Область экспоненциального поглощения аморфных полупроводников

Б.Т. Абдулазизов[*,1], Р.Г. Икрамов[2], Б.К. Султонов[2], О.Т. Холмирзаев[2]

[1]Наманганский государственный университет, ул. Уйчинская 316, 716019, Наманган, Узбекистан
[2]Наманганский инженерно-технологический институт, ул. Касансай 7, 160115, Наманган, Узбекистан

Получена 05.02.2022, revised 08.06.2022

* Corresponding author: e-mail bt_abdulazizov@mail.ru, Phone: +99891 186 06 05

С помощью формулы Кубо-Гринвуда в приближении Дэвиса-Мотта теоретически исследована область экспоненциального поглощения аморфных полупроводников. Получены аналитические выражения парциальных спектров поглощения для области экспоненциального поглощения из двух различных представлений формулы Кубо-Гринвуда. Эти результаты показали, что из трех парциальных спектров в области экспоненциального поглощения основную роль играют спектры, определяемые соответствующими электронными переходами от хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости.

Ключевые слова: аморфные полупроводники, оптические спектры поглощения, метод приближения Дэвиса-Мотта, формула Кубо-Гринвуда, экспоненциальная область спектра поглощения, парциальные спектры поглощения.

Using the Kubo-Greenwood formula in the approximation of Davis-Mott, the region of exponential absorption of amorphous semiconductors has been theoretically investigated. Analytical expressions for partial absorption spectra for the region of exponential absorption are obtained from two different representations of the Kubo-Greenwood formula. These results showed that of three partial spectra in the region of exponential absorption, the spectra determined correspondingly by electronic transitions from the tail of the valence band to the tail of the conduction band are played the main role.

Keywords: amorphous semiconductors, optical absorption spectra, Davis-Mott approximation method, Kubo-Greenwood formula, exponential region of the absorption spectrum, partial absorption spectra.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v24i2 326

I. Введение

В работах [1, 2] для определения аналитического выражения спектральной характеристики коэффициента оптического поглощения аморфных полупроводников использована формула Кубо-Гринвуда в приближении Дэвиса-Мотта:

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

или

$$\alpha(\hbar\omega) = A\int g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \qquad (2)$$

где A – коэффициент пропорциональности, не зависящий от энергии ($\hbar\omega$) поглощенных фотонов, $g_V(\varepsilon)$ и $g_V(\varepsilon-\hbar\omega)$ – значения плотностей состояний до оптических переходов электронов, а $g_C(\varepsilon+\hbar\omega)$ и $g_C(\varepsilon)$ – плотности состояний после оптических переходов. Поскольку интегралы в формулах (1) и (2) неопределенные, они дают только общее решение. С учетом этого в работе [3] показано, что для получения собственных решений спектров коэффициента оптического поглощения по формуле Кубо-Гринвуда в (1) необходимо записать этот интеграл в виде определенного интеграла, и тогда его можно записать в следующем виде:

$$\alpha(\hbar\omega) = A \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} g_V(\varepsilon) g_C(\varepsilon+\hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \qquad (3)$$

где ε_0 – энергетическое положение точки пересечения хвостов разрешенных зон. Известно, что энергия фотонов, поглощаемых в аморфных полупроводниках в области экспоненциального поглощения, меньше энергетической ширины ($\hbar\omega<E_g$) щели подвижности.

II. Метод исследования

В работе [4] показано, что в аморфных полупроводниках при поглощении фотонов малой энергии одновременно наблюдаются оптические переходы электронов из хвоста валентной зоны в зону проводимости, из хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости и из валентной зоны в хвост зоны проводимости. Поэтому, адаптируя формулу (3) к указанным выше оптическим переходам, запишем ее следующим образом:

$$\begin{aligned}
\alpha(\hbar\omega) &= A \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon) g(\varepsilon+\hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \\
&= A \int_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon) g(\varepsilon+\hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + \\
&+ A \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C-\hbar\omega} g(\varepsilon) g(\varepsilon+\hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + \\
&+ A \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} g(\varepsilon) g(\varepsilon+\hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \\
&= \alpha_1(\hbar\omega) + \alpha_2(\hbar\omega) + \alpha_3(\hbar\omega)
\end{aligned}, \qquad (4)$$

где ε_V – верхняя граница валентной зоны, ε_C – нижняя граница зоны проводимости. Парциальные спектры поглощения, соответствующие оптическим переходам электронов, обозначены как: от хвоста валентной зоны в зону проводимости $\alpha_1(\hbar\omega)$, от хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости $\alpha_2(\hbar\omega)$, от валентной зоны в хвост зоны проводимости $\alpha_3(\hbar\omega)$.

