

ВЫЧИСЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЕ ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО СПЕКТРА МЕЖЗОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Р. Г. Икрамов*, М. А. Нуриддинова, Х. А. Муминов

УДК 537.311.322

Наманганский инженерно-технологический институт,
160115, Наманган, Узбекистан; e-mail: rgikramov@mail.ru

(Поступила 21 декабря 2020)

Для аморфного углерода сопоставлены результаты эксперимента и расчета плотности электронных состояний из аналитического вида спектра межзонного поглощения. Из аналитического вида спектра межзонного поглощения также определены коэффициент пропорциональности и энергетическая ширина щели подвижности как подгоночные параметры. Для спектра межзонного поглощения, описанного методом приближения Дэвиса—Мотта по формуле Кубо—Гринвуда, для параболических разрешенных зон получено выражение для определения плотности электронных состояний в валентной зоне аморфных полупроводников. С использованием этого выражения и спектра межзонного поглощения, полученного из эксперимента для аморфного углерода, показана возможность определения плотности электронных состояний в валентной зоне.

Ключевые слова: аморфные полупроводники, параболические разрешенные зоны, формула Кубо—Гринвуда, метод приближения Дэвиса—Мотта, межзонный оптический переход электронов, спектр межзонного поглощения, энергетическая ширина щели подвижности, распределение плотности электронных состояний.

For amorphous carbon there are compared the results of the experiment and calculation of the density of electronic states from the analytical form of the interband absorption spectrum. From the analytical form of the interband absorption spectrum the proportionality coefficient and the energy width of the mobility gap were also determined as adjustable parameters. For the interband absorption spectrum, described by the Davis—Mott approximation method according to the Kubo—Greenwood formula, for the parabolic allowed bands, a new expression is obtained that determines the density of electronic states in the valence band of amorphous semiconductors. Using this formula and the value of the interband absorption spectrum obtained from the experiment for amorphous carbon, the possibility of determining the density of electronic states in the valence band is shown.

Keywords: amorphous semiconductors, parabolic allowed bands, Kubo—Greenwood formula, Davis—Mott approximation method, interband optical transitions of electrons, interband absorption spectrum, energy mobility gap, distribution of the density of electronic states.

Введение. В физике аморфных полупроводников имеются несколько моделей распределения плотности электронных состояний [1], с помощью которых теоретически определяют спектральные зависимости коэффициента поглощения. Определить плотность электронных состояний на основе экспериментальных результатов для одного образца аморфных полупроводников является трудной задачей. В настоящей работе представлен метод определения плотности электронных состояний в валентной зоне из экспериментального спектра межзонного поглощения.

CALCULATION OF THE DENSITY DISTRIBUTION OF ELECTRONIC STATES IN THE VALENCE BAND FROM THE EXPERIMENTAL SPECTRUM OF INTERBAND ABSORPTION OF AMORPHOUS SEMICONDUCTORS

R. G. Ikramov*, M. A. Nuriddinova, K. A. Muminov (Namangan Engineering and Technology Institute,
Namangan, 160115, Uzbekistan; e-mail: rgikramov@mail.ru)

Расчет. Спектральную зависимость коэффициента оптического поглощения аморфных полупроводников можно рассчитать с помощью метода приближения Дэвиса—Мотта по формуле Кубо—Гринвуда [2]:

$$\alpha(\hbar\omega) = B \int g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (1)$$

где $B = \frac{8\pi^4 e^2 \hbar^2 a}{nc(m^*)^2}$ — коэффициент пропорциональности; e — элементарный заряд; a — среднее расстояние между атомами аморфного полупроводника; n — показатель преломления; c — скорость света в вакууме; m^* — эффективная масса электрона; $\hbar$ — постоянная Планка; ω — угловая частота поглощенных фотонов; $g_1(\varepsilon)$ и $g_2(\varepsilon + \hbar\omega)$ — плотности начального и конечного электронных состояний при переходах.

Интеграл в формуле (1) является неопределенным, поэтому можно получить только общее решение, но не собственное. В работе [3] формула Кубо—Гринвуда записана с помощью интеграла:

$$\alpha(\hbar\omega) = B \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega},$$

где ε_0 — энергетическое положение точки пересечения экспоненциально затухающих “хвостов” разрешенных зон (рис. 1).

