Расчет распределения плотности электронных состояний в хвосте зоны проводимости аморфных полупроводников

Б.Т. Абдулазизов[*,1], Р.Г. Икрамов[2], М.А. Нуриддинова[2], Х.А. Муминов[2]

[1]Физико-технический институт АН РУз, ул. Ч. Айтматова 2б, 100084, Ташкент, Узбекистан
[2]Наманганский инженерно-технологический институт, ул. Касансай 7, 160115, Наманган, Узбекистан

Получена 19.02.2021

* Corresponding author: e-mail bt_abdulazizov@mail.ru, Phone: +998 91 186 06 05

Сопоставлены аналитическое выражение и экспериментальная кривая спектра экспоненциального поглощения аморфного $Se_{0,5}S_{0,5}$ селено-серного соединения. Параметры в аналитическом выражении спектра экспоненциального поглощения, определяющие крутизну хвостов разрешенных зон, найдены путем подгонки к экспериментальной кривой. Используя приближение Девиса-Мотта по формуле Кубо-Гринвуда, записанного для спектра экспоненциального поглощения, получена новая формула, определяющая плотность электронных состояний в хвосте зоны проводимости. Используя эти формулы и спектр экспоненциального поглощения, определенный из эксперимента, показана возможность определения плотности электронных состояний в хвосте зоны проводимости.

Ключевые слова: аморфные полупроводники, хвосты разрешенных зон, формула Кубо-Гринвуда, приближение Девиса-Мотта, оптические электронные переходы, спектр экспоненциального поглощения, крутизна хвостов разрешенных зон, распределение плотности электронных состояний.

The analytical expression and the experimental curve of the exponential absorption spectrum of amorphous $Se_{0.5}S_{0.5}$ selenium-sulphur compound are compared. The parameters in the analytical expression for the exponential absorption spectrum, which determine the slope of the tails of the allowed bands, were found by fitting to the experimental curve. Using the Davis-Mott approximation, a new formula was obtained using the Kubo-Greenwood formula for the exponential absorption spectrum, which determines the density of electronic states at the tail of the conduction band. Using this formula and the exponential absorption spectrum determined experimentally, it is shown that it is possible to determine the density of electronic states at the tail of the conduction band.

Keywords: amorphous semiconductors, allowed band tails, Kubo-Greenwood formula, Davis-Mott approximation, optical electronic transitions, exponential absorption spectrum, the slope of the allowed band tails, distribution of the density of electronic states.

I. Введение

Как известно, аналитический спектр оптического поглощения аморфных полупроводников вычисляют в приближения Девиса-Мотта по формуле Кубо-Гринвуда [1]:

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

Здесь A – коэффициент пропорциальности, не зависящий от частоты поглощенного фотона,

равный $A = 8\pi^4 e^2 \hbar^2 a/nc(m^*)^2$, где e – заряд электрона, a – среднее растояние между атомами аморфного полупроводника, n – показатель преломления, c – скорость света в вакууме, m^* – эффективная масса электрона, $\hbar$ – постоянная Планка, ω – частота поглощенных фотонов, $g(\varepsilon)$ – и $g(\varepsilon+\hbar\omega)$ – начальная и конечная плотности электронных состояний электронов, участвующих в оптических переходах.

Из формулы (1) видно, что спектр оптического поглощения сильно зависит от распределения плотности электронных состояний, участвующих в оптических переходах. Поэтому в настоящей работе предлагается новый метод определения распределения плотности электронных состояний на хвосте зоны проводимости из экспериментального спектра экспоненциального поглощения.

II. Метод исследования

В области экспоненциального поглощения выполняется правило Урбаха и энергия поглощенных фотонов будет меньше энергетической ширины щели подвижности (E_g): $\varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g > \hbar\omega$ [2]. Здесь ε_V – потолок валентной зоны, ε_C – дно зоны проводимости. При поглощении таких фотонов одновременно происходят следующие оптические переходы электронов: от хвоста валентной зоны в зону проводимости, от хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости и от валентной зоны в хвост зоны проводимости (рис. 1).

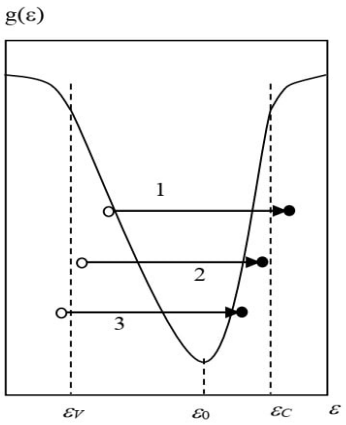


Рисунок 1. Оптические переходы электрона, когда энергия поглощенных фотонов лежит в интервале $\hbar\omega < \varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g$ в аморфных полупроводниках: *1* – от хвоста валентной зоны в зону проводимости, *2* – от хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости, 3 – от валентной зоны в хвост зоны проводимости.

