

**ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ ҚОШИДАГИ
ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАР ФИЗИКАСИ ВА МИКРОЭЛЕКТРОНИКА
ИЛМИЙ-ТАДҚИҚОТ ИНСТИТУТИ ҲУЗУРИДАГИ ФАЛСАФА
ДОКТОРИ ИЛМИЙ ДАРАЖАСИНИ БЕРУВЧИ
PhD.30.08.2018.FM/T.01.12 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

НАМАНГАН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

ЖАЛАЛОВ РАВШАНБЕК МАХМУДХАНОВИЧ

**ГИДРОГЕНИЗАЦИЯЛАНГАН АМОРФ КРЕМНИЙНИНГ СПЕКТРАЛ
ХАРАКТЕРИСТИКАЛАРИНИНГ ШАКЛЛАНИШ ХУСУСИЯТЛАРИ**

01.04.10 – яримўтказгичлар физикаси

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2019

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD)
диссертацияси автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)
по физико-математическим наукам**

**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD) on
physical-mathematical sciences**

Жалалов Равшанбек Махмудханович Гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг спектрал характеристикаларининг шаклланиш хусусиятлари	3
Жалалов Равшанбек Махмудханович Особенности формирования спектральных характеристик гидрогени- зированного аморфного кремния	27
Jalalov Ravshanbek Mahmudxanovich Spectral characteristics of the coefficient of the optical absorption hydrogenated amorphous semiconductors	49
Эълон қилинган ишлар рўйхати Список опубликованных работ List of published works.....	52

**ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ ҚОШИДАГИ
ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАР ФИЗИКАСИ ВА МИКРОЭЛЕКТРОНИКА
ИЛМИЙ-ТАДҚИҚОТ ИНСТИТУТИ ХУЗУРИДАГИ ФАЛСАФА
ДОКТОРИ ИЛМИЙ ДАРАЖАСИНИ БЕРУВЧИ
PhD.30.08.2018.FM/T.01.12 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ**

НАМАНГАН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

ЖАЛАЛОВ РАВШАНБЕК МАХМУДХАНОВИЧ

**ГИДРОГЕНИЗАЦИЯЛАНГАН АМОРФ КРЕМНИЙНИНГ СПЕКТРАЛ
ХАРАКТЕРИСТИКАЛАРИНИНГ ШАКЛЛАНИШ ХУСУСИЯТЛАРИ**

01.04.10 – яримўтказгичлар физикаси

**ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент – 2019

Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2019.2.PhD/FM 260 рақам билан рўйхатга олинган.

Докторлик диссертацияси Наманган давлат университетида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (ispm.uz) ва «ZiyoNet» ахборот-таълим порталида (www.ziynet.uz) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:

Зайнобидинов Сирожидин Зайнобидинович
физика-математика фанлари доктори, академик

Расмий оппонентлар:

Исмайлов Канатбай Абдреймович
физика-математика фанлари доктори, профессор

Отажанов Салим Мадрахимович
физика-математика фанлари доктори

Етакчи ташкилот:

Тошкент давлат техника университети

Диссертация ҳимояси Ўзбекистон Миллий университети қошидаги Яримўтказгичлар физикаси ва микроэлектроника илмий-тадқиқот институти ҳузуридаги фалсафа доктори илмий даражасини берувчи PhD.30.08.2018.FM/T.01.12 рақамли илмий кенгашнинг 2019 йил «___» _____ соат ___ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100057, Ўзбекистон, Тошкент шаҳри, Янги Олмазор кўчаси, 20-уй. Тел.: (+99871) 248-79-94; факс: (+99871) 248-79-92; e-mail: info@ispm.uz), ЎзМУ қошидаги ЯФМ ИТИ мажлислар зали).

