05 Термоэлектрический эффект в *n*-Ge, обусловленный термоупругодеформационным механизмом

© А.М. Мусаев

Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра РАН, Maxaчкала E-mail: akhmed-musaev@yandex.ru

Поступило в Редакцию 5 сентября 2013 г.

Рассмотрен новый физический механизм возникновения аномального термоэдс в *n*-Ge, который имеет знак, обратный знаку термоэдс Зеебека. Показано, что аномальный термоэлектрический эффект связан с перераспределением носителей заряда в энергетических экстремумах зон при термоупругой деформации кристалла.

Необычным явлением в полупроводниках при больших градиентах температуры, когда $\Delta T / \Delta x > 10^3$ K/cm, является эффект Бенедикса [1]. Термоэдс Бенедикса в *n*-Ge увеличивается с ростом перепада температуры и имеет знак, обратный знаку обычной термоэдс, т.е. термоэдс, обусловленной эффектом Зеебека. Теорию эффекта Бенедикса в полупроводниках впервые изложил Тауц [2]. По теории Тауца физический механизм эффекта заключается в диффузии неосновных носителей заряда в низкотемпературную область образца при условии $L_a \ll L_t \ll L_r$, где L_a — длина спада равновесной концентрации дырок; L_t — длина изменения температуры; L_r — диффузионная длина. В работах [3–5] теоретически и экспериментально исследовано пространственное распределение термоэлектрического потенциала и сделано заключение, что известные результаты эксперимента являются следствием достаточно сложного распределения потенциалов не только в области большого градиента температуры, но и в прилегающих к нему областях образца, и не могут быть объяснены в рамках теории Тауца, а также, возможно, обусловлены разогревом электронов тепловым потоком. Однако вычис-

69

ленное значение термоэдс при изменении градиента температуры не совсем соотносится с результатами проведенных экспериментов.

В ряде работ [6–8] проводились исследования по изучению влияния однородной одноосной упругой деформации на появление пьезотермоэдс в полупроводниках. В области электрон-фононного рассеяния пьезотермоэдс и пьезосопротивление обусловлены одними и теми же факторами и связаны с изменением заселенности долин зоны проводимости при одноосно-упругой деформации кристалла. Кроме выше приведенных работ исследованию различных аномальных термоэлектрических эффектов посвящено множество работ, которые в основном приведены в [1], где не рассматриваются проблемы, обсуждаемые в этой работе.

В данной работе излагаются результаты экспериментального исследования и качественного рассмотрения эффекта возникновения аномального термоэдс, обусловленного термоупругодеформационным механизмом.

Исследования проводились на образцах *n*-Ge с концентрацией примесей $N_D - N_A = 4.0 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, кристаллографически ориентированных вдоль направлений типа (100), с размерами 2.5 × 2.0 × 0.3 mm. Градиент температуры $\Delta T/\Delta x = 2.0 \cdot 10^3 \text{ K/cm}$ в диапазоне $T_1 = 320 - T_2 =$ = 420 K задавался в центральной части образца (направление *x*) на участке 0.5 mm. Для улучшения теплового контакта образца торцевые контакты припаивались к радиаторам (термостаты), а в областях образца, прилегающих к контактам, обеспечивались теплоотвод и электроизоляция. Распределения потенциала в низкотемпературной области образца I и высокотемпературной области III измерялись раздельно, микрозондовым методом. Распределение температуры в образце рассчитывалось с учетом изменения коэффициента теплопроводности образца с температурой. Конфигурация кристаллографической ориентации образца и упрощенная схема проведения измерений показаны на вставке рис. 1.

Экспериментальная зависимость распределения термоэлектрического потенциала вдоль образца в диапазоне температуры 320–420 К показана на рис. 1. Как видно из данной зависимости, в области I с температурой 320 К термоэдс возрастает по экспоненциальному закону до величины +4 mV, имеет полярность, совпадающую с термоэдс Зеебека. В области II наибольшего градиента температуры 320–420 К термоэдс инвертирует знак и изменяется до величины –27 mV, что



Рис. 1. Распределение термоэлектрического потенциала вдоль образца при градиенте температуры $\Delta T/\Delta x = 2.0 \cdot 10^3$ К/ст на участке образца $\Delta X = 1.0 - 1.5$ mm. На вставке: a — схема проведения измерений, где I, 2 — термостаты с температурами -320 К и 420 К соответственно, 3 — образец n-Ge; b — кристаллографическая ориентация образца.

является аномальным. В области III с температурой 420 К термоэдс уменьшается также по экспоненциальному закону до величины –21 mV и вновь имеет полярность, совпадающую с термоэдс Зеебека.

Известно, что в образце, находящемся в температурном поле с градиентами модуля Юнга и коэффициентами теплового расширения, а также с нелинейным распределением температуры (обусловленный зависимостью коэффициента теплопроводности от температуры), возникают термоупругие напряжения. В более нагретой области образца возникают сжимающие термоупругие напряжения, а в менее нагретой области — растягивающие напряжения, и имеют статические моменты площади сечения с симметрично распределенным "весом". Распределен



Рис. 2. Профиль распределения термоупругих напряжений в плоскости XZ//(010) образца, при градиенте температуры $\Delta T/\Delta x = 2.0 \cdot 10^3$ K/cm, в диапазоне 320–420 K, на участке $\Delta X = 1.0-1.5$ mm.

