

ПЕРЕНОС ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ Ge_{1-x}Si_x В СЛАБЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

© С.И. Шаговецова

Институт физики Национальной академии наук Украины,
252650 Киев, Украина

(Получена 6 февраля 1995 г. Принята к печати 20 марта 1995 г.)

Исследовались сплавы Ge_{1-x}Si_x (0 < x < 0.14), легированные сурьмой в концентрации 10¹⁴ ÷ 10¹⁶ см⁻³. Сообщается об особенностях переноса электронов в слабых электрических полях, связанных с изменением закона дисперсии сплавов. Перестройка зоны проводимости вплоть до инверсии зон типа L₁ → Δ₁ достигалась в эксперименте при изменении состава сплава и под действием одноосной, в направлении <100>, упругой деформации сжатия. Исследована эффективность механизмов рассеяния, ограничивающих подвижность электронов в сплавах различного состава при переходе от германиеподобного к кремниеподобному полупроводнику. Из сравнения полученных из эксперимента температурной, деформационной и концентрационной (от величины x) зависимостей холловской подвижности с результатами численного расчета, проведенного в приближении времени релаксации, установлено, что в германиеподобных сплавах доминирует акустическое и сплавное рассеяние, а в кремниеподобных — сплавное и междолинное рассеяние. Определены константы электрон-фононного взаимодействия для сплавов. Экспериментально и расчетным путем получены нелинейные функциональные зависимости кинетических коэффициентов сплавов в области инверсии.

1. Введение

В основе изменения гальваномагнитных свойств твердых растворов (сплавов) Ge_{1-x}Si_x лежит известный факт перестройки зонной структуры германия в зависимости от содержания атомов кремния (x — мольная доля Si) в решетке Ge или величины упругой деформации сжатия [1,2]. Всестороннее сжатие и сплавление с Si качественно одинаково изменяют симметрию края зоны проводимости, приводя к инверсии зон проводимости типа L₁ → Δ₁. С увеличением содержания кремния энергия минимумов типа L₁ относительно валентной зоны возрастает быстрее, чем энергия минимумов типа Δ₁, так что величина энергетической щели между ними (δ_{LΔ}) уменьшается от 0.18 эВ при x = 0 до нуля при x = 0.14. При x > 0.14 нижайшими, т. е. с наименьшим энергетическим расстоянием до валентной зоны, становятся минимумы Δ₁ вместо L₁, характеризуя переход от германиеподобного к кремниеподобному полупроводнику.

Процессы переноса в простых полупроводниках, таких как Ge и Si, хорошо изучены. В слабых электрических полях участие минимумов Δ_1 , расположенных на 0.18 эВ выше минимумов L_1 и пустых, в процессах переноса в n -Ge исключено. В то же время в сильных электрических полях уже при частичном заполнении минимумов Δ_1 электронами отмечаются такие особенности, как отрицательная дифференциальная подвижность [3], отрицательное магнитосопротивление [4], осцилляции тока [5], ограничение энергии электронов [6]. Кроме приложения сильного электрического поля, увеличение степени заполнения минимумов Δ_1 электронами, т.е. уменьшение энергетической щели $\delta_{L\Delta}$, достигается двумя путями: либо с помощью различного рода деформации сжатия, либо сплавлением с кремнием, т.е. созданием сплавов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$. В германии n -типа эти условия соответствуют электрическим полям $E > 10^4$ В/см [7], всестороннему сжатию свыше 30 кбар [2] или одноосному, в направлении $\langle 100 \rangle$, сжатию до 24 тс/см² [8]. Эти эксперименты сложны в осуществлении и неоднозначны в интерпретации. Для экспериментального исследования переноса электронов на разных этапах перехода от германиеподобного к кремниеподобному полупроводнику целесообразно использовать сплавы $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, в которых по сравнению с германием существенно облегчены условия достижения инверсии.

Кинетические коэффициенты n -Ge в области негреющих электрических полей можно описать в предположении взаимодействия электронов с внутривалинными акустическими, оптическими (430 К) и междолинными (32 К) фононами [9]. При этом интенсивность взаимодействия с междолинными (МД) фононами существенно уступает интенсивности внутривалинного рассеяния оптическими колебаниями решетки в отличие от n -Si, в котором доминирует внутривалинное акустическое и МД рассеяние g -типа [10]. Однако экстраполирование результатов, известных для Ge и Si, на сплавы кажется слишком упрощенным, так как ряд параметров сплавов зависит от содержания кремния, а также присутствует специфическое сплавное рассеяние.

Цель настоящей работы — построение физической картины изменения кинетических свойств сплавов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ ($0 < x < 0.14$), связанного с трансформацией зоны проводимости. Исследование состоит в экспериментальном изучении и численном расчете кинетических коэффициентов деформированных сплавов. В настоящей работе, как и в большинстве работ, где решается проблема определения констант связи, анализируются температурная и деформационная зависимости подвижности электронов $\mu(T, P)$ и проводимости $\sigma(T, P)$ сплавов. Такой выбор связан с тем, что кинетические коэффициенты определяются легко и точно, а их величина обусловлена суммарной интенсивностью всех механизмов рассеяния.

