

Рассеяние электронов в Δ_1 -модели зоны проводимости монокристаллов германия

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

Луцкий национальный технический университет,
43018 Луцк, Украина

(Получена 28 июля 2014 г. Принята к печати 17 октября 2014 г.)

Исследовано рассеяние электронов в возможных Δ_1 -моделях зоны проводимости кристаллов германия, созданных гидростатическим или одноосным давлением. На основании теории анизотропного рассеяния получены температурные зависимости параметра анизотропии времен релаксации и подвижности электронов для этих моделей в условиях рассеяния на ионах примеси, акустических и междолинных фононах. Анализ температурных зависимостей указывает, что в температурном интервале 77–300 К существенным становится междолинное рассеяние. Только для Δ_1 -модели, созданной одноосным давлением вдоль кристаллографического направления [100], рассеяние электронов на междолинных фононах, которые соответствуют g -переходам, является второстепенным по отношению к рассеянию на акустических фононах (внутридолинное рассеяние) и ионах примеси.

Развитие современной микро- и нанoeлектроники определяется в значительной степени достижениями физики полупроводников. Такой полупроводниковый материал, как германий, является сырьевым для изготовления диодов, триодов, силовых выпрямителей, дозиметрических приборов, детекторов для регистрации частиц темной материи [1,2]. Монокристаллический германий n -типа проводимости в настоящее время — это основной материал, применяемый в качестве оптической среды для линз, объективов, фильтров, которые используются для области спектра 3–5 мкм и 8–14 мкм [3]. Бездислокационный германий обеспечивает решение проблем, которые возникают при создании наноразмерных как напряженных, так и свободных от гигантских внутренних механических напряжений транзисторных структур с использованием кремния. В частности, технологии создания одноосных деформаций каналов NMOSFET электронных приборов при замене кристаллов n -Si на n -Ge позволяют увеличить как коэффициент усиления, так и туннельный ток [4–6]. В работе [7] показано, что при одноосной деформации 1.8% растяжения удельное сопротивление нанопроводов из германия уменьшается в 30 раз.

Проблеме изучения влияния внутренних и внешних деформационных полей на электрические, оптические, фотоэлектрические, магнитные характеристики таких наноструктур и создания на основе разных элементов функциональной электроники посвящено много внимания физиков и технологов, работающих в области полупроводникового материаловедения. Деформационные поля по величине могут быть такими, что за счет перестройки зонной структуры кристаллов германия становится возможным участие в разных кинетических и оптических эффектах высокоэнергетических минимумов зоны проводимости германия типа Γ_2 , Δ_1 и Γ_{15} . Также для недеформированных кристаллов n -Ge в экстремальных условиях направленного действия значи-

тельных электрических, оптических и температурных полей данные высокоэнергетические минимумы могут вносить существенный, а то и определяющий вклад в соответствующие эффекты. Например, расчеты, которые были сделаны в работе [8] на основании метода Монте-Карло, показывают, что заселенность электронами Δ_1 -минимумов зоны проводимости германия может происходить уже при электрических полях напряженностью $E > 3–4$ кВ/см.

Нами исследовалось рассеяние электронов в Δ_1 -модели зоны проводимости кристаллов n -Ge(Sb). В работе [9] было показано, что энергетический зазор между L_1 - и Δ_1 -минимумами будет уменьшаться как при гидростатическом давлении, так и одноосных давлениях вдоль кристаллографических направлений [100] и [110]. При этом инверсию типа L_1 – Δ_1 абсолютного минимума можно реализовать при гидростатическом давлении порядка 6 ГПа или одноосных давлениях: $X \approx 3$ ГПа, когда $X \parallel J \parallel [100]$, и $X \approx 8$ ГПа, когда $X \parallel J \parallel [110]$. Вследствие этого для случая гидростатического давления можно получить шестиэллипсоидную Δ_1 -модель зоны проводимости кристаллов n -Ge, а при одноосном давлении — двухэллипсоидную или четырехэллипсоидную соответственно. В работе [10] на основе теории анизотропного рассеяния при $T = 77$ К нами были получены концентрационные зависимости подвижности электронов для данных моделей. Однако при этом рассматривался случай рассеяния электронов на акустических фононах и ионах примеси. При увеличении температуры необходимо также дополнительно учитывать междолинное рассеяние. Поэтому в данной работе нами рассматривался наиболее общий случай смешанного рассеяния электронов на акустических фононах (внутридолинное рассеяние), ионах примеси и междолинных фононах в данных Δ_1 -моделях.

