

## КВАНТОВО-РАЗМЕРНАЯ АНИЗОТРОПИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ПЛЕНКАХ n-Ge и n-Si

Б.И.КУЛИЕВ, В.М.ГАДЖИЕВ

БГУ, им. М.Э.Расулзаде  
370148, Баку, ул. Академика З.Халилова, 23.

*Исследована анизотропия плотности электронных состояний и ширины запрещенной зоны в пленках n-Ge и n-Si в зависимости от ориентаций поверхности пленки относительно кристаллографических осей. Получены аналитические выражения этих величин как функции угла между нормалью к поверхности пленки и осью кристалла. Получены также выражения для электронной части теплоемкости в приближении сильновырожденного электронного газа.*

В последнее время, в связи с развитием микроэлектроники, возрос интерес к изучению физических свойств проводящих пленок в условиях размерного квантования, когда размеры образца становятся порядка длины дебройлевской волны носителей тока и возникают квантовые размерные эффекты. В том случае, если один (или два) из размеров образца ограничены, то энергетический спектр электронов приобретает частично дискретный характер и изменяется вид волновых функций. Влияние такого размерного квантования естественным образом отразится на поведении носителей тока, и в первую очередь на их статистике. Такая задача для проводящих пленок со стандартной зоной рассмотрена рядом авторов, например, в работах [1,3]. Что касается анизотропных полупроводниковых пленок типа n-Ge и n-Si, то здесь можно ожидать появления дополнительных анизотропных эффектов, связанных с ограниченностью размера. В работе [4] решалась задача об энергетическом спектре электронов в пленках n-Ge и n-Si и были получены выражения для энергии и волновых функций электронов при произвольной ориентации поверхности пленки.

В данной работе исследована анизотропия плотности электронных состояний и ширины запрещенной зоны в пленках n-Ge и n-Si в зависимости от ориентации поверхности пленки относительно кристаллографических осей. Получены аналитические выражения этих величин как функции угла между нормалью к поверхности пленки и осью кристалла. Получены также выражения для электронной части теплоемкости в приближении сильновырожденного электронного газа.

1. Рассмотрим пленки n-Ge и n-Si с поверхностями, произвольно ориентированными по отношению к кристаллографическим осям и допустим, что ось вращения S - эллипсоида составляет угол  $\theta_s$  с нормалью к поверхности пленки. Энергетический спектр при такой гео-

метрии был получен в [4] и его можно представить в виде:

$$\varepsilon_n(n_x, k_x, k_y) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{\parallel} d^2} f(\theta_s) n_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} [\Gamma^{-1}(\theta_s) K_x^2 + K_y^2] \quad (1)$$

где  $m_{\parallel}$  и  $m_{\perp}$  - соответственно продольные и поперечные эффективные массы электрона проводимости,  $f(\theta_s) = 1 + (\gamma - 1) \sin^2 \theta_s$ ,  $\gamma = \frac{m_{\parallel}}{m_{\perp}}$  - коэффициент анизотропии,  $n_x = 1, 2, 3, \dots$  - размерное квантовое число,  $d$  - толщина пленки.

Полученная при этом плотность электронных состояний имеет вид:

$$g_{\Gamma} = \frac{m_{\perp}}{\pi \hbar^2} \sum_{s=1}^N |f^{1/2}(\theta_s) \bar{n}_s| \quad (2)$$

где  $\bar{n}_s = \left[ \sqrt{\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{1s}}} \right]$  - целая часть числа  $\sqrt{\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{1s}}}$ , т.е.

среднее число подзон, дно которых лежит ниже заданной энергии  $\varepsilon_s$ ,

$\varepsilon_{1s} = \varepsilon_n(n_x=1, k_x=k_y=0)$ ,  $N=4$  (n-Ge) и  $N=6$  (n-Si)

Из формулы [2], задавая углы  $\theta_s$ , можно получить выражения для  $g_{\Gamma}$  пленок с определенной ориентацией нормали к их поверхности.

Зафиксируем некоторую поверхность пленки, в качестве таковой возьмем пленку с нормалью, ориентированной в /001/. Будем вращать эту нормаль вокруг одной из кристаллографических осей на угол  $\alpha$ . В этом случае для плотности состояний получим:

$$g_{\Gamma}(\alpha) = \frac{m_{\perp}}{\pi \hbar^2} \sum_{s=1}^N |\varphi_s(\alpha) \bar{n}_s|$$

При вращении нормали вокруг оси /100/ функции  $\varphi_s(\alpha)$  для n-Ge имеют вид:

$$\begin{aligned} \varphi_{1,2}(\alpha) &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1 + 2\gamma + (1 - \gamma) \sin 2\alpha|^{1/2} \\ \varphi_{3,4}(\alpha) &= \frac{1}{\sqrt{3}} |\gamma + (1 - \gamma) \sin 2\alpha|^{1/2} \end{aligned} \quad (4)$$

