ВЛИЯНИЕ ДЕФОРМАЦИИ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДЫРОЧНОГО ГЕРМАНИЯ И КРЕМНИЯ

Г. Е. Пикус и Г. Л. Бир

Как показали первые, пока еще немногочисленные работы [1], изучение влияния деформации на электрические свойства полупроводников может дать важные сведения об их зонной структуре. Особый интерес представляет изучение этих эффектов при вырожденных зонах, как это имеет место в случае валентных зон германия и кремния. При деформации по определенным направлениям вырождение частично или полностью снимается, что и приводит к большим эффектам. Как теоретически, так и экспериментально влияние деформации на электрические свойства этих полупроводников детально не рассматривалось.

В настоящей работе выведено выражение для спектра дырок в деформированном кристалле. Из общей формулы получены предельные выражения для энергии, одно из которых справедливо на достаточном удалении от края зоны и с точностью до численного множителя при одном из членов совпадает с формулой Адамса [2], а другое, наоборот, справедливо у края зоны. Из этих формул следует, что в то время как при высоких температурах эффекты пьезосопротивления пропорциональны деформации и относительно малы, при достаточно низких температурах электрические свойства деформированного кристалла становятся резко анизотропными, причем степень анизотропии вообще не зависит от величины деформации, а определяется только ее направлением. При малых деформациях мы можем определить $E(\mathbf{k})$ вблизи края зоны в деформированном кристалле, рассматривая члены, содержащие $\mathbf{k}$ и деформацию как возмущение. Значение $E(\mathbf{k})$ мы получим из соответствующего секулярного уравнения. Для того чтобы при этом можно было использовать обычную теорию возмущения, мы должны, как и в опубликованной ранее работе [3], провести обратное преобразование координат, совмещающее деформированную элементарную ячейку с недеформированной. Учитывая обычным образом спинорбитальное взаимодействие, для $E(\mathbf{k})$ получим

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = Ak^2 + a\Delta \pm \sqrt{E_k + E_{\varepsilon k} + E_\varepsilon}, \tag{1}$$

где

$$E_k = B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_x^2k_z^2 + k_y^2k_z^2). \tag{2}$$

$$E_\varepsilon = \frac{b^2}{2}\left[(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})^2 + (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})^2 + (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})^2\right] + d^2(\varepsilon_{xy}^2 + \varepsilon_{xz}^2 + \varepsilon_{yz}^2) \tag{3}$$

$$E_{\varepsilon k} = Bb[3(k_x^2\varepsilon_{xx} + k_y^2\varepsilon_{yy} + k_z^2\varepsilon_{zz}) - k^2D] + 2Dd(k_xk_y\varepsilon_{xy} + k_xk_z\varepsilon_{xz} + k_yk_z\varepsilon_{yz}) \tag{4}$$

Здесь a, b, d — комбинации матричных элементов оператора $\hat{D}$

$$\left.\begin{aligned} D^{ij} = \left(\frac{\hbar^2}{me}\frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + V_{ij}\right); \quad V_{ij} = \frac{\partial v\,[(1+\{\varepsilon\})x]}{\partial \varepsilon_{ij}}\Big|_{\varepsilon=0} = 0 \\ a = \frac{D^{xx}_{xx} + 2D^{xx}_{yy}}{3}\,;\ b = \frac{D^{xx}_{xx} - D^{xx}_{yy}}{3}\,;\ d = \frac{2D^{xy}_{xy}}{\sqrt{3}} \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

Значки внизу указывают, между какими из функций X, Y, Z вычисляются матричные элементы.

А, В и С — известные константы [4], определяющие эффективные массы в недеформированной решетке, $D^2 = C^2 + 3B^2$, а V — самосогласованный потенциал в деформированной решетке.

Низкие температуры

При низких температурах и достаточно больших деформациях практически все дырки находятся в области таких малых значений $\mathbf{k}$, что мы можем опустить член E_k в (1) и разложить подкоренное выражение по степеням $\frac{E_{\varepsilon k}}{E_\varepsilon}$; ограничиваясь первым членом разложения, получим в системе координат, связанной с главными осями тензора $\{\varepsilon'_{ij}\}$,

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = a\Delta \pm \sqrt{E_\varepsilon} + \frac{\hbar^2}{2}\sum_i \frac{k_i^2}{m_{i\pm}}\,, \tag{6}$$

где

$$\frac{1}{m_{i\pm}} = \frac{2}{\hbar^2}\left[A \pm \frac{Bb}{2\sqrt{E_\varepsilon}}\,(3\varepsilon''_{ii} - \Delta)\right]. \tag{7}$$

Здесь ε''_{ii} — компоненты тензора $\varepsilon'_{ij} = \begin{cases} \varepsilon_{ij} & i = j \\ \frac{Dd}{3Bb}\varepsilon_{ij} & i \neq j \end{cases}$ в его главных осях; $\{\varepsilon_{ij}\}$ — тензор деформации, $\Delta = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}$.

