

П.І. Баранський, Г.П. Гайдар¹

ФІЗИЧНІ ФАКТОРИ, ЩО ЗУМОВЛЮЮТЬ АНІЗОТРОПІЮ ТЕРМОЕРС І АНІЗОТРОПІЮ РУХЛИВОСТІ В БАГАТОДОЛИННИХ НАПІВПРОВІДНИКАХ

Розглянуто фізичні чинники, що забезпечують появу анізотропії термоЕРС $\Delta\alpha = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}$ у багатодолінних напівпровідниках за умов направленої пружної деформації (при $X \parallel J \parallel [111]$ в n -Ge і $X \parallel J \parallel [100]$ в n -Si), а також зв'язки, які існують між параметрами анізотропії термоЕРС $M = \alpha_{\parallel}^{\Phi} / \alpha_{\perp}^{\Phi}$ і анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$. Показано, як вказані параметри, що характеризують анізотропію відповідних величин, можна одержати з вимірів величин на макрорівні (тобто з вимірів питомого опору ρ_0 і ρ_{∞} , а також термоЕРС α_0 і α_{∞}) у багатодолінних недеформованих і направлено-деформованих (у разі механічного навантаження $X \rightarrow \infty$) напівпровідниках. Проведено зіставлення параметрів K і M , виміряних на монокристалах n -Si, легованих домішкою фосфору через розплав та шляхом ядерної трансмутації, що виникає при опроміненні кристалів кремнію тепловими нейтронами.

Ключові слова: багатодолінні напівпровідники, направлена пружна деформація, параметр анізотропії термоЕРС, параметр анізотропії рухливості.

ВСТУП

Анізотропія термоЕРС — явище досить рідкісне, адже для її виникнення необхідна одночасна наявність низки конкретних фізичних чинників (див. праці [1–7]). Тому тут ми лише нагадаємо, що у виявлених випадках вони зводяться до одночасного виконання деяких специфічних умов, а саме:

- наявності декількох механізмів анізотропного розсіяння і однієї групи носіїв струму з анізотропною ефективною масою;
- ізотропного розсіяння і однієї групи носіїв струму з анізотропною ефективною масою;
- наявності декількох груп носіїв струму, з яких хоча б одна має характеризуватися анізотропною ефективною масою при одному механізмі розсіяння;
- суттєвого прояву електрон-фононного захоплення в формуванні загальної термоЕРС α -носіїв струму з анізотропною ефективною масою.

На можливість появи термоЕРС, пов'язаної з ефектом захоплення електронів фононами, вперше звернуто увагу в теоретичній праці [8]. Перші дослідження в цьому напрямку на багатодолінних напівпровідниках (Ge і Si n -типу) було виконано в працях [9–11].

НАПРАВЛЕНО-ДЕФОРМОВАНІ КРИСТАЛИ

В однодолінній моделі (тобто в направлено-деформованих кристалах), коли напрям температурного градієнта ($\text{grad } T$ або ∇T) збігається з головною віссю ізоенергетичного еліпсоїда, ефект захоплення електронів фононами виявляється більш суттєво, ніж в інших напрямках; анізотропія термоЕРС за цих умов також істотно зростає. Як показали теоретичні розрахунки [6, 12–14] та експериментальні результати [7], анізотропія термоЕРС захоплення саме за цих умов може досягати величез-

них значень: від 4250 до 42 500 мкВ/К, що в принципі неможливо при інших механізмах виникнення $\Delta\alpha = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}$ (α_{\parallel} і α_{\perp} — складові термоЕРС відповідно вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда).

Ураховуючи, що тензор $\hat{\alpha}$ складається із двох частин:

$$\hat{\alpha} = \hat{\alpha}^e + \hat{\alpha}^{\phi}, \quad (1)$$

де $\hat{\alpha}^e$ і $\hat{\alpha}^{\phi}$ — відповідно електронна (дифузійна) і фононна складові термоЕРС, автори праць [15, 16], обчисливши електронну компоненту термоЕРС (яка може бути від'ємною чи додатною залежно від типу провідності напівпровідника) за співвідношенням

$$\alpha_{n,p}^e = \mp \frac{k}{e} (2 - \mu_{n,p}^*), \quad (2)$$

де e — заряд електрона; k — стала Больцмана; $k/e = 86$ мкВ/град; $\mu_{n,p}^*$ — зведений хімічний потенціал (електронний чи дірковий залежно від типу провідності), знайшли наступні вирази для анізотропії термоЕРС обох компонент в n -Ge:

