

Влияние гидростатического давления на статическую диэлектрическую проницаемость германия

© А.М. Мусаев

Институт физики им. Х.И. Амирханова Дагестанского научного центра Российской академии наук, 367003 Махачкала, Россия

E-mail: akhmed-musaev@yandex.ru

(Получена 28 июня 2016 г. Принята к печати 22 мая 2017 г.)

Экспериментально исследована зависимость статической диэлектрической проницаемости монокристаллического германия от гидростатического давления до $P \approx 7.4$ ГПа. При росте давления до $P \approx 4$ ГПа, диэлектрическая проницаемость Ge уменьшается в ~ 13 раз до значения $\epsilon = 1.22$. При дальнейшем росте давления до $P \approx 7$ ГПа наблюдается умеренный рост ϵ до исходного значения, а в диапазоне 7–7.4 ГПа диэлектрическая проницаемость возрастает до значения более 1000 единиц. Полученные экспериментальные результаты существенно отличаются от ранее известных зависимостей.

DOI: 10.21883/FTP.2018.01.45315.8359

О фундаментальном электрофизическом параметре монокристаллического Ge как зависимости статической диэлектрической проницаемости от всестороннего давления $\epsilon(P)$ до настоящего времени нет достоверной информации. Исследование зависимости $\epsilon(P)$ при потенциале взаимодействия атомов на расстояниях, меньших чем равновесные, представляет интерес для достаточно широкого круга задач физики и техники полупроводников. В настоящее время имеется незначительное количество работ по исследованию зависимости $\epsilon(P)$ германия, которые приведены в монографиях [1,2]. Эти экспериментальные результаты существенно отличаются от результатов, приведенных в работе [3], а также от результатов, полученных в последней экспериментальной работе [4], где приведена зависимость $\epsilon(P)$ до давления 8 ГПа.

Во всех экспериментальных работах зависимость поляризуемости от давления определена косвенным методом, основанным на формуле Лоренц–Лорентца, где поляризуемость вещества (α) связана с показателем преломления n следующей зависимостью:

$$R = V(n^2 - 1)/(n^2 + 2) = (4/3)\pi N\alpha, \quad (1)$$

где рефракция R выражается в единицах объема V (см³/моль), поляризуемость $\alpha = 3R/4\pi N = 3/9630 \cdot 10^{-25}R$.

В этих работах зависимость статической диэлектрической проницаемости $\epsilon(P)$ получена посредством экстраполяции частотной зависимости экспериментальных коэффициентов преломления $n(\omega)$ к нулевым частотам. В работе [4] показано, что изменение статической диэлектрической проницаемости $\epsilon(P)$ для Ge, связанной с изменением объема полупроводника с давлением, составляет $\Delta V/V_0 \approx 8\%$ и зависимость $\epsilon(P)$ можно представить коэффициентом $r = d \ln(\epsilon)/d \ln(V) = 1.58$. В работе [5] получено, что значение коэффициента $\eta \equiv \partial \ln(\chi)/\partial \ln(d)$ в зависимости от межатомного расстояния d составляет 2.4.

Как известно, диэлектрическая проницаемость кристаллов, в которых связь между атомами выполняется путем обменного взаимодействия валентных электронов, значительно превышает значение (n^2). Замена (ϵ) на (n^2) подразумевает, что показатель преломления является константой, измеренной в бесконечно длинных волнах. Поэтому результаты вычислений сильно зависят от точности экстраполяции показателя преломления на нулевые частоты.

В данной работе впервые получена экспериментальная зависимость статической диэлектрической проницаемости Ge от всестороннего давления посредством прямого экспериментального измерения. Исследование зависимости $\epsilon(P)$ проводилось по методике, основанной на регистрации зависимости барьерной емкости p – n структур от давления, на структурах со ступенчатым изменением концентрации примесей $N_p \gg N_n$ (сплавные структуры с базой из полупроводника n -типа) [6]. При этом зависимость статической диэлектрической проницаемости имеет вид

