

УДК 533.1, 549.9,53:51

Я.С. Буджак, А.О. Дружинін, І.В. Павловський, Ю.М. Ховерко
**Питомий опір кремнію р-типу провідності в умовах екранування
домішкових центрів носіями заряду**

Національний університет "Львівська політехніка"
вул. С. Бандери, 12, м. Львів-13, 79013
E-mail: druzh@polynet.lviv.ua

Проведено вимірювання питомого опору ниткоподібних кристалів кремнію р-типу провідності в температурному інтервалі (4,2-300) К. Показано, що в досліджуваних зразках акцептори екрануються дірками, що призводить до зменшення їх енергії активації.

Ключові слова: енергія активації, питомий опір, ниткоподібний кристал, коефіцієнт Зеебека, закон дисперсії.

Стаття поступила до редакції 12.06.2002; прийнята до друку 20.07.2002

Наявність у валентній зоні кремнію р-типу провідності легких і важких дірок обумовлює всі кінетичні властивості цього матеріалу. Закони дисперсії цих дірок у сферичній системі координат, відповідно, описуються такими загальними формулами:

$$p = \Psi_1(\vartheta, \varphi)P(\varepsilon) = \Psi_1(\vartheta, \varphi)\sqrt{\varepsilon} \quad (1)$$

$$p = \Psi_2(\vartheta, \varphi)P(\varepsilon) = \Psi_2(\vartheta, \varphi)\sqrt{\varepsilon} \quad (2)$$

У цих формулах р-модуль вектора квазіімпульса \vec{p} дірок, $\Psi_1(\vartheta, \varphi)$ і $\Psi_2(\vartheta, \varphi)$ – відомі функції кутів напрямку вектора \vec{p} для легких і важких дірок, а $P(\varepsilon) = \varepsilon^{1/2}$ – функція енергії носіїв заряду.

У роботі [1] показано, що якщо ввести для дірок спільну ефективну масу густини станів m_{cp}^* , то розрахунки властивостей домішкового кремнію р-типу можна виконувати подібно як для кристалів р-типу провідності з ізотропним законом дисперсії.

$$p = \sqrt{2m_{cp}^*} P(\varepsilon) = \sqrt{2m_{cp}^*} \varepsilon; \varepsilon = \frac{p^2}{2m_{cp}^*} \quad (3)$$

Ефективна маса густини станів m_{cp}^* , що входить у формулу (3) визначається з наступного співвідношення:

$$m_{cp}^* = [(m_{c1}^*)^{3/2} + (m_{c2}^*)^{3/2}]^{2/3} \quad (4)$$

В формулі (4) m_{c1}^* та m_{c2}^* – ефективні маси густини станів для легких і важких дірок, відповідно дорівнюють :

$$m_{c1}^* = \left(\frac{1}{4\pi 2^{3/2}} \int \Psi_1(\vartheta, \varphi)^3 d\Omega \right)^{2/3} \quad (5)$$

$$m_{c2}^* = \left(\frac{1}{4\pi 2^{3/2}} \int \Psi_2(\vartheta, \varphi)^3 d\Omega \right)^{2/3} \quad (6)$$

Як показано в роботах [2-4], концентрація носіїв заряду (n), питомий опір (ρ), коефіцієнт ефекту Зеебека (α) в кристалах із законом дисперсії (3) відповідно описуються такими загальними формулами:

$$n(\mu, T) = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi m_{cp}^*}{h^2} \right)^{3/2} I_{00}(\mu, T), \quad (7)$$

$$\rho(\mu, T) = \frac{1}{en(\mu, T)U_0^{(r)}(T)} \frac{I_{00}(\mu, T)}{I_{01}(\mu, T)}, \quad (8)$$

$$\alpha = \left(\frac{k}{ze} \right) \left[\frac{I_{11}(\mu, T)}{I_{01}(\mu, T)} - \mu^* \right]. \quad (9)$$

В цих формулах для зручності записів уведені наступні позначення:

$$I_{ij}(\mu, T) = \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^i (P(\varepsilon))^{(2i-3)} \left(\frac{d\varepsilon}{dP} \right)^2 P(\varepsilon)^3 \left(-\frac{df_0}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon, \quad (10)$$

де h – постійна Планка, k – постійна Больцмана, e –

величина заряду електрона, z – знак носія заряду, f_0 –

функція Фермі-Дірака, γ – показник розсіювання, який залежить від механізмів розсіювання носіїв зарядів в кристалах (наприклад, $\gamma = 0$, для розсіювання на акустичних фонах, $\gamma = 2$, для розсіювання на іонізованих домішках), $U_0^{(f)}(T)$ – відома функція рухливості, яка залежить від механізмів розсіювання і температури.