$$\Delta\alpha = \Delta\alpha^e + \Delta\alpha^{\phi}, \quad (3)$$

$$\Delta\alpha^e = \frac{4k}{e} \cdot \frac{K-1}{K} \cdot \frac{2K+1}{3K} \cdot \frac{n_1 n_2 \ln \frac{n_1}{n_2}}{\left(1 - \frac{4}{3} n_2 \frac{K-1}{K}\right) \left(\frac{1}{K} + \frac{8}{3} n_2 \frac{K-1}{K}\right)}, \quad (4)$$

$$\Delta\alpha^{\phi} = \alpha_0^{\phi} \cdot \frac{M-1}{K} \cdot \frac{2K+1}{2K+M} \cdot \frac{n_1 - n_2}{\left(1 - \frac{4}{3} n_2 \frac{K-1}{K}\right) \left(\frac{1}{K} + \frac{8}{3} n_2 \frac{K-1}{K}\right)}. \quad (5)$$

Тут n_1 — число електронів у долині, розміщеній вздовж осі деформації; n_2 — число електронів у кожній з долин, розміщених під кутом до осі деформації; $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$ — параметр анізотропії рухливості; μ_{\parallel} , μ_{\perp} — рухливості носіїв заряду вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно; $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ — параметр анізотропії термоЕРС захоплення електронів фононами; $\alpha_{\parallel}^{\phi}$, α_{\perp}^{ϕ} — фононні складові термоЕРС відповідно вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда; α_0^{ϕ} , α_{∞}^{ϕ} — фононні складові термоЕРС без тиску (механічне навантаження на зразок відсутнє $X=0$) і в насиченні ($X \rightarrow \infty$), які дорівнюють дослідним даним α_0 і α_{∞} (α_0 , α_{∞} — значення термоЕРС у недеформованих і в деформованих зразках) без електронної складової:

$$\alpha_0^{\phi} = \alpha_0 - \alpha^e,$$

$$\alpha_{\infty}^{\phi} \equiv \alpha_{\infty} - \alpha^e = \alpha_{\parallel}^{\phi}.$$

Для n -Si запишемо

$$\Delta\alpha^e = \frac{4k}{e} \cdot \frac{K-1}{K} \cdot \frac{2K+1}{3K} \cdot \frac{n_1 n_2 \ln \frac{n_1}{n_2}}{\left(1 - 2n_1 \frac{K-1}{K}\right) \left(1 - 2n_2 \frac{K-1}{K}\right)}, \quad (6)$$

$$\Delta\alpha^\Phi = 2\alpha_0^\Phi \cdot \frac{M-1}{K} \cdot \frac{2K+1}{2K+M} \cdot \frac{n_1 - n_2}{\left(1 - 2n_1 \frac{K-1}{K}\right) \left(1 - 2n_2 \frac{K-1}{K}\right)}. \quad (7)$$

Фононну складову термоЕРС захоплення електронів фононами недеформованого кристала α_0^Φ , параметр анізотропії рухливості K і параметр анізотропії термоЕРС захоплення електронів фононами M , які входять до формул (5) і (7), можна обчислити за відповідними виразами, наведеними в працях [7, 17], або за результатами вимірів п'єзотермоЕРС чи п'єзоопору [7, 9]. Так, параметр K визначають за формулою

$$K = \frac{\mu_\perp}{\mu_\parallel} = \frac{3}{2} \frac{\rho_\infty}{\rho_0} - \frac{1}{2}, \quad (8)$$

де $\rho_\infty = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\rho_x}{\rho_0}$ за умов, коли механічне навантаження X і струм J на-

правлені відповідним чином: в n -Ge $X \parallel J \parallel [111]$, в n -Si $X \parallel J \parallel [100]$. Параметр анізотропії термоЕРС захоплення електронів фононами експериментально знаходять із термоелектричних вимірів зі співвідношення

$$M = \frac{\alpha_\parallel^\Phi}{\alpha_\perp^\Phi} = \frac{2K}{(2K+1) \frac{\alpha_0^\Phi}{\alpha_\infty^\Phi} - 1}. \quad (9)$$

Для концентрацій носіїв заряду в інтервалі $10^{12} \leq n_e \leq 10^{17}$ при $T = 85$ К в n -Ge і $10^{13} \leq n_e \leq 2 \cdot 10^{16}$ при $T = 85$ К в n -Si концентраційні зміни $M = M(n_e)$, одержані з дослідів, наведені у вигляді відповідних графіків у праці [7]. Там само можна знайти (за необхідності) і концентраційні зміни термоЕРС як недеформованих, так і сильно деформованих (за умов $X \parallel \nabla T \parallel [111]$ для n -Ge та $X \parallel \nabla T \parallel [001]$ для n -Si) при чіткому прояві ефекту захоплення електронів фононами (тобто при $T = 85$ К). Щоб помітно не впливати на середню температуру зразка, що задається температурою навколишнього середовища, $\text{grad } T$ на зразку необхідно задавати, по можливості, незначним перепадом температур $\Delta T = T_2 - T_1$, який в робочих умовах не перевищуватиме 5 град/см. У цих дослідях потрібно забезпечувати одномірність теплового потоку, якомога знижуючи бокові втрати тепла від досліджуваних зразків, підтримуючи в цьому випадку добротну бокову теплову ізоляцію.