2. Образцы и методика эксперимента

Исходным материалом служили монокристаллы сплавов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$, легированные сурьмой в концентрации $5 \cdot 10^{14} \div 5 \cdot 10^{16}$ см⁻³, с максимальным содержанием Si $x = 0.105$. Сплавы выращивались по методу Чохральского с постоянным подпитыванием маточного раствора твердым кремнием [11]. Получение гомогенных слитков с $x > 0.05$ представляет большую технологическую проблему, так как с увеличением содержания Si возрастает неоднородность материала: для сплавов с $x < 0.04$

Таблица 1. Исходные характеристики образцов

x , мол. доля Si	N_D , см ⁻³	N_A , см ⁻³	μ , см ² /В · с	
			300 К	77 К
0	$8 \cdot 10^{14}$	$1.5 \cdot 10^{14}$	3600	25000
0.04	$6.5 \cdot 10^{15}$	$2 \cdot 10^{15}$	2500	8000
0.056	$8.5 \cdot 10^{14}$	$1.9 \cdot 10^{14}$	1700	5000
0.08	$8.2 \cdot 10^{14}$	$3 \cdot 10^{14}$	1130	3800
0.104	$8.2 \cdot 10^{14}$	$3 \cdot 10^{14}$	500	1000

отклонение от среднего уровня легирования $\Delta x = \pm 0.001$, для сплавов с $x > 0.1$ $\Delta x = \pm 0.02$, а слитки с $x > 0.12$ имели блочную структуру. Для эксперимента отбирались наиболее однородные образцы. Контроль содержания и распределения Si проводился на каждом образце с помощью рентгеновского микроанализатора.

Образцы изготавливались в форме параллелепипедов размерами $1 \times 1 \times 10$ мм³, длинное ребро ориентировалось вдоль направления $\langle 100 \rangle$ с точностью не хуже 0.5° . Вдоль этого направления прикладывались электрическое поле и деформация сжатия ($\mathbf{P} \parallel \mathbf{E} \parallel \langle 100 \rangle$). Во избежание сдвиговых напряжений образцы с нанесенными контактами и приваренными к ним проводниками с помощью эпоксидной смолы заправлялись в центрирующие торцевые оправки, изготовленные из латуни. Отметим, что механическая прочность образцов с сильно неоднородным распределением кремния уменьшалась, наблюдалась тенденция к расслаиванию образцов под давлением.

Исследовались пьезосопротивление и пьезохоллэффekt по стандартной методике на постоянном токе в интервале $5 \div 300$ К. Из холловских измерений и температурной зависимости проводимости рассчитывались концентрация мелких доноров N_D , компенсирующих акцепторов N_A и холловская подвижность. В расчетах холл-фактор полагался равным единице. Концентрация носителей тока в интервале температур $50 \div 300$ К была постоянной. Максимальная величина одноосного сжатия достигала 15 тс/см². Исходные характеристики образцов приведены в табл. 1.

Данные о физических параметрах сплавов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ ($0 \leq x \leq 0.14$), рассчитанные в приближении линейной аппроксимации по x , приведены в табл. 2. Приведенная в таблице концентрационная (от x) зависимость продольной скорости звука $V^{(100)}$ получена по методике поглощения акустической волны на частоте 10^7 Гц при 300 К. Величина Θ_0 равна энергии соответствующего оптического фонона в Ge.

Таблица 2. Физические параметры сплавов

Плотность, г/см ³	$\rho(x) = 5.323 - 3.087x$	[¹]
Шель между L_1 и Δ_1 , эВ	$\delta_{L\Delta}(x) = -0.18 + 1.29x$	[¹]
Ширина запрещенной зоны, эВ	$E_g(x) = 0.72 + 1.5x$	[¹]
Диэлектрическая проницаемость	$\kappa(x) = 15.8 - 10.7x$	[¹²]
Энергия оптических фононов, мэВ	$\Theta(x) = \Theta_0 + 63x$	[¹³]
Скорость звука, см/с	$V^{(100)}(x) = 3.57 \cdot 10^5 + 1.33 \cdot 10^5 x$	

3. Задание параметров

3.1. *Концентрация электронов в долинах.* Зона проводимости сплавов $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ включает четыре долины типа L_1 и шесть долин Δ_1 , минимум типа Γ_1 не рассматривался как не влияющий на процессы переноса. При наложении давления P или при изменении состава сплава (x) происходит изменение энергетического расстояния между долинами L_1 и Δ_1 по закону

