

Расчет подвижности электронов для Δ_1 -модели зоны проводимости монокристаллов германия

© С.В. Лунев[¶], П.Ф. Назарчук, О.В. Бурбан

Луцкий национальный технический университет,
43018 Луцк, Украина

(Получена 31 января 2013 г. Принята к печати 20 августа 2013 г.)

На основе анизотропного рассеяния при 77 К получены концентрационные зависимости подвижности носителей заряда для Δ_1 -модели зоны проводимости кристаллов *n*-Ge. Показано, что инверсия типа абсолютного минимума $L_1-\Delta_1$, обусловленная одноосным давлением кристаллов *n*-Ge вдоль кристаллографического направления [100], существенно уменьшает величину подвижности носителей заряда. Это объясняется уменьшением времени релаксации, поскольку эффективные массы для электронов разных минимумов мало различаются. Для других двух случаев инверсии абсолютного минимума $L_1-\Delta_1$, при гидростатическом и одноосном давлении вдоль кристаллографического направления [110], уменьшение подвижности электронов обусловлено в основном увеличением эффективной массы. Показано также, что на эффективность рассеяния носителей заряда в анизотропных полупроводниках в данном случае существенно влияет степень анизотропии эффективных масс.

Развитие автоматики и сенсорной техники стимулирует работы как по получению новых перспективных материалов, так и по усовершенствованию и дальнейшему изучению необходимых свойств уже используемых. Такой полупроводниковый материал, как германий, несмотря на довольно широкое практическое использование и всестороннюю изученность его свойств, остается и сейчас во многих случаях перспективным материалом для создания различного рода приборов и сенсоров.

Известно [1], что зонная структура германия имеет многодолинный характер. Самыми низкими минимумами зоны проводимости (основными минимумами) по шкале энергий являются в *n*-Ge 4 минимума с симметрией L_1 , которые участвуют в различных кинетических и оптических эффектах и определяют работу многих электронных приборов. Поэтому параметры данных минимумов на сегодня достаточно хорошо изучены. Выше по шкале энергий на 0.14 эВ находится один минимум с симметрией Γ_2 и на 0.18 эВ — 6 минимумов с симметрией Δ_1 . Самый высокий минимум (Γ_1) находится на расстоянии примерно 2.5 эВ. Значительная удаленность данных минимумов от основных как по энергии, так и по квазиимпульсу не способствовала исследованиям их влияния при малых физических возмущениях на свойства материала. Однако в экстремальных условиях направленного воздействия значительных электрических, деформационных, оптических и температурных полей данные минимумы могут вносить существенный, а возможно, и определяющий вклад в соответствующие эффекты.

На рис. 1 представлен расчет изменения положения минимумов L_1 , Γ_2 и Δ_1 в зависимости от одноосного давления вдоль кристаллографического направления [100] [2]. Согласно этим данным, при одноосных давлениях $X \approx 2$ ГПа зона проводимости германия будет

типа $L_1-\Delta_1$ и при дальнейшем увеличении деформации полностью Δ_1 -типа.

Поскольку зонные параметры данных минимумов различаются, то и различные кинетические и оптические эффекты в сильно деформированных по отношению к недеформированным монокристаллам германия будут проявляться совсем по-другому. В частности, в [3] за счет деформационной перестройки зонной структуры кристаллов германия при гидростатическом давлении > 0.6 ГПа обнаружено резкое увеличение интенсивности экситонного поглощения. В работе [4] впервые при одноосной деформации вдоль кристаллографического направления [100] был реализован фазовый переход металл-диэлектрик.