ЗІСТАВЛЕННЯ ПАРАМЕТРІВ K І M , ВИМІРЯНИХ НА МОНОКРИСТАЛАХ n -SI, ЛЕГОВАНИХ ДОМІШКОЮ ФОСФОРУ ЧЕРЕЗ РОЗПЛАВ І ШЛЯХОМ ЯДЕРНОЇ ТРАНСМУТАЦІЇ

Згідно з результатами експерименту нейтронно-леговані кристали силіцію (за рахунок ядерної трансмутації ^{30}Si в атоми фосфору ^{31}P при опроміненні тепловими нейтронами) Si^{TJ} відрізняються від звичайних кристалів Si, легованих домішкою фосфору із розплаву Si^{3B} не лише підвищеною гомогенністю у розподілі домішки по об'єму [18, 19], а й більш високими значеннями рухливості носіїв заряду μ (див. таблицю) за інших рівних умов.

Виникає питання, чи виявляться аналогічні переваги в кристалах Si порівняно зі звичайними кристалами Si тоді, як тестовими будуть явища,

Значення $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$ і $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ для кристалів n -Si <P>, легованих домішкою фосфору через розплав ($\text{Si}^{3\text{B}}$) та нейтронним опроміненням (тобто за рахунок ядерної трансмутації) ($\text{Si}^{\text{ТЛ}}$)

Вид легування	$\rho_{300\text{K}}$, Ом · см	n_e $\mu\text{K} \cdot 10^{-13}$, см^{-3}	α^e , мкВ/К (розрахунок)	$\alpha_0^{\phi} \cdot 10^{-3}$, мкВ/К	$\alpha_{\infty}^{\phi} \cdot 10^{-4}$, мкВ/К	$\mu_{\text{TK}} \cdot 10^{-4}$, $\text{см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$	K	M
$\text{Si}^{3\text{B}}$	200	1,9	1227	8,1	3,20	1,925	5,4	6,6
$\text{Si}^{\text{ТЛ}}$	200	1,7	1250	8,0	2,60	2,068	5,6	4,8
$\text{Si}^{3\text{B}}$	55	5,7	1132	7,9	3,05	1,900	5,3	6,4
$\text{Si}^{\text{ТЛ}}$	55	5,7	1132	7,3	2,35	2,133	5,4	4,9

пов'язані, наприклад, з розсіянням фононів, а не електронів, що еквівалентно підвищенню роздільної здатності за розмірами розсіювачів (дефектів), оскільки довжина хвилі де Бройля навіть довгохвильових фононів $\lambda_{\phi} < \lambda_e$.

Дані праці [20] свідчать про те, що за заданої поляризації довгохвильових фононів (l або t) захоплення електронів фононами в напрямку довгої (головної) осі ізоенергетичного еліпсоїда є визначальним, тобто $\alpha_{\parallel}^{(l,t)} \gg \alpha_{\perp}^{(l,t)}$, а при заданому напрямку відносно осей еліпсоїда переважаюча роль у захопленні електронів фононами належить фононам поздовжньої поляризації, тобто $\alpha_{\parallel\perp}^{(l)} \gg \alpha_{\parallel\perp}^{(t)}$. Унаслідок цього, зіставлення термоелектричних властивостей різних зразків (легованих, наприклад, різними способами) потрібно проводити саме за компонентою $\alpha_{\parallel}^{(l)}$, тому відповідно до одержаних нами результатів $\alpha_{\parallel}^{(l)3\text{B}} / \alpha_{\parallel}^{(l)\text{ТЛ}} \approx 1,7$. Звідси випливає, що поздовжні фонони (котрими переважно визначається фононна складова термоЕРС захоплення електронів фононами вздовж довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда $\alpha_{\parallel}^{\phi} \sim \alpha_{\parallel}^{(l)}$) ефективніше розсіюються в трансмутаційно-легованих (що зазнали лише технологічного відпалу) кристалах, ніж у звичайних кристалах Si, легованих домішкою фосфору з такою самою концентрацією через розплав.