$$\delta_{ij} = -0.18 + 1.29x + S_{ij}P, \quad (1)$$

а в случае одноосной деформации также расщепление минимумов. Здесь S_{ij} — барический коэффициент изменения щели между минимумами; единицы измерения в (1): δ_{ij} [эВ], P [тс/см²]. Положение минимумов зоны проводимости рассчитывалось в приближении теории деформационного потенциала [14], с использованием следующих значений продольной m_{\parallel} и поперечной m_{\perp} эффективных масс в минимумах L_1 и Δ_1 соответственно: $m_{\parallel}^L = 1.588m_0$ и $m_{\perp}^L = 0.082m_0$; $m_{\parallel}^{\Delta} = 1.353m_0$ и $m_{\perp}^{\Delta} = 0.288m_0$ [3]. Значения констант деформационного потенциала $\Xi_d(L_1) = -7.65$ эВ, $\Xi_u(L_1) = 17$ эВ и $\Xi_u(\Delta_1) = 10.4$ эВ взяты из справочника [15], а $\Xi_d(\Delta_1) = 0.53$ эВ рассчитано из соотношения $\Xi_d(\Delta_1) + \frac{1}{3}\Xi_u(\Delta_1) = (4.0 \pm 0.3)$ эВ, полученного в работе [16]. Для изотропного сжатия коэффициенты смещения четырех минимумов L_1 и шести минимумов Δ_1 равны соответственно $8.6 \cdot 10^{-7}$ и $5.2 \cdot 10^{-6}$ эВ/дин·см², а для случая $P \parallel \langle 100 \rangle$ коэффициенты смещения четырех минимумов L_1 , двух самых низких минимумов Δ_1 и четырех минимумов Δ_1 равны соответственно $8.7 \cdot 10^{-7}$, $-1 \cdot 10^{-5}$ и $2.5 \cdot 10^{-6}$ эВ/дин·см² [14].

В соответствии с теорией двузонной проводимости, развитой для n -Ge Поллом, Натаном и Бруксом [17] в приближении времени релаксации, физической причиной изменения проводимости сплавов в условиях постоянства полной концентрации электронов $N_0 = n_L + n_{\Delta}$ является изменение средней подвижности $\mu = e\langle\tau\rangle/m^*$. Здесь $n_{L,\Delta}$ — концентрация электронов в L_1 - и Δ_1 -долинах, e — заряд электрона, m^* — эффективная масса электронов, $\langle\tau\rangle$ — усредненное время релаксации. Из факторов, влияющих на величину подвижности в деформированном Ge, а именно перераспределение электронов между долинами, междолинное рассеяние и изменение параметров долин, определяющим является процесс перераспределения носителей тока [18].

В присутствии деформации в сплавах в общем случае будем иметь k_1 самых низких по энергии долин типа L_1 (примем их положение за нуль энергии) и k_2 долин, лежащих по энергии выше, при этом $k_1 + k_2 = 4$. Следующие по энергии долины k_3 типа Δ_1 и самые высокие по энергии долины k_4 , $k_3 + k_4 = 6$. Расстояние между расщепленными долинами k_1 и k_2 (соответственно между долинами k_3 и k_4) зависит только от давления. Если задана полная концентрация электронов N_0 и энергетические расстояния между разными группами долин, то концентрацию электронов в каждой долине $n_{i,j}$ можно определить из уравнения

$$n_i/n_j = \left(N_c^{(i)} / N_c^{(j)} \right) \exp[-(\delta_j - \delta_i)/kT]. \quad (2)$$

Здесь $N_c^{(i,j)}$ — плотность состояний в i, j -минимуме, $\delta_{i,j}$ — энергия i, j -минимума, отсчитываемая от нуля энергии в группе $k_{i,j}$ минимумов.

Тогда полная проводимость определяется по формуле

$$\sigma = e(k_1 n_1 \mu_1 + k_2 n_2 \mu_2 + k_3 n_3 \mu_3 + k_4 n_4 \mu_4). \quad (3)$$

3.2. Механизмы рассеяния. При анализе учитывались реальные механизмы рассеяния электронов в сплавах: акустическими длинноволновыми колебаниями решетки (τ_d), внутримолиновыми оптическими фононами (τ_{opt}), междолинными перебросками между эквивалентными минимумами внутри групп k_1, k_2 и k_3, k_4 , а также между неэквивалентными долинами ($\tau_{i.v}$), ионами примесей ($\tau_{i.i}$) и «сплавного» рассеяния (τ_{al}). Усредненное время релаксации (τ_{tot}) определяется выражением [9]

$$\langle \tau \rangle = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tau_i y^{3/2} e^{-y} dy, \quad (4)$$

здесь $y = E/kT$ — приведенная энергия электрона.

Расчет $\langle \tau_d \rangle$ и $\langle \tau_{opt} \rangle$ в сплавах осуществлялся по стандартным формулам. Учитывалась анизотропия акустического рассеяния в долинах L_1 согласно соотношению $\tau_{||}/\tau_{\perp} = 1.52$ [19], рассеяние в Δ_1 полагалось изотропным [20]. Внутримолиновое рассеяние в долинах L_1 происходит оптическими фононами с характерной энергией 438 К, а в долинах Δ_1 оно пренебрежимо мало [9].

Учитывалось рассеяние электронов фононами между эквивалентными долинами L_1 , рассеяние g -типа между долинами Δ_1 и рассеяние между неэквивалентными долинами $L_1 \rightarrow \Delta_1$ с фононом 320 К, и пренебрежимо малым полагалось рассеяние f -типа фононами 430 К в долинах Δ_1 и рассеяние g -типа фононами 100 К в долинах L_1 , согласно [9]. Параметры фононов, участвующих в рассеянии, приведены в табл. 3.