а для n-Si получим:

$$\begin{aligned} \varphi_{1,2}(\alpha) &= |1 + (\gamma - 1) \sin^2 \alpha|^{1/2} \\ \varphi_{3,4}(\alpha) &= |\gamma + (1 - \gamma) \sin^2 \alpha|^{1/2} \\ \varphi_{5,6} &= \gamma^{1/2} \end{aligned} \quad (5)$$

При вращении же нормали вокруг оси /110/ функции  $\varphi(\alpha)$  для n-Ge имеют вид:

$$\begin{aligned} \varphi_1(\alpha) &= \left[ 1 + (\gamma - 1) \sin^2 \left( \alpha - \arccos \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \right]^{1/2} \\ \varphi_2(\alpha) &= \left[ 1 + (\gamma - 1) \sin^2 \left( \alpha + \arccos \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \right]^{1/2} \\ \varphi_{3,4}(\alpha) &= \left[ 1 + \frac{(\gamma - 1)}{3} (2 + \sin 2\alpha) \right]^{1/2} \end{aligned} \quad (6)$$

а для n-Si получим:

$$\begin{aligned} \varphi_{1,2}(\alpha) &= |1 + (\gamma - 1) \sin^2 \alpha|^{1/2} \\ \varphi_{3,4}(\alpha) &= \left| \gamma + \frac{(1-\gamma)}{3} \sin^2 \alpha \right|^{1/2} \end{aligned} \quad (7)$$

Из формулы (3), с учетом (4)-(7), можно получить выражения для плотности состояний, когда нормали к поверхности пленок ориентированы по осям /001/, /011/, /111/ соответственно.

Действительно, для n-Ge имеем:

$$\begin{aligned} g_f^{(001)} &= \frac{4m_i}{\sqrt{3} \pi d h^2} (2\gamma + 1)^{1/2} \bar{n}_1 \\ g_f^{(011)} &= \frac{2m_i}{\pi d h^2} \left\{ \left( \frac{\gamma + 2}{3} \right)^{1/2} \bar{n}_1 + \gamma^{1/2} \bar{n}_2 \right\} \\ g_f^{(111)} &= \frac{m_i}{\pi d h^2} \left| \bar{n}_1 + (8\gamma + 1)^{1/2} \bar{n}_2 \right| \end{aligned} \quad (8)$$

Аналогично, для n-Si получим:

$$\begin{aligned} g_f^{(001)} &= \frac{2m_i}{\pi d h^2} \left| \bar{n}_1 + 2\gamma^{1/2} \bar{n}_2 \right| \\ g_f^{(011)} &= \frac{2m_i}{\pi d h^2} \left| \gamma^{1/2} \bar{n}_1 + (2\gamma + 2)^{1/2} \bar{n}_2 \right| \\ g_f^{(111)} &= \frac{2\sqrt{3}m_i}{\pi d h^2} (2\gamma + 1)^{1/2} \bar{n}_1 \end{aligned} \quad (9)$$

Из выражений (8) и (9) следуют неравенства, которым удовлетворяют плотности состояний:  $g_f^{(001)} > g_f^{(011)} > g_f^{(111)}$  - для n-Ge и  $g_f^{(001)} < g_f^{(011)} < g_f^{(111)}$  - для n-Si. Эти соотношения имеют место при равенстве всех  $\bar{n}_i$  друг другу при фиксированных толщинах пленки.

На рисунках 1 и 2 приведены графики плотности состояний как функции угла для сверхтонких пленок ( $\bar{n}_i = 1$ ) n-Ge и n-Si, соответствующих вращению нормали к поверхности пленки вокруг оси /110/.

Как видно из вышеприведенных соотношений и рисунков плотность состояний существенно зависит от ориентации поверхности пленки, т.е. обладает так называемой квантово-размерной анизотропией. При переходе к массивному образцу, как и следует ожидать, эта анизотропия исчезает.

