

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
“УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ”

Бурбан Олександр Вікторович



УДК 621.315.592

Деформаційні ефекти в $(L_1-\Delta_1)$ -моделі зони провідності кристалів германія

01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

УЖГОРОД – 2016

Дисертацією є рукопис

Робота виконана на кафедрі фізики і електротехніки Луцького національного технічного університету Міністерства освіти і науки України

Науковий керівник: кандидат фізико-математичних наук, доцент
Луньов Сергій Валентинович,
Луцький національний технічний університет,
доцент кафедри фізики і електротехніки,

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Хархаліс Любов Юріївна,
ДВНЗ “Ужгородський національний університет”
МОН України, професор кафедри фізики
напівпровідників;

кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник
Єрмаков Валерій Миколайович,
Інститут фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова НАН України, старший науковий
співробітник відділу напівпровідникових детекторів
іонізуючого випромінювання.

Захист відбудеться “29” квітня 2016 р. о 14⁰⁰ год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 61.051.01 при державному вищому навчальному закладі “Ужгородський національний університет” Міністерства освіти і науки України за адресою: 88000, м. Ужгород, вул. Волошина, 54, ауд. № 181.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці ДВНЗ “Ужгородський національний університет” (м. Ужгород, вул. Університетська, 14).

Автореферат розісланий „27” березня 2016 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 61.051.01

доктор фіз.-мат. наук, професор



Міца В.М.

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Сучасний науково-технічний прогрес електронної техніки пов'язаний як з розробкою нових матеріалів, так і з вдосконаленням необхідних властивостей вже існуючих. Одержані ж матеріали з необхідними властивостями вже в подальшому можуть стати основою для створення різноманітних складних пристроїв мікро- та наноелектроніки. Такий напівпровідниковий матеріал, як германій, незважаючи на досить детальне вивчення його властивостей, і надалі залишається модельним об'єктом при поясненні як знову відкритих, так і відомих процесів та явищ в об'ємі та на поверхні. В багатьох випадках германій є сировинним матеріалом для створення різного роду приладів та сенсорів, таких як діоди, тріоди, силові випрямлячі, дозиметричні прилади, тензодатчики. Монокристалічний германій n-типу провідності в даний час є основним матеріалом в якості оптичного середовища для лінз, об'єктивів, фільтрів, які використовуються для області спектра 3–5 мкм та 8–14 мкм. Висока рухливість електронів у германії дозволяє створювати нанотранзистори з високопровідними каналами, час перемикання яких може складати пікосекунди. Масиви Ge квантових точок, гетероструктури Si/Ge з успіхом можуть бути використанні в якості перспективних матеріалів для виготовлення фотодетекторів ближнього інфрачервоного діапазону, світловипромінюючих діодів для цієї ж спектральної області, сонячних елементів, термоелектричних перетворювачів, комірок пам'яті.

З точки зору розуміння електрофізичних властивостей германія головним є надійно встановлена енергетична зонна структура цього матеріалу, яка складається з мінімумів різної симетрії. В n-Ge крім основних мінімумів зони провідності (L_1 - мінімумів) існують додаткові (неосновні) Δ_1 -мінімуми, які розміщені за шкалою енергій на 0,18 eV вище основних в кристалографічно еквівалентних напрямках $\langle 100 \rangle$. Значна віддаленість цих мінімумів від основних як за енергією, так і по квазіімпульсу не сприяла дослідженням їх впливу при малих фізичних збуреннях на властивості матеріалу. Тому на сьогодні в літературі, незважаючи на досить інтенсивні дослідження, існує обмежена кількість як експериментальних, так і теоретичних робіт, присвячених дослідженню впливу радикальної деформаційної перебудови зонної структури монокристалів n-Ge на їх фізичні властивості.

Використання сильних одновісних або гідростатичних тисків дозволяє вивчати особливості зонної структури монокристалів n-Ge, визначати параметри різних мінімумів зони провідності, основними з яких є константи деформаційного потенціалу та компоненти тензора ефективної маси. Відомості ж про дані параметри дозволяють теоретично пояснювати одержані експериментальні результати впливу на монокристали германія значних деформаційних, електричних, оптичних та магнітних полів, конструювати різні елементи функціональної електроніки з наперед прогнозованими характеристиками, які працюватимуть у таких екстремальних умовах. Тому проблемі дослідження впливу деформаційних полів на фізичні властивості напівпровідників та напівпровідникових наноструктур, створення на основі них різних електронних приладів та датчиків присвячена значна

увага багатьох фізиків та технологів, які працюють в області напівпровідникового матеріалознавства.

Таким чином, стан наукових досліджень для вибраного напрямку на час виконання даної роботи і визначає актуальність обраної теми.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.

Наукові дослідження, проведені в дисертаційній роботі, безпосередньо пов'язані з напрямком наукових досліджень та планами наукових семінарів кафедри фізики і електротехніки Луцького національного технічного університету. Основою для підготовки та подання дисертаційної роботи була науково-дослідна робота на тему "Морфологічні методи і моделі контролю якості напівпровідникових та композитних матеріалів", № державної реєстрації 0110U002221.

Мета і завдання дослідження. Мета роботи полягає у вивченні впливу радикальної перебудови зонної структури монокристалів n-Ge при дії значних деформаційних полів на механізми тензоефектів та розсіяння носіїв заряду. Для досягнення поставленої мети необхідно було розв'язати наступні задачі:

1. На основі теорії анізотропного розсіяння та експериментальних досліджень тензорезистивного ефекту для одновісно деформованих вздовж кристалографічного напрямку [100] монокристалів n-Ge при температурі рідкого гелію та азоту знайти константи деформаційного потенціалу та компоненти тензора ефективної маси для Δ_1 -мінімумів зони провідності n-Ge.
2. Обчислити, використовуючи варіаційний метод Рітца, енергію іонізації основного стану мілких донорів Sb, P, As для Δ_1 -моделі зони провідності монокристалів n-Ge з врахуванням та без врахування хімічного зсуву для даних домішок.
3. Оцінити вплив інверсії типу (L_1 - Δ_1) абсолютного мінімуму в n-Ge, обумовленої одновісним тиском вздовж кристалографічного напрямку [100], на ефект екранування.
4. Дослідити розсіяння електронів в деформованих монокристалах n-Ge при сильних одновісних та гідростатичних тисках.
5. Оцінити вплив електрон-фононої взаємодії на тензорезистивний ефект одновісно деформованих вздовж кристалографічного напрямку [100] до тисків 3 ГПа монокристалів n-Ge при різних температурах.

Об'єкт досліджень: процеси радикальної перебудови в зонній структурі монокристалів германію і їх вплив на тензоефекти та розсіяння носіїв заряду при дії деформаційних полів.

Предмет досліджень: монокристали германія n-типу провідності, леговані різними домішками з різною концентрацією.

Методи дослідження. Для вирішення поставлених завдань використовувався метод дослідження тензоефектів при одновісній пружній деформації, теорія анізотропного розсіяння та деформаційного потенціалу, варіаційний метод Рітца.

Наукова новизна одержаних результатів

1. На основі теорії анізотропного розсіяння та експериментальних даних лише поздовжнього тензорезистивного ефекту монокристалів n-Ge при одновісних

тисках, коли реалізується інверсія типу (L_1 - Δ_1) абсолютного мінімуму, знайдено константи деформаційного потенціалу, ефективну масу густини станів та компоненти тензора ефективної маси для Δ_1 -мінімуму.

2. Вперше на основі теоретичних розрахунків з врахуванням хімічного зсуву та анізотропії закону дисперсії, обчислено енергію іонізації основного стану мілких донорів Sb, P, As, зв'язаних із Δ_1 -долинами зони провідності германія. Даний підхід може бути розповсюджений для знаходження відповідних параметрів інших типів мінімумів зони провідності германія або для таких технічно актуальних багатодолинних напівпровідників, як Si, GaAs, CdSb, InSb, при розгляді кінетичних ефектів, коли проявляється суттєвий вклад вище розташованих мінімумів (ефекти розігріву носіїв струму, радикальна перебудова зонної структури матеріалу при сильних деформаціях).

3. Виявлено, що такий важливий параметр у напівпровідникових матеріалах, як радіус екранування, зазнає змін у результаті інверсії типу (L_1 - Δ_1) абсолютного мінімуму зони провідності n-Ge, обумовленої одновісним деформуванням ($\approx 2,8$ ГПа) вздовж кристалографічного напрямку [100].

4. Для недеформованих та одновісно деформованих вздовж кристалографічних напрямків [111] та [110] n-Ge з температурних залежностей питомого опору $\rho(T)$ виявлено, що для чотирьохдолинної L_1 -моделі зони провідності n-Ge важливим є розсіяння електронів на оптичних та міждолинних фононах. У випадку двох- та однодолинної L_1 -моделі домінуючим буде розсіяння електронів на акустичних фононах.