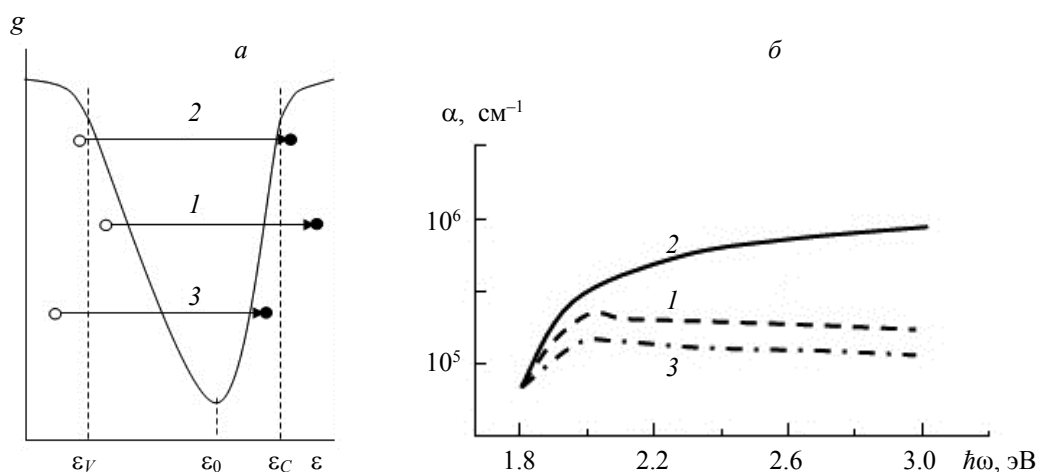


Рис. 1. Схема оптических переходов электрона (а) и спектральные зависимости парциальных коэффициентов поглощения [3] (б) при энергии поглощенных фотонов больше ширины щели подвижности ($\varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g \leq \hbar\omega$) в аморфных полупроводниках: 1 — из “хвоста” валентной зоны в зону проводимости, $\alpha_1(\hbar\omega)$; 2 — из валентной зоны в зону проводимости, $\alpha_2(\hbar\omega)$; 3 — из валентной зоны в “хвост” зоны проводимости, $\alpha_3(\hbar\omega)$; $g(\varepsilon)$ — плотность электронных состояний

В области межзонного поглощения энергия фотонов больше энергетической ширины щели (E_g) подвижности ($\varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g \leq \hbar\omega$). В этом случае одновременно происходят оптические переходы электронов: из “хвоста” валентной зоны в зону проводимости, из валентной зоны в зону проводимости и из валентной зоны в “хвост” зоны проводимости [4] (рис. 1, а). Поскольку коэффициент поглощения является аддитивной физической величиной [5], суммарный коэффициент поглощения представляет собой сумму парциальных коэффициентов поглощения, обусловленных вышеприведенными оптическими переходами. С учетом этого формула Кубо—Гринвуда преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \alpha(\hbar\omega) &= B \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = B \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_0} g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + B \int_{\varepsilon_C - \hbar\omega}^{\varepsilon_V} g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + \\ &+ B \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_C - \hbar\omega} g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \alpha_1(\hbar\omega) + \alpha_2(\hbar\omega) + \alpha_3(\hbar\omega). \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\alpha_1(\hbar\omega)$, $\alpha_2(\hbar\omega)$, $\alpha_3(\hbar\omega)$ — парциальные коэффициенты поглощения, определенные оптическими переходами электронов из “хвоста” валентной зоны в зону проводимости, из валентной зоны в зону проводимости и из валентной зоны в “хвост” зоны проводимости соответственно.