Видно, что для расчета спектров парциальных коэффициентов поглощения по формуле (4) должны быть известны распределения плотности электронных состояний в валентной зоне и в ее хвосте, а также в зоне проводимости и в хвосте зоны проводимости. Обычно при теоретических исследованиях спектров оптического поглощения используют эмпирические модели, выбранные для аморфных полупроводников. В этих моделях плотности электронных состояний на границах разрещенных зон записываются как линейные или параболические, а в хвостах разрещенных зон имеют вид экспоненциальных распределений [5, 6].

В [7] предложили следующую эмпирическую модель для этих распределений:

$$\begin{aligned}
g_V(\varepsilon) &= N(\varepsilon_V)\left(\frac{\varepsilon_C-\varepsilon}{E_g}\right)^{n_1},\ n_1 = 0, 1/2, 1 \\
g_V(\varepsilon) &= N(\varepsilon_V)\exp\left(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V)\right)
\end{aligned}, \qquad (5)$$

$$\begin{aligned}
g_C(\varepsilon) &= N(\varepsilon_C)\left(\frac{\varepsilon-\varepsilon_V}{E_g}\right)^{n_2},\ n_2 = 0, 1/2, 1 \\
g_C(\varepsilon) &= N(\varepsilon_C)\exp\left(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C)\right)
\end{aligned}, \qquad (6)$$

где $N(\varepsilon_V)$ и $N(\varepsilon_C)$ – эффективное значение плотности электронных состояний соответственно в валентной зоне и в зоне проводимости. Подставляя эти функции распределения в формулу (4), были получены следующие спектры парциальных коэффициентов поглощения электронов в соответствии с типами оптических переходов.

При n_1=n_2=1:

$$\begin{aligned}
\alpha_1(\hbar\omega) &= B\frac{\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))}{E_g\beta_1\hbar\omega}\left(E_g+\frac{1}{\beta_1}\right)\times \\
&\times\exp(-\beta_1(\varepsilon_C-\varepsilon_0-\hbar\omega)) - \\
&-B\frac{\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))}{E_g\beta_1\hbar\omega}\left(\varepsilon_0-\varepsilon_V+\frac{1}{\beta_1}+\hbar\omega\right)
\end{aligned}; \qquad (7)$$

$$\begin{aligned}
\alpha_2(\hbar\omega) &= \frac{B}{(\beta_2-\beta_1)\hbar\omega}\exp(\beta_1(\hbar\omega-E_g))\times \\
&\times\left[1-\exp(\beta_2-\beta_1)(\hbar\omega-E_g))\right]
\end{aligned}; \qquad (8)$$

$$\begin{aligned}
\alpha_3(\hbar\omega) &= B\frac{\exp(-\beta_2(\varepsilon_C-\varepsilon_0))}{E_g\beta_2\hbar\omega}\left(E_g+\frac{1}{\beta_2}\right)\times \\
&\times\exp(-\beta_2(\varepsilon_0-\varepsilon_V-\hbar\omega)) - \\
&-B\frac{\exp(-\beta_2(\varepsilon_C-\varepsilon_0))}{E_g\beta_2\hbar\omega}\left(\varepsilon_C-\varepsilon_0+\frac{1}{\beta_2}+\hbar\omega\right)
\end{aligned}. \qquad (9)$$

©Академия наук Республики Узбекистан, 2022 г.

При $n_1=n_2=1/2$ не удалось получить аналитических выражений для $\alpha_1(\hbar\omega)$ и $\alpha_3(\hbar\omega)$. Поэтому значения этих спектров рассчитаны, используя приближенные вычислительные методы. Этот приблизительный расчет и результаты, полученные по формулам (7) и (9), показали, что они практически не отличимы друг от друга. Графики парциальных коэффициентов поглощения, рассчитанные по формулам (7) - (9), представлены на рисунке. Расчеты выполнены для значений $\varepsilon_C-\varepsilon_0$=0.7 eV; E_g = 1.8 эВ; β_1=16 eV^{-1} и β_2=25 eV^{-1}.

