ОБЛАСТЬ СПЕКТРА ДЕФЕКТНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Икрамов Рустамжон Гуломжонович
Наманганский инженерно технологический институт,
Наманган, 160115, Узбекистан.
rgikramov@mail.ru

Аннотация: Используя формулы Кубо-Гринвуда теоретически исследованы спектры коэффициента дефектного поглощения для всех дефектных состояний аморфных полупроводников. Определено шест типа оптических переходов электрона, где участвуют дефектные состояния. Получены аналитические види этих парциалних спектров из формулы Кубо-Гринвуда.

Ключевые слова: Дефекты в аморфных полупроводниках, типы оптических переходов электронов, спектры коэффициента оптического поглощения, спектры дефектного поглощения.

Abstract: Using the Kubo-Greenwood formulas, the spectra of the coefficient of defect absorption for all defect states of amorphous semiconductors are theoretically investigated. Six types of optical transitions of electrons, where defect states participate, are determined. Analytical views of these partial spectra are obtained from the Kubo-Greenwood formula.

Key words: Defects in amorphous semiconductors, types of optical transitions of electrons, spectra of optical absorption coefficient, spectra of defect absorption.

Введение

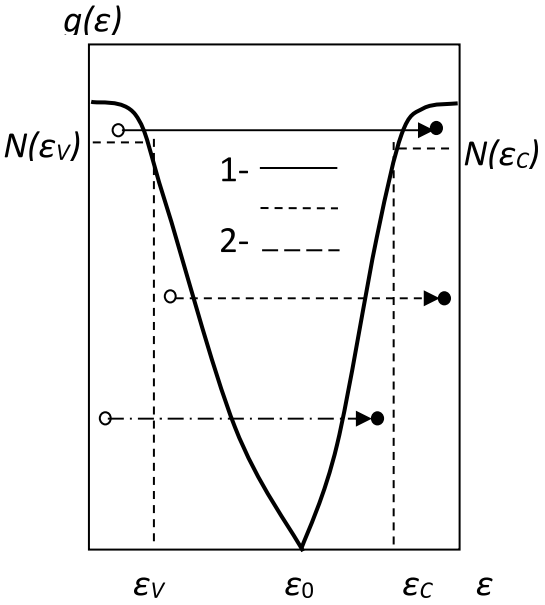
Как известно, в щели подвижности аморфных полупроводников (E_g) в место легирующими примесями распложены и локализованы энергетические уровни, образующие оборванные связи. Основные оборванные связи (дефекты) образующие моновоканции бывают три вида, характерные для аморфных полупроводников: имеющие один электрон и одна дырка D^0, два электрона D^- и две дырки D^+ [1]. Участие этих дефектов и легирующих примесей в электронных переходах, в аморфных полупроводниках играют одну и ту же роль в определении оптических свойств этого материала [2]. Поэтому, в настоящей работе, теоретически исследовани спектры дефектного

поглощения, где участвуют в оптических переходах только, электронные состояния дефектов и были получены их аналитические выражения.

Как известно, спектры коэффициента оптического поглощения аморфных полупроводников рассчитывается по методу Дэвиса-Мотта из формулы Кубо-Гринвуда и обычно записывается как:

$$\alpha(\hbar\omega) = A\int \frac{g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)}{\hbar\omega}d\varepsilon\,, \qquad (1)$$

где A – коэффициент пропорциональности, не зависящий от частоты поглощенных фотонов, $\hbar$ – постоянная Планка, ω – частота фотонов, падающих на полупроводник, $g(\varepsilon)$ - а также $g(\varepsilon+\hbar\omega)$ – значение начальные и конечные плотности электронных состояний электронов, участвующих в оптических переходах, соответственно.



1–рис. Типы оптических электронных переходов, возникающих при поглощении аморфными полупроводниками фотонов большой энергий из энергетической ширины щели

Поскольку интеграл в формуле (1) неопределенный, она не дает собственного решения. Исследование показало, что для расчета спектра коэффициента оптического поглощения необходимо записать интеграла в формуле Кубо-Гринвуда в форме определенного интегральа, в работе [3] она написана в следующем виде:

$$\alpha(\hbar\omega) = A\int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)}{\hbar\omega}d\varepsilon\,, \qquad (2)$$

где ε_0 – энергетическое положение точки пересечения экспоненциальных хвостов валентной зоны и зоны проводимости (рис.1).