Распределения плотности электронных состояний в аморфных полупроводниках можно разделить на три типа в зависимости от энергетического положения: не локализованные в валентной зоне и зоне проводимости; локализованные в “хвостах” зон; расположенные в щели подвижности и локализованные в дефектах структурной сетки (оборванные связи, дефекты). Энергетическое распределение плотности электронных состояний на краях разрешенных зон имеет степенную, а на “хвостах” этих зон экспоненциальную зависимости и на дефектах подчиняется распределению Гаусса [6]. Поэтому в работе [7] выражения для зависимостей плотностей электронных состояний от энергии в аморфных полупроводниках для валентной зоны и зоны проводимости имеют вид:

$$g_1(\varepsilon) = N(\varepsilon_V) \left(\frac{\varepsilon_C - \varepsilon}{E_g} \right)^{n_1}, \quad \varepsilon \leq \varepsilon_V, \quad (3)$$

$$g_2(\varepsilon) = N(\varepsilon_C) \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_V}{E_g} \right)^{n_2}, \quad \varepsilon_C \leq \varepsilon, \quad (4)$$

где $N(\varepsilon_V) = N(\varepsilon_C) = 10^{22} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-3}$ [8] — эффективные плотности электронных состояний в валентной зоне и зоне проводимости; ε_V — верхняя граница валентной зоны; ε_C — нижняя граница зоны проводимости; n_1 и n_2 — безразмерные параметры.

При теоретических расчетах энергетическая зависимость плотности электронных состояний на границах разрешенных зон обычно параболическая [9], поэтому параметры $n_1 = n_2 = 1/2$. В [10] плотности электронных состояний в экспоненциальных “хвостах” разрешенных зон описаны выражениями:

$$\text{для “хвоста” валентной зоны} \quad g_1(\varepsilon) = N(\varepsilon_V) \exp(-\beta_1(\varepsilon - \varepsilon_V)), \quad \varepsilon_V < \varepsilon < \varepsilon_0, \quad (5)$$

$$\text{для “хвоста” зоны проводимости} \quad g_2(\varepsilon) = N(\varepsilon_C) \exp(\beta_2(\varepsilon - \varepsilon_C)), \quad \varepsilon_0 < \varepsilon < \varepsilon_C, \quad (6)$$

где β_1 и β_2 — параметры, которые определяют экспоненциальную кривизну хвостов валентной зоны и зоны проводимости.

Согласно результатам расчетов, выполненных путем подстановки (3)—(6) в выражение (2), коэффициент межзонного поглощения определяется в основном величиной $\alpha_2(\hbar\omega)$ (рис. 1, б) и его можно записать в виде

$$\alpha(\hbar\omega) = B \int_{\varepsilon_C - \hbar\omega}^{\varepsilon_V} g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (7)$$

где $g_1(\varepsilon)$ и $g_2(\varepsilon + \hbar\omega)$ — плотности электронных состояний в валентной зоне и зоне проводимости. В работе [4] подстановкой (3) и (4) в (7) получено выражение для коэффициента межзонного поглощения при параболическом распределении плотности электронных состояний на краях разрешенных зон:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{A}{4E_g \hbar\omega} \left(2(\hbar\omega - E_g) \sqrt{E_g \hbar\omega} - (E_g + \hbar\omega)^2 \arctg \left(\frac{E_g - \hbar\omega}{\sqrt{4E_g \hbar\omega}} \right) \right), \quad (8)$$

где $A = N(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)B$.

В работе [11] представлены экспериментальные спектры межзонного поглощения аморфного углерода (a-C), полученного методом магнетронного напыления (рис. 2). Применяя уравнение Тауца к экспериментальным результатам [12], получаем:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{C}{\hbar\omega} (\hbar\omega - E_g)^2. \quad (9)$$

где C — коэффициент пропорциональности; $E_g \approx 1 \text{ эВ}$ — энергетическая ширина щели подвижности материала, согласно методике определения начальной точки спектра межзонного поглощения $E_g \approx 1.2 \text{ эВ}$. Для определения данного параметра предлагаем сравнить результаты расчета по формуле (8) и экспериментальные данные, рассматривая коэффициент пропорциональности A и энергетическую ширину щели подвижности E_g в качестве подгоночных параметров. Полученные результаты представлены на рис. 2. Как видно, экспериментальные данные для a-C и полученные по формуле (8) согласуются между собой при $A = 6.19 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ и $E_g = 1.235 \text{ эВ}$.