ние термоупругих напряжений в образце с геометрией пластины с приложенным градиентом температуры можно рассчитать по следующей формуле [9]:

$$\sigma = [E/(1-\mu)](\varepsilon_T + x\chi_T - \alpha_T T), \qquad (1)$$

где E — модуль Юнга, μ — коэффициент Пуассона, T — температура, x — координата температурного поля, $\varepsilon_T = 1/L \int_0^L \alpha_T T dx$, $\chi_T = 12/L^3 \int_0^L \alpha_T T x dx$.

Использованные значения: модуль Юнга $E = 102.7 \cdot 10^9$ Ра (const), коэффициент Пуассона $\mu = 0.31$, длина образца L = 2.5 mm, градиент температуры $\Delta T / \Delta x = 2.0 \cdot 10^3$ К/ст в диапазоне 320–420 К,

теплопроводность $\chi_T = [0.7 \text{ W/cm} \cdot \text{K}(320 \text{ K}) - 0.4 \text{ W/cm} \cdot \text{K}(420 \text{ K})]$, коэффициент теплового расширения $\alpha_T = [6.2 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}(320 \text{ K}) - 6.8 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}(420 \text{ K})]$. При расчетах учитывались нелинейная зависимость коэффициентов линейного расширения и теплопроводности от температуры, также предполагалось, что модуль Юнга и коэффициент Пуассона не зависят от температуры.

На рис. 2 приведен рассчитанный профиль распределения термоупругих напряжений в плоскости *XZ*//(010) образца.

Сжатие германия по оси [010], т.е. оси Z в плоскости XZ//(010), приводит к смещению вверх всех 4 минимумов зоны проводимости, а растяжение — к смещению вниз всех минимумов [10]. Валентная зона при этом расщепляется на 2 подуровня, которые имеют разные знаки и различные энергии смещения. Уровень Ферми смещается вместе с краем зоны проводимости. В условиях больших деформаций, когда $\Delta E_{c,v} \gg kT$, в проводимости кристалла участвуют только нижние уровни зоны проводимости и верхние валентной зоны.

Рассчитанная зависимость смещения энергетических уровней E_c и ΔE_v германия с кристаллографической ориентацией по [100] и при градиенте температуры $\Delta T / \Delta x = 2.0 \cdot 10^3$ K/cm в диапазоне 320–420 K (на центральном участке образца $\Delta L = 1.0-1.5$ mm) показана на рис. 3.

Данная ассиметрично-градиентная упругая деформация приводит к изменениям параметров зонной структуры с образованием разнесенных по координате потенциальных ям и областей с встроенными электрическими полями, приводящими к перераспределению концентрации носителей заряда между областями образца не только вследствие диффузии, но и вследствие дрейфа носителей заряда. Встроенное электрическое поле приводит к затягиванию и накоплению дырок в области наименьших их энергий, одновременно препятствуя проникновению электронов в низкотемпературную область.

Диффузия электронов в низкотемпературную область составляет одну часть образованной эдс со знаком, совпадающим с термоэдс Зеебека. Термоэдс другой полярности, обусловленной дрейфом, диффузией и накоплением основных и неосновных носителей заряда в потенциальных ямах, составляет вторую часть. Как показывают результаты эксперимента, величина данной термоупруго-деформационный эдс зависит от градиента температуры и при достаточно высоком градиенте температуры превосходит обычный темоэдс Зеебека.



Рис. 3. Изменение энергетических зон германия в кристаллографическом направлении [100] (ось X), вследствие термоупругих напряжений кристалла, при градиенте температуры $\Delta T/\Delta x = 2.0 \cdot 10^3$ K/cm на центральном участке образца $\Delta X = 1.0-1.5$ mm.

Исходя из вышеизложенного, можно сделать вывод, что компоненты термоэдс при высоком градиенте температуры состоят в основном из двух частей: $\alpha = \alpha_T + \alpha_D$ термодиффузионной α_T , которая связана с диффузией (термоэдс Зеебека), и термоупруго-деформационной компоненты эдс α_D , обусловленной перераспределением носителей заряда в

зонных энергетических экстремумах. Приближенная оценка величины термоупруго-деформационной компоненты эдс α_D , соответствует реализуемому при термоупругой деформации энергетическому смещению ΔE экстремума валентной зоны относительно дна зоны проводимости в высокотемпературной области образца, в условиях, когда $kT \ll \Delta E$.

Список литературы

- [1] Анатычук Л.И., Булат Л.П. // Полупроводники в экстремальных температурных условиях. СПб.: Наука, 2001. 224 с.
- [2] Тауц Я. // Фото- и термоэлектрические явления в полупроводниках. М.: ИЛ, 1962. 415 с.
- [3] Анатычук Л.И., Выграненко Ю.В., Лусте О.Я., Пинчук И.И. // ФТП. 1972. Т. 6. В. 5. С. 981–983.
- [4] Анатычук Л.И., Булат Л.П., Комолов Е.Н. // ФТП. 1982. Т. 16. В. 9. С. 1711– 1713.
- [5] Анатычук Л.И., Булат Л.П., Комолов Е.Н., Ладыга Р.Б. // ФТП. 1984. Т. 18.
 В. 2. С. 342–345.
- [6] Самойлович А.Г., Буда И.С. // ФТП. 1969. Т. З. В. З. С. 400-408.
- [7] Баранский П.И., Савяк В.В., Щербина Л.А. // ФТП. 1979. Т. 13. В. 6. С. 1219–1221.
- [8] Баранский П.И., Буда И.С., Савяк В.В., Щербина Л.А. // ФТП. 1979. Т. 13.
 В. 11. С. 2262–2264.
- [9] Коваленко А.Д. Термоупругость. Киев: Вища школа, 1975. 216 с.
- [10] Полякова А.Л. Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов. М.: Энергия, 1979. 168 с.