Uzbek Journal of Physics
Vol.21(№2) 2019 PP.88-92

ИНФРАКРАСНЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ В АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

С. Зайнобидинов[1], Р.Г. Икрамов[2], М.А. Нуриддинова[2], Р.М. Жалолов[3]

[1]Андижанский государственный университет, 170100 Андижан, Узбекистан
[2]Наманганский инженерно-технологический институт, Наманган, Узбекистан
[3]Наманганский государственный университет, 710019 Наманган, Узбекистан
rgikramov@mail.ru
(Получена 19.10.2018)

Дэвис-Мотт усули билан Кубо-Гринвуд формуласидан фойдаланиб аморф яримўтказгичларнинг инфрақизил ютилиш спектрлари тадқиқ қилинди. Ҳаракатчанлик тирқишида жойлашган нуқсонларда кучли ютилиш соҳаларини ҳосил бўлиши асосан валент ва ўтказувчанлик зоналари чегараларидаги локаллашмаган электрон ҳолатлари билан аниқланиши кўрсатилди. Инфрақизил спектрларида аниқ максимум ҳосил бўлиши учун нуқсонларни энергетик ҳолатига яқин жойлашган тақиқланмаган зонанинг чегарасида электрон ҳолатлари тақсимоти функцияси ҳам аниқ максимумга эга бўлиши шарт эканлиги кўрсатилди.

По формуле Кубо-Гринвуда, используя приближение Дэвиса-Мотта, исследованы спектры инфракрасного поглощения аморфных полупроводников. Показано, что появление полос сильного поглощения в дефектных состояниях, образующихся в щели подвижности, в основном определяется нелокализованными электронными состояниями, находящимися на краях валентной зоны или зоны проводимости. Показано, что в инфракрасных спектрах явные максимумы образуются только тогда, когда функция плотности электронных состояний на краю разрешенной зоны, вблизи которого находятся энергетические состояния дефектов, имеет явный максимум.

By the Kubo-Greenwood formula using the Davis-Mott approximation, the spectra of infra-red absorption in amorphous semiconductors are investigated. In is shown, that occurrence of bands of strong absorption in defect states formed in a band of mobility gap is defined by the non-local electronic states being on edges of a valence band or conduction band. It is shown also that in infra-red spectra maxima are formed only when function of electron state's density on a allowed band edge, near which the energy states of defects are located, has an maximum.

В литературе много экспериментальных данных, полученных по измерению спектральной характеристики коэффициента оптического поглощения аморфных полупроводников. Они показывают, что эти результаты отличаются только количественно, если энергия поглощенных фотонов близка к энергетической ширине щели подвижности. Но в инфракрасной области поглощения они различаются и по качеству [1, 2]. Несмотря на это, до сих пор остается открытым вопрос, почему приготовленные по схожим технологиям и из одного материала одни образцы показывают максимумы в инфракрасных спектрах коэффициента поглощения, а другие нет [2]. Поэтому в данной работе исследованы спектры инфракрасного поглощения аморфных полупроводников и определены условия появления максимумов в спектрах инфракрасного поглощения.

Эксперименты показывают, что инфракрасные полосы поглощения определяются в основном спектрами дефектного поглощения, т.е. оптическими

переходами электронов, в которых участвуют электронные состояния радиационных дефектов или примесей, образующих глубокие уровни [3]. Как известно, такие переходы могут быть трех видов: между дефектными состояниями, между дефектным состоянием и хвостом разрешенной зоны, между дефектным состоянием и разрешенной зоной. Аналитически спектры коэффициента поглощения, определяемые этими переходами, можно получить по формуле Кубо-Гринвуда в приближении Дэвиса-Мотта [2, 4].

При $kT<<\hbar\omega$ можно записать

$$\alpha(\hbar\omega) = A \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon) g(\varepsilon+\hbar\omega)) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (1)$$

где A – коэффициент пропорциональности, не зависящий от частоты поглощенного фотона. Видно, что для определения спектров дефектного поглощения надо знать распределение плотности электронных состояний, участвующих в оптических переходах. Основываясь на литературных данных, будем выбирать эти распределения в следующем виде:

для валентной зоны, т.е. когда $\varepsilon<\varepsilon_V$,

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_V)[(\varepsilon_C - \varepsilon)/E_g]^{n_1}, \quad (2)$$

для зоны проводимости, т.е. когда $\varepsilon>\varepsilon_C$,

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_C)[(\varepsilon - \varepsilon_V)/E_g]^{n_2}, \quad (3)$$

где E_g – энергетическая ширина щели подвижности, n_1 и n_2 могут иметь значения 0, 1/2 и 1. В работе [5] показано, что хвосты разрешенных зон имеют экспоненциальный вид

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_V)\exp[-\beta_1(\varepsilon - \varepsilon_V)], \quad \text{когда } \varepsilon_V<\varepsilon; \quad (4)$$

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_C)\exp[\beta_2(\varepsilon - \varepsilon_C)], \quad \text{когда } \varepsilon<\varepsilon_C, \quad (5)$$

β_1 и β_2 – параметры, определяющие наклоны экспоненциальных хвостов разрешенных зон.