Также актуальным вопросом, который возникает при исследованиях различных кинетических эффектов в

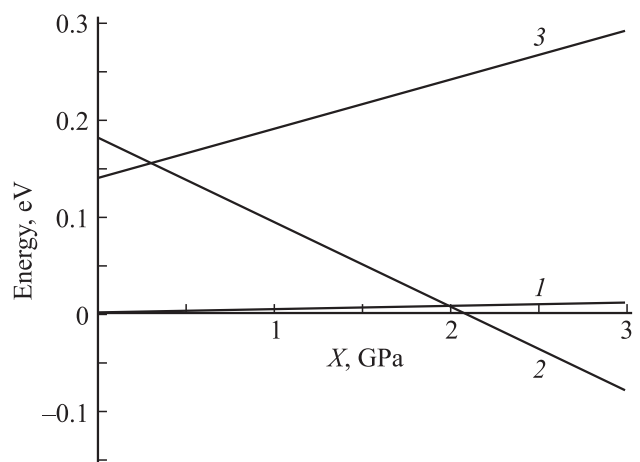


Рис. 1. Изменение положения минимумов зоны проводимости монокристаллов германия при одноосном давлении $X \parallel J \parallel [100]$ [2]: 1 — L_1 -минимум, 2 — Δ_1 -минимум, 3 — Γ_2 -минимум.

[¶] E-mail: luniovser@mail.ru

квантово-размерных системах на основе Ge, является изучение влияния внутренних деформационных полей на данные эффекты. Как показывает литературный обзор современных работ, в наноструктурах с компонентой германия возникает гигантское увеличение подвижности по сравнению с недеформированными кристаллами n -Ge и n -Si, которое имеет широкое практическое использование в CMOS-приборах [5,6]. Примером напряженного германия являются также гетероструктуры Si/Ge. В таких наноструктурах кластеры германия являются упруго деформированными вследствие того, что параметры кристаллических решеток германия и кремния различаются на 4% [7]. Эти напряжения могут быть по величине такими, что происходит радикальная перестройка зонной структуры кристаллов германия с доминирующим вкладом вышеуказанных высокоэнергетических минимумов. Использование наноструктур с самоиндуцированными nanoостровками Ge/Si открывает новые перспективы для развития опто- и наноэлектроники [8]. Пространственное упорядочение таких nanoостровков зависит также от распределения деформационных полей в данных наноструктурах [9].

Поскольку все физические свойства материала в изложенном смысле определяются особенностями его зонной структуры, нами в данной работе оценивалось влияние инверсии типа абсолютного минимума $L_1-\Delta_1$ в кристаллах n -Ge на подвижность носителей заряда. Данную инверсию, как было показано в работе [2], можно реализовать при одноосных давлениях $X \approx 2.8$ ГПа, в геометрии давления \mathbf{X} и тока \mathbf{J} при $\mathbf{X} \parallel \mathbf{J} \parallel [100]$, $X \approx 8$ ГПа, когда $\mathbf{X} \parallel \mathbf{J} \parallel [110]$, или гидростатическом давлении ~ 6 ГПа [10]. При этом для случая гидростатического давления можно получить шестиэллипсоидную Δ_1 -модель зоны проводимости кристаллов n -Ge, а при одноосном давлении — двухэллипсоидную, когда $\mathbf{X} \parallel \mathbf{J} \parallel [100]$, или четырехэллипсоидную, когда $\mathbf{X} \parallel \mathbf{J} \parallel [110]$.

При расчетах мы ограничились случаем невырожденного электронного газа и рассеянием электронов на акустических фононах и ионах примеси. При этом полученные результаты будут справедливыми для кристаллов достаточно высокой чистоты с относительно малыми концентрациями электронов, а потому можно будет пренебрегать также электрон-электронным рассеянием. Изоэнергетические поверхности как для L_1 , так и для Δ_1 -минимумов есть эллипсоиды вращения. Тогда подвижность носителей заряда в произвольном направлении можно определить из соотношения [11]

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

где θ — угол между рассматриваемым направлением и главной осью эллипсоида, μ_{\perp} и μ_{\parallel} — подвижность носителей заряда поперек и вдоль оси эллипсоида.