Диссертация билан Ахборот технологияларини жорий этиш бўлимида танишиш мумкин. (___ рақам билан рўйхатга олинган). Манзил: 100057, Ўзбекистон, Тошкент шаҳри, Янги Олмазор кўчаси, 20-уй. Тел.: (+99871) 248-79-59; e-mail: info@ispm.uz),

Диссертация автореферати 2019 йил « ___ » _____ да тарқатилди.
(2019 йил « ___ » _____ даги _____ рақамли реестр баённомаси)

Ш.Б. Утамурадова
Фалсафа доктори илмий даражасини берувчи
Илмий кенгаш раиси, ф.-м.ф.д., профессор

С.С. Насриддинов
Фалсафа доктори илмий даражасини берувчи
Илмий кенгаш котиби т.ф.д., доцент

А.Т. Мамадалимов
Фалсафа доктори илмий даражасини Илмий
кенгаш қошидаги илмий семинар раиси,
ф.-м.ф.д., профессор, академик

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг зарурати ва долзарблиги. Жаҳонда бугунги кунда шиддат билан ривожланаётган фотоэнергетика соҳасининг истиқболли йўналишлардан бири гидрогенизацияланган аморф кремнийда ёруғликни электр энергиясига айлантириш жараёнларини ўрганиш асосида қуёш энергиясини янада самаралироқ ўзгартириш ҳисобланади. Бунда гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг ёруғликни ютиш қобилиятини ўрганиш асосий масалалардан бўлиб, у қуёш энергиясини электр энергиясига ўзгартириш учун ишлатиладиган материалнинг мақбул параметрларини танлашда қимматли маълумотлар олиш имконини беради.

Ҳозирги кунда дунё илм-фанида гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг берилган спектрал оралиғидаги фундаментал параметрлари билан боғлиқ фотоэлектрик характеристикаларини ўрганишга катта эътибор қаратилмоқда. Бу борада, қуйида келтирилган йўналишлар бўйича мақсадли тадқиқотлар олиб бориш асосий масалалардан бири ҳисобланади: аморф кремнийнинг фундаментал ютилиш соҳасида электронларнинг тўғри ва нотўғри оптик ўтишлари учун ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги билан руҳсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлар зичлиги функциялари орасидаги боғланишларни тадқиқ қилиш; аморф яримўтказгичларда экспоненциал ютилиш коэффициентининг спектрал боғланишларида Урбах энергиясини аниқлаш; нуқсонлардаги электрон ҳолатлари иштирок этувчи фотонларнинг ютилишларини аниқловчи спектрлардан фойдаланиб, нуқсонларнинг энергетик ўрнини аниқлаш; инфрақизил ютилиш соҳасининг яримўтказгич кристалл панжараси параметрлари билан ўзаро боғлиқлигини аниқлаш.

Республикамызда илм-фан ривожига фотоўзгартиргичларга хусусан, монокристалл кремнийли қуёш модулларининг мақбул ишлаш режимларини тадқиқ этишга алоҳида эътибор қаратилмоқда. Бу борада ҳозирга қадар чегаравий ишчи температуралар аниқланган ва иссиқ об-ҳаво шароитида ишчи ҳолатини сақлаш учун тавсиялар ишлаб чиқилган.

2017–2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича Ҳаракатлар стратегияси¹ да илмий тадқиқот ва инновацион фаолиятни рағбатлантириш масалалари, ишлаб чиқаришга энергия тежамкор технологияларни жорий қилиш, қайта тикланувчи энергия манбаларидан фойдаланишни кенгайтириш вазифалари белгилаб берилган. Бу борада арзон яримўтказгич материаллари асосидаги эффектив қуёш элементларини ишлаб чиқиш муҳим аҳамиятга эга. Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги «2017–2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида»ги ПФ–4947-сонли Фармони ҳамда 2017 йил 13 февралдаги ПҚ–2772-сонли “2017-2021 йилларда электротехника саноатини ривожлантиришнинг устувор йўналишлари

¹ Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида»ги ПФ–4947-сон Фармони.