Интеграл в формуле (1) является неопределенным, поэтому из этой формулы можно получить только общее решение. Поэтому в работе [3] формула Кубо-Гринвуда записана в следующем виде:

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

где ε_0 – энергетическое положение точки пересечения экспоненциальных хвостов разрешенных зон (рис. 1).

Эту формулу расчленили на парциальные коэффициенты поглощения согласно указанным выше оптическим переходам в следующем виде:

$$\alpha(\hbar\omega) = B \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon) g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = B \int_{\varepsilon_C - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon) g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + B \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_{C-\hbar\omega}} g(\varepsilon) g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} +$$
$$+ B \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_V} g(\varepsilon) g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \alpha_1(\hbar\omega) + \alpha_2(\hbar\omega) + \alpha_3(\hbar\omega) \qquad (3)$$

По результатам расчетов этих парциальных коэффициентов поглощения показано, что при определении коэффициента экспоненциального поглощения основную роль играют оптические электронные переходы от хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости, т.е. $\alpha_2(\hbar\omega)$ (рис. 2).

Поэтому в работе [4] для спектра коэффициента экспоненциального поглощения формула Кубо-Гринвуда в приближении Девиса-Мотта записана как:

$$\alpha(\hbar\omega) = A \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C - \hbar\omega} g_1(\varepsilon) g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \qquad (4)$$

где $g_1(\varepsilon)$ – распределение плотности электронных состояний в хвосте валентной зоны, $g_2(\varepsilon+\hbar\omega)$ – распределение плотности электронных состояний в хвосте зоны проводимости.

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

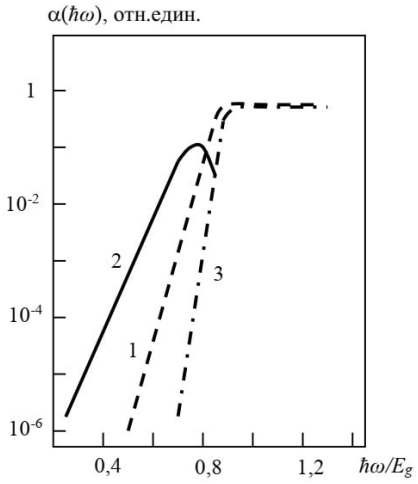


Рисунок 2. Парциальные коэффициенты поглощения, соответствующие оптическим переходам электронов, когда энергия поглощенных фотонов лежит в интервале $\hbar\omega<\varepsilon_C-\varepsilon_V=E_g$: *1* – $\alpha_1(\hbar\omega)$, от хвоста валентной зоны в зону проводимости, *2* – $\alpha_2(\hbar\omega)$, от хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости, *3* – $\alpha_3(\hbar\omega)$, из валентной зоны в хвост зоны проводимости [3].

В работе [5] распределение плотностей электронных состояний в экспоненциальных хвостах разрешенных зон записаны как:
для хвоста валентной зоны

$$g_1(\varepsilon) = N(\varepsilon_V)\exp(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V)), \text{ где } \varepsilon_V<\varepsilon<\varepsilon_0 \qquad (5)$$

для хвоста зоны проводимости

$$g_2(\varepsilon) = N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C)), \text{ где } \varepsilon_0<\varepsilon<\varepsilon_C, \qquad (6)$$

В этих формулах $N(\varepsilon_V)$ и $N(\varepsilon_C)$ – эффективные плотности электронных состояний валентной зоны и зоны проводимости соответственно; они равны $N(\varepsilon_V)\approx N(\varepsilon_C)\approx 10^{22}$ эВ·см$^{-3}$ [6], β_1 и β_2 – параметры, определяющие крутизну хвостов соответственно валентной и зоны проводимости.

В работе [7], подставляя (5) и (6) в (4), выполнены расчеты для аналитического решения спектра экспоненциального поглощения и полу чено:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{B}{(\beta_2-\beta_1)\hbar\omega}\exp(\beta_1(\hbar\omega-E_g))\left[1-\exp((\beta_2-\beta_1)(\hbar\omega-E_g))\right], \qquad (7)$$

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

Видно, что для того чтобы найти из этой формулы значения аналитических решений спектра экспоненциального поглощения, необходимо определить постоянные B, E_g, β_1, и β_2. Для этого мы будем пользоваться результатами спектральной характеристики коэффициента экспоненциального поглощения, определенными экспериментально.

