

П.І. Баранський, Г.П. Гайдар\*

## ПРО ОСОБЛИВОСТІ АНІЗОТРОПІЇ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ ЕФЕКТІВ У НАПІВПРОВІДНИКАХ, ПОВ'ЯЗАНОЇ ЗІ СПЕЦИФІКОЮ ПРОЯВУ БАГАТЬОХ ДОЛИН

Досліджено анізотропію термоЕРС  $\Delta\alpha$  (при електрон-фононному захопленні) в умовах направленої пружної деформації, встановлено зв'язок між недиагональними компонентами тензора термоЕРС  $\hat{\alpha}$  як для *n*-Si, так і для *n*-Ge, а також з'ясовано причини, які призводять у випадку багатодолинних напівпровідників (навіть за незначної анізотропії розсіяння) до комутаційного ефекту, характерного для недиагональних компонентів.

**Ключові слова:** багатодолинний напівпровідник, термоЕРС, анізотропія термоЕРС, термоелектричний тензор, направлена пружна деформація, фонон.

### ВСТУП

З огляду на те, що термоелектричні коефіцієнти є взаємозалежними, для простоти розглядатимемо анізотропію лише диференційної термоЕРС:

$$\Delta\alpha = \alpha_{\parallel} - \alpha_{\perp}, \quad (1)$$

де  $\alpha_{\parallel}$  і  $\alpha_{\perp}$  — диференційна термоЕРС, що розвивається відповідно вздовж і поперек виділеного напрямку в термоелектрично-анізотропному матеріалі, а у випадку багатодолинного напівпровідника — аналогічні компоненти вздовж і поперек ізоенергетичних еліпсоїдів.

На анізотропію термоЕРС, як відомо, природа виявилася не надто щедрою. Саме тому, протягом багатьох десятиліть не вдавалося виявити у природних умовах термоелектрично-анізотропні матеріали з  $\Delta\alpha > 350$  мкВ/град. Однак з появою теоретичної праці [1] ситуація істотно змінилася. Автори [1] показали, що в багатодолинних напівпровідниках типу *n*-Ge (термоелектрично-ізотропних за відсутності електрон-фононного захоплення внаслідок кубічної симетрії кристалів) в умовах електрон-фононної взаємодії на рівні окремих ізоенергетичних еліпсоїдів може виникати величезна анізотропія термоЕРС, що перевищує 7000 мкВ/град.

І ця анізотропія, як було вперше показано в праці [2], а дещо пізніше і в [3], за допомогою пружної направленої деформації може бути введена на рівень кристала.

### ВЛАСТИВОСТІ ТЕНЗОРА $\hat{\alpha}$ ПРИ НАПРАВЛЕНІЙ ПРУЖНІЙ ДЕФОРМАЦІЇ

При характерному для багатодолинних напівпровідників законі дисперсії  $E(\vec{P})$ , тензор  $\hat{\alpha}$  в одній долині діагональний. Якщо ж вісь деформації розташувати у площині  $(1\bar{1}0)$ , то за довільних  $X$  і  $\gamma$  ( $X$  — механічна напруга,  $\gamma$  — кут, який відраховується від напрямку  $[00\bar{1}]$  у площині  $(1\bar{1}0)$ ) симетрія тензора  $\hat{\alpha}$  буде відповідати кристалам моноклінної системи, причому в розрахунковій системі координат (вісь «1» на-

правлена вздовж осі деформації, вісь «3» — уздовж  $[1\bar{1}0]$ ) тензор термоЕРС буде вже недиагональним і асиметричним, тобто

$$\alpha_{12} \neq \alpha_{21}. \quad (2)$$

Таким чином, асиметрія тензора  $\hat{\alpha}$  у цьому випадку — наслідок того, що напівпровідник є багатодолинний.

### АСИМЕТРИЯ ТА АНІЗОТРОПИЯ ТЕНЗОРА ТЕРМОЕРС $\hat{\alpha}$

Результати аналізу виразів для компонентів тензора  $\hat{\alpha}$  показують, що асиметричною є тільки електронна частина  $\hat{\alpha}$ , а фононна частина — симетрична. Причиною анізотропії (а не асиметрії) термоЕРС захоплення (при деформуванні  $n$ -Ge уздовж  $\langle 111 \rangle$ , а  $n$ -Si — уздовж  $\langle 001 \rangle$ ) є не тільки анізотропія термоЕРС захоплення в кожній із долин, а й зумовлена деформацією нееквівалентність останніх. Проте навіть в області температур, за яких захоплення електронів фононами не відбувається, виникає анізотропія дифузійної складової термоЕРС, яка істотно залежить як від механічної напруги  $X$ , так і від кута деформації  $\gamma$ , тобто