Використавши експериментально виміряні (при $T \approx 85$ К) значення термоЕРС у недеформованих (α_0) і деформованих (α_{∞}) трансмутаційно-легованих зразках n -Si (зі значеннями питомого опору за кімнатної температури $\rho_{300\text{K}} \approx 200$ і 55 Ом · см), а також звільнивши ці дані від внеску електронної (дифузійної) компоненти термоЕРС α^e , можна отримати значення термоЕРС, пов'язаної з виявом ефекту захоплення електронів фононами, а саме: $\alpha_{\parallel}^{\phi}$ і α_{\perp}^{ϕ} . За формулою (9) на підставі одержаних результатів знаходимо параметр анізотропії термоЕРС захоплення M , який характеризує фононну підсистему: $M^{\text{ТЛ}} = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi} \approx 5$. Таким чином, суттєво зменшуючи параметр анізотропії термоЕРС захоплення порівняно з $M^{3\text{B}} \approx 6,5$, дефекти, які не повністю усуваються технологічним відпалом при 750 °С протягом кількох годин, не знижують, однак, рухливість в трансмутаційно-легованих зразках ($\mu^{\text{ТЛ}}$), про що свідчить виконання нерівності $\mu^{\text{ТЛ}} > \mu^{3\text{B}}$ (див. таблицю), характерне для нейтронно-легованих і звичайних кристалів, подібних між собою за іншими параметрами.

Отже, залишкові дефекти, які виникають у кристалах Si унаслідок їх легування за рахунок опромінення тепловими нейтронами і які не усуваються при технологічному відпалі, не виявляють помітного впливу на електронну підсистему, але суттєво змінюють ефекти, які протікають за участю довгохвильових фононів (для яких, як показують оцінки, знак звичної нерівності $\lambda_{\phi} < \lambda_e$ не змінюється).

ВИСНОВКИ

1. Розглянуто фізичні передумови, що забезпечують появу анізотропії термоЕРС $\Delta\alpha = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}$ у багатодолинних напівпровідниках в умовах направленої пружної деформації (при $X \parallel J \parallel [111]$ — в n -Ge та $X \parallel J \parallel [100]$ — в n -Si).

2. З'ясовано, як параметри анізотропії термоЕРС $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ і анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$, що характеризують анізотропію відповідних величин відносно головних осей ізоенергетичного еліпсоїда і пов'язані між собою за допомогою формули (9), можна одержати з вимірів величин на макрорівні (тобто з вимірів питомого опору ρ_0 і ρ_{∞} та термоЕРС α_0 і α_{∞}) у багатодолинних кристалах.

3. Зіставлено параметри K і M , виміряні на монокристалах, легованих домішкою фосфору через розплав або шляхом ядерної трансмутації (за рахунок опромінення кристалів Si тепловими нейтронами). Результати порівняльних дослідів показали, що залишкові дефекти, які виникали у кристалах Si у процесі трансмутаційного легування (і які не усувалися при технологічному відпалі при 750 °C протягом кількох годин), не виявляли помітного впливу безпосередньо на електронну підсистему, однак суттєво змінювали ефекти, що відбувалися за участю довгохвильових фононів, які задовольняють нерівності $\lambda_{\phi} \ll \lambda_e$.

P.I. Baranskii, G.P. Gaidar¹

PHYSICAL FACTORS THAT CAUSE THE ANISOTROPY OF THERMOELECTROMOTIVE AND THE ANISOTROPY OF MOBILITY IN MULTIVALLEY SEMICONDUCTORS

This work devoted to consideration of the physical factors which provide the appearance of the anisotropy of thermoelectromotive $\Delta\alpha = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}$ in the multivalley semiconductors in a conditions of the directed elastic deformation (at $X \parallel J \parallel [111]$ in n -Ge and $X \parallel J \parallel [100]$ in n -Si), as well as to establishment of the bond that exists between the parameters of the anisotropy of thermoelectromotive $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$ and the anisotropy of mobility $K = \mu_{\perp} / \mu_{\parallel}$. It is shown how these parameters, characterizing the anisotropy of the corresponding quantities, can be obtained from the measurements of magnitudes at the macrolevel (i. e. from measurements of resistivity ρ_0 and ρ_{∞} , and thermoelectromotive α_0 and α_{∞}) in multivalley undeformed and deformed directionally (when mechanical stress is $X \rightarrow \infty$) semiconductors. A comparison of the parameters of K and M , measured on single crystals of n -Si, doped with phosphorus through the melt and by nuclear transmutation that occurs during irradiation of silicon crystals by thermal neutrons, was made.

