

PACS: 72.20.Fr, 74.62.Fj, 61.05.-a

С.В. Луньов

## ЕФЕКТИВНА МАСА ГУСТИНИ СТАНІВ ЕЛЕКТРОНІВ $\Delta_1$ -МІНІМУМУ ЗОНИ ПРОВІДНОСТІ КРИСТАЛІВ ГЕРМАНІЮ

Луцький національний технічний університет  
вул. Львівська, 75, м. Луцьк, 43018, Україна

Стаття надійшла до редакції 1 квітня 2013 року

*На основі теорії деформаційного потенціалу й експериментальних даних поздовжнього п'єзоопору в кристалографічному напрямку  $[100]$  сильнолегованих монокристалів германію в області виключно іонного розсіювання ( $T = 4.2$  K) з урахуванням ділянки сильних одновісних тисків  $X > 1.6$  GPa (коли вклад у зміну питомого опору монокристалів n-Ge дають як  $L_1$ -, так і  $\Delta_1$ -мінімуми зони провідності) було знайдено ефективну масу густини станів  $m_{\Delta_1} = 0.88m_0$  для  $\Delta_1$ -мінімуму.*

**Ключові слова:** п'єзоопір, теорія деформаційного потенціалу, ефективна маса густини станів

*На основе теории деформационного потенциала и экспериментальных данных продольного пьезосопротивления в кристаллографическом направлении  $[100]$  сильнолегированных монокристаллов германия в области исключительно ионного рассеяния ( $T = 4.2$  K) с учетом участка сильных одноосных давлений  $X > 1.6$  GPa (когда вклад в изменение удельного сопротивления монокристаллов n-Ge дают как  $L_1$ -, так и  $\Delta_1$ -минимумы зоны проводимости) найдена эффективная масса плотности состояний  $m_{\Delta_1} = 0.88m_0$  для  $\Delta_1$ -минимума.*

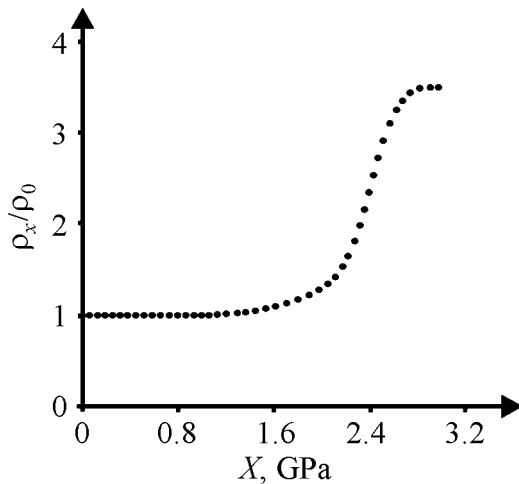
**Ключевые слова:** пьезосопротивление, теория деформационного потенциала, эффективная масса плотности состояний

Сучасний науково-технічний прогрес автоматики й електронної техніки стимулює розвиток технологій отримання як нових матеріалів, так і вдосконалення й подальшого вивчення необхідних властивостей тих, які використовуються. Такий напівпровідниковий матеріал, як германій, у багатьох випадках є перспективним матеріалом для створення різних електронних приладів і сенсорів. В екстремальних умовах дії значних зовнішніх електричних, деформаційних, оптичних і температурних полів участь у різних кінетичних та оптичних ефектах можуть брати не лише мінімуми зони провідності кристалів германію із симетрією  $L_1$ , а також високоенергетичні

мінімуми  $\Gamma_2$ ,  $\Delta_1$  та  $\Gamma_{15}$  [1–3]. Наприклад, розрахунки, які виконано в роботі [1] на основі методу Монте-Карло, показують, що заселеність електронами  $\Delta_1$ -мінімумів зони провідності германію може відбуватися при електричних полях напруженістю  $E > 3\text{--}4 \text{ kV/cm}$ . Уперше радикальну перебудову зонного спектру  $n$ -Ge за рахунок інверсії типу  $L_1\text{--}\Delta_1$  абсолютного мінімуму зони провідності при дії сильних одноосісних пружних деформацій було досягнуто в [2]. Як наслідок, спостерігався деформаційно-індукований фазовий перехід метал–діелектрик.