5. Встановлено, що для чотирьох та шестиеліпсоїдної Δ_1 -моделі в температурному інтервалі 100–300 К істотним, на відміну від L_1 -моделі, є міждолинне розсіяння. Лише для двохеліпсоїдної Δ_1 -моделі, утвореної одновісним тиском вздовж кристалографічного напрямку [100], розсіяння електронів на міждолинних фононах, які відповідають g-переходам, є другорядним у відношенні до розсіювання на акустичних фононах та іонах домішки.

6. При температурі рідкого азоту, з аналізу концентраційних залежностей рухливості електронів, в рамках теорії анізотропного розсіяння для L_1 - та Δ_1 -моделей зони провідності монокристалів германія слідує, що рухливість електронів залежить не лише від їх ефективної маси та часу релаксації, але й від параметра анізотропії ефективних мас для електронів цих мінімумів. Особливо ефект анізотропії стає відчутним для концентрацій легуючої домішки $N_d > 10^{15} \text{ см}^{-3}$, коли домінуючим є розсіяння електронів на іонах домішок.

7. Встановлено, що на величину тензорезистивного ефекту для одновісно деформованих вздовж кристалографічного напрямку [100] монокристалів n-Ge при одновісних тисках $P > 1,5$ ГПа додатково впливає механізм міждолинного розсіяння електронів між L_1 - та Δ_1 -мінімумами.

Практичне значення отриманих результатів.

1. Дослідження тензорезистивного ефекту при одновісних тисках більших, ніж 1,5 ГПа, за яких вже традиційний ефект п'єзоопору Сміта – Херрінга відсутній, дозволило отримати для монокристалів n-Ge при одновісній деформації вздовж

кристалографічного напрямку [100] значний тензорезистивний ефект, величина якого залежать від концентрації легуючої домішки та температури. Це дає змогу розширити діапазон тензочувливості для монокристалів n-Ge від 1,5 до 3 ГПа, що відкриває перспективи конструювання на основі n-Ge тензодатчиків, які, на відміну від n-Si, зможуть працювати в умовах таких значних деформаційних полів. Висока, порівняно з кремнієм, рухливість електронів та значна анізотропія коефіцієнта тензочувливості при одновісному тиску для n-Ge може бути використана для створення на основі германія принципово нових та унікальних за своїми властивостями тензодатчиків – високочутливих гетероепітаксialьних тензорезисторів та наносенорів механічного тиску нового покоління.

2. Отримані значення констант електрон-фононої взаємодії для оптичних та міждолинних фононів у L_1 -моделі, констант акустичного потенціалу деформації та компонент тензора ефективної маси для Δ_1 -мінімумів можуть бути використанні для опису та моделювання різних кінетичних та оптичних ефектів у n-Ge і відповідно створення на основі германія різних електронних приладів та датчиків, які працюватимуть при екстремальних умовах дії значних деформаційних, електричних, магнітних, оптичних полів, коли проявляється вклад даних мінімумів у відповідні ефекти.

3. Оскільки властивості Ge наноструктур суттєво залежать від величини та розподілу в них внутрішніх механічних напружень, які виникають в процесі їх синтезу, то дослідження впливу деформаційних полів на зонну структуру та механізми розсіяння носіїв заряду є важливим при прогнозуванні необхідних електрофізичних властивостей напружених наноструктур, у яких використовується германій (квантові точки Ge, гетероструктури Si/Ge).

Особистий внесок здобувача. У роботах, виконаних у співавторстві, особистий внесок автора полягає в одержанні зразків монокристалів n-Ge оптимальних геометричних розмірів та форми для дослідження тензоефектів при високих одновісних тисках, в автоматизації проведення експерименту за допомогою вимірювальної установки. Також автор особисто провів більшість експериментальних досліджень, окремі теоретичні розрахунки, брав активну участь в обговоренні одержаних результатів, написанні наукових праць, а також у представленні результатів на конференціях і семінарах різного рівня.

Так, у роботах [5-6, 9-11, 16, 17, 19, 26, 28] автор провів виміри тензорезистивного ефекту для одновісно деформованих вздовж кристалографічного напрямку [100] монокристалів n-Ge при різних температурах. В роботах [4, 23, 25] автором одержано температурні залежності питомого опору для одновісно деформованих вздовж кристалографічних напрямків [111] та [110] монокристалів n-Ge. В роботах [1, 8, 9, 13, 18, 20, 24, 27] автором були проведені розрахунки параметра анізотропії часів релаксації для L_1 - та Δ_1 -мінімумів зони провідності n-Ge при різних температурах та концентраціях легуючої домішки, оптимальних геометричних розмірів, форми досліджуваних зразків n-Ge та впливу концентрації легуючої домішки на вимірювання електричних параметрів напівпровідників. В роботах [2, 3, 12, 15, 21] автором розраховувався радіус екранування для L_1 - та Δ_1 -мінімумів. В роботах [7, 29] автором проводились розрахунки енергії іонізації

мілких донорів Sb, P, As, зв'язаних із Δ_1 -долинами зони провідності германія, без врахування хімічного зсуву.

Апробація результатів дисертації. Основні результати, які подані в дисертації, доповідались на I Міжнародній науково-практичній конференції “Актуальні проблеми прикладної фізики АППФ” (м. Севастополь, 2012 р.); на Всеукраїнській науковій конференції “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики АПТЕПФ–2012” (м. Тернопіль, 2012 р.); на VI Українській конференції з фізики напівпровідників УНКФН-6 (м. Чернівці, 2013 р.); на VI та VII Міжнародній конференції “Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали РНАОПМ’2012 та РНАОПМ’2014” (м. Луцьк, 2012 та 2014 р.); The XVIIIth International Seminar on Physics and Chemistry of Solids (Lviv, 2012); Proceedings of X International Scientific Conference “Electronics and Applied Physics” (Kyiv, 2014); на X Международной научно-технической конференции “Квантовая электроника 2015” (Минск, 2015); на конференції молодих вчених з фізики напівпровідників “Лашкарьовські читання 2012, 2013, 2014” (Київ 2012, 2013, 2014 рр.); на Міжнародній науковій конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “Еврика – 2012, 2013, 2014” (Львів 2012, 2013, 2014 рр.); на II та III Всеукраїнській науково-практичній конференції “Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення і перспективи” (Луцьк, 2012 р.); на наукових семінарах кафедри фізики і електротехніки Луцького національного технічного університету.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 29 друкованих праці, з яких 11 статей у фахових журналах.

Структура дисертації. Дисертація складається з вступу, чотирьох розділів, висновків та переліку використаної літератури. Загальний обсяг дисертаційної роботи становить 141 сторінка: з яких 39 рисунків та 6 таблиць. У роботі використано 126 бібліографічних посилань.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність дисертаційної роботи, мету та основні завдання досліджень, відзначено наукову новизну та практичне значення одержаних результатів. Також наведено відомості про апробацію результатів дисертаційної роботи дисертантом, його особистий внесок, кількість публікацій, об’єм та структуру дисертації.

Перший розділ присвячено розгляду феноменологічної теорії п’єзоопору багатодолинних напівпровідників, яка дозволяє пояснити основні закономірності тензоефектів у монокристалах n-Ge. Літературний огляд результатів як експериментальних, так і теоретичних робіт зосереджений, в основному, на дослідженні впливу сильних гідростатичних та одновісних тисків на трансформацію зонної структури n-Ge та пов’язаних із цим різних кінетичних ефектів. Також розглянуто основні засади теорії анізотропного розсіяння електронів, фононні спектри для міждолинних та оптичних фононів в германії, наведено основні методи визначення констант акустичного потенціалу деформації для L_1 - та Δ_1 -мінімумів у n-Ge на основі вимірювань тензорезистивного ефекту та представлено відомі

значення цих параметрів. Аргументовано актуальність дослідження впливу значних деформаційних полів на енергетичну зонну структуру та механізми розсіяння носіїв заряду в n-Ge з точки зору важливості вивчення для сучасної наноелектроніки властивостей напружених наноструктур на основі германію. Це квантові точки Ge на Si. Розміри, розподіл та енергетичний спектр таких точок залежить від величини внутрішніх механічних напружень. Для гетероструктур *Ge/Si* значні внутрішні напруження виникають за рахунок різниці сталих ґратки *Ge* та *Si* та залежать від співвідношення між товщинами шарів кремнію та германію.

Досить обмежена в літературі кількість робіт щодо визначення параметрів Δ_1 -мінімумів, кінетичних ефектів та механізмів розсіяння електронів за їх участю, на відміну від L_1 -мінімумів, вимагає проведення додаткових експериментальних та теоретичних досліджень. Оскільки при цьому результати отримувались, як правило, з використанням різних експериментальних методик, то це вносило додаткові похибки. Внаслідок чого отримувалась суттєва невідповідність між теорією та експериментом при описі та поясненні інших експериментальних результатів, коли проявлявся вклад даних мінімумів в різні ефекти. А це, в свою чергу, обґрунтовує актуальність, мету та наукову новизну поставленої задачі.