Расчет $\langle \tau_{i.i} \rangle$ проводился с учетом анизотропии рассеяния в долинах L_1 [20] и изотропного рассеяния в Δ_1 [22].

Таблица 3. Параметры фононов, участвующих в рассеянии электронов в $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$

Переходы	Тип фононов	Θ , К	D_i , эВ/см	Ссылки
Внутримолиновые				
L_1	Акустические	—	12 эВ	[3]
L_1	Оптические	438	$5.5 \cdot 10^8$	[21]
Δ_1	Акустические	—	3.8 эВ	[10]
Междолинные				
$L_1 \rightarrow L_1$	$LO + LA$	320	$2 \cdot 10^8$	[3,21]
$L_1 \rightarrow \Delta_1$	$LO + LA$	320	$4 \cdot 10^8$	[3]
$\Delta_1 \rightarrow \Delta_1$	$LO(g)$	430	$8.3 \cdot 10^8$	[3]
	$LA(g)$	100	$0.8 \cdot 10^8$	[3]
	$LO + LA(f)$	320	—	[3]

Сплавное рассеяние обусловлено рассеянием электронов полях упругих деформаций, возникающих в кристалле из-за различия атомных объемов и атомных псевдопотенциалов компонентов сплава. Полуэмпирические формулы для подвижности электронов μ_{al} в $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ в сплавах получены Гликсманом [23] с учетом экспериментально установленного соотношения подвижности электронов в долинах L_1 и Δ_1 $1/\tau_{\Delta} = 2.9/\tau_L$:

$$\mu(L_1) = 2.8 \cdot 10^4 T^{-0.8} / x(1-x), \quad \mu(\Delta_1) = 9.7 \cdot 10^3 T^{-0.8} / x(1-x). \quad (5)$$

В табл. 4 приведены расчетные формулы обратных времен релаксации в долинах L_1 и Δ_1 с численными коэффициентами в системе CGSE. Здесь

$$S_k = \Theta_k / T, \quad Q(y, S_k - P_{ij}) = \begin{cases} 0, & y < S_k - P_{ij} \\ 1, & y \geq S_k - P_{ij} \end{cases}, \quad P_{ij} = \delta_{ij} / kT,$$

δ_{ij} рассчитывается по формуле (1), N — число долин, в которые осуществляется рассеяние.

Таблица 4. Расчетные формулы обратного времени релаксации

L-долины	Δ-долины
	Акустическое
$1/\tau_{\parallel} = 4.6 \cdot 10^8 T^{3/2} \sqrt{y}$	$1/\tau = 1.8 \cdot 10^8 T^{3/2} \sqrt{y}$
$1/\tau_{\perp} = 1.52(1/\tau_{\parallel})$	
	Примесное
$1/\tau_{\parallel} = 0.07(N_D + N_A)/T^{3/2} y^{3/2}$	$1/\tau = 0.015[(N_D + N_A)/T^{3/2} y^{3/2}] \ln \left[(b+1) - \frac{b}{b+1} \right]$
$1/\tau_{\perp} = 11.85(1/\tau_{\parallel})$	$b = 4 \cdot 10^{14} T^2 / (N_D - N_A)$
	Сплавное
$1/\tau = 3.6 \cdot 10^{11} (y/T)^{0.8} (1-x)x$	$1/\tau = 10.44 \cdot 10^{11} (y/T)^{0.8} (1-x)x$
	Оптическое
$1/\tau = 162.6 \sqrt{T} \{ \dots \},$	
$\{ \dots \} = \{ (\exp S_k - 1) \left[\sqrt{y + S_k + P_{ij}} + Q(y, S_k - P_{ij}) \sqrt{y + S_k + P_{ij}} \exp S_k \right] \}$	
	Междолинное
$L_1 \rightarrow NL_1$	$\Delta_1 \rightarrow N\Delta_1$
$1/\tau = 294N\sqrt{T} \{ \dots \}$	$1/\tau = 1200N\sqrt{T} \{ \dots \}$
$L_1 \rightarrow N\Delta_1$	$\Delta_1 \rightarrow NL_1$
$1/\tau = 381.6N\sqrt{T} \{ \dots \}$	$1/\tau = 1180N\sqrt{T} \{ \dots \}$

4. Результаты эксперимента и их обсуждение

За изменением структуры зоны проводимости и основных параметров носителей тока в кристаллах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ можно проследить, измеряя коэффициент Холла R_H и проводимость σ в деформированных образцах сплавов с разным содержанием Si. На рис. 1 представлены деформационные зависимости относительного сопротивления $\rho(P)/\rho(0)$,

измеренные при температуре 77 К в Ge (кривая 1) и сплавах $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с $x = 0.04, 0.08$ и 0.104 (кривые 2-4 соответственно). Из-за малой механической прочности некоторых образцов зависимость не удалось снять во всем интервале давлений, как, например, для образца с $x = 0.04$ (кривая 2). Типичная зависимость $\rho(P)/\rho(0)$ (кривая 4) проходит через максимум, сдвигаясь с увеличением содержания Si в сторону меньших давлений. На зависимости можно выделить три характерных участка, ширина которых зависит от содержания Si. На участке I в области малых давлений сопротивление Ge практически не изменяется до 15 тс/см^2 , а с ростом содержания Si ширина участка уменьшается. Участок II, соответствующий области увеличения сопротивления, выглядит как резкая ступенька на кривой и в образцах с высоким содержанием Si наблюдается при меньших величинах давления. Участок III соответствует области насыщения сопротивления в Ge (кривая 1) или области максимума в сплавах (кривые 3, 4). С ростом давления после достижения максимума сопротивление немного уменьшается, пока не достигнет насыщения.