тўғрисида”ги ҳамда 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сонли “Фанлар Академиясининг фаолияти ва илмий-тадқиқот ишларини такомиллаштиришни ташкил қилиш, бошқариш ва молиялаштириш бўйича чора-тадбирлари тўғрисида”ги қарорлари ва мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга мазкур диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига боғлиқлиги. Мазкур тадқиқот республика фан ва технологиялар ривожланишининг Ф2 «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик» устувор йўналиши доирасида бажарилган.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Гидрогенизацияланган кремний асосли қуёш элементларида нуқсонларнинг ҳосил бўлиш сабабларини Америкалик олим Дэвид Дреболд¹ ва унинг ҳамкасблари биргаликда ўрганишган.

Россиялик олимлар томонидан аморф кремний учун тажрибалардан олинган спектрал характеристикалардан фойдаланиб рухсат этилган зоналарнинг думларидаги электрон ҳолатлар зичлиги тақсимотини ҳисоблаш усуллари ишлаб чиқилган ҳамда О.В. Константинов² ўзининг ҳамкасблари билан ҳолат зичлиги учун мослаштирувчи параметр - локаллашган ҳолатлар зичлигини тавсифловчи Урбах энергияси қатнашган феноменологик ифодани таклиф қилган (А.Ф.Иоффе номидаги физика-техника институти Санкт-Петербург).

Ўзбекистон олимлари: Р.А.Мўминов, А.Т.Мамадалимов, М.К.Бахадирханов, С.З.Зайнобидинов, Э.З.Имамов, Қ.П.Абдурахмонов, Р.Я.Расулов ҳамда Р.Ғ. Икрамовларнинг бир қатор назарий ишларида аморф яримўтказгичлар учун рухсат этилган зоналар чегараларидаги электрон ҳолатлари зичлигини тақсимоти чизиқли ёки параболик боғлиқликда бўлиши кўрсатилган. Бу тақсимотларни Кубо-Гринвуд формуласига қўйиш орқали ҳаракатчанлик тирқиши кенглигидан катта энергияли фотонлар ютилганда оптик ютилиш коэффицентининг спектрал характеристикалари аниқланган.

Аммо ҳозиргача нуқсонларда ютилиш коэффиценти спектрлари учун аниқ аналитик ечим олинмаган ҳамда аморф яримўтказгичларда нуқсон ва легировчи киришмаларнинг энергетик ўрни аниқланмаган.

Диссертация мавзусининг диссертация бажарилаётган олий таълим муассасаси илмий-тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги. Диссертация тадқиқоти Андижон давлат университети ва Наманган давлат университети илмий-тадқиқот режасининг ОТ-Ф2-002-сон «Поликристалл, аморф ва нанокристалл кремнийли структураларда ташқи таъсирлардан

¹ https://zn.ua/article/print/SCIENCE/solnechnye_batarei_dostoinstva_i_nedostatki.html

Солнечные батареи: достоинства и недостатки.

²М.А. Якобсон, Д.К. Нельсон, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев. Хвост локализованных состояний в запрещенной зоне квантовой ямы в системе $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}/\text{GaN}$ и его влияние на спектр фотолуминесценции при лазерном возбуждении. Физика и техника полупроводников, 2005, том 39, вып. 12. С.1459-1463.

(термик, оптик ва радиацион) стимуллашган номувозанатли заряд кўчиш жараёнлари» (2007 – 2011 йй.); ОТ-Ф2-28-сон «Легирланган кремний сирти ва ҳажмидаги квант ўлчамли эффектлар ҳамда уларнинг $p-n$ структуралардаги заряд ташувчилар фотогенерацияси ва рекомбинацияси жараёнларига таъсири» (2012 – 2016 йй.) мавзуларидаги илмий тадқиқот лойиҳалари доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг спектрал характеристикаларининг шаклланиш хусусиятларини аниқлашдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