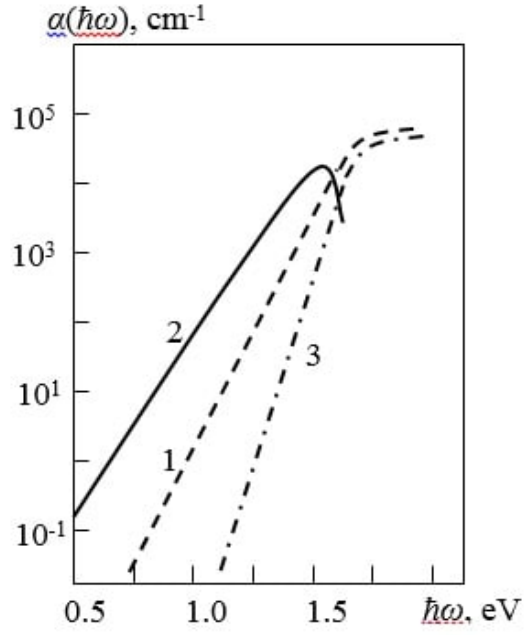


Рисунок. Графики парциальных спектров поглощения, полученные по формулам (7), (8) и (9). Расчеты ε_C-ε_0=0.7 eV; E_g = 1.8 eV выполнены для значений β_1=16 eV^{-1} и β_2=25 eV^{-1}.

Теперь рассмотрим расчет формулы Кубо-Гринвуда, записанной в виде уравнения (2). Для этого интеграл в формуле запишем в виде определенного интеграла следующим образом:

$$\alpha(\hbar\omega)=A\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_0+\hbar\omega} g_V(\varepsilon-\hbar\omega)g_C(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}. \qquad (10)$$

Запишем эту формулу в ниже следующем виде, адаптируя к типам электронных оптических переходов при выполнении условия $\hbar\omega<E_g$:

$$\begin{aligned}\alpha(\hbar\omega)&=A\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_0+\hbar\omega} g(\varepsilon-\hbar\omega)\,g(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}=\\&=A\int_{\varepsilon_C}^{\varepsilon_0+\hbar\omega} g(\varepsilon-\hbar\omega)\,g(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}+\\&+A\int_{\varepsilon_{V+\hbar\omega}}^{\varepsilon_C} g(\varepsilon-\hbar\omega)\,g(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}+\\&+A\int_{\varepsilon_0}^{\varepsilon_{V+\hbar\omega}} g(\varepsilon-\hbar\omega)\,g(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}=\\&=\alpha_1(\hbar\omega)+\alpha_2(\hbar\omega)+\alpha_3(\hbar\omega)\end{aligned}, \qquad (11)$$

где парциальные спектры коэффициента поглощения, определяемые оптическими переходами электронов из хвоста валентной зоны в зону проводимости есть $\alpha_1(\hbar\omega)$, из хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости $\alpha_2(\hbar\omega)$, из валентной зоны в хвост зоны проводимости $\alpha_3(\hbar\omega)$. В результате расчетов всех парциальных спектров поглощения по формуле (11) были получены следующие результаты:

$$\begin{aligned}\alpha_1(\hbar\omega)&=B\frac{\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))}{E_g\beta_1\hbar\omega}\left(E_g+\frac{1}{\beta_1}\right)\times\\&\times\exp(-\beta_1(\varepsilon_C-\varepsilon_0-\hbar\omega))-\\&-B\frac{\exp(-\beta_1(\varepsilon_0-\varepsilon_V))}{E_g\beta_1\hbar\omega}\left(\varepsilon_0-\varepsilon_V+\frac{1}{\beta_1}+\hbar\omega\right)\end{aligned}; \qquad (12)$$

$$\begin{aligned}\alpha_2(\hbar\omega)&=\frac{B}{(\beta_2-\beta_1)\hbar\omega}\exp(\beta_1(\hbar\omega-E_g))\times\\&\times\left[1-\exp(\beta_2-\beta_1)(\hbar\omega-E_g))\right]\end{aligned}; \qquad (13)$$

$$\begin{aligned}\alpha_3(\hbar\omega)&=B\frac{\exp(-\beta_2(\varepsilon_C-\varepsilon_0))}{E_g\beta_2\hbar\omega}\left(E_g+\frac{1}{\beta_2}\right)\times\\&\times\exp(-\beta_2(\varepsilon_0-\varepsilon_V-\hbar\omega))-\\&-B\frac{\exp(-\beta_2(\varepsilon_C-\varepsilon_0))}{E_g\beta_2\hbar\omega}\left(\varepsilon_C-\varepsilon_0+\frac{1}{\beta_2}+\hbar\omega\right)\end{aligned}. \qquad (14)$$

Из формул (7)-(9) и (12)-(14) следует, что при правильно выбранной эмпирической модели распределения плотности электронных состояний и границы интеграла в формуле Кубо-Гринвуда в аморфных полупроводниках спектры коэффициента поглощения в экспоненциальной области и результаты, полученные при расчете по формуле Кубо-Гринвуда, имеют одинаковый вид.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2022 г.