Деформационные зависимости относительного коэффициента Холла и холловской подвижности в сплаве с $x = 0.104$ при 150 К представлены на рис. 2, где $R_H(0, P)$ и $\mu(0, P)$ — значения в исходных и деформированных образцах. Вертикальной чертой отмечено давление, при котором имеет место инверсия. Возвращение постоянной Холла с ростом P к ее первоначальному значению (кривая 1) показывает, что в

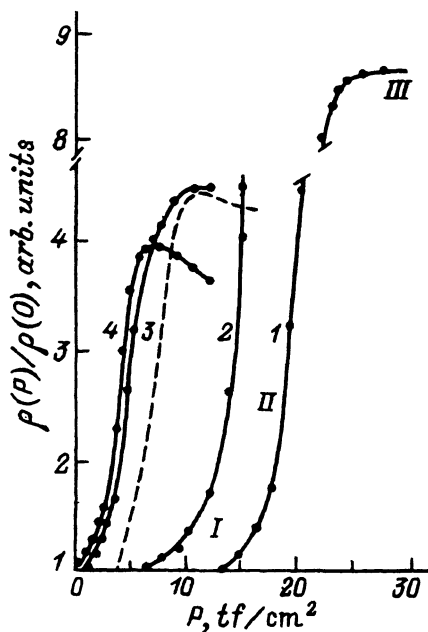


Рис. 1. Зависимости относительного сопротивления от одноосевого давления $P \parallel \langle 100 \rangle$ для Ge (кривая 1) и $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с $x = 0.04, 0.08, 0.104$ (кривые 2-4 соответственно) при $T = 77$ К. Штриховой линией показана расчетная зависимость для сплава с $x = 0.08$.

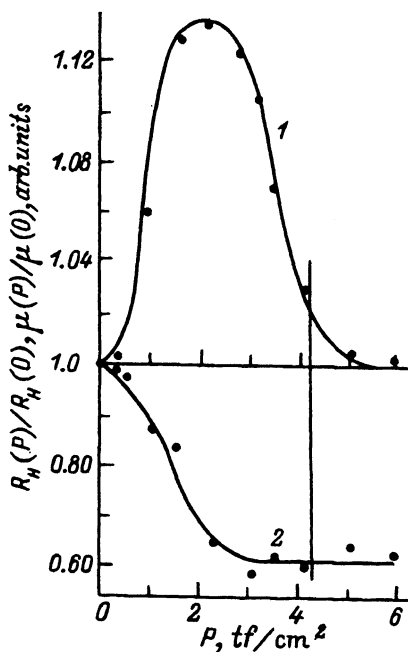


Рис. 2. Деформационные зависимости относительной постоянной Холла (кривая 1) и холловской подвижности электронов (кривая 2) в $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с $x = 0.104$. Эксперимент, $P \parallel \langle 100 \rangle$, 77 К.

исследуемом образце переход электронов в минимумы Δ_1 происходит бездефектно в глубоко лежащие примесные уровни, связанные с минимумами Δ_1 . Таким образом, в интервале $77 \div 300$ К полная концентрация электронов в зоне проводимости практически не зависит от деформации. Переход электронов в минимумы Δ_1 с ростом давления сопровождается уменьшением холловской подвижности до насыщения, определяемого величиной $\mu(\Delta_1)$ (кривая 2). Ступенька на зависимости $\mu(P)$ сдвигается в сторону больших деформаций для сплавов с малым содержанием Si, как иллюстрирует рис. 3, на котором приведены деформационные зависимости подвижности электронов при 150 К для сплавов с $x = 0.056$ и 0.104 (кривые 1 и 2 соответственно).

Температурная зависимость холловской подвижности в исходном и деформированном образце с $x = 0.104$ приведена на рис. 4. Видно, что уже при давлении 6 тс/см² изменился наклон зависимости $\mu(T) \sim T^{-\alpha}$. Уменьшение в деформированном образце показателя степени ниже $\alpha = 1.7$, характерного для рассеяния акустическими фонами в долинах L_1 , свидетельствует об изменении механизма рассеяния. Из-за сильного влияния сплавного рассеяния, изменяющего как величину, так и температурную зависимость подвижности, показатель α в сплавах меньше значения, характерного для чисто акустического рассеяния в долинах Δ_1 , а величина подвижности меньше $\mu(\Delta_1) = 1100$ см²/В · с в германии [17,18].