фундаментал ютилиш соҳасида электронларни тўғри ва нотўғри оптик ўтишлари учун ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги билан рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлиги функциялари орасидаги боғланишларни тадқиқ қилиш;

аморф яримўтказгичларда оптик ютилиш коэффицентининг спектрал характеристикасидан Урбах қоидаси бажариладиган соҳани аниқлаш;

Урбах энергиясининг рухсат этилган зоналарни экспоненциал думларини эгрилигини аниқловчи параметрга боғлиқлигини ўрнатиш;

нуқсонлардаги ютилиш коэффиценти спектрларидан фойдаланиб нуқсонларнинг энергетик ўрнини аниқлаш;

нуқсонларда ютилиш соҳасини аниқловчи формулалар ёрдамида инфрақизил ютилиш соҳасини тадқиқ қилиш ва кучли ютилиш соҳаларининг шаклланиш шартларини аниқлаш.

Тадқиқот объекти сифатида гидрогенизацияланган аморф кремний олинган.

Тадқиқотнинг предмети бўлиб гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг оптик ютилиш коэффиценти спектрал характеристикалари шаклланиш механизмларини тадқиқ этиш ҳисобланади.

Тадқиқотнинг усуллари. Диссертацияда тадқиқ этилган масалаларни ечишда Тауц қоидаси усули, Дэвис-Мотт яқинлашиш усулида Кубо-Гринвуд формуласи, тақрибий ҳисоблаш усули ва компьютер графикаси усулларидан (Maple7) фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

электронларнинг рухсат этилмаган тўғри ўтишлари учун ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги зоналари чегарасидаги локаллашмаган электрон ҳолатлар зичлиги функцияларининг кўринишига боғлиқ бўлиши аниқланган;

электронларнинг рухсат этилган ва рухсат этилмаган нотўғри оптик ўтишлари учун ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги зоналари чегарасидаги локаллашмаган электрон ҳолатлар зичлиги функцияларининг кўринишига боғлиқ бўлмаслиги белгиланган;

Урбах энергиясининг рухсат этилган зоналари экспоненциал думларидан биридаги локаллашган электрон ҳолатлари зичлигини аниқловчи параметрга ўзаро боғлиқлиги исботланган;

аморф яримўтказгич намуналарнинг структура тўридаги узилган

боғланишлар электрон ҳолатлари иштирок этувчи электрон ўтишлар учун аниқланган спектрлардан нуқсонларнинг энергетик ўрнини аниқлаш мумкин эканлиги кўрсатилган;

инфрақизил ютилиш спектрларида кучли ютилиш соҳаларининг шаклланиш шартлари аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижалари гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг ютилиш коэффициенти спектрал характеристикаларидан ютилиш коэффициентининг қийматини аниқлаш куёш элементларида ёруғликни ютувчи қатламининг мақбул қалинлигини танлаш имкониятини беришидир.

Тадқиқот натижаларнинг ишончлилиги ишда қўлланилган ёндашув ва усуллар, назарий маълумотларнинг олинган натижалар билан мос келиши, олиб борилган текширувларнинг услубий жиҳатдан тўғрилиги, математик статистика усулларида фойдаланилгани ва ютилиш спектрларини ҳисоблаш натижаларини тажриба натижаларига мос тушиши билан асосланади.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти. Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти аморф кремнийга хос бўлган электронларни тўғри ва нотўғри оптик ўтишлари, Урбах энергияси ва нуқсонларда ютилиш спектрлари ҳақидаги физик тасавурларни кенгайтириш имконини беришдан иборат.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти аморф кремнийга хос бўлган электронларнинг тўғри ва нотўғри оптик ўтишларида ҳаракатчанлик тирқишининг энергетик кенглигини аниқлаш учун таклиф қилинган усулда оптик хоссалари яхшиланган оптоэлектроника асбобларини яратишда фойдаланиш мумкин.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг спектрал характеристикаларининг шаклланиш хусусиятларини аниқлаш асосида:

Урбах энергияси қийматини рухсат этилган зоналарнинг думларидан биридаги локаллашган электрон ҳолатлари зичлигини аниқловчи параметрга боғлиқлигининг ўрганилганидан, аморф яримўтказгич намуналарининг структура тўридаги узилган боғланишлардаги электрон ҳолатлари иштирок этувчи электрон ўтишлари учун аниқланган спектрлардан нуқсонларнинг энергетик ўрнини аниқлаш мумкинлигидан ва инфрақизил ютилиш спектрларида кучли ютилиш соҳаларининг ҳосил бўлиш шартларини келтириб чиқарилганидан «Фотон» акциядорлик жамиятида яримўтказгичли электрон қурилмалар ишлаб чиқаришда фойдаланилган («Ўзэлтехсаноат» акциядорлик компаниясининг 2019 йил 4 июлдаги 04-4/857-сон маълумотномаси). Тадқиқот натижалардан фойдаланиш тажрибавий намуналарда электрон техник асбобларнинг электрофизик параметрларини яхшилаш имконини берган.

Электронларни рухсат этилмаган тўғри ўтишлари учун ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенлиги зоналари чегарасидаги локаллашмаган электрон ҳолатлари зичлиги функциясига боғлиқлигидан ҳисобланган усул Ф2-ОТ-О-15494 “Квант нуқтали гетеро ва нанотузилмалардаги экситонлар,

поляронлар, биполяронлар ва кўчиш ҳодисаларини тадқиқ этиш асосида нурлагичлар, фотоэлементлар ва бошқа турдаги оптоэлектрон асбобларнинг самарадорлигини яхшилаш” мавзусидаги фундаментал лойиҳани амалга оширишда фойдаланилган. (Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 16.07.2019 йилдаги 89-03-2787-сон маълумотномаси).

Тадқиқот натижалардан фойдаланиш кучли легирланган яримўтказгичларнинг тақиқланган зонаси кенглигини аниқлаш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Мазкур тадқиқот натижалари, жумладан, 5 та халқаро ва 5 та республика илмий-амалий анжуманларида муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши. Диссертация мавзуси бўйича жами 16 та илмий иш, шулардан Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг докторлик диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 5 та мақола, жумладан, 3 таси республика ва 2 таси хорижий журналларда нашр этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг ҳажми 110 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

Кириш қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати асосланган, тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги кўрсатилган, мавзу бўйича хорижий илмий-тадқиқотлар шарҳи, муаммонинг ўрганилганлик даражаси келтирилган, тадқиқот мақсади, вазифалари, объекти ва предмети тавсифланган, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, олинган натижаларнинг назарий ва амалий аҳамияти очиқ берилган, тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши, нашр этилган ишлар ва диссертация тузилиши бўйича маълумотлар берилган.

Диссертациянинг «**Электронларнинг оптик ўтишлари**» деб номланган биринчи бобида мавзу бўйича адабиётларда келтирилган натижалар таҳлил қилинган. Аморф яримўтказгичлар оптик ютилиш коэффициенти спектрал характеристикасини тадқиқ қилишдан келиб чиқадиган натижа ўрганилган.

Фотонларнинг фундаментал ютилиш соҳаси спектрларидан фойдаланиб электронларни тўғри рухсат этилган ва рухсат этилмаган оптик ўтишлари, ҳамда рухсат этилган ва рухсат этилмаган нотўғри оптик ўтишларнинг шартлари аналитик кўринишларида келтирилган. Фундаментал ютилиш соҳаси спектрлари учун бу шартларни текшириш тажрибалардан олинган натижалари асосида тадқиқ этилган.

Ютилиш коэффициентининг экспоненциал ютилиш соҳасида бажариладиган Урбах қонуниси учун тажрибалардан олинган натижалар келтирилган.