Как известно, плотность электронных состояний, находящихся в дефектах, подчиняется распределению Гаусса [6]

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_D)\exp[-\alpha(\varepsilon - \varepsilon_D)^2]. \quad (6)$$

Однако, интегрируя эту функцию по формуле Кубо-Гринвуда, невозможно получить аналитическое решение. Поэтому в работе [7] предложена интегрируемая функция распределения, соответствующая гауссовскому в пределах ошибок эксперимента, которая имеет вид:

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_D)/\mathrm{ch}[b(\varepsilon - \varepsilon_D)]. \quad (7)$$

Используя это распределение, можно определить аналитическое решение спектральных характеристик коэффициента поглощения для каждого типа электронных переходов с участием состояний, находящихся в дефектах, поскольку коэффициент поглощения является аддитивным параметром [3]. Эти переходы будем рассматривать в отдельности следующим образом: из валентной зоны в дефекты; из хвоста валентной зоны в дефекты; между дефектными состояниями; из дефекта в хвост зоны проводимости; из дефекта в зону проводимости.

Численные расчеты, проведенные для этих переходов по формуле (1), показали, что, во-первых, значения коэффициента поглощения в основном определяют электронные переходы между дефектными состояниями и

разрешенными зонами, во-вторых, вид этих спектров почти не различается при варьировании значений степеней n_1 и n_2 между 0 и 1 (рис. 1). Поэтому здесь мы приведем аналитическое решение спектральной характеристики коэффициента дефектного поглощения для «постоянных» разрешенных зон.

Используя выражения (2), (3) и (7) для n_1=0 и n_2=0 по формуле Кубо-Гринвуда, получаем:

$$\alpha = \frac{2A \times g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C) b \times \hbar\omega} \operatorname{arctg}\left[\frac{\exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar\omega)) - \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D))}{1 + \exp(b(2(\varepsilon_V - \varepsilon_D)) + \hbar\omega)} \right], \tag{8}$$

$$\alpha = \frac{2A \times g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C) b \times \hbar\omega} \operatorname{arctg}\left[\frac{\exp(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D)) - \exp(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D - \hbar\omega))}{1 + \exp(b(2(\varepsilon_C - \varepsilon_D)) - \hbar\omega)} \right]. \tag{9}$$

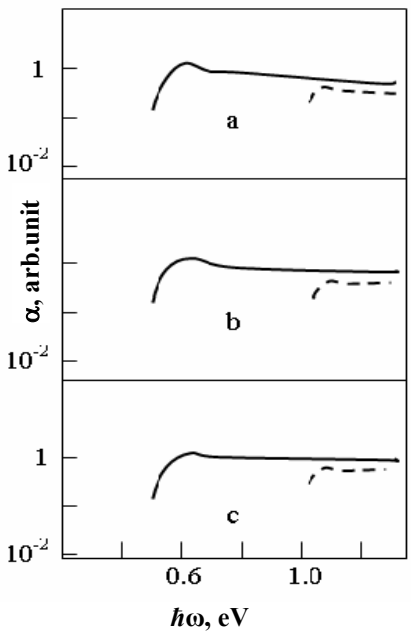


Рис. 1. Спектры коэффициента поглощения электронных переходов из дефектного состояния в зону проводимости (сплошная линия) и из валентной зоны в дефектное состояние (штриховая линия). E_g=1.8 eV, ε_C–ε_D=0.6 eV; *a*) n_1=n_2=0, *b*) n_1=n_2=1/2, *c*) n_1=n_2=1.

На рис. 1*a* показаны данные, полученные из этих выражений. Видно, что в спектрах нет полосы сильного поглощения, получаемой в эксперименте. Дальнейшие исследования показали, что полоса сильного поглощения образуется только в образцах, у которых на краях разрешенных зон имеются явные максимумы. Предполагая, что энергетическое распределение этих максимумов также имеет вид гиперболического секанса (7), выразим их следующим образом:

для края валентной зоны

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_V) / \operatorname{ch}(b_1(\varepsilon - \varepsilon_V)), \tag{10}$$

а для края зоны проводимости

$$g(\varepsilon) = g(\varepsilon_C) / \operatorname{ch}(b_2(\varepsilon - \varepsilon_C)). \tag{11}$$

Численные расчеты, полученные для $b \neq b_1$ и $b \neq b_2$, показали, что результаты интегрирования почти не отличаются от b_1=b=b_2, когда выполняются условия $b_1 < b < b_2$. Поэтому, чтобы получить аналитическое решение спектров коэффициента поглощения, используя выражения (10) и (11), требуется выполнение условий b=b_1 и b=b_2. Для электронных переходов из дефекта в зону проводимости