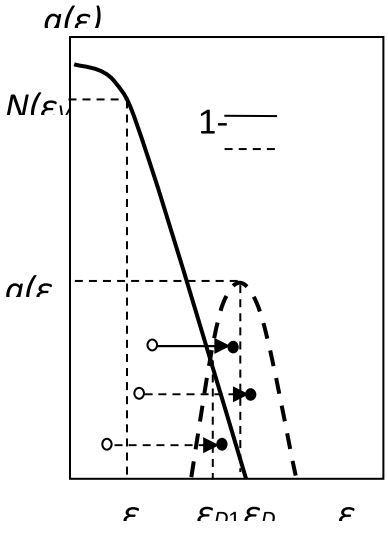
На работе [4] показано, что интеграла в формуле (2) необходимо разделить в соответствии с энергии поглощенных фотонов и оптическими переходами электронов. Если энергия поглощенных фотонов больше энергетической ширины щели подвижности аморфных полупроводников (E_g>$\hbar\omega$), то в одно и же время электроны участвует в оптических переходах: 1 - из хвоста валентной зоны в зону проводимости, 2 – из валентной зоны в зоны

проводимости и 3 - из валентной зоны в хвост зоны проводимости [5] (рис.1). Поскольку коэффициент поглощения является аддитивной величиной, его общее значение состоит из суммы его парциальных значений, определяемых различными оптическими переходами электронов [6]. С этим в смысле, определить общего значение коэффициента поглощения, интеграла в формуле (2) написано как сумма парциальных коэффициентов поглощения, соответствующих указанным выше оптическим переходам электронов:

$$\alpha = A\int\limits_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0}\frac{g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)}{\hbar\omega}d\varepsilon = A\int\limits_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A\int\limits_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A\int\limits_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_C-\hbar\omega} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \alpha_1+\alpha_2+\alpha_3 \quad (3)$$

где ε_V - верхная граница валентной зоны, ε_C – нижняя граница зоны проводимости, и спектры парциальных коэффициентов поглощения, определяемые оптическим переходом электронов: α_1 – от хвоста валентной зоны к зоне проводимости, α_2 – из валентной зоны в зону проводимости, α_3 – из валентной зоны в хвост зоны проводимости.

Мы тоже используем этот метод для расчета спектров дефектного поглощения. Прежде всего в зависимости от энергии поглощенных фотонов рассмотрим типы оптических переходов, в которых участвуют энергетические состояния дефектных состояний (рис.2). Из рисунка 2 *a*, видно, что когда энергия поглощенных фотонов меньше от $\hbar\omega<\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V$ электроны переходят только из хвоста валентной зоны на дефекты, когда выполнается условия $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V<\hbar\omega$, электроны одновременно, переходят из хвоста валентной зоны в дефект и из валентной зоны в дефект.



2 – *a* рис. Типы оптических электронных переходов с участием дефектных состояний, возникающие в

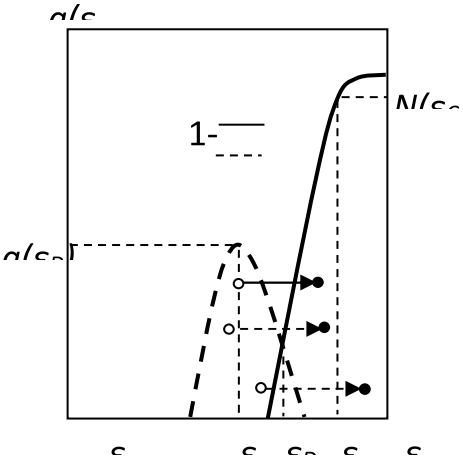
Как видно из рисунка 2 *b*, если для энергии поглощенных фотонов выполняется условия $\hbar\omega<\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}$, электроны участвуют в оптических переходах только 1 - от дефектов в хвост зоны проводимости, когда выполяется условия $\hbar\omega>\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}$, 2- происходят оптические переходы от дефектов в хвост зоны проводимости и в зону проводимости. Здесь ε_{D1} –энергетическое положение точек пересечения

распределений плотности электронных состояний дефектов и хвоста валентной зоны, и ε_{D2} – дефектов и хвоста зоны проводимости.