Другий розділ містить опис методики та техніки підготовки зразків n-Ge для досліджень. Обґрунтовано метод досліджень тензоефектів при одновісній пружній деформації. Представлено схематичне зображення установки для вимірювання поздовжнього п'єзоопору. Подано опис технічних характеристик та електричну частину вимірювальної установки, на якій проведена експериментальна частина роботи. Проведено теоретичні розрахунки впливу оптимальних геометричних розмірів, форми, ступеня легування домішками досліджувальних зразків на граничні межі вимірювань тензорезистивного ефекту в n-Ge та можливих похибок, які виникають при вимірюваннях питомого опору.

Третій розділ присвячений визначенню параметрів Δ_1 -мінімумів, таких як ефективна маса густини станів, компоненти тензора ефективної маси та акустичного потенціалу деформації. Для досягнення поставленої мети спочатку проводились вимірювання питомої електропровідності при температурі $T=4,2$ К для одновісно деформованих вздовж кристалографічного напрямку $[100]$ монокристалів n-Ge, легуваних домішкою сурми до рівня $N_d=2 \cdot 10^{18}$ см⁻³. При деформації n-Ge вздовж кристалографічного напрямку $[100]$ чотири L_1 -долини будуть зміщуватись вгору, а дві Δ_1 -долини – вниз за шкалою енергій. Статистика електронного газу в долинах така, що для області початкового спаду питомої електропровідності кристалу з тиском у 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 у L_1 -мінімумах. Крім того, $4n_{L_1} + 2n_{\Delta_1} = N_d$ для будь-якої точки залежності $\frac{\sigma}{\sigma_0} = f(P)$.

Враховуючи умову сталості концентрації електронів у зоні провідності та вирази для концентрації електронів у даних мінімумах, було одержано вираз для розрахунку зміни положення Δ_1 -мінімуму при одновісному тиску вздовж

кристалографічного напрямку [100]:

$$\Delta E_{\Delta_1} = -(E_{\Delta_{10}} - E_{L_{10}}) + \Delta E_{L_1} + kT \ln N_c - kT \ln \frac{n_e \mu_{\Delta_1} e - \sigma}{2e(\mu_{L_1} - \mu_{\Delta_1})} + \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m_{L_1}} \left(\frac{\sigma - n_e \mu_{\Delta_1} e}{4e(\mu_{L_1} - \mu_{\Delta_1})}\right)^{\frac{2}{3}}, \quad (1)$$

$$\text{де } N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_{\Delta_1} kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}.$$

При обчисленнях використовувались експериментальні результати питомої електропровідності σ деформованого зразка для початкового спаду кривої питомої електропровідності, відомі та надійно встановлені параметри L_1 -мінімуму та значення констант жорсткості для кристалів германія ($\Xi_u^{L_1} = 16,4 \text{ eV}$, $\Xi_d^{L_1} = -6,4 \text{ eV}$, $S_{11} = 0,769 \cdot 10^{-11} \text{ Па}^{-1}$, $S_{12} = -0,21 \cdot 10^{-11} \text{ Па}^{-1}$). Величини $\mu_{L_1} = 780 \frac{\text{см}^2}{\text{Вс}}$ і $\mu_{\Delta_1} = 220 \frac{\text{см}^2}{\text{Вс}}$ знаходились за відомими значеннями концентрації носіїв струму та провідності недеформованого та сильно деформованого кристалу (плато експериментальної залежності). Як показують відповідні розрахунки, згідно з (1), зміщення ΔE_{Δ_1} дна Δ_1 -мінімуму добре апроксимується лінійною функцією тиску, що також узгоджується з теорією деформаційного потенціалу. Тоді, для довільних значень одновісного тиску P_1, P_2, \dots, P_n можна записати, що

$$\frac{\Delta E_{\Delta_1}(P_1)}{P_1} = \frac{\Delta E_{\Delta_1}(P_2)}{P_2} = \dots = \frac{\Delta E_{\Delta_1}(P_n)}{P_n} = \text{const}. \quad (2)$$

Розв'язок рівняння (2), з урахуванням експериментальних значень питомої електропровідності $\sigma(P_1)$ та $\sigma(P_2)$ початкового спаду залежності $\frac{\sigma}{\sigma_0} = f(P)$, дає наступне значення ефективної маси густини станів електронів для Δ_1 -мінімуму: $m_{\Delta_1} = 0,55m_0$.

Залежність енергії електрона E від хвильового вектора \vec{k} як для L_1 -, так і Δ_1 -мінімуму має вигляд еліпсоїда обертання. Тому

$$m_{\Delta_1}^* = N^{\frac{2}{3}} (m_{\parallel} m_{\perp}^2)^{\frac{1}{3}}, \quad (3)$$

де N – число еквівалентних еліпсоїдів (для нашого випадку $N = 2$), m_{\parallel} , m_{\perp} – поздовжня та поперечна складова тензора ефективної маси електрона для Δ_1 -мінімуму. Враховуючи (3), $m_{\Delta_1}^* = 0,88m_0$. Для знаходження даних компонент тензора ефективної маси на основі теорії анізотропного розсіяння електронів на іонах домішки було одержано вираз для рухливості. При таких умовах експерименту (випадок чисто іонного розсіяння) час релаксації для електронів Δ_1 -

мінімуму залежатиме лише від компонент тензора ефективної маси та не залежатиме від констант деформаційного потенціалу. Це дозволило отримати наступну систему рівнянь:

$$\begin{cases} (m_{\parallel} m_{\perp}^2)^{\frac{1}{3}} = m_{\Delta_1}, \\ \frac{4e}{3\sqrt{\pi}m_{\parallel}} \int_0^{\infty} dx x^{\frac{3}{2}} e^{-x} \tau_{\parallel} = \mu_{\Delta_1}. \end{cases} \quad (4)$$

Беручи до уваги значення ефективної маси густини станів m_{Δ_1} , рухливість електронів μ_{Δ_1} при $T=4,2$ К для Δ_1 -мінімуму та вираз для поздовжньої складової τ_{\parallel} тензора часів релаксації в умовах розсіяння електронів на іонах домішки, отримано наступні значення компонент тензора ефективної маси: $m_{\parallel} = 1,65m_0$ та $m_{\perp} = 0,32m_0$. З урахуванням значення обчисленого на основі виразу (2) баричного коефіцієнта $\frac{dE_{\Delta_1}}{dP} = -8,65 \cdot 10^{11} \frac{eB}{Па}$ було отримано також комбінацію констант деформаційного потенціалу для Δ_1 - мінімуму:

$$0,35\Xi_d^{\Delta_1} + 0,77\Xi_u^{\Delta_1} = 8,65 eB. \quad (5)$$

Для роздільного знаходження констант деформаційного потенціалу $\Xi_u^{\Delta_1}$ та $\Xi_d^{\Delta_1}$ для Δ_1 - мінімуму досліджувався поздовжній п'єзоопір при температурі рідкого азоту для монокристалів n-Ge, легованих Sb до концентрації $5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, коли $P \parallel J \parallel [100]$.

За таких умов експерименту суттєвим стає вже механізм розсіяння електронів на акустичних фононах, для якого час релаксації є функцією як компонент тензора ефективної маси, так і констант деформаційного потенціалу $\Xi_u^{\Delta_1}$ та $\Xi_d^{\Delta_1}$. Оскільки для всього діапазону одновісних тисків ($0 < P < 2,6$ ГПа) концентрація електронів провідності є сталою, то рухливість електронів для Δ_1 -мінімуму, як і для випадку іонного розсіяння, визначалась за відомими значеннями концентрації носіїв струму та питомого опору недеформованого та сильно деформованого кристалу (плато експериментальної залежності).

Це дозволило отримати на основі теорії анізотропного розсіяння ще одне рівняння зв'язку між константами деформаційного потенціалу для Δ_1 -мінімуму і відповідно систему рівнянь для їх обчислення:

$$\begin{cases} \frac{4ea_{\parallel}}{3\sqrt{\pi k_B m_{\parallel}} T^{3/2}} \int_0^{\infty} \frac{x^3 e^{-x}}{x^2 + b_0} dx = \mu_{\Delta_1}, \\ 0,35\Xi_d^{\Delta_1} + 0,77\Xi_u^{\Delta_1} = 8,65. \end{cases} \quad (6)$$

Розв'язок системи рівнянь (6) дає такі значення констант деформаційного потенціалу для Δ_1 - мінімуму: $\Xi_u^{\Delta_1} = 11,82$ eВ, $\Xi_d^{\Delta_1} = -1,29$ eВ.

Для пояснення різних кінетичних ефектів у сильно деформованих кристалах n-Ge поряд із такими важливими параметрами зонної структури як константи деформаційного потенціалу та компоненти тензора ефективної маси, необхідно також мати значення баричних коефіцієнтів для різних типів мінімумів зони провідності. Тому також теоретично розраховувались, враховуючи знайденні константи деформаційного потенціалу, баричні коефіцієнти для Δ_1 -мінімуму та зміна величини енергетичної щільності між L_1 - та Δ_1 -мінімумами зони провідності монокристалів n-Ge при гідростатичному та одновісному тисках. Дані обчислення представлені в таблиці 1.