Аморф яримўтказгичлар оптик ютилиш коэффициенти спектрал характеристикаларидан фойдаланиб, Урбах энергияси учун тажрибалардан олинган натижалар ўрганилган.

Гидрогенизацияланган аморф яримўтказгичларга хос бўлган нуқсонлар, уларнинг энергетик ўрни ва ютилиш коэффициенти спектрал характеристикасининг нуқсонларда ютилиш соҳаси учун олинган тажриба натижалари таҳлил қилинган. Булардан келиб чиққан ҳолда диссертация ишининг мақсад ва вазифалари белгиланган.

Диссертациянинг **“Зоналараро оптик ўтишлар. Тўғри ва нотўғри оптик ўтишларнинг шартлари бажарилиши”** деб номланган иккинчи бобида аморф яримўтказгичларда рухсат этилган зоналарда бўлган электрон ҳолатлар зичлиги тақсимоти даражали боғланишга эга бўлгандаги фундаментал ютилиш соҳаси спектрлари ўрганилган. Бу соҳа учун электронларнинг тўғри ва нотўғри ўтиш шартларининг бажарилиши тадқиқ қилинган. Рухсат этилган зоналар чегараларидаги электрон ҳолатлар тақсимоти даражали бўлганда электронларнинг рухсат этилган ва рухсат этилмаган нотўғри ҳамда рухсат этилмаган тўғри ўтиш шартлари бажарилиши кўрсатилган. Электронларнинг рухсат этилган тўғри ўтиш шarti, фақат рухсат этилган зоналарнинг чегараларида максимумлар бўлгандагина бажарилиши аниқланган.

Аморф яримўтказгичларда ютилган фотонларнинг энергияси ҳаракатчанлик тирқиши энергетик кенглигидан катта бўлганда, электронларнинг оптик ўтишлари уч турга бўлиниши, шунинг учун ютилиш коэффициенти спектрларини ҳисоблашда Дэвис-Мотт яқинлашуви учун Кубо-Гринвуд формуласини уч қисмга ажратиб олиш кераклиги кўрсатилган:

$$\alpha = A \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon)g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = A \int_{\varepsilon_C - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon)g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C - \hbar\omega} g(\varepsilon)g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_V} g(\varepsilon)g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3, \quad (1)$$

бу ерда $g(\varepsilon)$ ва $g(\varepsilon + \hbar\omega)$ – мос равишда валент ва ўтказувчанлик зонасидаги электрон ҳолатлари зичлиги, ε_0 - эса валент зона ва ўтказувчанлик зоналари думларининг кесишиш нуқтасининг энергетик вазияти. (1) формуладаги биринчи ҳад, электронни валент зона думидан ўтказувчанлик зонасига ўтишни, иккинчи ҳад зоналараро ўтишни ва учинчи ҳад валент зонадан ўтказувчанлик зонаси думига оптик ўтишларни ифодалайди.

Юқорида таъкидланганидек, электрон ҳолатлар зичлиги тақсимоти рухсат этилган зоналарда даражали боғланишга, бу зоналарнинг думларида эса экспоненциал боғланишга эга бўлади. Шунинг учун уларни мос равишда қуйидаги кўринишларда ёзиш мумкин: валент зона учун

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_V) \left(\frac{\varepsilon_C - \varepsilon}{E_g} \right)^s, \quad \varepsilon < \varepsilon_V, \quad \text{бўлганда} \quad (2)$$

ўтказувчанлик зонаси учун

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_C) \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_V}{E_g} \right)^p, \quad \varepsilon_C < \varepsilon, \quad \text{бўлганда} \quad (3)$$

валент зона думи учун

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_V) \exp(-\beta_1(\varepsilon - \varepsilon_V)), \quad \varepsilon_V < \varepsilon < \varepsilon_0, \quad \text{бўлганда} \quad (4)$$

ўтказувчанлик зонаси думи учун

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_C) \exp(\beta_2(\varepsilon - \varepsilon_C)), \quad \varepsilon_0 < \varepsilon < \varepsilon_C \quad \text{бўлганда} \quad (5)$$

бу ерда $N(\varepsilon_V)$ - ва $N(\varepsilon_C)$ - мос равишда валент зона ва ўтказувчанлик зоналари чегараларидаги электрон ҳолатлар зичлигининг эффектив қиймати.