$$\epsilon = (1.44 \cdot 10^8 C_b^2 U_k) / \epsilon_0 S^2 \cdot N_d, \quad (2)$$

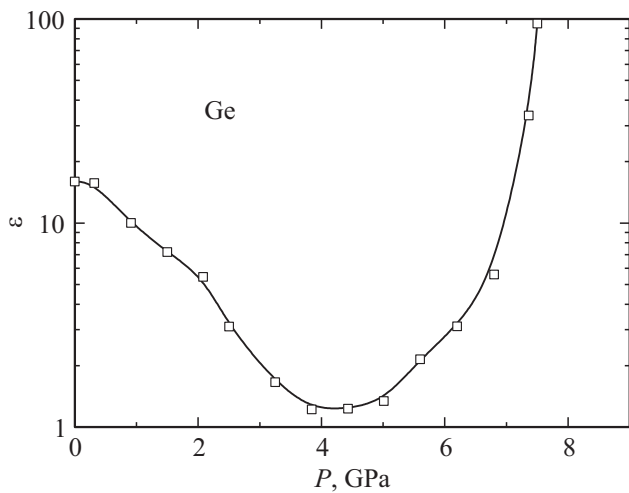
где $\epsilon_0 = 8.85416 \cdot 10^{-2}$ пф/см.

Из соотношения (2), по экспериментальным данным: $C_b(P)$ и известным величинам: $U_k(P)$, $S(P)$, можно определить зависимость $\epsilon(P)$. Энергия ионизации мелких примесей от давления фактически не изменяется [7], и составляет примерно 10^{-13} эВ/Па, тогда как изменение ширины запрещенной зоны $dE_g/dP = 5 \cdot 10^{-11}$ эВ/Па. Расчет изменения контактного потенциала $U_k(P)$ с давлением производился с использованием известных коэффициентов давления [7,8] для экстремумов зон проводимости $\gamma_{Ci}(L, \Delta_1)$ и валентной зоны γ_Δ которые составляют для Ge:

$$\gamma_{CL} = 83 \text{ мЭВ/ГПа}, \quad \gamma_{C\Delta} = 8 \text{ мЭВ/ГПа}, \quad \gamma_V = 28 \text{ мЭВ/ГПа},$$

$$\Delta E_{g(V-CL)} = 55 \text{ мЭВ/ГПа}, \quad (P = 0-2.5 \text{ ГПа}),$$

$$\Delta E_{g(V-C\Delta)} = -20 \text{ мЭВ/ГПа}, \quad (P \geq 2.5 \text{ ГПа}).$$



Экспериментальная зависимость статической диэлектрической проницаемости Ge от всестороннего давления.

Исследуемые *p-n*-структуры изготавливались сплавлением сплавов In–Pb–Ga (Pb — 10%, Ga — 0.7%, In — 89.3%) и Pb–Sn–Sb (Pb — 65%, Sn — 30%, Sb — 5%) в *n*-Ge, с концентрацией примесей $N_D - N_A = 4.0 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, кристаллографически ориентированной по направлению [100].

Для генерирования давления в диапазоне 0–10 ГПа применялся аппарат высокого давления типа „плоские наковальни с лункой и тороидальной поддержкой“ [9]. Барические зависимости барьерной емкости регистрировались на частоте 1 МГц при уровне измерительного сигнала 0.1 В. При расчете $\epsilon(P)$, учитывалось изменение $C(P)$, связанное с изменением геометрических размеров структур с давлением $\Delta V(P)/V_0$, которое составляет $-0.25\%/ГПа$.

На рисунке представлена зависимость статической диэлектрической проницаемости для Ge от всестороннего давления при температуре 300 К. Как видно из результатов эксперимента, на начальном участке наблюдается незначительный рост диэлектрической проницаемости. Дальнейшее увеличение давления приводит к существенному уменьшению статической диэлектрической проницаемости, в ~ 13 раз до значения $\epsilon = 1.22$ при $P \approx 4$ ГПа. В диапазоне давлений 4.0–7 ГПа наблюдается умеренный рост ϵ до исходного значения, а в диапазоне 7–7.4 ГПа диэлектрическая проницаемость увеличивается до значений более 1000 единиц.

Известно, что в Ge гибридные орбитали обладают более низкой симметрией, чем составляющие их атомные орбитали, а распределение электронной плотности смещено от атомного ядра в направлении симметрии гибридной орбитали. При этом поляризуемость атомов по порядку величины совпадает с объемом атома, т.е. атомы с большим радиусом электронной орбиты легко поляризуются. Уменьшение межатомных расстояний ($-0.368\%/ГПа$) усиливает гибридизацию *s-*

и *p*-орбиталей и обеспечивает большее перекрытие электронных орбит соседних атомов, при этом потенциал в центре между взаимодействующими атомами в точке ветвления не изменяется и равен нулю.

Изменение статической диэлектрической проницаемости в Ge при всестороннем давлении связано со следующими взаимно конкурирующими факторами.