Проанализируем изменение процессов рассеяния, ограничивающих подвижность электронов при изменении P и x , трансформирующих зону проводимости. В расчетах, кроме одноосного в направлении $\langle 100 \rangle$ сжатия, рассматривался еще и случай изотропного сжатия. При одноосной деформации реализуется ситуация трех групп долин: самые низкие по энергии четыре долины L_1 , следующие — две долины Δ_1 и

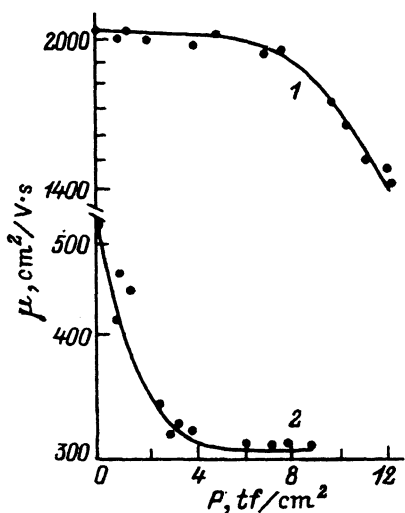


Рис. 3. Деформационные зависимости холловской подвижности электронов в $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с $x = 0.056$ и 0.104 (кривые 1 и 2 соответственно). Эксперимент, $P \parallel \langle 100 \rangle$, 150 К.

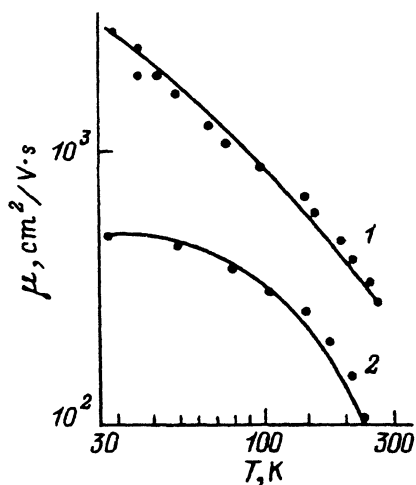


Рис. 4. Температурная зависимость холловской подвижности электронов в $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с $x = 0.104$ (в исходном — кривая 1 и деформированном образце — кривая 2). Эксперимент, $P \parallel \langle 100 \rangle$, $P = 6$ тс/см².

затем четыре долины Δ_1 . В принятых обозначениях $k_1 = 4$, $k_2 = 0$, $k_3 = 2$, $k_4 = 4$, а абсолютные смещения долин, вычисленные согласно (1), равны (δ_{ij} — в эВ, P — в тс/см²)

$$\delta_2 = \delta_{42} = -0.18 + 1.29x + 0.011P,$$

$$\delta_3 = \delta_{44} = -0.18 + 1.29x - 0.002P,$$

$$\delta_4 = \delta_{24} = -0.012P.$$

Здесь δ_{42} — щель между четырьмя L_1 и двумя долинами Δ_1 , δ_{44} — между четырьмя L_1 и четырьмя Δ_1 , δ_{24} — между двумя и четырьмя долинами Δ_1 . При встречном смещении четырех L_1 и двух долин Δ_1 с давлением энергетическая щель между ними вначале уменьшается, а после инверсии долины расходятся.

Подвижность в разных группах долин рассчитывалась по формулам

$$\mu_1 = e \left[\frac{\langle \tau_{\parallel} \rangle}{3m_{\parallel}} + \frac{2\langle \tau_{\perp} \rangle}{3m_{\perp}} \right], \quad \mu_3 = \frac{e\langle \tau \rangle}{m_{\parallel}}, \quad \mu_4 = \frac{e\langle \tau \rangle}{m_{\perp}}, \quad (7)$$

где m_{\parallel} , m_{\perp} — компоненты тензоров эффективной массы соответствующих долин, а проводимость определялась из соотношения

$$\sigma = e[4n_1\mu_1 + 2n_3\mu_3 + 4n_4\mu_4].$$

При изотропном сжатии наблюдаются две группы долин: шесть долин типа Δ_1 симметрично смещаются относительно четырех долин L_1 . Таким образом, $k_1 = 4$, $k_2 = 0$, $k_3 = 6$, $k_4 = 0$, разделяющая долины щель равна

$$\delta_3 = \delta_{46} = -0.18 + 1.29x + 6.06 \cdot 10^{-6}P. \quad (8)$$

Подвижности μ_1 и μ_3 определялись по формулам (7), а проводимость из соотношения

$$\sigma = e[4n_1\mu_1 + 6n_3\mu_3].$$

Перестройка зоны проводимости для обоих видов деформации качественно подобна, поэтому проиллюстрируем роль процессов рассеяния в ограничении подвижности электронов в долинах L_1 и Δ_1 расчетными зависимостями для случая изотропного сжатия образцов. Рассмотрим зависимости $\mu(T)$ на примере деформированного сплава с $x = 0.1$ и концентрацией примеси 10^{14} см⁻³ для крайних случаев германиеподобного и кремниеподобного полупроводника, реализующихся при $p = 0$ и 10 кбар соответственно (рис. 5). Видно, что в германиеподобном сплаве в интервале 100–300 К в долинах L_1 доминирует рассеяние акустическими фононами, с ним конкурирует сплавное, а междолинное рассеяние, как в германии, мало. В условиях приближения инверсии роль рассеяния между неэквивалентными долинами возрастает, так что в кремниеподобных сплавах основную роль играет междолинное рассеяние наряду со сплавным.