Аморф яримўтказгичларда рухсат этилган зоналар ва нуқсонлардаги электрон ҳолатлари тақсимоти максимумларга эга бўлган ҳол учун, улар Гаусс тақсимотига бўйсинганда:

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_D) \exp(-a(\varepsilon - \varepsilon_D)^2), \quad (6)$$

гиперболиксеканс тақсимотига бўйсинганда:

$$g(\varepsilon) = \frac{2N(\varepsilon_D)}{\exp(b(\varepsilon - \varepsilon_B)) + \exp(-b(\varepsilon - \varepsilon_D))}, \quad (7)$$

кўринишларда ёзилган. Кўриниб турибдики, бу тақсимотларни (1) ифодага қўйиб оптик ютилиш спектрларини аниқлайдиган ифодаларни олиш мумкин.

Аморф яримўтказгичларда зоналараро электронларни оптик ўтишлари учун, рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлигини энергияга боғланиши параболик кўринишга эга бўлганда, оптик ютилиш коэффициентлари учун қуйидаги ифодалар олинган. Электронларни тўғри ўтишлари учун:

$$\alpha \cdot \hbar\omega \sim (\hbar\omega - E_{g_0})^{n_1}, \quad (8)$$

бу ерда даражани қийматлари, оптик ўтишлар рухсат этилган бўлганда $n_1=1/2$ ва рухсат этилмаган ўтишлар учун $n_1=3/2$ га тенг бўлади, E_{g_0} – электронларни тўғри ўтишлари учун ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги.

Бу боғланишни нотўғри оптик ўтишлар учун, тажриба натижаларига асосланиб электронларни оптик ўтишларида иштирок этадиган фононларнинг частотаси ютилган фотонларни частотасидан жуда кичик ($\omega_{\text{фон}} \ll \omega$) ва ($kT \ll \hbar\omega$) бўлаганда қуйидагича ёзилган:

$$\alpha \hbar\omega \sim (\hbar\omega - E_g)^{n_2}. \quad (9)$$

E_g - электронларни нотўғри оптик ўтишлари учун ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги. Бу ифодадаги даражанинг қиймати оптик ўтишлар рухсат этилган бўлганда $n_2=2$, рухсат этилмаган оптик ўтишлар учун эса $n_2=3$ га тенг бўлади. (8) ва (9) формулалардан кўринадиги электронларни тўғри ва

нотўғри оптик ўтишлари спектрларидан тақиқ зонанинг оптик кенгликларини аниқлаш мумкин экан:

$$\sqrt[n_1]{\alpha \cdot \hbar\omega} \sim \hbar\omega - E_{g_0} \quad (10)$$

$$\sqrt[n_2]{\alpha \cdot \hbar\omega} \sim \hbar\omega - E_g \quad (11)$$

Электронлари зоналараро оптик ўтишлари учун валент ва ўтказувчанлик зоналардаги электрон ҳолатлари зичлигини энергияга боғланишлари ўзгармас, параболик ва чизиқли бўлган ҳоллар учун, зоналараро ютилиш коэффициентини спектрларини аналитик ечимларини қуйидаги: рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлигининг тақсимоти ўзгармас

$$\alpha\hbar\omega = A(\hbar\omega - E_g), \quad (12)$$

параболик

$$\alpha\hbar\omega = \frac{A}{4E_g} \left(2(\hbar\omega - E_g) \sqrt{E_g \hbar\omega} - (E_g + \hbar\omega)^2 \arctg \left(\frac{E_g - \hbar\omega}{\sqrt{4E_g \hbar\omega}} \right) \right) \quad (13)$$