$$\Delta\alpha_{ik}^e = \Delta\alpha_{ik}^e(X, \gamma). \quad (3)$$

Асиметрія дифузійної частини тензора термоЕРС визначається безпосередньо проявом ефекту багатодолинності, зумовленого явною залежністю термоЕРС групи електронів (що мають енергію  $E$ ) від хімічного потенціалу, який зі зміною  $X$  зміщується по шкалі енергій. За цих умов асиметрія  $\hat{\alpha}^e$  виникає лише у разі відмінності від нуля функції

$$\Phi = n_1 n_2 \ln \frac{n_1}{n_2} + n_2 n_3 \ln \frac{n_2}{n_3} + n_3 n_1 \ln \frac{n_3}{n_1}, \quad (4)$$

яка залежить від відносних чисел електронів як мінімум у трьох різних групах нееквівалентних долин. Адже, якщо концентрації  $n_k$  в яких-небудь двох долинах, що належать до різних груп, збігаються, то функція  $\Phi$  перетворюється на нуль. Саме тому в  $n$ -Si, в якому (за розглянутих умов) може бути реалізовано лише дві групи нееквівалентних долин, тензор  $\hat{\alpha}^e$  симетричний, а в  $n$ -Ge (за тих самих умов)  $\alpha_{12}^e \neq \alpha_{21}^e$ , причому  $\alpha_{12} - \alpha_{21} \cong 50$  мкВ/град. Такою є ситуація стосовно асиметрії тензора  $\hat{\alpha}$ , обумовленої деформаційною нееквівалентністю долин.

### ТЕНЗОР $\hat{\alpha}$ У БАГАТОДОЛИННОМУ НАПІВПРОВІДНИКУ ЗА НАЯВНОСТІ ЗОВНІШНЬОГО МАГНІТНОГО ПОЛЯ

Оскільки основні особливості термоелектричних і термомагнітних явищ у багатодолинних напівпровідниках є наслідком додавання відповідних термострумів, що виникають в окремих долинах, то в найбільш загальному випадку не тільки одновісна пружна деформація, а й магнітне поле  $\vec{H}$ , що задає виділений напрям у кристалі, повинні спричинювати істотні зміни структури термомагнітного тензора  $\hat{\alpha}$ , а отже, і анізотропію кінетичних коефіцієнтів. Це, врешті-решт, у випадку багатодолинних напівпровідників призводить до виникнення низки нових ефектів, відсутніх у напівпровідниках зі стандартною зоною провідності.

Один із таких ефектів уперше було теоретично виявлено у праці [5]. Цей ефект є термомагнітним аналогом поздовжнього ефекту Холла [6, 7] і полягає у виникненні електричного поля, паралельного  $\vec{H}$ , якщо останнє орієнтоване перпендикулярно до градієнта температури, який, у свою чергу, збігається з поздовжньою віссю досліджуваних кристалів. У експериментальній праці [8] не тільки підтверджено теоретичні передбачення залежності цього ефекту від  $H$ , а й незалежним шляхом отримано значення параметра анізотропії термоЕРС захоплення в  $n$ -Ge (для 80 К), яке, як виявилось, дорівнює  $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi} = 8,5$  при  $H = 30$  кЕ ( $\alpha_{\parallel}^{\phi}$ ,  $\alpha_{\perp}^{\phi}$  — фононні складові термоЕРС захоплення відповідно вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда). Таке значення  $M$  кількісно непогано узгоджувалося з даними для цього параметра ( $M = 9,7$ ), одержаними під час вивчення п'єзотермоЕРС і п'єзоопору за умови відсутності магнітного поля [9].

Але навіть за відсутності деформації (тобто, при  $X = 0$ ), як було показано [10], у напівпровідниках з нестандартною зоною провідності компоненти тензора термоЕРС виявляють деякі особливості симетрії у зовнішньому магнітному полі. Дійсно, за умов, коли магнітне поле  $\vec{H}$  направлене не вздовж головної осі ізоенергетичного еліпсоїда і не лежить у площині, що перпендикулярна до неї (тобто за наявності орієнтаційної неузгодженості між цими осями), співвідношення симетрії для недіагональних компонентів тензора  $\hat{\alpha}$  навіть у випадку однієї долини (і магнітних полів як завгодно малої напруженості) не виконуються. Отже, у цьому випадку виявляється так званий ефект комутації:

$$\alpha_{ik}(\vec{H}) \neq \alpha_{ki}(-\vec{H}). \quad (5)$$

Величину  $\Delta_{ik}(\vec{H}) = \alpha_{ik}(\vec{H}) - \alpha_{ki}(-\vec{H}) \neq 0$  називають мірою комутаційного ефекту в багатодолинному напівпровіднику. Зазначимо, що за суттєвої ролі анізотропії розсіювання в однодолинному напівпровіднику можуть змінюватися за значенням навіть діагональні компоненти тензора  $\hat{\alpha}$  при інверсії магнітного поля. За наявності ж декількох долин у комутаційний ефект робитиме свій внесок і ефект багатодолинності.