Keywords: multivalley semiconductors, directed elastic deformation, the anisotropy parameter of thermoelectromotive, the anisotropy parameter of mobility.

1. *Самойлович А.Г., Коренблит И.Я., Даховский И.В.* Анизотропное рассеяние электронов на ионизированных примесях // Докл. АН СССР. — 1961. — **139**, № 2. — С. 355—358.
2. *Самойлович А.Г., Коренблит Л.Л.* Вихревые термоэлектрические токи в анизотропной среде // ФТТ. — 1961. — **3**, вып. 7. — С. 2054—2059.
3. *Анизотропное рассеяние электронов на ионизированных примесях и акустических фононах / А.Г. Самойлович, И.Я. Коренблит, И.В. Даховский и др.* // Там же. — 1961. — **3**, вып. 11. — С. 3285—3298.
4. *Самойлович А.Г., Ницович М.В., Ницович В.М.* К вопросу об анизотропии пьезотермо-ЭДС в кремнии и германии // УФЖ. — 1967. — **12**, № 7. — С. 1214—1216.
5. *Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках / П.И. Баранский, И.С. Буда, И.В. Даховский, В.В. Коломоец.* — Киев: Наук. думка, 1977. — 270 с.

6. Баранский П.И., Буда И.С., Даховский И.В. Теория термоэлектрических и термомагнитных явлений в анизотропных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1987. — 272 с.
7. Баранский П.И., Буда И.С., Савяк В.В. Термоэлектрические и термомагнитные явления в многодолинных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1992. — 268 с.
8. Гуревич Л.Э. Термоэлектрические свойства проводников // ЖЭТФ. — 1946. — 16, вып. 3. — С. 193—227.
9. Herring C. Transport properties of a many-valley semiconductor // Bell Syst. Techn. J. — 1955. — 34, N 1. — P. 237—290.
10. Herring C., Geballe T.H., Kunzler J.E. Analysis of Phonon-Drag Thermomagnetic effects in *n*-type Germanium // Ibid. — 1959. — 38, N 3. — P. 657—747.
11. Herring C., Geballe T.H., Kunzler J.E. Phonon-drag thermomagnetic effects in *n*-type Germanium. I. General Survey // Phys. Rev. — 1958. — 111, N 1. — P. 36—57.
12. Львов В.С. Гальваномагнитные и термомагнитные эффекты в деформированном *n*-Ge // ФТП. — 1966. — 8, вып. 5. — С. 1351—1364.
13. Самойлович А.Г., Буда И.С. Влияние упругой деформации на термоэдс в *n*-Ge в области эффекта увлечения // ФТП. — 1969. — 3, вып. 3. — С. 400—408.
14. Samoilovich A.G., Buda I.S., Dakhovskii I.V. Anisotropy of Thermomagnetic Effects in *n*-Ge // Phys. status solidi. — 1967. — 23, N 1. — P. 229—236.
15. Galvanothermometric effects in anisotropic media / P.I. Baranskii, I.S. Buda, I.V. Dakhovskii et al. // Phys. status solidi. B. — 1975. — 67, N 1. — P. 291—299.
16. Роль анізотропії мікро- і макрорівнів у формуванні термоелектричних і термомагнітних явищ у багатодолинних напівпровідниках / Л.І. Анатичук, П.І. Баранський, І.С. Буда та ін. // Вісн. АН УРСР. — 1989. — № 2. — С. 17—30.
17. Баранский П.И. Теоретические и экспериментальные исследования явлений переноса в многодолинных полупроводниках / Под ред. О.В. Снитко // Физические основы полупроводниковой электроники. — Киев: Наук. думка, 1985. — С. 161—172. — 303 с.
18. Haas W.E., Schnoller M.S. Silicon doping by nuclear transmutation // J. Electron. Mater. — 1976. — 5, N 1. — P. 57—68.
19. Schnoller M. Breakdown behavior of rectifiers and thyristors made from striation-free silicon // IEEE Trans. Electron Devices. — 1974. — 21, N 5. — P. 313—314.
20. Фонон-фононная релаксация при эффектах увлечения в *n*-Ge / П.И. Баранский, И.С. Буда, В.В. Коломоец и др. // ФТП. — 1975. — 9, вып. 9. — С. 1680—1684.

Інститут фізики напівпровідників

Отримано 22.01.2013

ім. В.Є. Лашкарьова
НАН України
Проспект Науки, 45
03028 Київ

¹Інститут ядерних досліджень
НАН України
Проспект Науки, 47
03680 Київ
e-mail: gaydar@kinr.kiev.ua