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{A}{b\hbar\omega} \frac{1}{\operatorname{sh}(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D - \hbar\omega))} \ln \frac{1 + \left(\frac{g(\varepsilon_D)}{g(\varepsilon_C)}\right)^2 + 2\left(\frac{g(\varepsilon_D)}{g(\varepsilon_C)}\right) \operatorname{ch}(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D))}{1 + \left(\frac{g(\varepsilon_D)}{g(\varepsilon_C)}\right)^2 + 2\left(\frac{g(\varepsilon_D)}{g(\varepsilon_C)}\right) \operatorname{ch}(b(2\hbar\omega - \varepsilon_C - \varepsilon_D))}. \tag{12}$$

Для оптических переходов из валентной зоны в дефекты

$$\alpha(\hbar\omega)=\frac{A}{b\hbar\omega}\frac{1}{\mathrm{sh}(b(\varepsilon_D-\varepsilon_V-\hbar\omega))}\ln\frac{1+\left(\frac{g(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)^2+2\left(\frac{g(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)\mathrm{ch}(b(\varepsilon_D-\varepsilon_V))}{1+\left(\frac{g(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)^2+2\left(\frac{g(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)\mathrm{ch}(b(2\hbar\omega-\varepsilon_D-\varepsilon_V))}. \quad (13)$$

На рис. 2 представлены расчетные данные, полученные из формулы (13). Для сравнения также показаны спектры инфракрасного поглощения аморфного германия, полученные экспериментальным путем в работе [2]. Видно, что расчетные и экспериментальные данные хорошо согласуются. Это показывает, что полосы сильного инфракрасного поглощения появляются только в тех аморфных полупроводниках, у которых имеются максимумы на краях разрешенных зон.

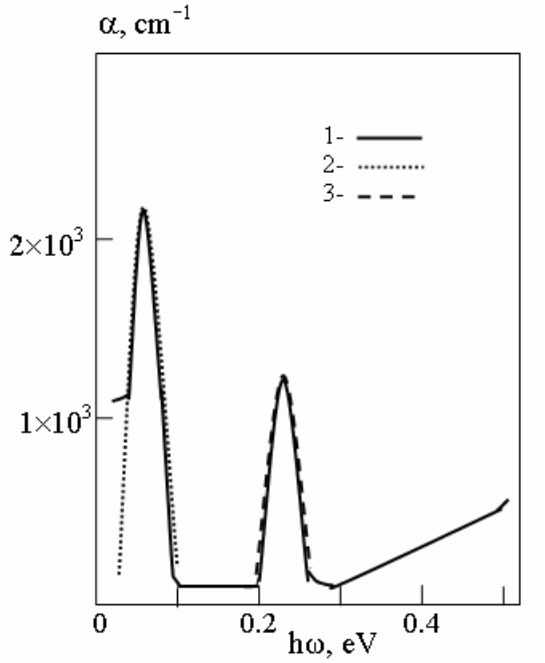


Рис. 2. Инфракрасные спектры аморфного германия: *1* – эксперимент [2]; расчетные данные, полученные по формуле (13): *2* – ε_D–ε_V=0.07 eV, *3* – ε_D–ε_V=0.24 eV.

Следует отметить, наши дальнейшие расчеты показали, что если энергетический интервал между разрешенными зонами и радиационными дефектами или примесями, образующими глубокие уровни, меньше, чем 0.03 эВ, тогда, для расчета спектров инфракрасного поглощения надо использовать формулу Кубо-Гинвуда в виде

$$\alpha(\hbar\omega)=A\int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0}g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)(f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\hbar\omega))\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (14)$$

где $f(\varepsilon)=\exp\left(-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT}\right)$ – распределение Больцмана.

Таким образом, в настоящей работе определены условия появления полос сильного инфракрасного поглощения. Определены аналитические виды этих спектров. Показано, что в инфракрасных спектрах явные максимумы появляются только тогда, когда функция распределения на краях разрешенной зоны имеет максимум, вблизи которого находятся энергетические состояния радиационных дефектов или примесей, образующих глубокие уровни.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р.Г. Икрамов, Н. Рахимов, Х.О. Кучкаров, Узбек. физич. журн.№ 5**,** 30 (1994).
2. Н. Мотт, Э. Дэвис. Электронные процессы в некристаллических веществах (Москва, Мир, 1982).
3. В.И. Фистуль. Аморфные примеси в полупроводниках (Москва, Металлургия, 1992).
4. M. Vanecek, A. Abraham, O. Stika, and J. Kocka, Phys. Stat. Sol. (a) **83**, 617 (1984).
5. А.А. Андреев, М.С. Шлимак. В книге: Фотоприемники и фотопреобразователи. Сборник научных трудов ФТИ им А.Ф. Иоффе АН СССР (Ленинград, Наука, 1986).
6. S. Yamasaki, H. Oheda, A. Matsuda, Jap. J. Appl. Phys. **21**, (9), L539 (1982).
7. Р.Г. Икрамов, Естественные и технические науки (Москва) **21**, (9), L539 (2002).