.$ Для довільних значень одновісного тиску

 X_1, X_2, \ldots, X_n , згідно з (5) та (6):

$$\frac{\Delta E_{\Delta}(X_1)}{X_1} = \frac{\Delta E_{\Delta}(X_2)}{X_2} = \dots = \frac{\Delta E_{\Delta}(X_n)}{X_n} = \text{const.} \quad (7)$$

$$\frac{1}{X_1} \left(-\left(E_{\Delta_0} - E_{L_0}\right) + \Delta E_L(X_1) + kT \ln N_C - kT \ln \frac{n_e \mu_L e - \sigma(X_1)}{2e(\mu_L - \mu_\Delta)} + \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_L} \left(\frac{\sigma(X_1) - n_e \mu_\Delta e}{4e(\mu_L - \mu_\Delta)}\right)^{\frac{2}{3}}\right) \\
= \frac{1}{X_2} \left(-\left(E_{\Delta_0} - E_{L_0}\right) + \Delta E_L(X_2) + kT \ln N_C - kT \ln \frac{n_e \mu_L e - \sigma(X_2)}{2e(\mu_L - \mu_\Delta)} + \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_L} \left(\frac{\sigma(X_2) - n_e \mu_\Delta e}{4e(\mu_L - \mu_\Delta)}\right)^{\frac{2}{3}}\right). \tag{8}$$

Розв'язок рівняння (8) з урахуванням експериментальних значень питомих електропровідностей $\sigma(X_1)$ та $\sigma(X_2)$ початкового зростання залежності питомого опору від одновісного тиску (див. рис. 1) дає таке значення ефективної маси густини станів електронів для Δ_1 -мінімуму: $m_{\Delta} = 0.88 m_0$. Залежність енергії електрона E від хвильового вектора **k** як для L_1 , так і Δ_1 -мінімуму має вигляд еліпсоїда обертання. Тому

$$m_{\Delta} = (m_{\parallel}m_{\perp}^2)^{\frac{1}{3}},\tag{9}$$

де m_{\parallel}, m_{\perp} — поздовжній та поперечний складник ефективної маси електрона для Δ_1 -мінімуму відповідно.

Оскільки таких еквівалентних Δ_1 -еліпсоїдів при інверсії типу $(L_1 - \Delta_1)$ абсолютного мінімуму, зумовленої одновісним тиском кристалів *n*-Ge вздовж кристалографічного напрямку [100], буде не 1, а 2, то ефективна маса густини станів

$$m_{\Delta}^{*} = N^{\frac{2}{3}} (m_{\parallel} m_{\perp}^{2})^{\frac{1}{3}} = 2^{\frac{2}{3}} (m_{\parallel} m_{\perp}^{2})^{\frac{1}{3}}$$
$$= 2^{\frac{2}{3}} m_{\Delta} = 0.88 \, m_{0}.$$

Якщо ізоенерґетичні поверхні є еліпсоїдами обертання, то рухливість носіїв заряду в довільному напрямку визначається зі співвідношення [15]

$$\mu = \mu_{\perp} \sin^2 \theta + \mu_{\parallel} \cos^2 \theta, \tag{10}$$

де θ — кут між розгляданим 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 (10), для Δ_1 -мінімуму

$$\mu_{\Delta} = \mu_{\parallel}^{\Delta} = \frac{e}{m_{\parallel}^{\Delta}} \langle \tau_{\parallel}^{\Delta} \rangle, \tag{11}$$

$$\langle \tau_{\parallel} \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_{0}^{\infty} dx \, x^{\frac{3}{2}} e^{-x} \tau.$$
 (12)

На основі теорії анізотропного розсіяння запишемо вираз для поздовжньго складника τ_{\parallel} тензора часів релаксації в умовах розсіяння на йонах домішки [16]:

$$\tau_{\parallel} = \frac{1}{\lambda},\tag{13}$$

$$\lambda = 2C\left(\frac{\pi - 2\chi}{2}\ln\frac{\beta\rho + 1}{\beta\rho - 1} - \left(2\alpha + \frac{\pi}{2}\right)\ln 2 + L(\chi + \alpha) - L(\chi - \alpha) + L\left(\frac{\pi}{2} - 2\alpha\right) + 2L(\alpha) - \frac{\beta}{1 + \beta^2}\ln(b + 1)\right),$$

$$\text{re } C = \frac{3\pi n_e e^4\sqrt{2m_\parallel}}{1 + \beta^2}, \quad \rho = \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{1 + \beta^2}{2}}, \quad \beta^2 = \frac{m_\parallel - m_\perp}{2}, \quad \chi = \arctan\rho, \quad \alpha = \arctan\beta, \quad L(y) = -\int_{-\infty}^{y}\ln\cos\varphi\,dx$$