У роботі [3] виявлено різке зростання інтенсивності екситонного поглинання в кристалах германію при високих гідростатичних тисках, коли зона провідності стає  $\Delta_1$ -типу. Нанотехнології напруженого германію знайшли широке практичне використання в NMOSFET та CMOS електронних приладах [4–6]. Зокрема, в роботі [4] показано, що в наноструктурах з компонентою  $n$ -Ge розмірами до 20 nm за рахунок значних внутрішніх напруг відбувається перебудова зонної структури кристала. Внаслідок цього виникає гігантське збільшення рухливості порівняно з недеформованими кристалами  $n$ -Ge та  $n$ -Si, яке має широке практичне використання в CMOS-приладах. Дані внутрішні напруження можуть бути за величиною такими, що відбувається радикальна перебудова зонної структури кристалів германію, яка має багатодолінний характер [7]. При цьому необхідно вже враховувати вклад у різні кінетичні й оптичні ефекти високоенергетичних мінімумів зони провідності германію. Однією з основних проблем при наданні необхідних електрофізичних властивостей таким наноструктурам є якраз врахування впливу деформацій на їхні кількісні характеристики. Тому при конструюванні та моделюванні різних елементів мікро- та наноелектроніки, в яких використовується германій, потрібно враховувати досить важливий вплив деформації. Для кількісного ж трактування фізичних властивостей матеріалу необхідно мати параметри активних енергетичних мінімумів зони провідності.

На даний час відомі поодинокі роботи щодо значень компонент тензора ефективної маси, параметра анізотропії ефективних мас і комбінації констант деформаційного потенціалу для  $\Delta_1$ -мінімумів у  $n$ -Ge [8–10]. Спільним для цих робіт є те, що вищевказані параметри визначалися з урахуванням результатів досліджень інших авторів, що може вносити додаткові похибки. У роботі [11] за вимірами ефекту поздовжнього  $p$ 'єзоопору в кристалографічному напрямку [100] для легованих сурмою до рівня  $n = 2.0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  монокристалів германію в області виключно іонного розсіювання носіїв заряду ( $T = 4.2 \text{ K}$ ) (рисунок) нами було знайдено комбінацію констант деформаційного потенціалу для  $\Delta_1$ -мінімуму:  $0.35\Xi_d^{\Delta_1} + 0.77\Xi_u^{\Delta_1} = (8.65 \pm 0.05) \text{ eV}$ . Дану комбінацію було отримано з урахуванням того, що для області початкового росту питомого опору кристала з тиском в  $L_1$ -мінімумах електронний газ є виродженим, а в  $\Delta_1$ -мінімумах – невиродженим.



**Рис. 1.** Залежність поздовжнього п'єзоопору  $n$ -Ge <Sb> від величини одновісного тиску вздовж кристалографічного напрямку [100] при  $T = 4.2$  К.

Для області насичення ситуація змінюється на протилежну. Саме ж плато залежності  $\rho_x / \rho_0 = f(X)$  означає повну відсутність електронів у  $L_1$ -мінімумах. З урахуванням знайденої комбінації констант деформаційного потенціалу та значення баричного коефіцієнта для гідростатичного тиску кристалів  $n$ -Ge [12] нами було обчислено константи деформаційного потенціалу  $\Xi_d^{\Delta_1} = -1.7$  eV та  $\Xi_u^{\Delta_1} = 12$  eV [13]. Ще одним з важливих параметрів зонної структури, який використовується для опису різних кінетичних ефектів у напівпровідниках, поряд з константами деформаційного потенціалу, є ефективна маса густини станів.

При деформації  $n$ -Ge уздовж кристалографічного напрямку [100] чотири  $L_1$ -долини будуть зміщуватись уверх, а дві  $\Delta_1$ -долини – униз за шкалою енергій [8]. Тоді питому електропровідність деформованого зразка можна представити у вигляді:

$$\sigma = e(n_{L_1}\mu_{L_1} + n_{\Delta_1}\mu_{\Delta_1}). \quad (1)$$

Тут індексами  $L_1$  та  $\Delta_1$  позначено параметри відповідних енергетичних мінімумів. Крім того, для будь-якої точки кривої п'єзоопору (рисунок)

$$n_{L_1} + n_{\Delta_1} = n_e = 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3} = \text{const}. \quad (2)$$

Враховуючи вирази (1) і (2), легко знайти концентрацію електронів в  $L_1$ - та  $\Delta_1$ -мінімумах:

$$n_{L_1} = \frac{\sigma - n_e \mu_{\Delta_1} e}{e(\mu_{L_1} - \mu_{\Delta_1})}, \quad n_{\Delta_1} = \frac{n_e \mu_{L_1} e - \sigma}{e(\mu_{L_1} - \mu_{\Delta_1})}. \quad (3)$$

З іншої сторони, концентрацію електронів у цих мінімумах можна записати так [14]:

$$n_{L_1, \Delta_1} = 4\pi \left( \frac{2m_{L_1, \Delta_1}}{h^2} \right)^{3/2} \int_{E_{L_1, \Delta_1}}^{\infty} \frac{(E - E_{L_1, \Delta_1})^{1/2} dE}{\exp\left(\frac{E - F}{kT}\right) + 1}, \quad (4)$$

де  $m_{L_1, \Delta_1}$  – ефективна маса густини станів для  $L_1$ - або  $\Delta_1$ -мінімумів;  $F$ ,  $E_{L_1, \Delta_1}$  – енергії Фермі та відповідних мінімумів у деформованому кристалі відносно нульового рівня, яким є енергетичне положення дна зони провідності недеформованого кристала.