Наведемо комутаційні співвідношення, отримані в [11], для дводолинної моделі, яку можна реалізувати за допомогою сильної одновісної пружної деформації  $n$ -Ge і  $n$ -Si уздовж  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ . Згідно з аналізом застосування однієї й тієї самої дводолинної моделі до  $n$ -Ge і  $n$ -Si породжує істотно відмінні результати. Це пов'язано з тим, що різняться взаємні розташування осей розглянутих долин, які містять електрони: в  $n$ -Si [12] ці осі взаємно перпендикулярні, а в  $n$ -Ge — розташовані під кутом, не кратним  $\pi/2$  [10]. Саме тому, як показано в [4], в  $n$ -Si

$$\begin{cases} \alpha_{12}(\vec{H}) = \frac{2K}{K+1} \cdot \alpha_{21}(-\vec{H}), \\ \alpha_{23}(\vec{H}) = \frac{K+1}{2K} \cdot \alpha_{32}(-\vec{H}), \end{cases} \quad (6)$$

а інші компоненти (при степеневій залежності  $E(\vec{P})$ ) задовольняють співвідношенням симетрії, тоді як в  $n$ -Ge

$$\begin{cases} \alpha_{12}(\vec{H}) = \frac{2K+1}{K+2} \cdot \alpha_{21}(-\vec{H}), \\ \alpha_{13}(\vec{H}) = \frac{3K}{K+2} \cdot \alpha_{31}(-\vec{H}), \\ \alpha_{23}(\vec{H}) = \frac{3K}{2K+1} \cdot \alpha_{32}(-\vec{H}). \end{cases} \quad (7)$$

Порушення співвідношень симетрії, яке виявилось характерним для різного числа компонентів  $\alpha_{ik}$  тензора  $\hat{\alpha}$  в  $n$ -Si й  $n$ -Ge, наочно ілюструє прояв специфічних особливостей анізотропії термоЕРС на рівні  $\vec{k}$ -простору й органічний зв'язок цих проявів з орієнтацією ізоенергетичних еліпсоїдів щодо головних осей кристала.

Сукупність наведених вище результатів показує наступне. Прояв особливостей анізотропії термоЕРС на мікро- й макрорівнях у багатодолінних напівпровідниках, спричинених накладанням на ці кристали направлених зовнішніх впливів (магнітних полів або одновісних пружних напружень), які призводять до орієнтаційних, деформаційних та інших нееквівалентностей у групах і окремих еліпсоїдах енергії з наступним перерозподілом носіїв заряду між ними, перебудовою структури й зміною за абсолютним значенням компонентів тензора  $\hat{\alpha}$ , визначає у таких напівпровідниках як кінетику електронних процесів на рівні ізоенергетичних еліпсоїдів, так і їхній прояв на рівні кристала [4].

## ВИСНОВКИ

1. Експериментально підтверджено теоретичне передбачення того, що специфіка напівпровідників дає змогу одержати в умовах електрон-фононного захоплення гігантські значення анізотропії термоЕРС (близько десятків тисяч мікрвольт на градус), які практично реалізуються за допомогою виведення цієї анізотропії на рівень кристала у разі накладання одновісної пружної деформації.

2. У рамках послідовної мікроскопічної теорії обґрунтовано і піддано строгій експериментальній перевірці (у дослідах з Ge і Si  $n$ -типу) універсальний зв'язок між п'єзоопором і п'єзотермоЕРС в області електрон-фононного захоплення, що утвердило як абсолютні значення параметра  $M = \alpha_{\parallel}^{\phi} / \alpha_{\perp}^{\phi}$  (характерні для нелегованих кристалів), так і концентраційну залежність цього важливого параметра на експериментально реалізованій основі.

3. Встановлено фізичну природу асиметрії електронної частини тензора  $\hat{\alpha}$  ( $\alpha_{12}^e \neq \alpha_{21}^e$ ), що виникає в кристалах  $n$ -Ge за довільної орієнтації механічної напруги  $X$  у площини  $(1\bar{1}0)$ , і з'ясовано (при тому самому довільному виборі осі деформації) причину відсутності аналогічного ефекту в кристалах кремнію.