III. Заключение

Таким образом, в данной работе теоретически исследована область экспоненциального поглощения аморфных полупроводников. Показано, что парциальные коэффициенты оптического поглощения аморфных полупроводников в трех видах соответствуют трем разным оптическим переходам электронов. Парциальные коэффициенты поглощения, соответствующие этим трем различным оптическим переходам электронов, рассчитывались для спектров двумя различными способами.

Показано, что аналитические выражения спектров парциальных коэффициентов поглощения, рассчитанных двумя разными методами, не отличаются друг от друга.

Благодарности. Данная работа выполнена в рамках фундаментального гранта ФЗ-20200929243 “Влияние горячих электронов и фононов в сильном электромагнитном поле на характеристики полупроводниковых солнечных фотогальванических элементов и наноструктур”.

Метаданные

Exponential absorption region of amorphous semiconductors

B.T. Abdulazizov[1], R.G. Ikramov[2], B.Q. Sultonov[2], O.T. Xolmirzayev[2]

[1]Namangan State University, Uychi str. 316, 716019, Namangan, Uzbekistan
[2]Namangan Institute of Engineering and Technology, Kasansay str. 7, 160115, Namangan, Uzbekistan

Using the Kubo-Greenwood formula, the region of exponential absorption of amorphous semiconductors has been theoretically investigated. Analytical expressions for partial absorption spectra for the region of exponential absorption are obtained from two different representations of the Kubo-Greenwood formula. These results showed that, of the three partial spectra in the region of exponential absorption, the main role is played by the spectra determined corresponding to electronic transitions from the tail of the valence band to the tail of the conduction band.

Keywords: amorphous semiconductors, optical absorption spectra, Davis-Mott approximation method, Kubo-Greenwood formula, exponential region of the absorption spectrum, partial absorption spectra.

Литература (References)

[1] S. Zainobidinov, R.G. Ikramov, M.A. Nuritdinova, R.M. Zhalalov. Ukr. J. Phys. **53**, No.12, 1177-1180 (2008).
[2] S.V. Ivliev. IOP Conference Series: Journal of Physics **941**, 012047, 1-5 (2017),
[3] R.G. Ikramov, A.A. Mamakhanov, M.A. Nuriddinova, R.M. Jalolov, Kh.M. Muminov, and B.Q. Sultonov. Journal of Applied Science and Engineering **25**, No.5, 767-772 (2021).
[4] S. Zainobidinov, R.G. Ikramov, R.M. Zhalalov. Journal of Applied Spectroscopy **78**, No.2, 243-247 (2011).
[5] G.D. Cody. Optical Properties **21**, 218-221 (1984).
[6] S.K. O’Leary. Solid State Commun. **109**, 589-594 (1999).
[7] R. Ikramov, M. Nuriddinova, K. Muminov, and R. Zhalalov Optics and Photonics Journal **10**, 21, 211-218 (2020).

Аморф яримўтказгичларни экспоненциал ютилиш соҳаси спектрлари

Б.Т. Абдулазизов[1], Р.Г. Икрамов[2], Б.Қ. Султонов[2], О.Т. Холмирзаев[2]

[1]Наманган давлат университети, Уйчи кўчаси, 316, 716019, Наманган, Ўзбекистон
[2]Наманган муҳандислик-технология институти, Косонсой кўчаси 7, 160115, Наманган, Ўзбекистон

Аморф яримўткагичларни оптик ютилиш спектрларини экспоненциал ютилиш соҳаси Кубо-Гринвуд формуласи ёрдамида назарий тадқиқ қилинган. Кубо-Гринвуд формуласини икки хил кўринишидан оптик ютилиш спектрининг экспоненциал ютилиш соҳаси учун парциал ютилиш спектрларининг аналитик ифодалари келтириб чиқарилган Ҳисоблашлардан олинган натижалар оптик ютилиш коэффициентининг экпоненциал соҳаси учун аниқлаган учта парциал ютилиш коэффициентларидан валент зона думидан ўтказувчанлик зонасига электронларни оптик ўтишлари билан аниқланувчи спектрнинг қийматлари асосий ролни ўйнашини кўрсатди.

Калит сўзлар: аморф яримўтказгичлар, оптик ютилиш спектрлари, Дэвис-Мотт яқинлашиш усули, Кубо-Гринвуд формуласи, ютилиш спектрининг экспоненциал соҳаси, парциал ютилиш спектрлари.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2022 г.