Згідно з теорією деформаційного потенціалу [15] зміщення  $L_1$ - та  $\Delta_1$ -мінімумів є лінійними функціями тиску:

$$E_{\Delta_1} = E_{\Delta_1}^0 - \alpha X, \quad \Delta E_{L_1} = E_{L_1}^0 - \beta X, \quad (5)$$

де  $\alpha = \left( \Xi_d^{\Delta_1} + \frac{1}{3} \Xi_u^{\Delta_1} \right) (S_{11} - S_{12}) + \frac{2}{3} \Xi_u^{\Delta_1} (S_{11} - S_{12})$ ,  $\beta = \left( \Xi_d^{L_1} + \frac{1}{3} \Xi_u^{L_1} \right) (S_{11} - S_{12})$ ;

$E_{L_1}^0 = 0$ ,  $E_{\Delta_1}^0 = 0.18$  eV – енергетичні положення  $L_1$ - та  $\Delta_1$ -мінімумів у недеформованому кристалі.

Враховуючи значення констант жорсткості  $S_{11} = 0.769 \cdot 10^{-11}$  Pa<sup>-1</sup>,  $S_{12} = -0.21 \cdot 10^{-11}$  Pa<sup>-1</sup> для кристалів германію та надійно встановлені параметри  $L_1$ -мінімуму ( $m_{L_1} = 0.55m_0$ ,  $\Xi_u^{\Delta_1} = 16.4$  eV,  $\Xi_d^{\Delta_1} = -6.4$  eV) [16], можна отримати на основі виразів (3), (4) рівняння для знаходження положення рівня Фермі  $F(X)$  у деформованому кристалі:

$$4\pi \left( \frac{2m_{L_1}}{h^2} \right)^{3/2} \int_{E_{L_1}}^{\infty} \frac{(E - E_{L_1})^{1/2} dE}{\exp\left(\frac{E - F}{kT}\right) + 1} = \frac{\sigma - n_e \mu_{\Delta_1} e}{e(\mu_{L_1} - \mu_{\Delta_1})}. \quad (6)$$

Величини  $\mu_{L_1} = 780$  cm<sup>2</sup>/(V·s) і  $\mu_{\Delta_1} = 220$  cm<sup>2</sup>/(V·s) легко знаходяться за відомими значеннями концентрації домішки та провідності недеформованого й сильнодеформованого кристала (плато експериментальної залежності на рисунку).

Записавши вирази (3)–(5) для концентрації електронів в  $\Delta_1$ -мінімумі при довільних значеннях одновісного тиску  $X_1$ - та  $X_2$ -ділянки росту експериментальної залежності  $\rho_X/\rho_0 = f(X)$  ( $1.6 < X < 2.8$  GPa) (рисунок), отримаємо систему рівнянь відносно невідомих значень ефективної маси густини станів  $m_{\Delta_1}$  і сталої  $\alpha$ :

$$\begin{cases} 4\pi \left( \frac{2m_{\Delta_1}}{h^2} \right)^{3/2} \int_{E_{\Delta_1}(X_1)}^{\infty} \frac{(E - E_{\Delta_1}(X_1))^{1/2} dE}{\exp\left(\frac{E - F(X_1)}{kT}\right) + 1} = \frac{n_e \mu_{L_1} e - \sigma(X_1)}{e(\mu_{L_1} - \mu_{\Delta_1})}, \\ 4\pi \left( \frac{2m_{\Delta_1}}{h^2} \right)^{3/2} \int_{E_{\Delta_1}(X_2)}^{\infty} \frac{(E - E_{\Delta_1}(X_2))^{1/2} dE}{\exp\left(\frac{E - F(X_2)}{kT}\right) + 1} = \frac{n_e \mu_{L_1} e - \sigma(X_2)}{e(\mu_{L_1} - \mu_{\Delta_1})}. \end{cases} \quad (7)$$

Розрахунки проводили для одновісних тисків  $X_1 = 2$  GPa та  $X_2 = 2.4$  GPa. Знайшовши з рівняння (6) положення рівня Фермі  $F(X_1)$  та  $F(X_2)$  для вказаних одновісних тисків, отримали такі розв'язки системи рівнянь (7):  $m_{\Delta_1} = 0.88m_0$  та  $\alpha = 8.65 \cdot 10^{-11}$  eV/Pa ( $m_0$  – маса вільного електрона).

Слід також відмітити, що числове значення сталої  $\alpha$ , яке визначає баричний коефіцієнт при одновісному тиску вздовж кристалографічного напрямку [100], для  $\Delta_1$ -мінімуму добре узгоджується з його обчисленим значенням за даними констант деформаційного потенціалу  $\Xi_d^{\Delta_1} = -1.7$  eV та  $\Xi_u^{\Delta_1} = 12$  eV роботи [13].