Хімічний потенціал μ , або $\mu^* = \mu/kT$, є коренем рівняння нейтральності, структура якого залежить від природи кристала та від типу і концентрації домішки

$$L(\mu, T) = n(\mu^*, T) + N_d - \frac{N_a}{1 + (1/2) \exp\left(\frac{\Delta E_a}{kT} + \mu^*\right)} = 0, \quad (11)$$

де ΔE_a – енергія активації акцепторної домішки.

Це рівняння для невироджених дірок і постійної

в кристалі.

Для кристалів р-типу провідності, легованих однотипними донорами і акцепторами з відповідними концентраціями N_d і N_a в інтервалі температури, в якому відсутні власні переходи, рівняння нейтральності має такий вигляд:

енергії активації має аналітичний розв'язок [4]:

$$\mu^* = \ln\left(\frac{n(T)}{N_v(T)}\right); N_v(T) = \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi m_{cp}^*}{h^2}\right)^{3/2} \int_0^\infty \left(\frac{P(\varepsilon)}{kT}\right)^3 \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right) d\varepsilon, \quad (12)$$

$$\text{де } n(T) = \left(\frac{2N_d}{1+2x(T)}\right) \left(\frac{C-1}{1+Y(T)^{1/2}+1}\right), \quad (12a)$$

$$x(T) = \frac{N_d}{2n_a(T)}; n_a(T) = N_v(T) \exp\left(-\frac{\Delta E_a}{kT}\right), \quad (12б)$$

$$y(T) = \frac{4(c-1)x(T)}{1+x(T)^2}, \quad C = \frac{N_a}{N_d}. \quad (12в)$$

Як видно із рівняння (11) і формул (12-12в) хімічний потенціал сильно залежить від енергії активації ΔE_a , яка при умові екранування домішкових центрів електронами дуже залежить від їх концентрації, тобто при таких умовах ΔE_a залежить від хімічного потенціалу.

В роботах [4,5] показано, що для мілких енергетичних рівнів в умовах екранування енергія активації цих рівнів описується наступною формулою:

$$\Delta E_a(\mu, T) = \left(\frac{Z^2 I_0}{\chi^2}\right) \left(\frac{m_{cp}^*}{m_0}\right) F(x, y). \quad (13)$$

В цій формулі Z – кратність іонізації домішкового центра, (m_{cp}^*/m_0) – відносна ефективна маса густини станів, χ – діелектрична постійна кристала, $I_0 = 13,6$ еВ – енергія іонізації атома водню, $F(x, y)$ – функція екранування, яка має таке значення:

$$F(x, y) = \left(2\frac{(x-1)^3}{yx^2} - \frac{(x-1)^2}{y^2}\right), \quad (14)$$

$$x = x(y) = \frac{y}{3} \left[1 + 2(1 + 3/y)^{1/2} \cos(\varphi(y)/3)\right], \quad (15)$$

$$\cos \varphi(y) = \frac{\left(1 + \frac{9}{2y} - \frac{27}{y^2}\right)}{\left(1 + \frac{3}{y}\right)^{3/2}}, \quad (16)$$

$$y = \frac{2r_0}{a^*} = \frac{2r_0}{a_0 \chi} \left(\frac{m_c^*}{m_0}\right) = \frac{2}{a_0} \left(\frac{m_c^*}{m_0}\right) \left(\frac{1}{4\pi e^2 \chi} \left(\frac{dn}{d\mu}\right)^{-1}\right)^{1/2}, \quad (17)$$

де $a_0 = 0,53 \cdot 10^{-8}$ см – радіус борівської орбіти атома водню, r_0 – радіус екранування.
у дорівнює:

$$y = \frac{3,83 \cdot 10^{-3}}{[\chi I(\mu, T)]^{1/2}} \left(\frac{m_c^*}{m_0} \right)^{1/4};$$

Аналіз формули (18) показує, що збільшення концентрації носіїв заряду призводить до зменшення величини (y), тобто $(dy/dn) \leq 0$.