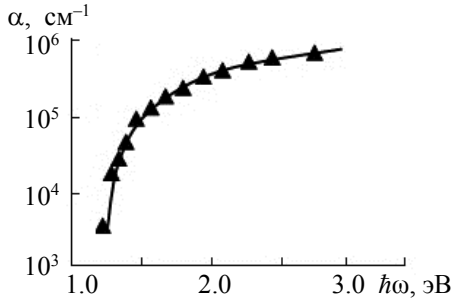


Рис. 2. Экспериментальный [11] (▲) и рассчитанный по формуле (8) (линия) спектр межзонного поглощения *a-C*

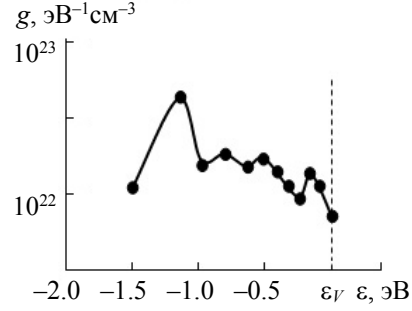


Рис. 3. Рассчитанная по формуле (15) плотность электронных состояний в валентной зоне аморфного углерода (*a-C*)

Из уравнения (7) видно, что коэффициент межзонного поглощения сильно зависит от плотности электронных состояний в разрешенных зонах. Поэтому предполагаем, что по формуле (7) можно рассчитать плотности электронных состояний в разрешенных зонах. В [13] приведено выражение для дифференцирования интеграла функции двух переменных по одной переменной:

$$\frac{d}{dy} \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} f(x, y) dx = \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} dx + \frac{\partial \beta(y)}{\partial y} f(\beta(y), y) - \frac{\partial \alpha(y)}{\partial y} f(\alpha(y), y). \quad (10)$$

Используя (10), дифференцируем (7) по энергии поглощенных фотонов ($\hbar\omega$):

$$\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} = \frac{\partial}{\partial \hbar\omega} B \int_{\varepsilon_C - \hbar\omega}^{\varepsilon_V} \left(\frac{g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega)}{\hbar\omega} \right) d\varepsilon = \frac{B}{\hbar\omega} \int_{\varepsilon_C - \hbar\omega}^{\varepsilon_V} g_1(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \hbar\omega} g_2(\varepsilon + \hbar\omega) d\varepsilon - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} + \frac{B}{\hbar\omega} g_1(\varepsilon_C - \hbar\omega) g_2(\varepsilon_C), \quad (11)$$

$$g_1(\varepsilon) = N(\varepsilon_V) \left(\frac{\hbar\omega}{E_g} \right)^{1/2} = N(\varepsilon_V) \left(\frac{\varepsilon_C - \varepsilon}{E_g} \right)^{1/2}. \quad (12)$$

Подставляя (3) и (4) в (11), получаем:

$$\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} = \frac{A(\hbar\omega - E_g)}{2E_g \hbar\omega} \operatorname{arctg} \left(\frac{\hbar\omega - E_g}{2\sqrt{E_g \hbar\omega}} \right) - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} + \frac{A}{\hbar\omega N(\varepsilon_V)} N(\varepsilon_V) \sqrt{\frac{\hbar\omega}{E_g}}, \quad (13)$$

Применяя (12), вычисляем, какое состояние соответствует энергии $\hbar\omega$: $\varepsilon = \varepsilon_C - \hbar\omega = \varepsilon_C - \varepsilon_V + \varepsilon_V - \hbar\omega = \varepsilon_V + (E_g - \hbar\omega)$, $\hbar\omega = \varepsilon_C - \varepsilon$. Поскольку $E_g - \hbar\omega < 0$ и $\varepsilon \leq \varepsilon_V$, то ε определяет энергетическое состояние, расположенное в валентной зоне. Следовательно, из уравнения (12) для плотности электронных состояний в валентной зоне получаем:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} &= \frac{A(\hbar\omega - E_g)}{2E_g \hbar\omega} \operatorname{arctg} \left(\frac{\hbar\omega - E_g}{2\sqrt{E_g \hbar\omega}} \right) - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} + \frac{A}{\hbar\omega N(\varepsilon_V)} g_1(\varepsilon), \\ g_1(\varepsilon) &= \frac{\hbar\omega N(\varepsilon_V) \left(\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} + \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} - \frac{A}{2} \frac{(\hbar\omega - E_g)}{\hbar\omega E_g} \operatorname{arctg} \frac{\hbar\omega - E_g}{2\sqrt{E_g \hbar\omega}} \right)}{A}. \end{aligned} \quad (14)$$