Из этого следует что, экспериментальная величина спектра дефектного поглощения аморфных полупроводников представляет собой сумму шести указанных выше парциальных коэффициентов поглощения.

Сопоставляя энергетических положений ε_0 – на рис.1 и ε_{D1} – на рис. 2 – *a*, и ε_{D2} – на рис. 2 – *b*, а также, используя формулу (2), для условия ε_{D1}-ε_V>$\hbar\omega$, напишем спектр дефектного поглощения для оптических переходов электронов от хвоста валентной зоны на дефекты в следующем виде:

$$\alpha = A\int_{\varepsilon_{D1}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D1}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}. \quad (4)$$



2 – *b* рис. Типы оптических электронных переходов с участием дефектных состояний, происходящих в

Для условия ε_{D1}-ε_V<$\hbar\omega$ напишем подгоняя формулу Кубо-Гринвуда, к оптическим переходам следующим образом:

$$\alpha = A\int_{\varepsilon_{D1}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D1}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = A\int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_{D1}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A\int_{\varepsilon_{D1}-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \quad (5)$$
$$= \alpha_1 + \alpha_2$$

где α_1 — спектр оптических переходов электронов от хвоста валентной зоны на дефект, а α_2 — спектр оптических переходов от валентной зоны на дефект.

При выполнении условия $\hbar\omega$<ε_C-ε_{D2} парциальный спектр дефектного поглощения для оптических переходов электронов от дефекта в хвост зоны проводимости: $\alpha = A\int_{\varepsilon_{D2}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}$. (6)Если выполняется условия $\hbar\omega$>ε_C-ε_{D2} и, подгоняем формулу Кубо-Гринвуда для оптических переходов от дефектов на хвост зоны проводимости и от дефекта на зону проводимости следующим образом:

$$\alpha = A\int\limits_{\varepsilon_{D2}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = A\int\limits_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A\int\limits_{\varepsilon_{D2}-\hbar\omega}^{\varepsilon_C-\hbar\omega} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \quad (7)$$
$$= \alpha_1 + \alpha_2$$

где α_1 — спектр оптических переходов электронов от дефекта в хвост зоны проводимости, α_2 — спектр оптических переходов от дефекта в зону проводимости.

Для вычисления интегралов в этих формулах необходимо знать распределения плотности электронных состояний разрешенных зонах и в их хвостах, а также в дефектах. Обычно, теоретических в исследованиях оптических свойств аморфных полупроводников использует эмпирические модели. В этих моделях распределение плотности электронных состояний на границах разрешенных зон является линейними или параболическими, а в хвостах этих зон экспоненциальными [7]. Поэтому в настоящей работе использована модель приведенный в работе [8]. Для распределения плотности электронных состояний в валентной зоне и в ее хвосте:

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_V)\left(\frac{\varepsilon_C - \varepsilon}{E_g}\right)^{n_1}, \quad n_1 = 0, 1/2, 1 \text{ ва } g(\varepsilon) = N(\varepsilon_V)\exp(-\beta_1(\varepsilon - \varepsilon_V)). \quad (8)$$

А для распределения плотности электронных состояний в зоне проводимости и в ее хвосте:

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_C)\left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_V}{E_g}\right)^{n_2}, \quad n_2 = 0, 1/2, 1 \quad \text{ва } g(\varepsilon) = N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon - \varepsilon_C)). \quad (9)$$

где эффективные значения плотности электронных состояний $N(\varepsilon_V)$ – в валентной зоне, $N(\varepsilon_C)$ –в зоне проводимости, кривизна экспоненциальных хвостов β_1 – валентной зоны, β_2 –зоны проводимости.