Видно, что эффективные массы $m_{i\pm}$ не зависят от абсолютной величины деформации, а только от ее направления и знака. Конечно, чем больше деформация, тем шире область спектра, где применимо разложение (6). Из-за расщепления зон при этом все дырки перейдут в нижнюю зону, вследствие чего электрические свойства полупроводников станут резко анизотропными. Эту деформацию энергетических зон можно определить по циклотронному резонансу или по наблюдению других электрических или оптических свойств.

Высокие температуры

При высоких температурах основная масса дырок находится в области больших значений $\mathbf{k}$, таких, что E_k намного больше, чем E_ε. Пренебрегая членом E_ε в (1) и раскладывая подкоренное выражение по степеням $\frac{E_{\varepsilon k}}{E_k}$, получим, ограничиваясь первым членом разложения, в главных осях тензора: $\{\varepsilon'_{ij}\}$

$$E_{1,2}(\mathbf{k}) = E^0_{1,2} + \Delta E_{1,2}(\mathbf{k}) = Ak^2 \pm \sqrt{E_k} \pm \frac{Bb}{2}\sum_i \frac{3k_i^2 - k^2}{\sqrt{E_k}}\,\varepsilon''_{ii}\,. \tag{8}$$

Изменение проводимости $\Delta\sigma_{ij}$ и холловской проводимости $\Delta\sigma_{ij\nu}$ (5) при деформации связано, во-первых, с непосредственным изменением групповой скорости $\Delta v_i \sim \frac{\partial \Delta E}{\partial k_i}$, во-вторых, с перераспределением носителей в **k** пространстве вследствие изменения показателя экспоненты и, в третьих, с изменением τ. При этом τ меняется как вследствие явной зависимости τ от энергии, так и за счет изменения матричного элемента. Если не учитывать изменение матричного элемента и предполагать, что τ зависит только от энергии, то для двух независимых компонент тензоров λ_{ijml} и $\zeta_{ij\nu ml}$, определяющих изменение проводимости и холловской проводимости каждого из типов дырок при деформации, получим

$$\lambda_{xxxx} = \frac{\Delta\sigma_{xx}}{\sigma_0 \varepsilon_{xx}} = \pm \frac{3}{5} \frac{Bb}{\sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}} \frac{\varphi(T)}{k_0 T}; \quad \lambda_{xyxy} = \frac{\Delta\sigma_{xy}}{\sigma_0 \varepsilon_{xy}} = \pm \frac{3}{10} \frac{Dd}{\sqrt{B^2 + \frac{C^2}{5}}} \frac{\varphi(T)}{k_0 T}; \quad (9)$$

$$\zeta_{xyzzz} = \frac{\Delta\sigma_{xyz}}{\sigma_{0xyz}\varepsilon_{zz}} = -\varphi_2(T)\,\lambda_{xxxx}; \quad \zeta_{xyyzy} = \frac{\Delta\sigma_{xyy}}{\sigma_{0xyz}\varepsilon_{zy}} = -\varphi_2(T)\,\lambda_{xyxy}; \quad (10)$$

$$\varphi(T) = \frac{k_0 T \langle\tau\rangle}{\langle\tau E_0\rangle}; \quad \varphi_2(T) = \frac{\langle\tau^2\rangle \langle\tau E_0\rangle}{\langle\tau^2 E_0\rangle \langle\tau\rangle}. \quad (11)$$

Скобки $\langle\,\rangle$ означают максвелловское усреднение. Здесь σ_0 и σ_{0xyz} — проводимость и холловская проводимость в недеформированном кристалле. Из формул видно, что относительное изменение проводимостей порядка $\frac{b\varepsilon}{k_0 T}$ или $\frac{d\varepsilon}{k_0 T}$.

В заключение отметим, что особый характер изменения спектра при деформации при наличии вырождения открывает новые возможности для изучения процессов рассеяния носителей тока.

Если при низкой температуре „нагреть" газ дырок в деформированном кристалле постоянным или высокочастотным электрическим полем, то, наблюдая затем изменение, например, пьезосопротивления со временем, можно изучить кинетику остывания газа дырок и перехода их из одной зоны в другую.

Литература

[1] C. Smith. Phys. Rev., *94*, 42, 1954; F. J. Morih, T. H. Geballe, C. Herring. Phys. Rev., *105*, 525, 1957; R. Keys. Phys. Rev., *103*, 1240, 1956. — [2] E. N. Adams. Phys. Rev. *96*, 803, 1954. — [3] Г. Е. Пикус. ЖТФ. **28**, 2592, 1958. — [4] G. Dresselhaus, A. Kip, C. Kittel. Phys. Rev., **98**, 368, 1955. — C. Herring. Bell Syst. Tech. J. *34*, 237, 1955,

Поступило в Редакцию
28 октября 1958 г.