В работе [8] приведены спектральные характеристики коэффициента оптического поглощения аморфного селено-серного соединения a-Se_xS_{1-x}, полученного термическим напылением в вакууме. Для определенности мы выберем результаты экспериментов для a-$Se_{0.5}S_{0.5}$.

Выбранный спектр оптического поглощения разделим на следующие области: межзонные, экспоненциальные и дефектные (рис. 3) [9].

В работе [10] значения B и E_g определены как подгоночные параметры, сравнивая результаты расчетов аналитического спектра межзонного поглощения, полученные для параболических разрешенных зон, с результатами экспериментов: B=7.5×10^5 см$^{-1}$ и E_g=2.25 эВ.

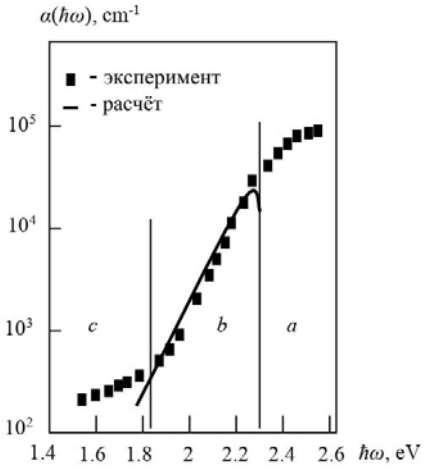


Рисунок 3. Спектральная характеристика, полученная из эксперимента [9] для аморфного $Se_{0,5}S_{0,5}$ и формулы (7): *a* – область межзонного поглощения, *b* –область экспонециального поглощения, *c* – область дефектного поглощения.

Для определения численных значений β_1 и β_2, как подгоночных параметров, сопоставляются результаты экспериментов для области экспоненциального поглощения с результатами расчетов по формуле (7). Получены значения,

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

равные β_1=16.2 эВ$^{-1}$ и β_2=19.8 эВ$^{-1}$. (рис. 3, сплошная кривая).

В работе [11] для производной по одной переменной от интеграла функции двух переменных приведено следующее выражение:

$$\frac{d}{dy}\int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} f(x,y)dx = \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} \frac{\partial f(x,y)}{\partial y}dx + \frac{\partial \beta(y)}{\partial y} f(\beta(y),y) - \frac{\partial \alpha(y)}{\partial y} f(\alpha(y),y). \quad (8)$$

Подставляя в эту формулу выражение (4), получим следующее:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} &= \frac{\partial}{\partial \hbar\omega} A \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_{C-\hbar\omega}} \left(\frac{g_1(\varepsilon)g_2(\varepsilon+\hbar\omega)}{\hbar\omega}\right)d\varepsilon = \\ &= \frac{A}{\hbar\omega}\int_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} g_1(\varepsilon)\frac{\partial}{\partial \hbar\omega} g_2(\varepsilon+\hbar\omega)d\varepsilon - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} - \frac{A}{\hbar\omega} g_1(\varepsilon_C-\hbar\omega)g_2(\varepsilon_C).\end{aligned} \quad (9)$$

Подставляя в эту формулу (3) и (4), получим:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} &= \frac{A}{\hbar\omega}\int_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} N(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)\exp(\beta_1\varepsilon_V)\exp(-\beta_1\varepsilon)\beta_2\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C+\hbar\omega))d\varepsilon - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} - \\ &- \frac{A}{\hbar\omega}N(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega)) = \\ &= \frac{B\beta_2}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)}\exp(\beta_2(\hbar\omega-E_g)) - \frac{B}{\hbar\omega}\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega))\left(\frac{\beta_2}{(\beta_2-\beta_1)}+1\right) - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega}\end{aligned} \quad (10)$$

В выражении (10) обозначаем:

$$\begin{aligned}g_2(\varepsilon) &= N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C)) = \\ &= N(\varepsilon_C)\exp(\beta_2(\hbar\omega-E_g))\end{aligned} \quad (11)$$

Используя (11), рассчитаем какое энергетическое положение определяет E_g–$\hbar\omega$.

$$\begin{aligned}\varepsilon-\varepsilon_C &= \hbar\omega - E_g \text{ или} \\ \varepsilon &= \varepsilon_C + \hbar\omega - E_g\end{aligned} \quad (12)$$

Поскольку в этом выражении $E_g > \hbar\omega$, ε_C<0, в формуле (12) ε определяет энергетическое положение в хвосте зоны проводимости. Поэтому из равенства (10) получим следующее выражение:

$$\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} = \frac{B\beta_2}{\hbar\omega(\beta_2-\beta_1)N(\varepsilon_C)}g_2(\varepsilon) - \frac{B}{\hbar\omega}\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega))\left(\frac{\beta_2}{(\beta_2-\beta_1)}+1\right) - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega}. \quad (13)$$