Плотности электронных состояний в дефектах подчиняется распределению гиперболического секанса:

$$g(\varepsilon) = \frac{g(\varepsilon_D)}{ch(b(\varepsilon - \varepsilon_D))} = \frac{2g(\varepsilon_D)}{\exp(b(\varepsilon - \varepsilon_D)) + \exp(-b(\varepsilon - \varepsilon_D))}, \quad (10)$$

или распределение Гаусса

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_D)\exp(-a(\varepsilon - \varepsilon_D)^2), \quad (11)$$

где $g(\varepsilon_D)$ – максимальное значение плотности электронных состояний в дефектах, ε_D – энергетическое положения максимального значения плотности электронных состояний в дефектах, b – и a – параметры, определяющие эффективную полуширину плотности распределения электронных состояний в дефектах.

Из несложных вычислений можно показать, что эффективные полуширины распределение (10) и (11) соответствуют при выполнении условия $b = \sqrt{\frac{a}{\ln 2}} \ln\left(2+\sqrt{3}\right)$, а при выполнении условия $b = \sqrt{\pi a}$ концентрации ограниченные этими распределениями дефектов будет равны между собой.

В работе [9] показано, что если $\beta_1 \neq b$ и $\beta_2 \neq b$ из формули (4) и (6) не могут быть получены аналитические решения, поэтому их решения получены численными методами расчета. При расчете по формули (4) и (6) требуя для значения b и β_1, $b_1 = \frac{\beta_1 + b}{2}$ и для значения b и β_2 , $b_2 = \frac{\beta_2 + b}{2}$ результаты расчетов и получение из численных расчетов оказалось практически неотличимым.

Выводы

Таким образом, в настоящей работе теоретически исследованы спектры дефекного поглощения аморфных полупроводников. Было найдено шесть различных оптических переходов где участвуют электронные состояния дефектов. Были получены новые выражения парциальных спектров поглощения, образующих эти шесть различных оптических переходов и определены их значения.

Список литературы

1. Ayvazov A.A., Buagyan B.G., Strekhilev D.A. Optieskie svoysva plenok *a-Si:H* legirovannikh azotom i defektnie sostoyanie v nikh. FTP, 25(11), 2040 (1991).

2. Ikramov R.G., Nuriddinova M.A., Muminov Kh.A. Spectra of the coefficient of defect absorption and the energy position of defects in amorphous hydrogenated silicon. International Journal of Multidisplinary Trends. 1(1), 12 (2019).

3. kramov R.G., Mamaxanov A.A., Nuriddinova M.A., Jalalov R.M., Muminov Kh.A. and Sultanov B.Q. Calculation of the interband absorption spectra of amorphous semiconductors using the Kubo-Greenwood formula. Journal of Applied Science and Engineering. 25(5), 767 (2021)

4. Zainobidinov S., Ikramov R.G., Nuritdinova M.A., Zhalalov R.M. Temperature effect in absorption spectra of amorphous semiconductors. Ukr. J. Phys., 53(8), 789 (2008)

5. Zainobidinov S., Ikramov R.G., Zhalalov R.M. and Nuritdinova M.A. Distribution of electron density of states in allowed bands and interband absorption in amorphous semiconductors. Optics and spectroscopy, 110(5), 762 (2011)

6. Fistul I.V. Vvdenie v fiziku poluprovodnikov. (Moskva, Visiaya shkola, 1984), P. 352

7. Mott N., Devis E. Elektronie prosesi v nekristallichkikh veshestvakh. (Moskva, Mir, 1982), P. 652

8. Ikramov R.G., Nurddinova M.A., Muminov Kh.A. Vichislenie plotnosti elektronnikh sostoyaniy v valentoy zone iz eksperimentalnogo spektra mejzonogo spectra poglosheniya amorfnikh poluprovodnikov. Jurnal prikladnoy spektroskopii. 88(3), 45 (2021)

9. Ikramov R.G., Nuriddinova M.A., Jalalov R.M. Density of defect states and spectra of defect absorption in a-Si:H. Ukr. J. Phys. 64(4) 315 (2019)