Формули (17) і (18) для невідроджених і сильно вироджених носіїв струму відповідно приводяться до таких виразів (y):

$$y = 2,6086 \times 10^9 \left(\frac{m_{cp}^*}{m_0} \right) \left(\frac{T}{\chi n} \right)^{1/2}, \quad (18a)$$

$$y = \frac{3,83 \cdot 10^{-3}}{\left[\chi \left(\frac{2 dP^3}{3 d\mu} \right) \right]^{1/2}} \left(\frac{m_{cp}^*}{m_0} \right). \quad (18б)$$

Легко можна показати, що для $y = 2$ функція екранування $F(x, y) = 0$, а при зміні величини у в інтервалі $2 < y \leq \infty$ ця функція монотонно і асимптотично зростає в інтервалі $0 < F(x, y) \leq 1$.

Фізично це означає, що за умови $y \leq 2$, локальні енергетичні рівні акцепторів зливаються із валентною зоною, тому електрони валентної зони захоплюються акцепторами на їх валентні орбіти без затрати енергії. Внаслідок таких переходів у

$$y = \frac{3,83 \cdot 10^{-3}}{[\chi I(\mu, T)]^{1/2}} \left(\frac{m_c^*}{m_0} \right) \leq 2; \quad I(\mu, T) = \int_0^\infty \left(\frac{2 dP^3}{3 d\varepsilon} \right) \left(- \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad (19в)$$

Рівняння нейтральності (11) і (19) та їх корені m сильно відрізняються між собою. Тому в кристалах з екранованими домішковими центрами при низьких температурах може відбуватися немонотонний перехід від рівняння нейтральності (11), якщо $y > 2$, до рівняння нейтральності (19), якщо $y \leq 2$. Це призводить до немонотонної зміни хімічного потенціалу $\mu^*(T)$, концентрації носіїв струму $n(\mu, T)$, $\rho(T)$ і коефіцієнта Зеебека $\alpha(T)$ від температури.

Отже, в досліджуваних кристалах має місце умова екранування мілких акцепторів дірками. Тому при температурі рідкого гелію, як показують оцінки, в кристалі існує $\sim 10^{15} \text{ см}^{-3}$ дірок і вони невідроджені.

Для закону дисперсії (3) величина

$$I(\mu, T) = \int_0^\infty \left(\frac{2 dP^3}{3 d\varepsilon} \right) \left(- \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon. \quad (18)$$

валентній зоні появляються дірки, а самі акцептори іонізуються негативно.

При такій умові рівняння нейтральності (9) набуває наступного вигляду:

$$L(\mu, T) = n(\mu^*, T) + N_d - N_a = n(\mu^*, T) - n_0 = 0, \quad (19)$$

яке можна записати таким чином:

$$n(\mu^*, T) = N_a - N_d = n_0. \quad (19a)$$

Необхідно відмітити, що рівняння (19a) може мати місце при умові виснаження некомпенсованої домішки в кристалі, тобто, якщо у формулі (12 а) величина $x(T) < 0$. Однак при цьому носії заряду повинні бути невідроджені а їх концентрація повинна відповідати умові:

$$y = 2,6086 \cdot 10^9 \left(\frac{m_{cp}^*}{m_0} \right) \left(\frac{T}{\chi n} \right)^{1/2} \gg 1 \quad (19б)$$

Отже, при наявності екранування носії заряду, концентрація яких задовольняє рівняння (19a), повинні бути виродженими, а їх хімічний потенціал задовольняти умову:

Наведена вище теоретична концепція дає можливість якісно пояснити експериментальні температурні залежності омичного опору ниткоподібних кристалів кремнію р-типу провідності в інтервалі температури (4,2÷300) К, (рис. 1). Вимірювання проводилось на ниткоподібних кристалах кремнію р-типу, вирощених із матеріалу, в якому, згідно із сертифікатом, ймовірна концентрація мілких акцепторів дорівнює $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [6].