1. При всестороннем давлении кулоновское отталкивание атомов и эффект наложения электронных оболочек соседних атомов приводят к увеличению кинетической энергии связывающих электронов. При этом скорость валентных электронов с уменьшением радиуса их орбит увеличивается как

$$V_P = V_0 \cdot r_0 / r_P, \quad (3)$$

где V_0 — скорость электрона при $P = 0$, r_0 — радиус электрона при $P = 0$, r_P — радиус электрона при всестороннем давлении.

Так как электронная поляризация обратно пропорциональна квадрату скорости электронов $P \approx k/V_e^2$, то с уменьшением межатомных расстояний уменьшается и коэффициент диэлектрической проницаемости.

2. Электрическое поле связывающих атомов имеет точку ветвления в середине линии их связи. В точке ветвления напряженность поля равна нулю, а эквипотенциальная поверхность пересекает сама себя. Изменение электрического потенциала в зависимости от радиуса электрона при всестороннем давлении r_P и от расстояния h , в направлении, перпендикулярном линии, соединяющей атомы, можно представить как [10]

$$\varphi_{\perp} \approx -k \cdot h^2 / r_P^3, \quad (4)$$

где k — коэффициент пропорциональности.

Из данного соотношения следует, что потенциал связывающих атомов в направлении, перпендикулярном линии их связи, с уменьшением межатомного расстояния понижается, что должно привести к увеличению влияния внешнего поляризующего электрического поля.

3. Увеличению диэлектрической проницаемости способствует и фактор повышения плотности электронов, локализованных в пространстве между атомами с уменьшением межатомных расстояний.

Из сказанного следует, что уменьшение поляризации в Ge при давлениях до 4 ГПа связано с преобладающим воздействием фактора увеличения кинетической скорости электронов с давлением. Последующее увеличение поляризации при $P \geq 4$ ГПа обусловлено насыщением кинетической энергии носителей и уменьшением напряженности поля в пространстве между взаимодействующими атомами, а также повышением плотности электронов, локализованных в пространстве между атомами.

Вышеприведенные объяснения наблюдаемого изменения статической диэлектрической проницаемости Ge от всестороннего давления относятся к диапазону давлений до начала их структурных фазовых переходов. По данным авторов работы [11] (см. также ссылки в

этой работе), фазовый переход в Ge от структуры типа алмаза (I) к структуре типа β -Sn (II) происходит в диапазоне давлений 6.7–10.6 ГПа.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-02-05181.

Список литературы

- [1] В. Пол, Д. Варшауэр. *Твердые тела под высоким давлением* (М., Мир, 1966) с. 524.
- [2] M. Cardona, H. Paul, H.S. Brooks. *Phys. Chem. Solids*, **8**, 204 (1959).
- [3] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) т. 1, с. 383.
- [4] A.R. Gofii, K. Syassen, M. Cardona. *Phys. Rev.*, **B**, **41** (14), 10104 (1990).
- [5] С.Ю. Давыдов, Е.И. Леонов. *ФТТ*, **29** (10), 2890 (1987).
- [6] Л.С. Берман. *Емкостные методы исследования полупроводников* (Л., Наука, 1972) с. 104.
- [7] А.Л. Полякова. *Деформация полупроводников и полупроводниковых приборов* (М., Энергия, 1979) с. 168.
- [8] П.И. Баранский, В.Г. Клочков, И.В. Потыкевич. *Полупроводниковая электроника* (Киев, Наук. думка, 1975) с. 704.
- [9] L.G. Khvostantsev, V.A. Sidorov. *Phys. Status Solidi A*, **46**, 305 (1978).
- [10] В.А. Говорков. *Электрические и магнитные поля* (М., Энергия, 1968) с. 488.
- [11] М.М. Александрова, В.Д. Бланк, С.Г. Буга. *ФТТ*, **35** (5), 1308 (1993).

Редактор А.Н. Смирнов

The influence of hydrostatic pressure on the static dielectric permittivity of germanium

A.M. Musaev

Institute of Physics,
Daghestan Scientific Center,
Russian Academy of Sciences,
367003 Makhachkala, Russia

Abstract The dependence of the static dielectric permittivity of monocrystalline germanium on the hydrostatic pressure up to $P \approx 7.4$ GPa is researched. When increasing the pressure up to $P \approx 4$ GPa dielectric permittivity of Ge decreases up to the value $\varepsilon = 1.22$, by a factor of ~ 13 . Further increase in pressure up to $P \approx 7$ GPa triggers a moderate rise in ε to an initial value, and over the range of 7–7.4 GPa the dielectric permittivity rises as high as 1000 units. Obtained experimental data are substantially different from previous dependences.