Как было показано в работе [11], междолинное рассеяние для Δ_1 -минимума вызвано взаимодействием электронов с акустическими и оптическими фононами с частота-

[¶] E-mail: luniovser@mail.ru

ми, которые отвечают температурам $T_{C1} = 320$ К (междолинное рассеяние f -типа), $T_{C2} = 430$ К и $T_{C3} = 100$ К (междолинное рассеяние g -типа). Такое рассеяние описывается скалярным временем релаксации τ_j :

$$\frac{1}{\tau_j} = \alpha_j \varphi_j, \quad (1)$$

где

$$\alpha_j = \frac{\Theta_j^2 (m_d^j)^{3/2}}{\sqrt{2\pi\rho\hbar}(kT_{Cj})^{1/2}} \left(\frac{T}{T_{Cj}}\right)^{1/2},$$

$$\varphi_j(x) = \frac{1}{e^{\frac{T_{Cj}}{T}} - 1} \times \left[\left(x + \frac{T_{Cj}}{T}\right)^{1/2} + e^{\frac{T_{Cj}}{T}} \theta\left(x; \frac{T_{Cj}}{T}\right) \left(x - \frac{T_{Cj}}{T}\right)^{1/2} \right],$$

$m_d^j = (m_{||j} m_{\perp j}^2)^{1/3} (Z_j - 1)$, $m_{||j}$, $m_{\perp j}$ — продольная и поперечная составляющие тензора эффективной массы для электронов, которые находятся в эллипсоиде j -типа; Z_j — число эквивалентных эллипсоидов зоны проводимости j -типа; Θ_j — константа междолинного деформационного потенциала; ρ — плотность кристалла; T_{Cj} — температура j -го междолинного фонона; $x = \frac{\epsilon}{kT}$ — приведенная энергия электрона; $\theta(x; \frac{T_{Cj}}{T})$ — ступенчатая функция.

Наиболее важный параметр, который характеризует рассеяние носителей заряда в анизотропных полупроводниках, есть параметр анизотропии времен релаксации [12]:

$$K_r = \frac{\langle \tau_{||} \rangle}{\langle \tau_{\perp} \rangle}, \quad (2)$$

где $\tau_{||}$, τ_{\perp} — продольная и поперечная составляющие тензора времен релаксации соответственно. Тогда в условиях смешанного рассеяния

$$\frac{1}{\tau_{||}} = \frac{1}{\tau_{||}^a} + \frac{1}{\tau_{||}^i} + \frac{1}{\tau_j}; \quad \frac{1}{\tau_{\perp}} = \frac{1}{\tau_{\perp}^a} + \frac{1}{\tau_{\perp}^i} + \frac{1}{\tau_j}, \quad (3)$$

где $\tau_{||}^a$, τ_{\perp}^a , $\tau_{||}^i$, τ_{\perp}^i — продольная и поперечная составляющие тензора времен релаксации при рассеянии на акустических фононах (внутридолинное рассеяние) и ионах примеси соответственно; τ_j — время релаксации для междолинного рассеяния.

На основании теории анизотропного рассеяния [13]

$$\tau_{||}^a = \frac{a_{||}}{T\sqrt{kT}\sqrt{x}}, \quad \tau_{\perp}^a = \frac{a_{\perp}}{T\sqrt{kT}\sqrt{x}};$$

$$\tau_{||}^i = \frac{\tau_{0i}}{\Phi_{0i}}, \quad \tau_{\perp}^i = \frac{\tau_{0i}}{\Phi_{1i}}. \quad (4)$$

(Необходимые обозначения в формулах (4) приведены в работе [10]).