Из последнего выражения получаем:

$$g_2(\varepsilon) = \frac{\hbar\omega N(\varepsilon_C)(\beta_2-\beta_1)\left(\frac{B}{\hbar\omega}\exp(-\beta_1(E_g-\hbar\omega))\left(\frac{\beta_2}{(\beta_2-\beta_1)}+1\right) + \frac{\partial\alpha(\hbar\omega)}{\partial\hbar\omega} + \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega}\right)}{B\beta_2}. \quad (14)$$

Усредняя коэффициент экспоненциального поглощения и энергию поглощенных фотонов, выражения (11) и (14) перепишем в следующем виде:

$$g_{2i} = N(\varepsilon_C)\exp\left(\beta_2\left(\left(\frac{\hbar\omega_i+\hbar\omega_{i+1}}{2}\right)-E_g\right)\right). \quad (15)$$

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

$$g_{2i}(\varepsilon)=\frac{\frac{(\hbar\omega_{i+1}+\hbar\omega_i)}{2}N(\varepsilon_C)(\beta_2-\beta_1)(\frac{2B}{(\hbar\omega_{i+1}+\hbar\omega_i)}\exp(-\beta_1(E_g-\frac{(\hbar\omega_{i+1}+\hbar\omega_i)}{2}))(\frac{\beta_2}{(\beta_2-\beta_1)}+1))}{A\beta_2}+$$
$$+\frac{\frac{(\hbar\omega_{i+1}+\hbar\omega_i)}{2}N(\varepsilon_C)(\beta_2-\beta_1)(\frac{\alpha_{i+1}(\hbar\omega)-\alpha_i(\hbar\omega)}{\hbar\omega_{i+1}-\hbar\omega_i}+\frac{\alpha_{i+1}(\hbar\omega)+\alpha_i(\hbar\omega)}{\hbar\omega_{i+1}+\hbar\omega_i})}{B\beta_2}, \quad (16)$$

где $\alpha(\hbar\omega_i)$ и $\hbar\omega_i$ соответственно коэффициент поглощения и энергия поглощенных фотонов, определенная из эксперимента. Подставляя в (15) и (16) результаты, полученные для спектра экспоненциального поглощения экспериментально, рассчитаем распределение плотности электронных состояний в хвосте зоны проводимости. Результаты расчетов, полученные по формулам (15) и (16) показаны на рис. 4.

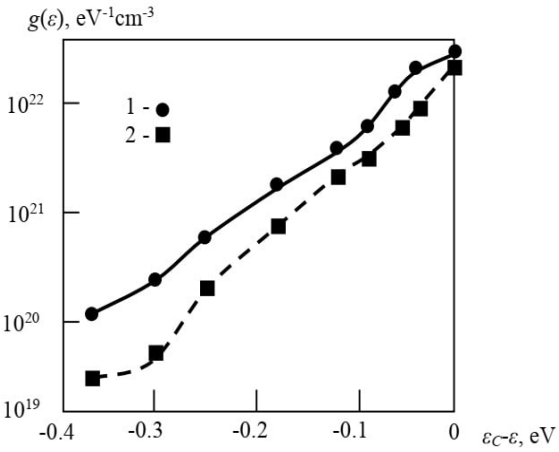


Рисунок 4. Распределение плотности электронных состояний в хвосте зоны проводимости для аморфного $Se_{0,5}S_{0,5}$: *1* – результаты, полученные по формуле (15) (сплошная кривая), *2* – по формуле (16) (пунктирная).

III. Заключение

Таким образом, в настоящей работе путем сравнения эксперимантальных результатов со значениями, полученными аналитически, для спектра экспоненциального поглощения показана возможность определения параметров, определяющих крутизну хвостов валентной зоны и зоны проводимости. Используя формулу Кубо-Гринвуда в приближении Девиса-Мотта, для области экспоненциального поглощения выведена новая формула, определяющая распределение плотностей электронных состояний в хвосте зоны проводимости.