У цьому випадку інтеграли $I_{ij}(\mu, T)$, які входять у формули (7-9) апроксимуються такими наближеннями:

$$I_{ij}(\mu, T) = J_{ij}(T) \exp(\mu^*), \quad (20)$$

$$J_{ij}(T) = \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon}{kT} \right)^i \left[P(\varepsilon)^{(2r-3)} \left(\frac{d\varepsilon}{dP} \right)^2 \right]^j \left(\frac{P(\varepsilon)^3}{kT} \right) \exp\left(- \frac{\varepsilon}{kT} \right) d\varepsilon.$$

Для закону дисперсії, який має місце в р-

кремнію, $P(\varepsilon) = e^{1/2}$ інтеграл $J_{ij}(T)$ дорівнює:

$$J_{ij}(T) = 2^{2j}(kT)^{(r-1/2)j+3/2} \Gamma[i + (r-1/2)j + 5/2], \quad (21)$$

де $\Gamma(x)$ - гамма функція Ейлера.

Отже, омичний опір $R(T)$ досліджуваного

кристала при температурі рідкого гелію, коли дірки не вироджені, а $u > 2$, дорівнює:

$$R(T) \approx \frac{1}{en(\mu, T)U_0^{(r)}(T)} \frac{J_{00}(T)}{J_{01}(T)}. \quad (22)$$

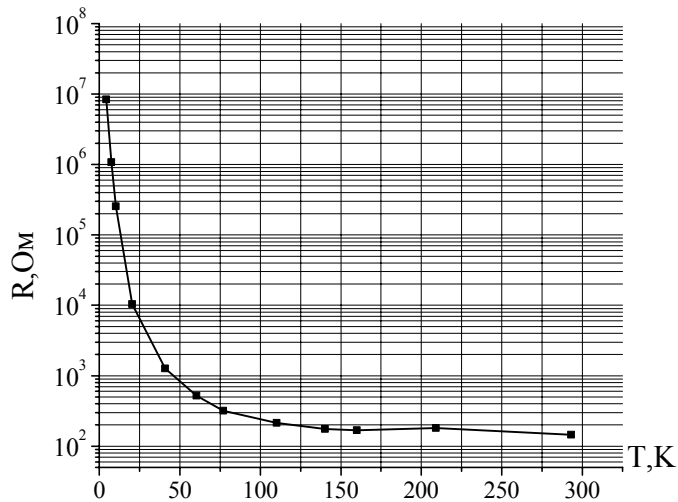


Рис. 1. Залежність опору легованих ниткоподібних кристалів кремнію р-типу провідності, в інтервалі температур 4,2-300 К.

В температурному інтервалі (4,2÷100) К цей опір дуже швидко зменшується до свого стаціонарного температурному інтервалі (100÷300) К він майже не залежить від температури (рис. 1).

В цьому температурному інтервалі всі акцептори

значення $R_{CT} \approx 2 \cdot 10^2$ Ом-см і далі в іонізовані, дірки вироджені і задовольняють рівнянню нейтральності (19а), а опір зразка дорівнює:

$$R(T) \approx \frac{1}{en_0 U_0^{(r)}(T_{CT})} \frac{J_{00}(\mu, T_{CT})}{J_{01}(\mu, T_{CT})} = \frac{1}{en_0 U_0^{(r)}(T_{CT})} \left[P(\mu)^{(2r-3)} \left(\frac{d\mu}{dP} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (23)$$

В формулі (23) нижній індекс "ст" означає, що відповідні функції розраховуються в інтервалі температури (100÷300), коли всі акцептори іонізовані, а дірки сильно вироджені.