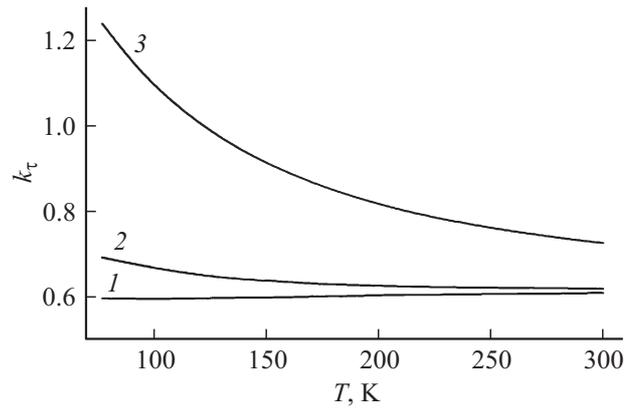


Рис. 1. Температурные зависимости параметра анизотропии времен релаксации для двухэллипсоидной Δ_1 -модели зоны проводимости кристаллов германия, созданной одноосным давлением вдоль кристаллографического направления [100], для концентраций примеси $N_D, \text{см}^{-3}$: 1 — 10^{13} , 2 — $5 \cdot 10^{14}$, 3 — $6.6 \cdot 10^{16}$.

Тогда, в конечном итоге, выражение для компонент тензора времен релаксации для случая невырожденного электронного газа будет иметь вид:

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

$$\langle \tau_{\perp} \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} dx x^{3/2} e^{-x} \tau_{\perp}. \quad (5)$$

Учитывая значения констант акустического потенциала деформации и компонент тензора эффективной массы для Δ_1 -минимума [9,14] ($\Theta_d = -1.7$ эВ, $\Theta_u = 12$ эВ, $m_{||} = 1.65m_0$, $m_{\perp} = 0.32m_0$), температуры междолинных фононов ($T_{C1} = 320$ К, $T_{C2} = 430$ К и $T_{C3} = 100$ К) и соответствующие им константы междолинного потенциала деформации Θ_j ($\Theta_{100} = 7.89 \cdot 10^7$ эВ/см, $\Theta_{320} = 3.27 \cdot 10^8$ эВ/см, $\Theta_{430} = 1.57 \cdot 10^8$ эВ/см) [11], на основании выражений (1–5) получены температурные зависимости параметра анизотропии времен релаксации (2) для разных, указанных выше моделей зоны проводимости кристаллов n -Ge. Анализ этих зависимостей показывает, что для слабо легированного полупроводника в двухэллипсоидной Δ_1 -модели параметр анизотропии времен релаксации практически не зависит от температуры (рис. 1, кривая 1). Для четырехэллипсоидной и шестиэллипсоидной Δ_1 -модели данный параметр возрастает при увеличении температуры (рис. 2, кривая 1 и рис. 3, кривая 1). Такие температурные зависимости параметра анизотропии времен релаксации объясняются присутствием в этих моделях междолинного рассеяния, вклад которого при увеличении температуры возрастает. Для двухэллипсоидной Δ_1 -модели рассеяние электронов на междолинных фононах, что отвечает g -переходам, является второстепенным по отношению к рассеянию

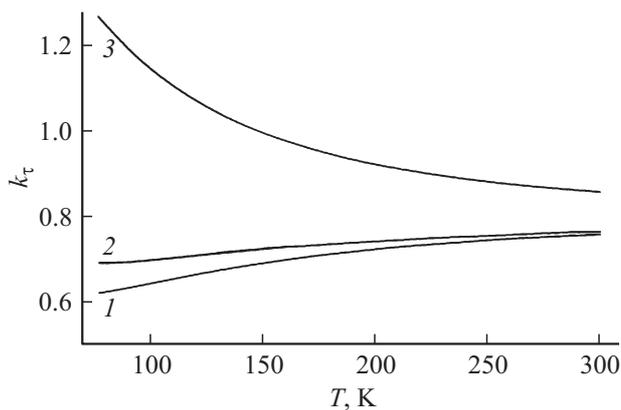


Рис. 2. Температурные зависимости параметра анизотропии времен релаксации для четырехэллипсоидной Δ_1 -модели зоны проводимости кристаллов германия, созданной одноосным давлением вдоль кристаллографического направления $[110]$, для концентраций примеси $N_D, \text{см}^{-3}$: 1 — 10^{13} , 2 — $5 \cdot 10^{14}$, 3 — $6.6 \cdot 10^{16}$.