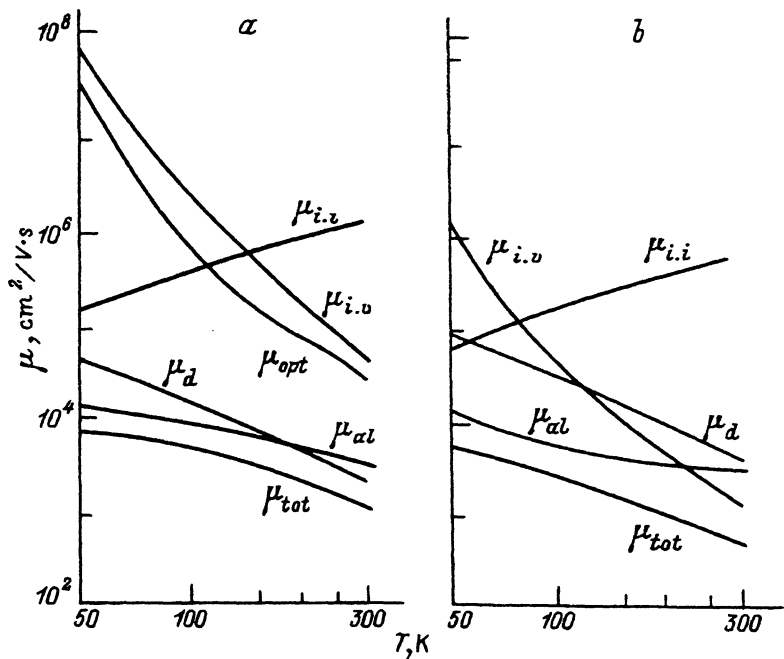


Рис. 5. Температурные зависимости холловской подвижности электронов в $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ с $x = 0.1$, обусловленные разными механизмами рассеяния. Расчет при концентрации примеси $N = 10^{14} \text{ см}^{-3}$: а — в долинах L_1 ($P = 0$), б — в долинах Δ_1 (изотропное сжатие, $P = 10$ кбар).

Последнее позволяет однозначно идентифицировать механизм изменения деформационной зависимости сопротивления сплавов (рис. 1). На участке I реализуется ситуация германиеподобного полупроводника со слабо эффективными междолинными (между L_1 и Δ_1) переходами. Пока минимумы Δ_1 расположены высоко, проводимость осуществляется по зоне L_1 , концентрация электронов в минимумах L_1 постоянна, а подвижность μ_1 определяется эффективной массой проводимости $m_c(L) = 0.119m_0$. Уменьшение энергетической щели $\delta_{L\Delta}$ приводит к увеличению заселенности минимумов Δ_1 и уменьшению средней подвижности примерно на порядок из-за участия в переносе электронов с большой эффективной массой $m_{\parallel}(\Delta) = 1.353m_0$ и возросшей интенсивности междолинных переходов. Оба упомянутых выше фактора приводят к резкому росту сопротивления с давлением (рис. 1, участок II). Рост сопротивления продолжается и после инверсии, пока минимумы L_1 частично заселены. Уменьшение междолинного рассеяния из-за удаления друг от друга долин L_1 и Δ_1 приводит к небольшому увеличению средней подвижности и уменьшению сопротивления до насыщения (рис. 1, участок III), определяемого значением μ_3 (7).

В крайних случаях германиеподобного и кремниеподобного полупроводника были рассчитаны подвижность электронов в минимумах L_1 и Δ_1 и проводимость. Добиваясь наилучшего совпадения расчета с экспериментом, мы установили набор констант связи электронов с фононами. Подгонка параметров проводилась по деформационной зависимости относительно сопротивления сплавов с учетом зависимо-

сти их параметров от содержания Si (табл. 2). Наилучшее совпадение получено при значениях параметров, приведенных в табл. 3. Так, деформационный потенциал акустического фонона в долинах Δ_1 равен 3.8 эВ, что соответствует значению, полученному Ахмадом и Адамсом [10], а не величине 6 или 9 эВ, приведенной Фоссетом и Канали [3,21]. Величина константы деформационного потенциала $2 \cdot 10^8$ эВ/см для рассеяния между неэквивалентными долинами $L_1 \rightarrow \Delta_1$ с фононом 320 К не выходит за рамки известных из литературы значений $1.6 \cdot 10^8$ и $3 \cdot 10^8$ эВ/см [3,21]. Константа деформационного потенциала для междолинного $\Delta \rightarrow \Delta$ g -рассеяния (430 К) в сплавах $8.3 \cdot 10^8$ эВ/см близка к значению $9.46 \cdot 10^8$ эВ/см для германия [3]. Для кремния она равна $3 \cdot 10^8$ эВ/см [24].