Таким чином, використовуючи теорію деформаційного потенціалу та лише дані експерименту з визначення величини поздовжнього п'єзоопору на ділянці одновісних тисків, коли вклад у зміну питомого опору монокристалів *n*-Ge дають як  $L_1$ -, так і  $\Delta_1$ -мінімуми зони провідності, можна достатньо надійно визначити ефективну масу густини станів і баричний коефіцієнт при одновісному тиску вздовж кристалографічного напрямку [100] для  $\Delta_1$ -мінімуму.

1. C. Jacoboni, F. Nava, C. Canali, and G. Ottaviani, Phys. Rev. **B24**, 1014 (1981).
2. П.И. Баранский, В.Н. Ермаков, В.В. Колomoец, П.Ф. Назарчук, Тезисы докладов XI Международной конференции МАРИВД, Киев (1987), с. 127.
3. G.H. Li, A.R. Goñi, K. Syassen, and M. Cardona, Phys. Rev. **B49**, 8017 (1994).
4. F. Murphy-Armando and S. Fahy, J. Appl. Phys. **109**, 113703 (2011).
5. Benjamin Lemkea, Rajashree Baskaranb, Oliver Paula, Sensors and Actuators A: Physical **176**, 10 (2012).
6. M. Kobayashi, T. Irisawa, B. Magyari-Köpe, K. Saraswat, H.S.P. Wong, and Y. Nishi, Electron Devices **57**, 1037 (2010).
7. В.В. Филиппов, А.Н. Власов, Е.Н. Бормонтов, Конденсированные среды и межфазные границы **12**, 282 (2010).
8. П.И. Баранский, В.В. Колomoец, Б.А. Сусь, В.В. Шаповалов, ФТП **13**, 602 (1979).
9. T. Arizumi, A. Yoshida, N. Savaki, Jpn. J. Appl. Phys. **8**, 700 (1969).
10. В.В. Байдаков, Н.Н. Григорьев, В.Н. Ермаков, В.В. Колomoец, Т.А. Кудыкина, ФТП **17**, 370 (1983).
11. С.В. Луньов, П.Ф. Назарчук, Л.І. Панасюк, Прогресивні технології та прилади **1**, 112, (2011).
12. C.N. Ahmad, A.R. Adams, Phys. Rev. **B34**, 2319 (1986).
13. С.В. Луньов, П.Ф. Назарчук, О.В. Бурбан, Матер. 6-ої Міжнар. наук. конф. РНАОПМ 2012, 42 (2012).
14. П.С. Киреев, Физика полупроводников, Высшая школа, Москва (1969).
15. C. Herring and E. Vogt, Phys. Rev. **101**, 944 (1956).
16. П.И. Баранский, В.П. Ключков, И.В. Потыкевич, Полупроводниковая электроника, Наукова думка, Киев (1975).

*S.V. Luniov*

## EFFECTIVE MASS OF THE DENSITY OF ELECTRON STATES FOR $\Delta_1$ -MINIMUM OF THE CONDUCTION BAND OF THE GERMANIUM CRYSTALS

In many cases such semiconductor material as germanium is a perspective material for creation of different electronic devices and sensors. In extreme conditions of large electric, deformation, optical and temperature fields in single crystals of germanium, not only the minima of the conduction band with symmetry  $L_1$ , and also high energy minimums  $\Gamma_2$ ,  $\Delta_1$  and  $\Gamma_{15}$  can participate in a variety of kinetic and optical effects. For a quantitative description of these effects, the parameters of active minimums of energy of the conduction band are required. The effective mass of the density state is one of the important parameters of the band structure. Based on the theory of deformation potential in many-valley semiconductors and experimental data on longitudinal piezoresistance in crystallographic direction [100] in heavily doped single crystals of germanium, in the region of ion scattering exclusively ( $T = 4.2$  K), the effective mass of the density of states for  $\Delta_1$ -minimum has been found. The calculation was carried out in the area of strong uniaxial pressure  $X > 1.6$  GPa, when the contribution to the change in resistivity of the  $n$ -Ge single crystals was made by both  $L_1$ - and  $\Delta_1$ -minima of the conduction band. The analysis allowed evaluation of the effective mass of density states  $m_{\Delta_1} = 0.88m_0$  parameters for  $L_1$ -minimum and values of resistivity for this area.

**Keywords:** piezoresistance, deformation potential theory, effective mass of density states.

**Fig.** Dependence of the longitudinal piezoresistance in  $n$ -Ge  $\langle \text{Sb} \rangle$  on the magnitude of the uniaxial pressure along the crystallographic direction [100] at  $T = 4.2$  K