Метаданные

Calculation of the distribution of the density of electronic states at the tail of the conduction band of amorphous semiconductors

B.T. Abdulazizov[1], R.G. Ikramov[2], M.A. Nuriddinova[2], Kh.A. Muminov[2]

[1]Physical and Technical Institute of the Academy of Sciences of the RUz, Ch. Aitmatov str. 2b, 100084, Tashkent, Uzbekistan
[2]Namangan Institute of Engineering and Technology, Kasansay str. 7, 160115, Namangan, Uzbekistan

The analytical expression and the experimental curve of the exponential absorption spectrum of amorphous $Se_{0.5}S_{0.5}$ selenium-sulphur compound are compared. The parameters in the analytical expression for the exponential absorption spectrum, which determine the slope of the tails of the allowed bands, were found by fitting to the experimental curve. Using the Davis-Mott approximation, a new formula was obtained using the Kubo-Greenwood formula for the exponential absorption spectrum, which determines the density of electronic states at the tail of the conduction band. Using this formula and the exponential absorption spectrum determined experimentally, it is shown that it is possible to determine the density of electronic states at the tail of the conduction band.

Keywords: amorphous semiconductors, allowed band tails, Kubo-Greenwood formula, Davis-Mott approximation, optical electronic transitions, exponential absorption spectrum, the slope of the allowed band tails, distribution of the density of electronic states.

Литература (References)

[1] J. Taus The optical properties of solids. Ed F. Abeles (North-Holland, Amsterdam: 1972).
[2] S. Zaynobidinov, R.G. Ikramov, M.A. Nuritdinova, R.M. Zhalalov. Ukr. J. Phys. **53,** No.12, 1177 (2008).

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.

[3] S. Zaynobidinov, R.G. Ikramov, M.A. Nuritdinova, R.M. Zhalalov. Ukr. J. Phys. **53,** No.8, 789 (2008).
[4] S. Zaynobidinov, R.G. Ikramov, R.M. Zhalalov. Jurnal Prikladnoy Spektroskopii **78**, No.2, 243 (2011).
[5] A.A. Andreev, M.S. Shlimak. Fotopriemniki i fotopreobrazovateli. Sbornik nauchnikh trudov AN SSSR (FTI imeni Ioffe, Leningrad, Nauka, 1986).
[6] G.D. Cody. J. Non. Cryst. Solids **141**, 3 (1992).
[7] S. Zaynobidinov, R.G. Ikramov, R.M. Zhalalov. M.A. Nuritdinova. Optika i spektroskopiya **110**, No.5. 813 (2011).
[8] N.Z. Djalilov, G.M. Damirov. Fizika i Tekhnika poluprovodnikov **45**, No. 4, 500 (2011).
[9] E.A. Davis, N.F. Mott. Electronic Processes in Non Crystalline Materials (Oxford, Clarendon Press, 1979).
[10] R.G. Ikramov, M.A. Nuriddinova, X.A. Muminov. Journal of Applied Physical Science International (JAPSI) **12**, No.1, 36 (2020).
[11] I.N. Bronshtein, K.A. Semendyaev. Spravochnik po matematike dlya injenerov i uchashikhsya vtuzov (Moskva, Nauka, 1986)..

Аморф яримўтказгичларни ўтказувчанлик зонаси думидаги электрон ҳолатлари зичлиги тақсимотини ҳисоблаш

Б.Т. Абдулазизов[1], Р.Г. Икрамов[2], М.А. Нуриддинова[2], Х.А. Муминов[2]

[1]ЎзР ФА Физика-техника институти, Ч. Айтматов кўчаси 2б, 100084, Тошкент, Ўзбекистон
[2]Наманган муҳандислик-технология институти, Косонсой кўчаси 7, 160115, Наманган, Узбекистан

Аморф селен-олтингугурт $Se_{0.5}S_{0.5}$ бирикмасининг экспоненциал ютилиш спектрининг тажриба ва аналитик ифодасидан олинган ҳисоблаш натижалари солиштирилган. Экспоненциал ютилиш спектрининг аналитик ифодасидаги рухсат этилган зоналарни думлари эгрилигини аниқловчи параметрларни тажриба натижаларига мослаштириш орқали топилган. Дэвис-Мотт яқинлашиш бўйича экспоненциал ютилиш спектри учун ёзилган Кубо-Гринвуд формуласидан ўтказувчанлик зонаси думидаги электрон ҳолатлари зичлиги тақсимотининг аниқловчи янги формула олинган. Бу формула ва тажрибадан аниқланган экспоненциал ютилиш спектри натижаларидан фойдаланиб, ўтказувчанлик зонаси думидаги электрон ҳолатлари зичлиги тақсимотини аниқлаш мумкин эканлиги кўрсатилган.

Калит сўзлар: Аморф яримўтказгичлар, руҳсат этилган зоналарни думлари, Кубо-Гринвуд формуласи, Дэвис-Мотт яқинлашиш усули, электронларни оптик ўтишлари, экспоненциал ютилиш спектри, руҳсат этилган зоналарни думларини эгрилиги, электрон ҳолатлари зичлиги тақсимоти.

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2020 г.