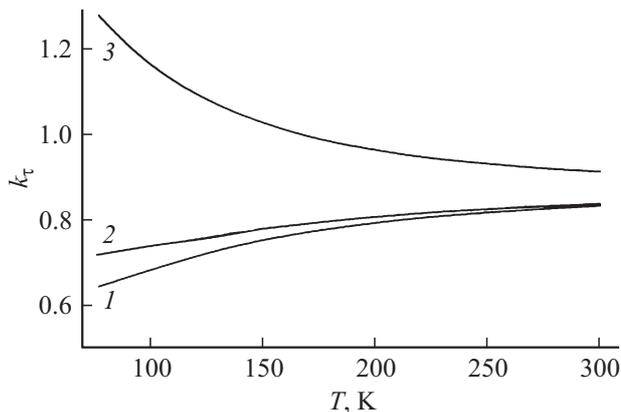


Рис. 3. Температурные зависимости параметра анизотропии времен релаксации для шестиэллипсоидной Δ_1 -модели зоны проводимости кристаллов германия, созданной гидростатическим давлением, для концентраций примеси $N_D, \text{см}^{-3}$: 1 — 10^{13} , 2 — $5 \cdot 10^{14}$, 3 — $6.6 \cdot 10^{16}$.

на акустических фонах (внутридолинное рассеяние). При увеличении же концентрации легирующей примеси, вместе с рассмотренными механизмами рассеяния, возрастает также вклад компоненты примесного рассеяния. Это влияет на увеличение значения параметра анизотропии времен релаксации в данных Δ_1 -моделях с ростом концентрации примеси.

Для сопоставления проведенных теоретических расчетов с экспериментальными результатами нами были получены температурные зависимости удельного сопротивления для одноосно-деформированных вдоль кристаллографического направления $[100]$ монокристаллов n -Ge, легированных примесью Sb концентрацией $N_D = 5 \cdot 10^{14} \text{см}^{-3}$. Такая одноосная деформация ведет к синхронному смещению вверх по шкале энергий четырех L_1 -минимумов и к опусканию двух

Δ_1 -минимумов. Одноосное давление в экспериментах составляло 2.8 ГПа, что позволяло реализовать в широком температурном интервале двухэллипсоидную Δ_1 -модель зоны проводимости монокристаллов n -Ge. Учитывая то, что в данных условиях концентрация электронов в зоне проводимости остается постоянной и равной концентрации примеси, были получены соответствующие температурные зависимости подвижности электронов (рис. 4, кривая 3). При гидростатическом давлении четыре L_1 -минимума смещаются вверх по шкале энергий, а шесть Δ_1 -минимумов опускаются вниз, что позволяет получить шестиэллипсоидную Δ_1 -модель зоны проводимости монокристаллов n -Ge при давлениях порядка 6 ГПа. Учитывая данный факт, авторы работы [15] на основе измерений пьезо-холл-эффекта, при гидростатическом давлении получили экспериментальные результаты температурных зависимостей подвижности электронов для данной Δ_1 -модели (рис. 4, кривая 2, а). При одноосном давлении вдоль кристаллографического направления $[110]$ два L_1 -минимума и четыре Δ_1 -минимума смещаются вниз по шкале энергий. Поскольку величина барического коэффициента для четырех Δ_1 -минимумов больше, чем для двух L_1 -минимумов, то при давлениях порядка 8 ГПа, как было показано в работе [9], можно реализовать инверсию типа L_1 - Δ_1 абсолютного минимума и получить четырехэллипсоидную Δ_1 -модель зоны проводимости монокристаллов n -Ge. Провести измерения температурных зависимостей удельного сопротивления при таком большом значении одноосного давления практически является невозможной экспериментальной