Тогда, согласно (1), подвижность для L_1 -минимума

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

Для Δ_1 -минимума подвижность есть

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

когда $\mathbf{X} \parallel \mathbf{J} \parallel [100]$,

$$\mu^{\Delta} = \frac{1}{2} \mu_{\parallel}^{\Delta} + \frac{1}{2} \mu_{\perp}^{\Delta}, \quad (4)$$

когда $\mathbf{X} \parallel \mathbf{J} \parallel [110]$, для гидростатического давления

$$\mu^{\Delta} = \frac{1}{3} \mu_{\parallel}^{\Delta} + \frac{2}{3} \mu_{\perp}^{\Delta}. \quad (5)$$

С другой стороны, компоненты тензоров подвижности $(\mu_{\parallel}^{L,\Delta}, \mu_{\perp}^{L,\Delta})$ можно выразить через компоненты тензоров времен релаксации $(\tau_{\parallel}^{L,\Delta}, \tau_{\perp}^{L,\Delta})$ и эффективной массы $(m_{\parallel}^{L,\Delta}, m_{\perp}^{L,\Delta})$ для соответствующих минимумов:

$$\mu_{\parallel}^{L,\Delta} = \frac{e}{m_{\parallel}^{L,\Delta}} \langle \tau_{\parallel}^{L,\Delta} \rangle, \quad \mu_{\perp}^{L,\Delta} = \frac{e}{m_{\perp}^{L,\Delta}} \langle \tau_{\perp}^{L,\Delta} \rangle, \quad (6)$$

где e — заряд электрона.

На основе теории анизотропного рассеяния в условиях рассеяния на акустических фононах и ионах примеси [11] получаем

$$\tau_{\parallel} = \frac{a_{\parallel}}{\sqrt{kT^{3/2}}} \frac{x^{3/2}}{x^2 + b_0}, \quad \tau_{\perp} = \frac{a_{\perp}}{\sqrt{kT^{3/2}}} \frac{x^{3/2}}{x^2 + b_1}, \quad (7)$$

где T — температура, k — постоянная Больцмана.

Необходимые обозначения в формулах (7) приведены в *Приложении*.

Тогда окончательно выражения для компонент тензора времен релаксации будут иметь вид

$$\langle \tau_{\parallel} \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^{3/2} e^{-x} \tau_{\parallel},$$

$$\langle \tau_{\perp} \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^{3/2} e^{-x} \tau_{\perp}. \quad (8)$$

Учитывая значение констант деформационного потенциала и компонент тензора эффективной массы для L_1 -минимума ($\Theta_d = -6.4$ эВ, $\Theta_u = 16.4$ эВ, $m_{\parallel} = 1.58m_0$, $m_{\perp} = 0.082m_0$) [1] и соответствующие параметры, которые были найдены нами в работах [2,12] для Δ_1 -минимума ($\Theta_d = -1.7$ эВ, $\Theta_u = 12$ эВ, $m_{\parallel} = 1.65m_0$, $m_{\perp} = 0.32m_0$), можно, используя выражения (2)–(5) с учетом (6)–(8), получить концентрационные зависимости подвижности электронов для L_1 - и Δ_1 -минимумов (рис. 2, сплошные кривые).

Согласно рис. 2, для различной концентрации примеси все возможные из вышеперечисленных видов инверсии абсолютного минимума $L_1-\Delta_1$ в n -Ge приводят к уменьшению подвижности электронов. При инверсии, которая обусловлена одноосным давлением вдоль кристаллографического направления [100], значительное

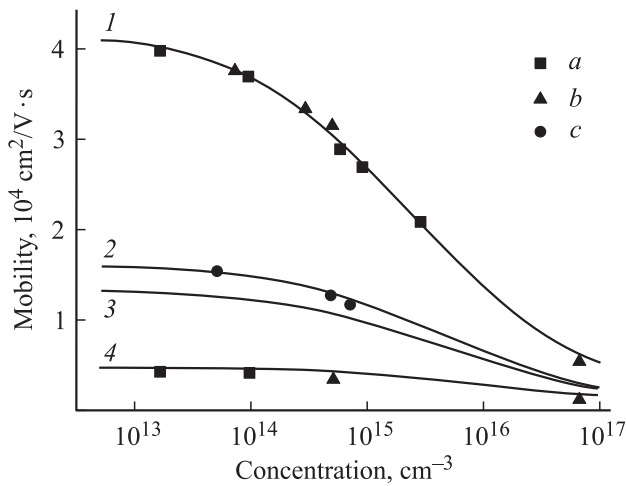


Рис. 2. Зависимости подвижности электронов от концентрации примеси для L_1 - и Δ_1 -минимумов зоны проводимости кристаллов n -Ge при $T = 77$ К: 1 — L_1 -минимум; 2 — Δ_1 -минимум, гидростатическое давление; 3 — Δ_1 -минимум, одноосное давление $\mathbf{X} \parallel \mathbf{J} \parallel [110]$; 4 — Δ_1 -минимум, одноосное давление $\mathbf{X} \parallel \mathbf{J} \parallel [100]$. a — экспериментальные результаты работы [13]; b — наши экспериментальные результаты; c — экспериментальные результаты работы [10].