С использованием средних значений коэффициента межзонного поглощения и энергии поглощенных фотонов запишем:

$$\begin{aligned} g_i(\varepsilon) &= \frac{1}{A} N(\varepsilon_V) \left(\frac{\hbar\omega_i + \hbar\omega_{i+1}}{2} \right) \left(\frac{\alpha(\hbar\omega_{i+1}) - \alpha(\hbar\omega_i)}{\hbar\omega_{i+1} - \hbar\omega_i} + \frac{\alpha(\hbar\omega_{i+1}) + \alpha(\hbar\omega_i)}{\hbar\omega_i + \hbar\omega_{i+1}} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{A(E_g - (\hbar\omega_i + \hbar\omega_{i+1})/2)}{E_g(\hbar\omega_i + \hbar\omega_{i+1})} \operatorname{arctg} \frac{E_g - (\hbar\omega_i + \hbar\omega_{i+1})/2}{2\sqrt{E_g(\hbar\omega_i + \hbar\omega_{i+1})/2}} \right), \end{aligned} \quad (15)$$

где $\alpha(\hbar\omega_i)$, $\alpha(\hbar\omega_{i+1})$ и $\hbar\omega_i$, $\hbar\omega_{i+1}$ — соседние экспериментальные коэффициенты межзонного поглощения и энергии поглощенных фотонов соответственно.

Из уравнения (15) следует, что если известно экспериментальное значение коэффициента межзонного поглощения, то можно определить плотности электронных состояний в валентной зоне. На рис. 3 показано распределение плотности электронных состояний в валентной зоне, определенное с использованием спектра межзонного поглощения на рис. 2.

Заключение. Для аморфных полупроводников результаты расчета плотности электронных состояний из аналитического вида спектра межзонного поглощения сопоставлены с экспериментальными данными. С использованием рассчитанного и экспериментального коэффициентов межзонного поглощения показана возможность определения плотности электронных состояний в валентной зоне для аморфных полупроводников.

- [1] **J. R. A. Abanto.** On the Fundamental Absorption of Amorphous Semiconductors, Pontificia Universidad Catolica del Peru, Lima (2016)
- [2] **J. Taus.** In: Optical Properties of Solids, Ed. F. Abeles, North-Holland, Amsterdam (1972) 277—314
- [3] **S. Zaynobidinov, R. G. Ikramov, M. A. Nuritdinova, R. M. Zhalalov.** Ukr. J. Phys., **53**, N 8 (2008) 789—793
- [4] **С. Зайнобидинов, Р. Г. Икрамов, Р. М. Жалалов, М. А. Нуритдинова.** Опт. и спектр., **110**, № 5 (2011) 813—818
- [5] **В. И. Фистуль.** Введения в физику полупроводников, Москва, Высшая школа (1984)
- [6] **Р. Г. Икрамов.** Естеств. и техн. науки, **6** (2007) 58—63
- [7] **С. Зайнобидинов, Р. Г. Икрамов, Р. М. Жалалов.** Журн. прикл. спектр., **78**, № 2 (2011) 243—247
- [8] **S. Zaynobidinov, R. G. Ikramov, R. M. Jalalov.** J. Appl. Spectr., **78** (2011) 223—227
- [9] **G. D. Cody.** In: Hydrogenated Amorphous Silicon, B. Optical Properties, Ed. J. I. Pankove, Academic, New York (1984) 11—82
- [10] **N. F. Mott, E. A. Davis.** Electronic Processes in Non-Crystalline Materials, Clarendon Press, Oxford (1979)
- [11] **А. А. Андреев, И. С. Шлимак.** В кн.: Фотоприемники и фотопреобразователи. Сб. науч. тр. АН СССР ФТИ им. Иоффе, Ленинград, Наука (1986)
- [12] **А. А. Пронкин, А. В. Костановский.** Теплофизика высоких температур, **53**, № 2 (2015) 312—314
- [13] **Е. А. Коншина.** Аморфный гидрогенизированный углерод и применение его в оптических устройствах, Санкт-Петербург, НИУ ИТМО (2010)
- [13] **И. Н. Бронштейн, К. А. Семендяев.** Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов, Москва, Наука, Физматлит (1986)