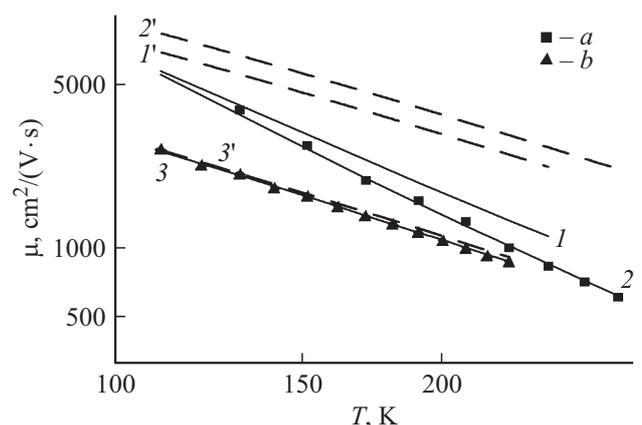


Рис. 4. Температурные зависимости подвижности электронов для Δ_1 -минимума зоны проводимости кристаллов n -Ge: 1 — в случае одноосного давления вдоль кристаллографического направления $[110]$, 2 — в случае гидростатического давления, 3 — в случае одноосного давления вдоль кристаллографического направления $[100]$; а — экспериментальные результаты для концентрации электронов $n = N_D - N_A = 4.72 \cdot 10^{13} \text{см}^{-3}$ [15]; б — наши экспериментальные результаты для концентрации электронов $n = N_D = 5 \cdot 10^{14} \text{см}^{-3}$. Сплошные линии — теоретические расчеты с учетом междолинного рассеяния, а штриховые — без учета междолинного рассеяния.

задачей, поскольку его величина близка к критическому значению давления, когда происходит потеря устойчивости образца германия. Поэтому мы ограничились лишь теоретическими расчетами (рис. 4, кривая I, I').

Как известно, изоэнергетические поверхности как для L_1 , так и для Δ_1 -минимумов являются эллипсоидами вращения. Тогда подвижность носителей заряда в произвольном направлении можно определить из соотношения [16]

$$\mu = \mu_{\perp} \sin^2 \theta + \mu_{\parallel} \cos^2 \theta, \quad (6)$$

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

Согласно (1), для Δ_1 -минимума

$$\mu^{\Delta_1} = \mu_{\parallel}^{\Delta_1} \quad (7)$$

в случае одноосного давления вдоль кристаллографического направления [100] и

$$\mu^{\Delta_1} = \frac{1}{2} \mu_{\parallel}^{\Delta_1} + \frac{1}{2} \mu_{\perp}^{\Delta_1}, \quad (8)$$

когда одноосное давление направлено вдоль кристаллографического направления [110].

Для гидростатического давления

$$\mu^{\Delta_1} = \frac{1}{3} \mu_{\parallel}^{\Delta_1} + \frac{2}{3} \mu_{\perp}^{\Delta_1}. \quad (9)$$

С другой стороны, компоненты тензоров подвижности можно выразить через компоненты тензоров времен релаксации и эффективной массы:

$$\mu_{\parallel}^{\Delta_1} = \frac{e}{m_{\parallel}^{\Delta_1}} \langle \tau_{\parallel}^{\Delta_1} \rangle, \quad \mu_{\perp}^{\Delta_1} = \frac{e}{m_{\perp}^{\Delta_1}} \langle \tau_{\perp}^{\Delta_1} \rangle. \quad (10)$$

Учитывая выше приведенные значения констант деформационного потенциала и компонент тензора эффективной массы, нами на основании выражений (7)–(10), были получены температурные зависимости подвижности электронов для Δ_1 -минимума с учетом и без учета междолинного рассеяния (рис. 4, сплошные и штриховые кривые). Полученные результаты теоретических расчетов и экспериментальных исследований показывают, что для шестиэллипсоидной Δ_1 -модели подвижность электронов изменяется по закону $\mu \sim T^{-2.27}$, для четырехэллипсоидной $\mu \sim T^{-1.98}$ и для двухэллипсоидной $\mu \sim T^{-1.53}$. Температурная зависимость подвижности электронов для двухэллипсоидной Δ_1 -модели зоны проводимости кристаллов n -Ge соответствует типичному закону рассеяния электронов на акустических фононах $\mu \sim T^{-1.5}$. Увеличение показателя степени температурной зависимости подвижности электронов $\lg \mu = f(\lg T)$ для четырехэллипсоидной и шестиэллипсоидной Δ_1 -моделей объясняется присутствием в этих случаях дополнительного механизма междолинного рассеяния.

Проведенные теоретические и экспериментальные исследования позволяют сформулировать следующие выводы:

1. Рассеяние электронов в Δ_1 -моделях зоны проводимости кристаллов германия является анизотропным.

2. Результаты теоретических расчетов подвижности электронов с учетом и без учета междолинного рассеяния показывают, что для шестиэллипсоидной и четырехэллипсоидной Δ_1 -модели зоны проводимости n -Ge в температурном интервале 77–300 К существенным становится междолинное рассеяние. Только для Δ_1 -модели, образованной одноосным давлением вдоль кристаллографического направления [100], рассеяние электронов на междолинных фононах, которые соответствуют g -переходам, является второстепенным по отношению к рассеянию на акустических фононах (внутридолинное рассеяние) и ионах примеси.