де $C = \frac{5\pi n_e e}{8\beta^3 \varepsilon^2 m_\perp (kT)^{\frac{3}{2}} x^{\frac{3}{2}}}, \rho = \frac{1}{\beta} \sqrt{1 + \frac{1+\beta^2}{b}}, \beta^2 = \frac{m_\parallel - m_\perp}{m_\perp}, \chi = \arctan \rho, \alpha = \arctan \beta, L(y) = -\int_0^y \ln \cos \varphi \, d\varphi$ - функція Лобачевського, $N = n_e$ — концентрація домішки, ε — діелектрична проникність (для германію $\varepsilon = 16$).

Тут
$$b = \frac{8m^*\bar{E}}{\hbar^2}R_0^2, \ \bar{E} = kT\frac{\Phi_{\frac{3}{2}}(E_F^*)}{\Phi_{\frac{1}{2}}(E_F^*)}$$
 — середня енергія електронів;

$$x = \frac{E - \Delta E_{\Delta}}{kT}, \ E_{\rm F}^* = \frac{E_{\rm F}}{kT}, \ \Phi_n = \int_0^\infty \frac{x^n dx}{e^{x-E} + 1}$$

інтеґрали Фермі, R_0 — радіус екранування, який у найзагальнішому вигляді визначається так [16]:

$$R_0^2 = \frac{h^3 \varepsilon}{16\pi^2 e^2 (m^*)^{\frac{3}{2}} (2kT)^{\frac{1}{2}} \Phi_{-\frac{1}{2}}(E_{\rm F}^*)}.$$
 (14)

У результаті можна отримати систему рівнянь щодо невідомих значень компонент тензора ефективної маси m_{\parallel}, m_{\perp} :

$$\begin{cases} (m_{\parallel}m_{\perp}^{2})^{\frac{1}{3}} = m_{\Delta}, \\ \frac{4e}{3\sqrt{\pi}m_{\parallel}} \int_{0}^{\infty} dx \, x^{\frac{3}{2}}\tau_{\parallel} = \mu_{\Delta}. \end{cases}$$
(15)

Ураховуючи вирази (4), (5), (13) та значення ефективної маси густини станів m_{Δ} та рухливості електронів μ_{Δ} для Δ_1 — мінімуму, які наведені вище, обчислено $m_{\parallel} = 1.65 m_0$ та $m_{\perp} = 0.32 m_0$.

Для напів
провідникових кристалів із концентрацією носіїв заряд
у $n_e \geq 10^{16}\,{\rm cm}^{-3}$ суттєвими стають

ефекти екранування [17]. Тому для теоретичного опису різноманітних явищ переносу в сильно леґованих кристалах поряд із такими важливими параметрами, як ефективна маса, компоненти тензора ефективної маси й деформаційного потенціалу, необхідно мати також відомості про величину радіуса екранування та екрануючого множника [18]:

$$g(b) = \ln(1+b) - \frac{b}{1+b}.$$
 (16)

Із виразу (14) видно, що існує сильна залежність довжини екранування від ефективної маси густини станів. Саме ця обставина змушує звернути увагу на поведінку величини радіуса екранування при реалізації інверсії типу $(L_1 - \Delta_1)$ абсолютного мінімуму в *n*-Ge, оскільки названий параметр суттєво впливає на розсіяння носіїв заряду кулонівськими центрами і при певних умовах визначає енерґетичний спектр ло-кальних рівнів домішки [19].

Для визначення радіуса екранування та екрануючого множника для L_1 і Δ_1 -мінімуму необхідно обчислити інтеґрали Фермі індексів $\frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$, а для цього спочатку треба знайти положення рівня Фермі стосовно дна зони провідності відповідного мінімуму зі співвідношення:

$$n_e = \frac{2N_{\rm Ci}}{\sqrt{\pi}} \Phi_{\frac{1}{2}}(E_{\rm Fi}^*), \tag{17}$$