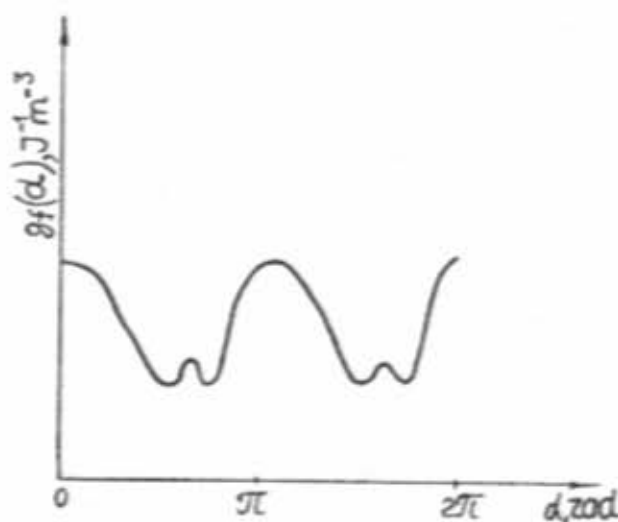


Рис.1. График функции плотности состояний сверхтонкой пленки n-Ge, соответствующий вращению нормали к поверхности пленки вокруг оси /110/.

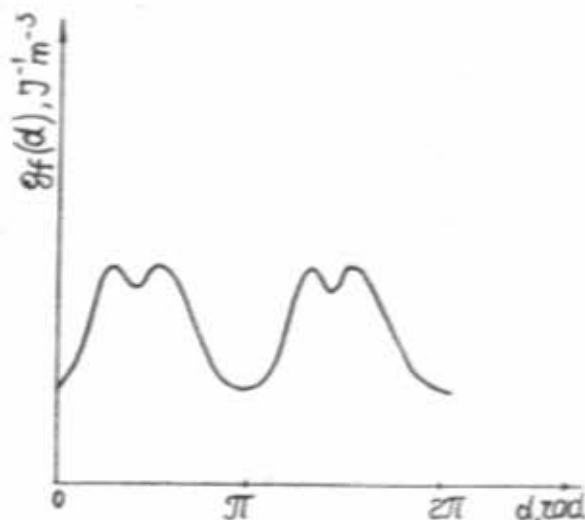


Рис.2. График функции плотности состояний сверхтонкой пленки n-Si, соответствующий вращению нормали к поверхности пленки вокруг оси /110/.

Можно показать, что ширина запрещенной зоны  $\epsilon_g$  также обладает подобной анизотропией. Действительно, если учесть, что валентные зоны Ge и Si являются изотропными, то ширину запрещенной зоны как функцию толщины в размерно-квантованной пленке можно определить как:

$$\epsilon_g = \epsilon_{1s}^{(c)}(d) - \epsilon_{1s}^{(v)}(d) \quad (10)$$

где  $\epsilon_{1s}^{(c)}$  и  $\epsilon_{1s}^{(v)}$  - энергии наименьших дискретных уровней электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне соответственно.

В случае пленок n-Ge и n-Si  $\epsilon_g$  будет меняться в зависимости от ориентации поверхности пленки. К примеру, рассмотрим поверхность пленки /001/ и будем вращать нормаль к ней вокруг оси /110/. В этом случае изменение ширины запрещенной зоны окажется для n-Ge:

$$\Delta\epsilon_g = -\frac{\hbar^2 \pi^2}{2m d^2} (\gamma - 1) \left\{ \frac{2}{3} - \sin^2 \left( \alpha - \arccos \frac{1}{\sqrt{3}} \right) \right\} \quad (11)$$

а для n-Si получим:

$$\Delta\epsilon_g = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m d^2} (\gamma - 1) \sin^2 \alpha \quad (12)$$

где  $\Delta\epsilon_g$  определяется из условия  $\Delta\epsilon_g = \epsilon_g(\alpha) - \epsilon_g(0)$ .

Отметим, что здесь  $0 \leq \alpha \leq \alpha_0$ , где  $\alpha_0$  определяется из условия пересечения наименьшего дискретного уровня с последующим при вращении. Как видно из формул (11) и (12) изменение ширины запрещенной зоны, связанное с квантово-размерной анизотропией, имеет разный знак для n-Ge и n-Si.

2. Зная спектр электронов в размерно-квантованной пленке, можно вычислить конкретные термодинамические функции системы. Приведем здесь выражение для электронной части теплоемкости в приближении сильновырожденного электронного газа. Имеем:

$$C_T(\alpha) = \frac{m_e \pi k_B^2 T}{3 \hbar^2} \sum_{s=1}^N \langle \varphi_s(\alpha) \bar{n}_s \rangle \quad (13)$$

где,  $\bar{n}_s = \left[ \frac{\xi_F(\alpha)}{\epsilon_{1s}(\alpha)} \right]$ . При этом уровень Ферми

$\xi_F(\alpha)$  имеет вид:

$$\xi_F(\alpha) = \frac{\pi \hbar^2 n_e / m_e + \frac{1}{6} \sum_{s=1}^N \langle \varphi_s(\alpha) \epsilon_{1s}(\alpha) \bar{n}_s (\bar{n}_s + 1) (\bar{n}_s + 2) \rangle}{\sum_{s=1}^N \langle \varphi_s(\alpha) \bar{n}_s \rangle} \quad (14)$$

где  $n_e$  - концентрация электронов в пленке.