З врахуванням значень знайдених баричних коефіцієнтів, було обчислено також зміщення L_1 - та Δ_1 -мінімумів при гідростатичному та одновісному тиску і показано, що при одновісному тиску вздовж кристалографічного напрямку $[100]$ інверсія типу абсолютного мінімуму відбувається для тиску близькому до 2,1 ГПа, а при одновісному тиску вздовж кристалографічного напрямку $[110]$ та гідростатичному – для тисків $P \approx 8$ ГПа та $P \approx 5$ ГПа відповідно.

Таблиця 1

Значення баричних коефіцієнтів для Δ_1 -мінімуму та зміни величини енергетичної щільності між L_1 - та Δ_1 -мінімумами зони провідності кристалів n-Ge

Тиск	Баричні коефіцієнти для Δ_1 -мінімуму $\frac{dE_{\Delta_1}}{dP} \cdot 10^{11}, \frac{eB}{Па}$	Зміна величини енергетичної щільності між L_1 - та Δ_1 -мінімумами $\frac{dE_{(L_1-\Delta_1)}}{dP} \cdot 10^{11}, \frac{eB}{Па}$
Одновісний тиск $P_{\parallel[100]}$	-8,65	-8,97
Одновісний тиск $P_{\parallel[110]}$	-5,9	-2,24
Одновісний тиск $P_{\parallel[111]}$	-0,92	6,73
Гідростатичний тиск	-2,77	-3,75

Як видно з таблиці, при одновісному тиску вздовж кристалографічного напрямку $[111]$ реалізувати інверсію типу абсолютного мінімуму не можливо, оскільки для цього випадку швидкість зміщення нижнього L_1 -мінімуму значно

більша, ніж шести Δ_1 -мінімумів, і при цьому енергетична щілина між цими типами мінімумів збільшується.

Відомо [1], що існує сильна залежність дебаївської довжини екранування від ефективної маси носіїв струму. Саме ця обставина змусила звернути увагу на поведінку величини радіуса екранування при реалізації інверсії типу (L_1 - Δ_1) абсолютного мінімуму в n-Ge. З одержаних значень величини радіуса екранування та концентраційних залежностей екрануючого множника для L_1 - та Δ_1 -мінімумів було зроблено наступні висновки:

1. Радіус екранування збільшується в результаті інверсії типу абсолютного мінімуму зони провідності n-Ge, обумовленої одновісним деформуванням вздовж кристалографічного напрямку [100]. Причиною цього є зростання ефективної маси густини станів при переході від L_1 - до Δ_1 -мінімумів, оскільки концентрація екрануючих носіїв струму при інверсії не змінюється.
2. Різні залежності екрануючого множника від концентрації домішки для L_1 - та Δ_1 -мінімумів зони провідності n-Ge вказують на різний характер екранування і відповідно розсіяння електронів для різних типів мінімумів.

Тому для сильнолегованих монокристалів n-Ge та інших багатодолинних напівпровідників при розгляді різних кінетичних ефектів за наявності значних деформаційних полів необхідно враховувати додатково також залежність радіуса екранування, а отже й часу релаксації, від деформації.

За рахунок анізотропії закону дисперсії та корекції потенціалу центральної комірки енергетичні рівні основного стану мілких донорів у монокристалах германія зазнають значного хімічного зсуву. На основі варіаційного методу Рітца обчислювалась енергія іонізації основного стану мілких донорів Sb, P, As для Δ_1 -моделі зони провідності монокристалів n-Ge з врахуванням зазначених факторів.

Пробна функція для основного стану електрона вибиралась у вигляді:

$$\psi_{1s} = ce^{-\sqrt{\frac{x^2+y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2}}}, \quad (7)$$

де c , a , b – невідомі варіаційні параметри.

Величина хімічного зсуву залежить від природи самої домішки. Тому потенціал поля домішкового іона повинен враховувати конкретну його природу. Для розв'язку поставленої задачі був запропонований такий потенціал:

$$U(r) = -\frac{q^2}{\epsilon r} \left(1 + Ae^{-\frac{r}{r_0}} \right) e^{-\frac{r}{R}}, \quad (8)$$

де A – параметр, який характеризує ефективність “серцевини” іона домішки, r_0 – половина відстані між двома найближчими сусідніми атомами кристалу (для германія $r_0 = 1,225 \cdot 10^{-10}$ м); R – радіус екранування.

Вказані параметри дозволили побудувати гамільтоніан для електрона, який знаходиться в полі (8), у випадку еліпсоподібної ізоенергетичної поверхні та обчислити енергію іонізації основного стану донорів Sb, P, As для Δ_1 -моделі з врахуванням хімічного зсуву. Для порівняння впливу хімічного зсуву на величину енергії іонізації також проводились обчислення і без врахування хімічного зсуву. При цьому вибирався звичайний кулонівський потенціал для домішкового іона. В таблиці 2 представлені результати розрахунків енергії іонізації основного стану мілких донорів у монокристалах n-Ge без врахування та з врахуванням хімічного зсуву для цих домішок.

Таблиця 2

Енергія іонізації основного стану мілких донорів у n-Ge, зв'язаних із Δ_1 -долинами

Енергія іонізації основного стану мілких донорів $E_{1S}^{\Delta_1}$, меВ		
Без врахування хімічного зсуву	Із врахуванням хімічного зсуву	Експериментальні результати [2, 3]
30,4	Sb: 32,6	Sb: (35±2)
	As: 42,5	As: (45±2)
	P: 39	P: (41±2)

Порівняння одержаних теоретичних результатів із відповідними експериментальними даними показують, що модель кулонівського потенціалу домішки може бути використана в грубому наближенні лише для домішки Sb в Ge, без врахування хімічного зсуву. Для домішок P та As розрахунки необхідно вже проводити з урахуванням хімічного зсуву, тобто, коли потенціал поля іона домішки не є кулонівським. Запропонований потенціал, який враховує різний хімічний зсув для різних домішок, та методика теоретичного розрахунку можуть бути використані для знаходження енергетичних рівнів мілких донорів для таких технічно актуальних багатодолинних напівпровідників, як Si, GaAs, CdSb, InSb. Також дані результати необхідно враховувати при розгляді ефектів розігріву носіїв струму за рахунок сильних електричних полів, коли проявляється суттєвий вклад вище розташованих мінімумів.

Четвертий розділ присвячений дослідженню механізмів розсіяння електронів у L_1 -, Δ_1 - та $(L_1-\Delta_1)$ -моделях зони провідності монокристалів германія. Для вивчення особливостей електрон-фононої взаємодії в n-Ge досліджувалось розсіяння електронів у чотирьох-, двох- та однодолинній L_1 -моделі зони провідності монокристалів германія. У недеформованих монокристалах n-Ge зона провідності складається з чотирьох ізоенергетичних поверхонь, які являють собою еліпсоїди обертання. Двохдолинна та однодолинна L_1 -модель в широкому температурному інтервалі отримувалась при сильному одновісному тиску $P \sim 1,8$ ГПа вздовж кристалографічного напрямку $[110]$ та $[111]$ відповідно. Результати даних експериментальних досліджень показують, що для чотирьохдолинної L_1 -моделі, питомий опір змінюється за законом $\rho \sim T^{1,66}$, а для двох- та однодолинної – $\rho \sim T^{1,5}$. Така різниця в температурних залежностях питомого опору монокристалів n-Ge при

переході від чотирьох- до двох- та однодолинної L_1 -моделі зони провідності, очевидно, пов'язана із зміною вкладу при одновісному тиску різних механізмів розсіяння електронів. Поряд із розсіянням електронів на акустичних фононах (внутрішньодолинне розсіяння) та іонах домішки в n-Ge можливим також є розсіяння на оптичних фононах, яке спричинене взаємодією електронів із фононами, частоти яких відповідають температурі $T_{C1}=430$ К (внутрішньодолинне розсіяння) та міждолинне розсіяння на акустичних фононах із характеристичною температурою $T_{C2}=320$ К. Одержані залежності показують, що для чотирьохдолинної L_1 -моделі зони провідності n-Ge досить важливим є розсіяння електронів на оптичних та міждолинних фононах. У двох- та однодолинній L_1 -моделі домінуючим для досліджуваної концентрації домішки буде розсіяння електронів на акустичних фононах. Для кількісного ж трактування відносного вкладу різних механізмів розсіяння в n-Ge було проведено також теоретичні розрахунки даних температурних залежностей питомого опору на основі теорії анізотропного розсіяння. З одержаних теоретичних залежностей слідує, що питомий опір для чотирьохдолинної L_1 -моделі змінювався за законом $\rho \sim T^{1,9}$, для двохдолинної – $\rho \sim T^{1,55}$ та однодолинної як $\rho \sim T^{1,63}$, що не узгоджується з відповідним експериментальним результатами. Така невідповідність між експериментальними та теоретичними залежностями пояснюється недостатньо точними значеннями констант оптичного та міждолинного деформаційного потенціалу, що вимагає їх уточнення. Тому на основі теорії анізотропного розсіяння та одержаних експериментальних результатів температурних залежностей питомого опору для недеформованого n-Ge, із розв'язків системи рівнянь, було знайдено дані константи $\Xi_{430} = 4 \cdot 10^8 \frac{eB}{cm}$ та

$$\Xi_{320} = 1,4 \cdot 10^8 \frac{eB}{cm}$$

Проведені теоретичні розрахунки температурних залежностей питомого опору для двох- та однодолинної L_1 -моделі зони провідності монокристалів n-Ge із використанням отриманих констант добре узгоджуються з одержаними експериментальними результатами.