3. Анализ температурных зависимостей подвижности электронов и параметра анизотропии времен релаксации для четырехэллипсоидной и шестиэллипсоидной Δ_1 -модели показывает, что на эффективность междолинного рассеяния также влияет сама структура Δ_1 -зоны, т.е. число эквивалентных эллипсоидов, которые ее составляют.

4. Полученные результаты могут быть использованы при конструировании и моделировании на основе n -Ge необходимых элементов микро- и нанoeлектроники, которые будут работать в условиях значительных деформационных полей.

Список литературы

- [1] A.A. Selesnirov, A.Y. Aleinikov, P.V. Ermakov, N.S. Ganchuk, S.N. Ganchuk, R.E. Jones. Phys. Sol. St., **54** (3), 436 (2012).
- [2] S.W. Leman, S.A. Hertel, P. Kim, B. Cabrera, E. Do Couto E Silva, E. Figueroa-Feliciano, K.A. McCarthy, R. Resch, B. Sadoulet, K.M. Sundqvist. J. Low Temp. Phys., **166**, 1106 (2012).
- [3] А.П. Оксанич, В.В. Малеванный. Вестн. Кременчуг. нац. ун-та им. М. Остроградского, **78** (1), 18 (2013).
- [4] Kobayashi Masaharu, Irisawa, Toshifumi, Magyari-Köpe, Blanka, Saraswat Krishna, Hon-Sum Philip Wong, Nishi Yoshio. Electron Dev., **57** (5), 1037 (2010).
- [5] M. Kobayashi, T. Irisawa, B.M. Kope, Yun Sun, K. Saraswat, H.-S.P. Wong, P. Pianetta, Y. Nishi. VLSI Technology, (2009) p. 76.
- [6] Choi Youn Sung, Lim Ji-Song, Numata Toshinori, Nishida Toshikazu, E.S. Thompson. J. Appl. Phys., **102** (10), 104 507 (2007).
- [7] J. Greil, A. Lugstein, C. Zeiner, G. Strasser, E. Bertagnolli. Nano Lett., **12**, 6230 (2012).
- [8] C. Jacoboni, F. Nava, C. Canali, G. Ottaviani. Phys. Rev. B, **24**, 1014 (1981).
- [9] С.В. Лунев, П.Ф. Назарчук, О.В. Бурбан. Матер. 6-й Междунар. науч. конф. РНАОПМ (Украина, Луцк, 2012) с. 42.
- [10] S.V. Luniov, P.F. Nazarchuk, O.V. Burban. Semiconductors, **48** (4), 438 (2014).
- [11] W. Fawcett, E.G.S. Paige. J. Phys. C: Sol. St. Phys., **4**, 1801 (1971).

- [12] C. Herring, E. Vogt. Phys. Rev., **101** (3), 944 (1956).
- [13] П.И. Баранский, И.С. Буда, И.В. Даховский, В.В. Коломоец. *Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках* (Киев, Наук. думка, 1977) с. 269.
- [14] S.V. Luniov, P.F. Nazarchuk, O.V. Burban. J. Phys. Study, **3**, 3702 (2013).
- [15] C.N. Ahmad, A.R. Adams. Phys. Rev. B, **34**, 2319 (1986).
- [16] Г.Л. Бир. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972) с. 584.

Редактор А.Н. Смирнов

The electron scattering in Δ_1 -model conduction band of germanium single crystals

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

Lutsk National Technical University,
43018 Lutsk, Ukraine

Abstract The scattering of electrons in a possible Δ_1 -models of the conduction band of germanium crystals formed by uniaxial or hydrostatic pressure is investigated. Temperature dependences of anisotropy parameter of relaxation times and electron mobility for these Δ_1 -models under conditions of mixed scattering of electrons by impurity ions, acoustic and intervalley phonons have been obtained on the basis of the theory of anisotropic scattering. Analysis of the temperature dependences of the electron mobility and the anisotropy parameter of relaxation time shows that intervalley scattering is significant in temperature range 77–300 K. The scattering of electrons on intervalley phonons corresponding to g -transitions is minor relative to scattering by acoustic phonons (scattering intravalley) and ions of impurity is possible only for Δ_1 -model formed by uniaxial pressure along the crystallographic direction [100].