уменьшение подвижности связано прежде всего с уменьшением времени релаксации, поскольку эффективные массы для электронов разных минимумов мало различаются (для L_1 $m^L = 0.55m_0$, для Δ_1 $m^\Delta = m_{\parallel}^\Delta = 0.88m_0$). Для остальных двух случаев инверсии, при гидростатическом и одноосном давлении вдоль кристаллографического направления [110], уменьшение подвижности обусловлено в основном увеличением эффективной массы электронов при переходе от L_1 - к Δ_1 -модели зоны проводимости кристаллов германия. Также, как видно из рис. 2, подвижность электронов для L_1 -минимума является более чувствительной к увеличению концентрации примеси по сравнению с Δ_1 -минимумом. Это объясняется тем, что для L_1 -минимума параметр анизотропии эффективных масс больше, чем для Δ_1 -минимума ($K_m^L = m_{\parallel}^L/m_{\perp}^L = 19.3$, $K_m^\Delta = m_{\parallel}^\Delta/m_{\perp}^\Delta = 5.15$).

Поэтому общий вывод о том, что на эффективность рассеяния носителей заряда в анизотропных полупроводниках влияет только действие конкретного механизма, нужно дополнить очень существенной поправкой о большой роли степени анизотропии отдельных параметров самого кристалла.

Приложение

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

$$b_0 = \frac{a_{\parallel} \Phi_{0i}}{\sqrt{kT}^{3/2} \tau_{0i}(kT)}, \quad b_1 = \frac{a_{\perp} \Phi_{1i}}{\sqrt{kT}^{3/2} \tau_{0i}(kT)} \quad (\text{П.2})$$

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

$$\begin{aligned} \Phi_{1a} = & 1 + \frac{1 + \beta^2}{\beta^2} \left[2 + \frac{3}{\beta^2} - \frac{3(1 + \beta^2)}{\beta^3} \alpha \right] \frac{\Theta_u}{\Theta_d} \\ & + \frac{(1 + \beta^2)}{\beta^4} \frac{\Theta_u^2}{\Theta_d^2} \left\{ (1 + \beta^2) \left[1 + \frac{15}{4\beta^2} - \frac{3}{4\beta^3} (5 + 3\beta^2) \alpha \right] \right. \\ & \left. + \frac{C_{11}}{4C_{44}} \left[-13 - \frac{15}{\beta^2} + \frac{3(1 + \beta^2)}{\beta^3} (5 + \beta^2) \alpha \right] \right\}, \quad (\text{П.4}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Phi_{0a} = & 1 + \frac{2(1 + \beta^2)}{\beta^2} \left[1 - \frac{3}{\beta^2} + \frac{3}{\beta^3} \alpha \right] \frac{\Theta_u}{\Theta_d} \\ & + \frac{(1 + \beta^2)}{\beta^4} \frac{\Theta_u^2}{\Theta_d^2} \left\{ (1 + \beta^2) \left[1 - \frac{6}{\beta^2} - \frac{3}{2\beta^2(1 + \beta^2)} + \frac{15}{2\beta^3} \right] \right. \\ & \left. + \frac{C_{11}}{C_{44}} \left[2 + \frac{15}{2\beta^2} - \frac{3}{2\beta^3} (5 + 3\beta^2) \alpha \right] \right\}, \quad (\text{П.5}) \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \Phi_{1i} = & \frac{3}{4\beta^3} \left\{ [(1 - \beta^2)\alpha - \beta] \ln \gamma^2 + 2(\beta^2 - 1)L(a) \right. \\ & - 2\beta^2 \alpha - (\beta^2 - 1)\alpha \ln(1 + \beta^2) \\ & \left. + \frac{\gamma^2}{2} [\beta(1 + 3\beta^2) + \alpha(3\beta^4 + 2\beta^2 - 1)] \right\}. \quad (\text{П.6}) \end{aligned}$$