С учетом (3) для  $C_T(\alpha)$  получаем:

$$C_T(\alpha) = \frac{(\pi k_B)^2 T}{3} g_T(\alpha) \quad (15)$$

Отсюда видно, что зависимость теплоемкости от ориентации поверхности пленки имеет тот же характер, что и для плотности состояний. При переходе к толстым пленкам получается результат для массивного образца. При этом анизотропия исчезает и теплоемкость от ориентации поверхности пленки не зависит.

При переходе же к сверхтонким пленкам, когда заселен лишь один пленочный уровень, вклад в теплоемкость в зависимости от ориентации поверхности дают разные эллипсоиды с наименьшей энергией  $\epsilon_{1s}$  дискретной части спектра.

Приведем здесь выражения для теплоемкостей сверхтонких пленок n-Ge и n-Si с определенными ориентациями их поверхности и сравним с соответствующими значениями теплоемкости  $C_m$  для массивного образца. Для n-Ge имеем:

$$C_T^{(001)} = C_m \left\{ 1 + \frac{\gamma d^3 n_e}{2\pi \left( \frac{2\gamma + 1}{3} \right)^{3/2}} \right\}^{-1/2},$$

$$C_T^{(011)} = \frac{1}{2} C_m \left\{ 1 + \frac{\gamma d^3 n_e}{\pi \left( \frac{\gamma + 2}{3} \right)^{3/2}} \right\}^{-1/2}$$

$$C_T^{(111)} = \frac{1}{4} C_m \left\{ 1 + \frac{2\gamma d^3 n_e}{\pi} \right\}^{-1/2} \quad (16)$$

Аналогичные вычисления для n-Si дают нам:

$$C_T^{(001)} = \frac{1}{3} C_m \left\{ 1 + \frac{\gamma d^3 n_e}{\pi} \right\}^{-1/2}$$

$$C_T^{(011)} = \frac{2}{3} C_m \left\{ 1 + \frac{\sqrt{2} \gamma d^3 n_e}{\pi (\gamma + 1)^{3/2}} \right\}^{-1/2}$$

$$C_T^{(111)} = C_m \left\{ 1 + \frac{\sqrt{3} \gamma d^3 n_e}{\pi (2\gamma + 1)^{3/2}} \right\}^{-1/2} \quad (17)$$

Анализ выражения (16) и (17) для  $C_T$  показывает, что действительно, в случае сверхтонких пленок вклад в теплоемкость дает разное количество эллипсоидов. Только при определенных ориентациях поверхности пленок  $C_T^{(001)}$ -n-Ge и  $C_T^{(111)}$ -n-Si / теплоемкость электронного газа обусловлена всеми эллипсоидами. Это также является следствием анизотропии энергетического спектра в пленках n-Ge и n-Si.

1. В.Б.Сандомирский . - ЖЭТФ, 1967, т.52, с.158.
2. Б.А.Тавгер, В.Н.Демиковский. - УФН, 1968, т.96, с.61.
3. Б.М.Аскеров.- Электронные явления переноса в полупроводниках. Москва, "Наука", 1985, § 26, с.294.
4. Б.И.Кулиев, В.М.Гаджиев. - "Физика" АН Азерб. Республики, 1996, № 2, с.22.

V.I.QULIYEV, V.M.HACIYEV

ÖLÇÜYƏ GÖRƏ KVANTLANMIŞ n-Ge və n-Si NAZİK TƏBƏQƏLƏRİNDƏ ELEKTRON HALLARIN ANİZOTROPİYASI

İşdə ölçüyə görə kvantlaşmış n-Ge və n-Si nazik təbəqələrində hal sıxlığı və qadağan zonasının eninin lövhə səthinin yönəlməsindən asılıq anizotropiyası araşdırılmışdır. Onlar üçün analitik ifadələr alınmış və təhlil edilmişdir. Eyni zamanda güclü cırlaşmış hal üçün istilik tutumunun elektron hissəsi üçün ifadələr alınmışdır.

B.I.KULIEV, V.M.GADJIEV

THE SIZE-QUANTIZED ANISOTROPIA OF ELECTRONS' STATES IN n-Ge AND n-Si FILMS

The anisotropy of the density of electrons states and the width of energy gap in n-Ge and n-Si films are investigated in dependence on the film's surface orientation with respect to the crystallographic axes. The analytical expressions of these values as an angle functions between the normal to the film's surface and a crystal axis are obtained. Also the expressions for the electronic part of heat capacity at the strongly degenerated electron gas approximation are obtained.

Поступило 10.09.96