4. Наведено фізичну інтерпретацію причин, які приводять у випадку багатодолінних напівпровідників (навіть за незначної анізотропії розсіювання) до комутаційного ефекту, що проявляється недіагональними компонентами тензора  $\hat{\alpha}$  [ $\alpha_{ik}(\vec{H}) \neq \alpha_{ki}(-\vec{H})$ ]. З'ясовано фізичний зміст тих умов (у першу чергу — прояв сильної анізотропії розсіювання), за наявності яких можуть змінюватися за значенням навіть діагональні компоненти тензора  $\hat{\alpha}$  зі зміною знака (напряму) магнітного поля.

5. Послідовний підхід до аналізу розглянутих явищ із урахуванням тензорного характеру диференційної термоЕРС електрон-фононного захоплення і направлених (одновісних) зовнішніх впливів дав змогу внести значні зміни в існуючі уявлення щодо анізотропії термоЕРС (а отже, й інших термоелектричних явищ) у багатодолинних напівпровідниках. Такий підхід також дав можливість обґрунтувати й експериментально перевірити найважливіші поняття мікроскопічної теорії для сукупності основних явищ термоелектричного класу [4, 10].

**P.I. Baranskii, G.P. Gaidar\***

**ABOUT PECULIARITIES OF THE ANISOTROPY OF THERMOELECTRIC EFFECTS IN SEMICONDUCTORS, CONNECTED WITH THE SPECIFIC MANIFESTATIONS OF MANY VALLEYS**

The anisotropy of thermoelectromotive  $\Delta\alpha$  (at the electron-phonon entrainment) in the conditions of the directed elastic deformation was studied, the connection between the non-diagonal components of the thermoelectromotive tensor  $\hat{\alpha}$  both for *n*-Si, and for *n*-Ge was established, as well as the reasons that lead in the case of many-valley semiconductors (even at the insignificant scattering anisotropy) to the switching effect, typical for the non-diagonal components, were clarified.

**Keywords:** many-valley semiconductors, thermoelectromotive, anisotropy of thermoelectromotive, thermoelectromotive tensor, uniaxially elastic deformation, phonon.

1. *Самойлович А.Г., Буда И.С.* Влияние упругих деформаций на термоЭДС в *n*-Ge в области эффекта увлечения // ФТП. — 1969. — 3, вып. 3. — С. 400—408.
2. *Анатычук Л.И., Искра В.Д., Попович П.П.* Анизотропия пьезотермоЭДС при увлечении электронов фононами // Там же. — 1969. — 3, вып. 10. — С. 1458—1464.
3. *Баранский П.И., Видалко Е.Н., Савяк В.В.* Термоэлектрические характеристики анизотропных термоэлементов на основе упруго деформированных кристаллов кремния *n*-типа // Там же. — 1982. — 16, вып. 11. — С. 2015—2017.
4. *Баранский П.И., Буда И.С., Савяк В.В.* Термоэлектрические и термомагнитные явления в многодолинных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1992. — 269 с.
5. *Буда И.С.* Продольный термомагнитный эффект в *n*-Ge // ФТП. — 1969. — 3, вып. 5. — С. 767—769.
6. *Grabner L.* Longitudinal Hall Effect // Phys. Rev. — 1960. — 117, N 3. — P. 689—697.
7. *Baranskii P.I., Dakhovskii I.V.* Longitudinal Hall-Effect in *n*-Ge // Phys. Stat. Sol. — 1966. — 15. — P. 57—61.
8. *Исследование анизотропии эффекта увлечения электронов фононами в *n*-Ge / П.И. Баранский, И.С. Буда, В.В. Коломоец и др. // ФТП. — 1974. — 8, вып. 11. — С. 2159—2163.*
9. *Drabble J.R., Groves R.D.* The effect of strain on the Seebeck coefficient of *n*-type germanium // J. Phys. Chem. Sol. — 1960. — 12, N 3/4. — P. 285—294.
10. *Баранский П.И., Буда И.С., Даховский И. В.* Теория термоэлектрических и термомагнитных явлений в анизотропных полупроводниках. — Киев: Наук. думка, 1987. — 272 с.
11. *Буда И.С.* Пьезогальванотермомагнитные явления в многодолинных полупроводниках. Автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. — Л., 1982. — 25 с.
12. *Баранский П.И., Савяк В.В., Симоненко Ю.В.* Температурная зависимость анизотропии термоЭДС увлечения в одноосно деформированном *n*-Si // ФТП. — 1984. — 18, вып. 6. — С. 1059—1063.

Інститут фізики напівпровідників  
ім. В.Є. Лашкарьова  
НАН України  
Проспект Науки, 41  
03028 Київ

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

Отримано 19.01.2012