Для дослідження механізмів розсіяння електронів у Δ_1 -моделі зони провідності германія було оцінено вплив інверсії типу (L_1 - Δ_1) абсолютного мінімуму на величину рухливості. При розрахунках ми обмежилися спочатку випадком невиродженого електронного газу та розсіянням електронів на акустичних фононах та іонах домішки. Враховуючи значення констант деформаційного потенціалу та компонент тензора ефективної маси для L_1 -мінімуму, відповідні параметри, які знайдені в розділі 3, для Δ_1 -мінімуму, було отримано концентраційні залежності рухливості електронів для L_1 - та Δ_1 -мінімумів. Для різної концентрації домішки в усіх можливих випадках інверсії типу (L_1 - Δ_1) абсолютного мінімуму в n-Ge спостерігається зменшення рухливості електронів. При інверсії, яка обумовлена одновісним тиском вздовж кристалографічного напрямку $[100]$, значне зменшення рухливості пов'язане, передусім, із зменшенням часу релаксації. Для інших двох випадків інверсії при гідростатичному та одновісному тисках вздовж

кристалографічного напрямку [110] зменшення рухливості пояснюється, в основному, збільшенням ефективної маси електронів при переході від L_1 - до Δ_1 -моделі зони провідності монокристалів германія. Також рухливість електронів для L_1 -мінімуму є чутливішою до збільшення концентрації домішки в порівнянні з Δ_1 -мінімумом. Це пов'язано з тим, що для L_1 -мінімуму параметр анізотропії ефективних мас $K_m = \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}}$ є більшим, ніж для Δ_1 -мінімуму ($K_m^{L_1} = 19,3$; $K_m^{\Delta_1} = 5,15$).

Одним із важливих параметрів, який характеризує розсіяння носіїв заряду в анізотропних напівпровідниках, є параметр анізотропії часів релаксації:

$$k_{\tau} = \frac{\langle \tau_{\parallel} \rangle}{\langle \tau_{\perp} \rangle}, \quad (9)$$

де $\langle \tau_{\parallel} \rangle$ та $\langle \tau_{\perp} \rangle$ – усереднені компоненти тензора часів релаксації вздовж і поперек до головної осі еліпсоїда. Тому для L_1 - та Δ_1 - мінімумів розраховувались залежності параметру анізотропії часів релаксації від концентрації легуючої домішки при температурі рідкого азоту в умовах розсіяння електронів на іонах домішки та акустичних фононах. Одержані концентраційні залежності показують, що розсіяння електронів для різних мінімумів є анізотропним, а ступінь анізотропії залежить від концентрації домішки, значень компонент тензорів ефективної маси та деформаційного потенціалу для даних мінімумів. Залежність $k_{\tau} = f(N)$ є більш чутливою до зміни концентрації для L_1 -мінімуму, ніж для Δ_1 -мінімуму, що можна пояснити, як було зазначено вище, різними значеннями параметра анізотропії ефективних мас для цих мінімумів.

Також розглядався найбільш загальний випадок змішаного розсіяння електронів на акустичних фононах (внутрішньодолинне розсіяння), оптичних фононах, іонах домішки та міждолинних фононах у даних Δ_1 -моделях. Із цією метою розраховувались температурні залежності рухливості та параметра анізотропії часів релаксації для цих моделей. Одержані результати теоретичних розрахунків та експериментальних досліджень (рис. 1) показують, що для шестиеліпсоїдної Δ_1 -моделі рухливість електронів змінюється за законом $\mu \sim T^{-2,27}$, для чотирьохеліпсоїдної – $\mu \sim T^{-1,98}$ та двохеліпсоїдної як $\mu \sim T^{-1,53}$.

Температурна залежність рухливості електронів для двохеліпсоїдної Δ_1 -моделі зони провідності кристалів n-Ge відповідає типовому закону розсіяння електронів на акустичних фононах $\mu \sim T^{-1,5}$. Збільшення показника степеня температурної залежності рухливості електронів $\lg \mu = f(\lg T)$ для чотирьохеліпсоїдної та шестиеліпсоїдної Δ_1 -моделі пояснюється наявністю в цих моделях додаткового механізму міждолинного розсіювання. Проведені теоретичні та експериментальні дослідження дозволяють стверджувати, що в Δ_1 -моделі зони провідності n-Ge в температурному інтервалі 100 – 300 К суттєвим стає міждолинне розсіяння.

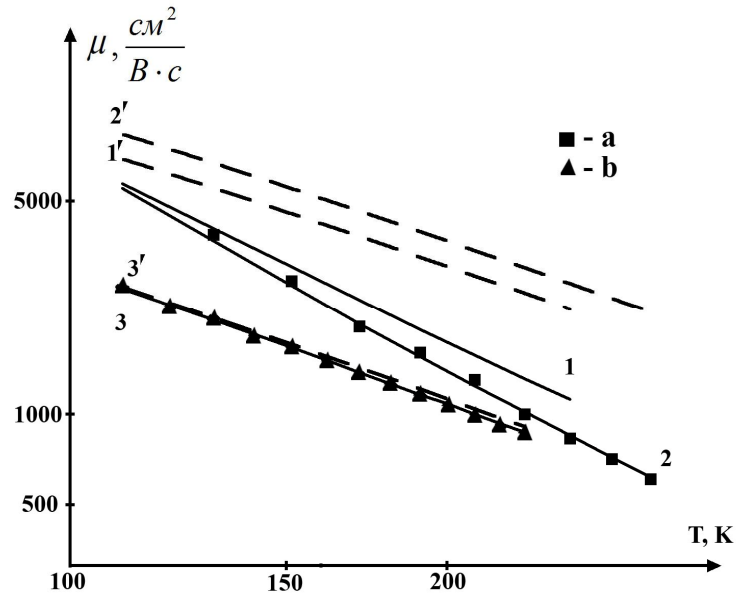


Рис. 1. Температурні залежності рухливості електронів для Δ_1 -мінімуму зони провідності n-Ge: 1 – чотирьохеліпсоїдна Δ_1 -модель; 2 – шестиеліпсоїдна Δ_1 -модель; 3 – двохеліпсоїдна Δ_1 -модель; а – експериментальні результати для концентрації електронів $n = N_D - N_A = 4,72 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ [4]; б – наші експериментальні результати для концентрації електронів $n = N_D = 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$. Суцільні криві – теоретичні розрахунки з врахуванням міждолинного розсіювання, а штрихові – без врахування міждолинного розсіювання.

Лише у випадку Δ_1 -моделі, утвореної одновісним тиском $P \parallel J \parallel [100]$, розсіювання електронів на міждолинних фононах, що відповідають g -переходам, є другорядним у відношенні до розсіювання на акустичних фононах (внутрішньодолинне розсіювання) та іонах домішки. Аналіз температурних залежностей рухливості електронів та параметра анізотропії часів релаксації для чотирьохеліпсоїдної та шестиеліпсоїдної Δ_1 -моделі показує, що на ефективність міждолинного розсіювання також впливає сама структура Δ_1 -зони, тобто число еквівалентних еліпсоїдів.

Поряд із розглянутими вище можливими механізмами розсіювання електронів у L_1 - та Δ_1 -моделях зони провідності монокристалів германія необхідно враховувати те, що за рахунок зменшення енергетичної щілини між L_1 - та Δ_1 - мінімумами при збільшенні одновісного тиску, наприклад, вздовж кристалографічного напрямку $[100]$, зростатиме роль нееквівалентного міждолинного розсіювання. Порівняння одержаних теоретичних залежностей п'єзоопору n-Ge із відповідними експериментальними результатами (рис. 2) показує, що описати його особливості, коли реалізується при одновісному тиску $P \parallel [100]$ (L_1 - Δ_1) модель зони провідності, можна лише з врахуванням даного механізму розсіювання. Причому його вклад буде зростати при збільшенні температури та зменшенні енергетичної щілини між L_1 - та Δ_1 - мінімумами.