Для сплавов с $0 < x < 0.04$ расхождение расчетных и экспериментальных деформационных зависимостей сопротивления не превышало нескольких процентов. Для сплавов с большей концентрацией Si имело место лишь качественное подобие кривых, как видно из рис. 1, например для сплава с $x = 0.08$ (кривая 3 — эксперимент, штриховая — расчет). Количественное несоответствие экспериментальных и расчетных значений в первую очередь связано с присутствием крупномасштабных флуктуаций состава в реальных образцах с большим содержанием Si. Особенно большие различия расчетных и экспериментальных зависимостей кинетических коэффициентов имеют место в области инверсии из-за использования в расчетах усредненных по образцу значений x .

Таким образом, в настоящей работе экспериментально, на примере сплавов $Ge_{1-x}Si_x$, выяснены условия достижения инверсии зон $L_1 \rightarrow \Delta_1$ в деформированных образцах с разным содержанием Si, расчетным путем установлены доминирующие механизмы рассеяния. Последнее позволило в приближении времени релаксации рассчитать температурные и деформационные зависимости подвижности и проводимости и установить набор констант электрон-фононной связи.

В заключение автор считает своим долгом выразить глубокую благодарность проф. О.Г. Сарбею за полезную критику и обсуждение результатов.

Список литературы

- [1] E.R. Johnson, S.M. Christian. Phys. Rev., **95**, 560 (1954).
- [2] F. Bassani, D. Brust. Phys. Rev., **131**, 1524 (1963).
- [3] W. Fawcett, E.G.S. Paige. J. Phys. C, **4**, 1801 (1971).
- [4] Z. Dobrovolskis. Phys. St. Sol. (b), **58**, K59 (1973).
- [5] J.C. McGroddy, M.J. Nathan. IBM J. Res. Dev., **11**, 337 (1967).
- [6] E.G.S. Paige. IBM J. Res. Dev., **13**, 562 (1969).
- [7] C. Jacoboni. Phys. Rev. (B), **24**, 1014 (1981).
- [8] П.И. Баранский, В.В. Коломеец, Б.А. Сусь. ФТП, **13**, 602 (1979).
- [9] М. Аше, З.С. Грибников, В.В. Митин, О.Г. Сарбей. *Горячие электроны в многодолинных полупроводниках* (Киев, Наук. думка, 1957).
- [10] C.N. Ahmad, A.R. Adams. Phys. Rev. B, **34**, 2319 (1986).
- [11] И.Н. Белокурова, М.Г. Кекуа, Д.А. Петров. Изв. АН СССР. Неорг. матер., № 1, 9 (1959).
- [12] E. Shmidt. Phys. St. Sol., **27**, 57 (1968).
- [13] R.A. Logan, J.M. Rowell, F. Trumbore. Phys. Rev., **136**, 1751 (1964).

- [14] К. Херринг, Е. Фогт. В кн.: *Проблемы физики полупроводников* (М., Физматгиз, 1957).
- [15] П.И. Баранский, В.П. Клочков, И.В. Потыкевич. *Полупроводниковая электроника* (Киев, Наук. думка, 1975).
- [16] Т. Arizumi, A. Yoshida, N. Sawaki. *Japan. J. Appl. Phys.*, **8**, 700 (1969).
- [17] M.J. Nathan, W. Paul, H. Brooks. *Phys. Rev.*, **124**, 391 (1961).
- [18] K. Fletcher, G.D. Pitt. *J. Phys. C*, **4**, 1822 (1971).
- [19] В.М. Бондар, О.Г. Сарбей, П.М. Томчук. *ФТТ*, **8**, 2511 (1966).
- [20] А.Г. Самойлович, И.Я. Коренблит, И.В. Лаховский. *ФТТ*, **3**, 3285 (1961).
- [21] C. Canali, C. Jacoboni, F. Nava. *Sol. St. Commun.*, **26**, 889 (1978).
- [22] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Физматгиз, 1962).
- [23] M. Glicksman. *Phys. Rev.*, **111**, 125 (1958).
- [24] D.L. Rode. *Phys. St. Sol. (b)*, **53**, 245 (1972).

Редактор Т.А. Полянская

Electron Transport in $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ Alloys at Low Electric Fields

S.I. Shahovtsova

Institute of Physics of the Ukrainian Academy of Sciences, Kiev, Ukraine

Hall-effect and resistivity measurements have been made on n -type $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ semiconductor alloys ($0 < x < 0.14$). The electron transport peculiarities at low electric fields are a consequence of the c -band rearrange at stress applied along $\langle 100 \rangle$ direction and with Si content lead to $L_1 \rightarrow \Delta_1$ minima inversion. The conditions of c -band inversion are established and the dependencies of kinetic coefficients on Si contents, temperature and stress are measured. The contribution of each type of scattering to electron mobility limitation is determined. It was found that acoustic and alloy scattering dominant in germaniumlike structure but intervalley and alloy scattering dominant in siliconlike structure. The coupling constants between valleys were established in $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ alloys.