Слабка залежність опору R_{CT} від температури свідчить про те, що сильно вироджені дірки розсіюються на іонізованих центрах, і, найбільш імовірно, що це є іонізовані акцептори. Це означає, що показник розсіювання $r = 2$, а функція рухливості $U_0^{(r)}(T)$ має таке значення:

$$U_0^{(r)}(T) = \left(\frac{1}{N_{ai}} \right) F(T, n_0), \quad (24)$$

де N_{ai} – концентрація іонізованих акцепторів, яка в даних умовах співпадає з концентрацією дірок n_0 , а $F(T, n_0)$ – відома функція, яка слабо залежить від концентрації носіїв струму n_0 і температури [7]. Відношення

$$\frac{R(T)}{R_{CT}} = \frac{F(T_{CT}, n_0)}{F(T, n_0)} \frac{I_{01}(\mu, T_{CT})}{I_{01}(\mu, T)}. \quad (25)$$

Для параболічного закону дисперсії це

Відношення має таке значення:

$$\begin{aligned} \frac{R(T)}{R_{CT}} &= \frac{\sqrt{\pi}}{8} \left[\frac{\mu_0}{kT} [1 - (\pi^2/12)(kT/\mu_0)^2] \right]^{3/2} \frac{F(T_{CT}, n_0)}{F(T, n)} = \\ &= 6,1 \cdot 10^{-17} \left(\frac{m_0}{m_c^* T} \right)^{3/2} n_0 \frac{F(T_{CT}, n_0)}{F(T, n)} \approx 1,22 \cdot 10^{-14} \left(\frac{m_0}{m_c^* T} \right)^{3/2} n_0 \end{aligned} \quad (26)$$

Наближені оцінки показують, що в досліджуваному кристалі концентрація неконтрольованих акцепторів $N_a = n_0 \approx 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ і в температурному інтервалі (100÷300) К вони всі іонізовані. Тому відношення (26) при температурі Т рідкого гелію дорівнює $1,41 \cdot 10^5$. Експериментальне значення цього відношення $4,79 \cdot 10^4$, яке відрізняється в три рази від розрахункового, що можна вважати задовільним збігом теоретичних та експериментальних даних.

Я.С. Буджак – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри напівпровідникової електроніки;
А.О. Дружинін – доктор технічних наук, професор професор кафедри напівпровідникової електроніки;
І.В. Павловський – інженер науково-дослідного центру “Кристал” при кафедрі напівпровідникової електроніки;
Ю.М. Ховерко – молодший науковий співробітник науково-дослідного центру “Кристал” при кафедрі напівпровідникової електроніки.

- [1] Я.С. Буджак, С.С. Варшава, І.П. Островський. Термо-ерс ниткоподібних кристалів Si-Ge // *Вісник ДУ "Львівська політехніка"*, № 393, сс.60-64 (2000).
- [2] Я.С. Буджак, Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, Л.Й. Межиловська. Елементи теорії термодинамічних та кінетичних властивостей кристалів // *Фізика і хімія твердого тіла*, **1**(2), сс.159-166 (2000).
- [3] Я.С. Буджак, Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, Л.Й. Межиловська. До теорії кінетичних явищ у напівпровідникових кристалах // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(1), сс.77-85 (2001).
- [4] Я.С. Буджак, О.А. Бурій. *Вступ до теорії термодинамічних та кінетичних властивостей кристалів*. Вид. Національного університету "Львівська політехніка", С.151
- [5] Я.С. Буджак, М.П. Заячковский. *К вопросу о механизме рассеивания носителей тока в PbSe*. // *УФЖ*, **13**(11), сс.1798 – 1804 (1968).
- [6] Druzhinin A., Lavitska E., Maryamova I., Oszwaldowski M., Berus T., Kunert H. *Studies of piezoresistance and piezomagneto-resistance in Si whiskers at cryogenic temperatures*. // *Cryst. Res. Technol.*, **137**(2-3), pp. 243-257 (2002).
- [7] К. Зеерер. *Фізика полупроводников*. М.: "Мир" (1977).

Ya.S. Budzjak, A.O. Druzhynin, I.V. Pavlovskiy, Yu.M. Hoverko

Specific Resistance of p-Type Silicone at the Screening of Doped Centres by Carrier Current

State University "Lvivska Polytehnika", 12, Bandera St., 79005, Lviv, E-mail: druzh@polynet.lviv.ua

The measurement of specific resistance of p-types thread like crystals at the temperature range (4,2-300) K. Is shown, at the research samples acceptors screening by holes, that the lead to decrease their activation energy.