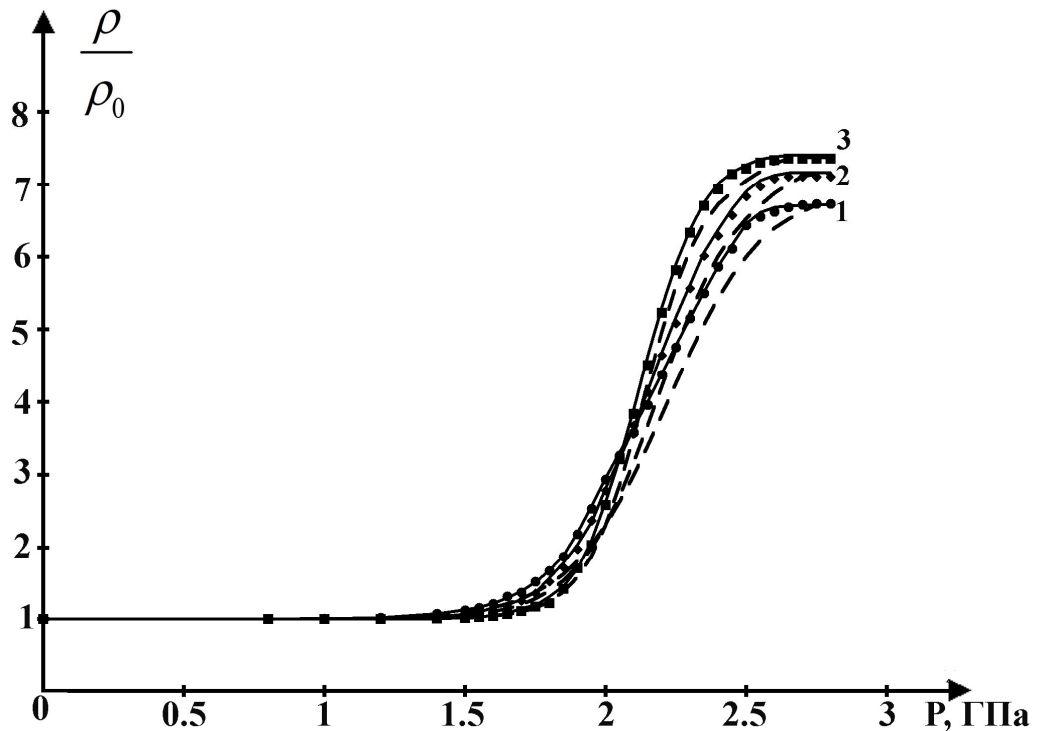


Рис. 2. Залежність п'єзоопору монокристалів n-Ge від одновісного тиску вздовж кристалографічного напрямку $[100]$ для різних температур: 1 – 180 К; 2 – 150 К; 3 – 110 К. Суцільні криві – теоретичні розрахунки з врахуванням нееквівалентного міждолинного розсіювання електронів між L_1 - та Δ_1 -мінімумами, а штрихові – без врахування.

Зменшення величини плато п'єзоопору n-Ge при збільшенні температури пов'язане з “виключенням” за рахунок одновісної деформації механізму розсіювання електронів на міждолинних та оптичних фононах при переході від L_1 - до Δ_1 -моделі зони провідності n-Ge. Виявлений експериментально та теоретично одержаний в області одновісних тисків від 1,5 до 3 ГПа значний п'єзоопір та коефіцієнт тензочутливості для монокристалів n-Ge, величина яких залежать від температури, може знайти своє практичне використання для конструювання датчиків високого одновісного тиску.

ВИСНОВКИ

Проведені експериментальні дослідження та теоретичні розрахунки дозволили сформулювати наступні висновки:

1. На основі теорії анізотропного розсіяння та вимірювань тензорезистивного ефекту для одновісно деформованих вздовж кристалографічного напрямку [100] монокристалів n-Ge при температурах рідкого гелію та азоту визначено компоненти тензорів деформаційного потенціалу та ефективної маси для Δ_1 - мінімуму зони провідності: $\Xi_d^{\Delta_1} = -1,29 \text{ eV}$, $\Xi_u^{\Delta_1} = 11,82 \text{ eV}$, $m_{\parallel} = 1,65m_0$, $m_{\perp} = 0,32m_0$. Їх визначення дало можливість розрахувати баричні коефіцієнти для Δ_1 -мінімуму при одновісному тиску вздовж кристалографічних напрямків [100], [110], [111] та гідростатичному тиску. З обчислених значень цих коефіцієнтів слідує, що інверсію типу (L_1 - Δ_1) абсолютного мінімуму в монокристалах n-Ge можна реалізувати при гідростатичному та одновісних тисках вздовж кристалографічних напрямків [100] і [110].
2. Встановлено, що довжина екранування для однієї і тієї ж концентрації екрануючих носіїв заряду є різною для L_1 - та Δ_1 мінімумів, що пов'язується з різним значенням ефективної маси густини станів для електронів цих мінімумів. Різні залежності екрануючого множника від концентрації домішки для L_1 - та Δ_1 - мінімумів вказують на різний характер екранування і відповідно розсіяння електронів.
3. Вперше, на основі варіаційного методу Рітца, розраховано енергію іонізації основного стану донорів Sb, P, As для Δ_1 -моделі зони провідності монокристалів n-Ge із врахуванням анізотропії закону дисперсії та хімічного зсуву. Виявлено, що при переході від L_1 - до Δ_1 -моделі зони провідності монокристалів n-Ge енергія іонізації основного стану домішок Sb, P, As суттєво збільшується. Порівняння одержаних теоретичних результатів із відповідними експериментальними даними показують, що модель кулонівського потенціалу домішки може бути використана в грубому наближенні лише для Sb в Ge, без врахування хімічного зсуву. Для домішок P та As розрахунки необхідно вже проводити з врахуванням хімічного зсуву, тобто, коли проявляється "індивідуальність" потенціалу поля іона домішки, який не є кулонівським.
4. Встановлено, для чотирьохдолинної L_1 -моделі зони провідності n-Ge залежність питомого опору від температури $\rho(T)$ змінюється за законом: $\rho \sim T^{1,66}$, а для двох- та одно долинної, утворених одновісним тиском $P=1,8 \text{ ГПа}$ вздовж кристалографічних напрямків [110] та [111] відповідно, - як $\rho \sim T^{1,5}$. Відмінність в залежностях $\rho(T)$ в n-Ge віднесена до прояву додаткових механізмів розсіяння електронів на оптичних та міждолинних фононах у чотирьохдолинній L_1 -моделі та відсутністю даних механізмів розсіяння в двох- та однодолинної L_1 -моделі зони провідності германія. Знайденні значення констант електрон-фононної взаємодії для оптичних: $\Xi_{430} = 4 \cdot 10^8 \text{ eV/cm}$ та міждолинних: $\Xi_{320} = 1,4 \cdot 10^8 \text{ eV/cm}$ фононів дозволили теоретично описати та пояснити одержані експериментальні залежності питомого опору для одновісно деформованих монокристалів n-Ge.

5. Показано, що величина рухливості електронів у зоні провідності германія, утвореної сильним гідростатичним та одновісним тисками, для L_1 - та Δ_1 -мінімумів, залежить не лише від ефективної маси та часу релаксації електронів, але й від параметра анізотропії ефективних мас. Із аналізу одержаних температурних залежностей рухливості електронів та параметра анізотропії часів релаксації слідує, що для Δ_1 -моделі зони провідності n-Ge в температурному інтервалі 100–300 К необхідно враховувати міждолинне розсіяння. Тільки для Δ_1 -моделі, утвореної одновісним тиском вздовж кристалографічного напрямку [100], розсіяння електронів на міждолинних фононах, які відповідають g-переходам, є другорядним у відношенні до розсіяння на акустичних фононах та іонах домішки.
6. Виявлено, що крім відомих механізмів, при різних температурах на тензорезистивний ефект в монокристалах n-Ge при одновісних тисках $1,6 < P < 2,7$ ГПа вздовж кристалографічного напрямку [100], впливатиме додатково нееквівалентне міждолинне розсіяння електронів між L_1 - та Δ_1 -мінімумами зони провідності, ефективність якого залежатиме від температури та одновісного тиску. Зменшення величини плато тензорезистивного ефекту n-Ge при одновісних тисках $P > 2,7$ ГПа пояснюється “виключенням” за рахунок інверсії типу $(L_1-\Delta_1)$ абсолютного мінімуму механізму розсіяння електронів на міждолинних та оптичних фононах.

СПИСОК ЦИТОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Фистуль В. И. Сильно легированные полупроводники / В. И. Фистуль. – М: Наука, 1967. – 416 с.
2. Breakdown of Impurity States of As and Sb in Germanium at Uniaxial Compression $P \parallel [001] \parallel E$ / V. V. Baidakov, V. N. Ermakov, N. N. Grigorev et.al. // Phys. stat. sol.(b). – 1984. – Vol. 122. – P. K163–K167.
3. Горин А. Е. Междолинное перераспределение электронов при ударной ионизации мелких доноров в одноосно деформированном Ge / А. Е. Горин, В. Н. Ермаков, В. В. Коломоец // ФТП. – 1995. – Т. 29. – №4. – С. 1147–1151.
4. Ahmad C. N. Electron transport and pressure coefficients associated with the L_{1c} and Δ_{1c} minima of germanium / C. N. Ahmad, A. R. Adams // Phys. Rev. – 1986. – Vol. №4. – P. 2319–2328.