де $N_{\rm Ci}$, $E_{\rm Fi}^*$ — ефективна густина станів та зведене значення енерґії Фермі для *i*-ого мінімуму. Враховуючи значення ефективної маси густини станів для L_1 і Δ_1 -мінімуму, обчислено для концентрації домішки $n_e = 2 \cdot 10^{18}$ см⁻³ при T = 4.2 К енерґетичні положення рівня Фермі: $E_{\rm F}^{L_1} = 10.5$ еВ та $E_{\rm F}^{\Delta_1} = 6.6$ еВ. Значення радіуса екранування та екрануючого множника для L_1 і Δ_1 -мінімуму виявилися рівними: $R_0^{L_1} = 1.76 \cdot 10^{-7}$ см, $g_{L_1}(b) = 0.227$ та $R_0^{\Delta_1} = 1.41 \cdot 10^{-7}$ см, $g_{\Delta_1}(b) = 0.127$. Різна величина радіуса екранування та екрануючого множника для L_1 і Δ_1 -мінімуму зони провідності кристалів *n*-Ge вказують на різний характер екранування й відповідно розсіяння електронів для різних типів мінімумів.

Таким чином, використовуючи теорії деформаційного потенціалу й анізотропного розсіяння та лише дані експерименту з визначення величини поздовжнього п'єзоопору на ділянці одновісних тисків, коли починається "деформаційне підмішування" енерґетичних станів Δ_1 -мінімуму, можна досить надійно визначити:

- Комбінацію констант деформаційного потенціалу для цього мінімуму.
- 2. Ефективну масу густини станів.
- 3. Компоненти тензора ефективної маси.
- 4. Радіус екранування та екрануючий множник.
- G. H. Li, A. R. Goni, K. Syassen, M. Cardona, Phys. Rev. B 49, 8017 (1994).
- [2] F. Murphy-Armando, S. Fahy, J. Appl. Phys. 109, 113703 (2011).
- [3] B. Lemke, R. Baskaran, O. Paul, Sens. Actuat. A 176, 10 (2012).
- [4] Y. S. Choi, J.-S. Lim, T. Numata, T. Nishida, E. S. Thompson, J. Appl. Phys. **102**, 104507 (2007).
- [5] M. Kobayashi *et al.*, IEEE Trans. Electron Dev. 57, 1037 (2010).
- [6] K. Brunner, Rep. Prog. Phys. 65, 27 (2002).
- [7] Д. Н. Дроздов *и др.*, Физ. техн. полупр. **43**, 332 (2009).
- [8] S. Tong, J. Liu, L. J. Wan, K. L. Wang, Appl. Phys. Lett. 80, 1189 (2002).
- [9] В. О. Юхимчук та ін., Укр. фіз. журн. 56, 254 (2011).
- [10] А. Н. Ефанов и др., Металлофиз. нов. технол. 28, 441 (2006).

- [11] П. И. Баранский В. В. Коломоец, Б. Н. Сусь,
 В. И. Шаповалов, Физ. техн. полупр. 13, 602 (1979).
- [12] T. Arizumi, A. Yoshida, N. Savaki, J. Appl. Phys. Jpn 8, 700 (1969).
- [13] В. В. Байдаков*и др.*, Физ. техн. полупр. **17**, 370 (1983).
- [14] C. Herring, E. Vogt, Phys. Rev. 101, 944 (1956).
- [15] Г. Л. Бир, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках (Наука, Москва, 1972).
- [16] В. И. Фистуль, Сильно легированные полупроводники (Наука, Москва, 1967).
- [17] Я. С. Буджак, О. В. Зуб, Вост.-Европ. журн. передов. технол. 53, 11 (2011).
- [18] Б. Г. Журкин, В. С. Земсков, К. В. Юркина, Физ. тверд. тела 3, 3509 (1961).
- [19] В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г. Калашников, Физика полупроводников (Наука, Москва, 1977).

PARAMETERS OF THE HIGH-ENERGY Δ_1 -MINIMUM OF THE CONDUCTION BAND IN *n*-Ge

S. V. Luniov, P. F. Nazarchuk, O. V. Burban Lutsk National Technical University, Physics and Electrical Engineering Depart.,

75 Lvivska Avenue, Lutsk, UA–43018, Ukraine

e-mail: luniovser@mail.ru

On the basis of longitudinal piezoresistance experiments in the *n*-Ge crystals using the theory of deformation potential and the theory of anisotropic scattering the combination deformation potential constants, effective mass of the density of states, effective mass tensor components for Δ_1 -minimum conduction band of *n*-Ge are defined. It is shown that the screening effect and scattering vary as a result of the realized $(L_1 - \Delta_1)$ absolute minimum type inversion in crystals of germanium about unaxial pressure along the crystallographic direction [100]. That was explained by different values of the screening radius as a screening factor for L_1 and Δ_1 -minimum.