Здесь $\alpha = \arctg \beta$,

$$\beta^2 = \frac{m_{\parallel} - m_{\perp}}{m_{\perp}}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{\pi \hbar^2 e^2 N}{2m_{\parallel} kT}},$$

$L(a) = - \int_0^{\alpha} \ln \cos \varphi d\varphi$ — функция Лобачевского, N — концентрация примеси.

Список литературы

- [1] П.И. Баранский, В.П. Клочков, И.В. Потыкевич. *Полупроводниковая электроника* (Киев, Наук. думка, 1975).
- [2] С.В. Лунев, П.Ф. Назарчук, О.В. Бурбан. *Матер. 6-й Междунар. науч. конф. РНАОПМ* (Украина, Луцк, 2012) с. 42.
- [3] G.H. Li, A.R. Coñi, K. Syassen, M. Cardona. *Phys. Rev. B*, **49**, 8017 (1994).
- [4] П.И. Баранский, В.Н. Ермаков, В.В. Коломоец, П.Ф. Назарчук. *Тез. докл. XI Междунар. конф. (МАРИВД)* (Украина, Киев, 1987) с. 127.

- [5] F. Murphy-Armando, S. Fahy. *J. Appl. Phys.*, **109** (11), 113 703 (2011).
- [6] V. Lemke, R. Baskaran, O. Paul. *Sensors Actuators A: Physical*, **176**, 10 (2012).
- [7] K. Brunner. *Rep. Progr. Phys.*, **65** (1), 27 (2002).
- [8] Д.Н. Дроздов, А.Н. Яблонский, В.Б. Шмагин, З.Ф. Красильник, Н.Д. Захаров, Р. Werner. *ФТП*, **43**, 332 (2009).
- [9] В.О. Юхимчук, М.Я. Валах, В.П. Кладько, М.В. Слободян, О. Й. Гудименко, З.Ф. Красильник, О.В. Новиков. *УФЖ*, **56** (3), 254 (2011).
- [10] C.N. Ahmad, A.R. Adams, G.D. Pitt. *J. Phys. C: Sol. St. Phys.*, **12** (10), 1379 (1979).
- [11] П.И. Баранский, И.С. Буда, И.В. Даховский, В.В. Коломоец. *Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках* (Киев, Наук. думка, 1977).
- [12] С.В. Лунев, П.Ф. Назарчук, Л.И. Панасюк. *Тез. докл. V Украинской науч. конф. по физике полупроводников (УНКФН-5)* (Украина, Ужгород, 2011) с. 249.
- [13] П.И. Баранский, А.В. Федосов, Г.П. Гайдар. *Физические свойства кристаллов кремния и германия в полях эффективного внешнего воздействия* (Луцк, Надстир'я, 2000) с. 280.

Редактор Л.В. Шаронова

The calculation of the charge carrier mobility for Δ_1 -model of the germanium conduction band

S.V. Luniov, P.F. Nazarchuk, O.V. Burban

Lutsk National Technical University,
43018 Lutsk, Ukraine

Abstract Based on the theory of anisotropic scattering, the concentration dependences of charge carrier mobility for Δ_1 -minimum of conduction band in n -Ge crystals at 77 K are obtained. It is shown that the charge carrier mobility is significantly reduced as a result of the absolute minimum inversion of $L_1-\Delta_1$ type at uniaxial pressure of n -Ge crystals along the crystallographic direction [100]. This is due to a decrease in the relaxation time, since the effective masses for electrons of different minima are different not much. For the hydrostatic pressure and uniaxial pressure along the crystallographic direction [110] electron mobility decreases mainly due to increase in the effective mass. It is shown that the magnitude of anisotropy of the effective mass significantly affects the efficiency of scattering of charge carriers in anisotropic semiconductors in this case.