СПИСОК ДРУКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Бурбан О. В. Анізотропія часів релаксації для Δ_1 -мінімуму зони провідності кристалів n-Ge/ О. В. Бурбан // Науковий вісник Волинського національного університету імені Лесі українки. – Фізичні науки. – 2012. – №16. – С. 25–28.
2. Вплив інверсії $(L_1-\Delta_1)$ типу абсолютного мінімуму n-Ge на ефект екранування / С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, Л. І. Панасюк О. В. Бурбан // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. – 2012. – Т. 3. – №2. – С. 69–74.
3. Луньов С.В. Параметри високоенергетичного Δ_1 -мінімуму зони провідності n-Ge / С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, О. В. Бурбан // Журнал фізичних досліджень. – 2013. – Т. 17. – №3 – С. 3702.

4. Луньов С. В. Константи електрон-фононої взаємодії для оптичних та міждолинних фононів в n-Ge / С. В. Луньов, О. В. Бурбан // Журнал нано- та електронної фізики. – 2014. – Т. 6. – №1. – С. 01020.
5. Luniov S. V. Calculation of the Electron Mobility for the Δ_1 Model of the Conduction Band of Germanium Single Crystals / S. V. Luniov, P. F. Nazarchuk, O. V. Burban // Semiconductors. – 2014. – Vol. 48. – №4. – P. 438–441.
6. Luniov S. V. Deformation potentials for Δ_1 minimum of conduction band of single crystals n-Ge / S. V. Luniov, O. V. Burban, P. F. Nazarchuk. // Journal of Advances in Physics. – 2014. – Vol. 5, №1. – P. 705–711.
7. Луньов С. В. Розрахунок енергії іонізації основного стану мілких донорів в Δ_1 – моделі зони провідності монокристалів n-Ge / С. В. Луньов, О. В. Бурбан, П. Ф. Назарчук // Український фізичний журнал. – 2015. – Т. 60. – №10. – С. 1022–1026.
8. Методика вимірювання електричних властивостей монокристалів n-Ge при високих одновісних тисках / С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, О. В. Бурбан, В. А. Лопухович // Вісник ТНТУ. – 2014. – №3. – С. 172.
9. Luniov S. V. Electron scattering in the Δ_1 model of the conduction band of germanium crystals / S. V. Luniov, O. V. Burban, P. F. Nazarchuk // Semiconductors. – 2015. – Vol. 49. – №5. – P. 574–578.
10. Influence of electron-phonon interaction on piezoresistance of single crystals n-Ge / S. V. Luniov, O. V. Burban, P. F. Nazarchuk, A. I. Zimych // Journal of Advances in Physics. – 2015. – Vol. 7. – №3. – P. 1931–1938.
11. Бурбан О. В. Вплив температури на тензочутливість сильнодеформованих монокристалів n-Ge/ О. В. Бурбан // Сенсорна електроніка і мікросистемні технології. – 2015. – Т. 12. – №2. – С. 64–70.
12. Бурбан О. В. Вплив деформаційної перебудови зонної структури кристалів n-Ge на ефект екранування / О. В. Бурбан, С. В. Луньов // Тези доповідей конференції молодих вчених з фізики напівпровідників “Лашкарівські читання”. Київ, 3–5 квітня 2012 р. – Київ, 2012. – С. 151–152.
13. Бурбан О. В. Анізотропія розсіяння носіїв заряду для L_1 - та Δ_1 -мінімумів зони провідності кристалів германія / О. В. Бурбан, С. В. Луньов // Збірник тез доповідей Міжнародної наукової конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “Еврика – 2012”. – Львів, 19-22 квітня. – Львів, 2012. – С. 44.
14. Луньов С. В. Деформаційні потенціали Δ_1 -мінімуму зони провідності кристалів n-Ge / С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, О. В. Бурбан // Матеріали VI Міжнародної наукової конференції “Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали РНАОПМ’2012”. Луцьк-Шацькі озера, 25–29 травня 2012 р. – Луцьк: Смарагд. – 2012. – С. 42–45.
15. Luniov S. V. Parameters of high – energy Δ_1 -minimum conduction band of n-Ge / S. V. Luniov, P. F. Nazarchuk, O. V. Burban // Proceeding of the “XVIIIth International Seminar on Physics and Chemistry of Solids”. – Lviv, September 12–15. – 2012. – P. 12.
16. Луньов С. В. Вплив інверсії (L_1 - Δ_1)-типу абсолютного мінімуму на тензочутливість кристалів германія / С. В. Луньов, О. В. Бурбан, П. Ф. Назарчук //

Матеріали Всеукраїнської наукової конференції “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики АПТЕПФ – 2012”.– Тернопіль, 20–22 вересня 2012. – Тернопіль, 2012. – С. 106 – 107.

17. Рухливість носіїв заряду в Δ_1 - моделі зони провідності кристалів n-Ge / С. В. Луньов, О. В. Бурбан, П. Ф. Назарчук, Л. І. Панасюк // Матеріали I Міжнародної науково-практичної конференції “Актуальні проблеми прикладної фізики АППФ”. – Севастополь, 24 – 28 вересня 2012. – Севастополь, 2012. – С. 114–115.

18. Анізотропія часів релаксації для Δ_1 -мінімуму зони провідності кристалів германія / О. В. Бурбан, С. В. Луньов, В. А. Лопухович, О. В. Лисик // Матеріали II Всеукраїнської науково-практичної конференції “Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення і перспективи”. – Луцьк, 19 – 20 жовтня 2012. – Луцьк: РВВ ЛНТУ, 2012. – С. 210–213.

19. Бурбан О. В. Датчики для вимірювання високих тисків на основі германія / О. В. Бурбан // Збірник тез доповідей Міжнародної наукової конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “Еврика – 2013”, Львів, 15–17 травня 2013 р. – Львівський національний університет імені Івана Франка, 2013. – С. А3.

20. Бурбан О. В. Розсіяння носіїв заряду в умовах інверсії типу L_1 - Δ_1 абсолютного мінімуму кристалів n-Ge / О. В. Бурбан, С. В. Луньов, Л. А. Косинець // Збірник тез доповідей конференції молодих вчених з фізики напівпровідників “Лашкарівські читання”. Київ, 2 – 4 квітня 2013. – Київ, 2013. – С. 149–150.

21. Бурбан О. В. Вплив ефекту екранування на п’єзоопір монокристалів n-Ge / О. В. Бурбан, С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук // Тези доповідей VI Української конференції з фізики напівпровідників УНКФН–6 (з міжнародною участю). – Чернівці: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, 2013. – С. 255–256.

22. Міждолинне розсіяння електронів в Δ_1 -моделі зони провідності монокристалів n-Ge / О. В. Бурбан, С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, Л. А. Косинець // Тези доповідей VI Української конференції з фізики напівпровідників “УНКФН–6” (з міжнародною участю). – Чернівці, 2013. – С. 257–258.

23. Особливості електрон-фононої взаємодії в n-Ge / С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, О. В. Бурбан, Ю. А. Герасимюк // Матеріали VII Міжнародної наукової конференції “Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали РНАОПМ’2014”. Луцьк – Шацькі озера, 8–12 червня 2014. – Луцьк: РВВ “Вежа” Східноєвропейського нац. ун-ту ім. Лесі Українки, 2014. – С. 178–182.

24. Луньов С. В. Розрахунок оптимальних геометричних параметрів та форми зразків для вимірювання тензорезистивних ефектів в монокристалів n-Ge при високих одновісних тисках / С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, О. В. Бурбан // Матеріали VII Міжнародної наукової конференції “Релаксаційні, нелінійні й акустооптичні процеси та матеріали РНАОПМ’2014”. Луцьк, 8–12 червня 2014. – Луцьк: РВВ “Вежа” Східноєвропейського національного університету ім. Лесі Українки, 2014. – С. 182–186.

25. Бурбан О. В. Особливості електрон-фононої взаємодії для одновісно-деформованих монокристалів n-Ge / О. В. Бурбан, С. В. Луньов // Збірник тез доповідей конференції молодих вчених з фізики напівпровідників “Лашкарівські читання”. Київ, 2–4 квітня 2014. – Київ, 2014 р. – С. 119–121.
26. Луньов С. В. Визначення параметрів високоенергетичного Δ_1 -мінімуму зони провідності n-Ge / С. В. Луньов, П. Ф. Назарчук, О. В. Бурбан // Всеукраїнський семінар з теоретичної та математичної фізики до 85 річчя професора Анатолія Вадимовича Свідзинського, Луцьк, 27 лютого – 1 березня 2014. – Луцьк: “Вежа-друк” Східноєвропейського національного університету ім. Лесі Українки, 2014. – С. 13–17.
27. Луньов С. В. Вплив концентрації легуючої домішки на вимірювання електричних параметрів напівпровідників / С. В. Луньов, О. В. Бурбан // Збірник тез доповідей Міжнародної наукової конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики “Еврика – 2014”, Львів, 15–17 травня 2014 р. – Львівський національний університет імені Івана Франка, 2014. – С. 99.
28. Effect of phonon scattering of electrons by piezoresistance of single-crystals n-Ge / S. V. Luniov, O. V. Burban, P. F. Nazarchuk, A. V. Zimych // Proceeding of the XI International Scientific Conference “Electronics and Applied Physics”. – Kyiv, October 21–24 2014. – Kyiv, 2014. – P. 84–85.
29. Энергия ионизации мелких доноров в Δ_1 -модели монокристаллов германия / С. В. Лунёв, А. В. Бурбан, А. И. Зимич, П. Ф. Назарчук // Квантовая электроника: материалы X Междунар. науч.-техн. конф. Минск, 9–13 ноября 2015 г. – Минск: Изд. центр БГУ, 2015. – С. 34–35.

АНОТАЦІЯ

Бурбан О.В. Деформаційні ефекти в $(L_1-\Delta_1)$ -моделі зони провідності кристалів германія. Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків. Ужгородський національний університет, Ужгород, 2016.

Дисертація присвячена вивченню впливу радикальної перебудови зонної структури кристалів n-Ge при дії значних одновісних тисків на механізми тензоефектів та розсіяння носіїв заряду. На основі теорії анізотропного розсіяння та експериментальних даних поздовжнього тензорезистивного ефекту кристалів n-Ge знайдено константи деформаційного потенціалу, ефективну масу густини станів та компоненти тензора ефективної маси для Δ_1 -мінімуму. З врахуванням хімічного зсуву обчислено енергію іонізації основного стану мілких донорів Sb, P, As, зв'язаних із Δ_1 -долинами зони провідності германія. Показано, що характер екранування домішкових іонів електронами зазнає змін у результаті інверсії типу $(L_1-\Delta_1)$ абсолютного мінімуму в n-Ge. Встановлено, що для чотирьох та шестиеліпсоїдної Δ_1 -моделі суттєвим стає міждолинне розсіяння. Показано, що величина п'єзоопору n-Ge при одновісному тиску $P//[100]$, коли реалізується L_1 - Δ_1 -модель зони провідності, залежить від відносного вкладу нееквівалентного міждолинного розсіяння електронів між L_1 - та Δ_1 -мінімумами.

Ключові слова: тензорезистивний ефект, константи деформаційного потенціалу, міждолинне розсіяння, ефект екранування, хімічний зсув.

АННОТАЦИЯ

Бурбан А.В. Деформационные эффекты в $(L_1-\Delta_1)$ -модели зоны проводимости кристаллов германия. Рукопись.

Диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников и диэлектриков. Ужгородский национальный университет, Ужгород, 2016.

Диссертация посвящена изучению влияния радикальной перестройки зонной структуры кристаллов n-Ge при действии значительных одноосных давлений на механизмы тензоэффектов и рассеяния носителей заряда. На основе теории анизотропного рассеяния и экспериментальных данных продольного тензорезистивного эффекта кристаллов n-Ge найдены константы деформационного потенциала, эффективную массу плотности состояний и компоненты тензора эффективной массы для Δ_1 -минимума. С учетом химического сдвига вычислено энергию ионизации основного состояния мелких доноров Sb, P, As, связанных с Δ_1 -долинами зоны проводимости германия. Показано, что характер экранирования примесных ионов электронами изменится в результате инверсии типа $(L_1-\Delta_1)$ абсолютного минимума в n-Ge. Установлено, что для четырех- и шестиэллипсоидной Δ_1 -модели существенным становится междолинное рассеяния. Показано, что величина пьезосопротивления n-Ge при одноосном давлении $P \parallel [100]$, когда реализуется $L_1-\Delta_1$ -модель зоны проводимости, зависит от относительного вклада неэквивалентного междолинного рассеяния электронов между L_1 - и Δ_1 -минимумами.

Ключевые слова: тензорезистивный эффект, константы деформационного потенциала, междолинное рассеяния, эффект экранирования, химический сдвиг.

SUMMARY

Burban O.V. Deformation effects in $(L_1-\Delta_1)$ -model of conduction band of germanium crystals. Manuscript.

Thesis for a candidate degree in Physics and Mathematics by speciality 01.04.10 – Physics of semiconductors and dielectrics. Uzhgorod National University, Uzhgorod, 2016.

This dissertation deals with the study of influence of a radical restructuring of the band structure of crystals n-Ge under significant uniaxial pressure on the mechanisms of tensoeffects and scattering of charge carriers. Constants of deformation potential, effective mass for density of states and tensor components of effective mass for Δ_1 -minimum were revealed on the basis of the theory of anisotropic scattering and experimental data of longitudinal tensor resistive effect of n-Ge crystals. The refined values of constants of the electron-phonon interaction for optical and intervalley phonons in L_1 -model of the conduction band of germanium are obtained.

The influence of (L_1 - Δ_1) absolute minimum type of inversion on screening effect is investigated. The results of the investigation showed that screening radius for the same concentration of screening carriers is different for different type minima. Such results are explained by different values of the effective mass of the electron density of states for L_1 - and Δ_1 -minima. Various dependences of screening factor on the concentration of impurities for L_1 - and Δ_1 -minima point to a different character effect of screening and electron scattering.

The energy of ionization for the ground state of petty donors Sb, P, As for Δ_1 - model of the conduction band of single crystals n-Ge is calculated on the basis of variation method of Ritz. The calculation was carried out taking into account anisotropy dispersion law and chemical shift. Comparison of the obtained theoretical results with the corresponding experimental data show that the model of Coulomb potential of impurity can be used in a rough approximation only for the impurity Sb in Ge. The given model can be applied without chemical shift.

Temperature dependences of resistivity for undeformed and deformed under uniaxial pressure $P=1,8$ GPa along the crystallographic directions $[110]$ and $[111]$ crystals n-Ge are obtained. The results of the investigation showed that the resistivity for four-valley L_1 -model is changed according to the law $\rho \sim T^{1,66}$. The resistivity for two- and single-valley is changed as $\rho \sim T^{1,5}$. Such a difference in the temperature dependences of resistivity n-Ge for the given models is explained due to the additional mechanism of electron scattering on optical and intervalley phonons in four-valley L_1 - model and lack of the given mechanism of scattering in two- and single-valley L_1 -model of the conduction band.

The scattering of electrons in a Δ_1 -model of the conduction band of germanium crystals formed by uniaxial or hydrostatic pressure is investigated. Comparison of the obtained concentration dependences of electron mobility for L_1 and Δ_1 -minima indicates that the value of electron mobility depends not only on the effective mass and relaxation time of electrons for the data minima, but also on the anisotropy parameter of the effective masses. Analysis of the temperature dependences of the electron mobility and the anisotropy parameter of relaxation time shows that the intervalley scattering should be taken into account in temperature range 100-300 K for Δ_1 model of the n-Ge conduction band. The scattering of electrons on intervalley phonons (which correspond to g-transitions) is minor relatively to scattering on the acoustic phonons (intravalley scattering) and ions of impurity. Such scattering is possible only for Δ_1 -model formed by uniaxial pressure along the crystallographic direction $[100]$.

Tensoresistive effect for uniaxially deformed along the crystallographic direction $[100]$ single crystals n-Ge under different fixed temperatures has been investigated. The results of theoretical calculations show that tensorresistive effect for n-Ge under uniaxial pressures $1,6 < P < 2,7$ GPa depends on the effectiveness of nonequivalent intervalley

scattering of electrons between L_1 - and Δ_1 -minima of the conduction band. Reduction of the plateau magnitude of tensorial resistive effect in n-Ge under uniaxial pressures $P > 2.7$ GPa is explained by the "exception" due to implementation for the inversion of (L_1 - Δ_1) type of absolute minimum for mechanism of electrons scattering on intervalley and optical phonons.

The defined parameters for L_1 - and Δ_1 -minima can be used for the description and simulation of various kinetic and optical effects in n-Ge and nanostructures with component Ge under extreme conditions of action for considerably deformational, electrical, magnetic, optical fields.

Keywords: tensorial resistive effects, constants of deformation potential, intervalley scattering, screening effect, chemical shift.

Підписано до друку 25.03.2016. Формат 60×84 1/16
Ум. друк. арк. 0,9. Зам № 51. Тираж 100.
Папір офсетний. Гарнітура Times. Друк офсетний.
Друк ПП Іванюк В. П. 43021, м. Луцьк, вул. Винниченка, 65.
Свідоцтво Держкомінформу України
ВЛн №31 від 04.02.2004 р.