ва чизиқли бўлганда

$$\alpha\hbar\omega = \frac{A}{E_g^2} \frac{\hbar\omega - E_g}{6} (E_g^2 + 4\hbar\omega E_g + \hbar^2 \omega^2), \quad (14)$$

кўринишда бўлиши кўрсатилган. Рухсат этилган зоналардаги локаллашмаган ҳолатлар зичликларини энергияга боғланиши бир-биридан фарқ қиладиган ҳолларнинг турли комбинациялари учун зоналараро ютилиш спектрлари:

1. Битта рухсат этилган зонадаги электрон ҳолатлари зичлиги ўзгармас, иккинчиси эса параболик бўлганда

$$\alpha\hbar\omega = \frac{2A}{3} \frac{(\sqrt{\hbar\omega^3} - \sqrt{E_g^3})}{\sqrt{E_g}}. \quad (15)$$

2. Агар битта зонадаги электрон ҳолатлари ўзгармас иккинчисидagi эса чизиқли бўлганда

$$\alpha\hbar\omega = \frac{A}{2} \frac{\hbar\omega^2 - E_g^2}{E_g}. \quad (16)$$

3. Бир зонадаги ҳолатлар параболик иккинчиси чизиқли бўлган ҳолда эса

$$\alpha\hbar\omega = \frac{2A}{15\sqrt{E_g^3}} \left(5(E_g + \hbar\omega) (\sqrt{\hbar\omega^3} - \sqrt{E_g^3}) - 3(\sqrt{\hbar\omega^5} - \sqrt{E_g^5}) \right). \quad (17)$$

кўринишдаги ифодалар олинган.

Маълумки, электронларни тўғри ва нотўғри ўтиш шартлари зоналараро ўтишлар учун ёзилади. Шунинг учун бу шартларни зоналараро ютилиш коэффициенти спектрал характеристикалари учун текширилган.

(12)-(17) спектрларни (10) ва (11) ифодалардан температура ўзгармас бўлганда электронларни нотўғри рухсат этилган ва рухсат этилмаган оптик ўтиш шартларини мос равишда қуйидаги кўринишларда ёзилган:

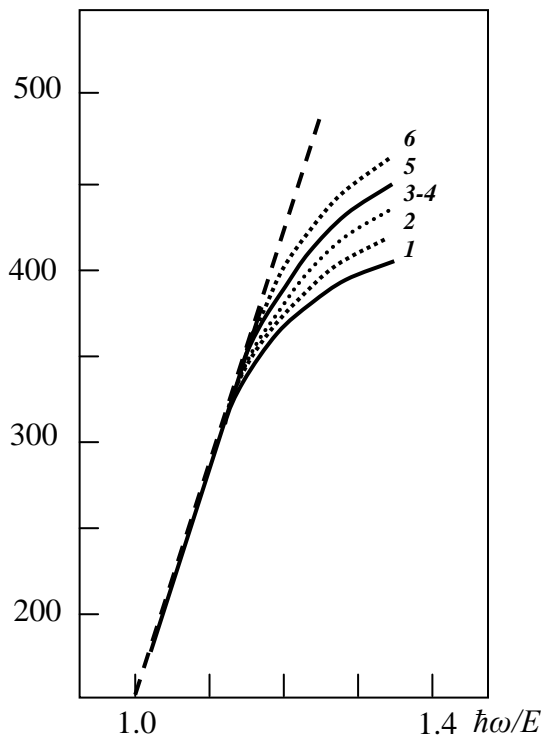
$$(\alpha\hbar\omega)^{1/2} \sim \sqrt{f(\hbar\omega)}, \quad (18)$$

$$(\alpha\hbar\omega)^{1/3} \sim \sqrt[3]{f(\hbar\omega)}. \quad (19)$$

Бу ерда $f(\hbar\omega)$ – (12) -(17) формулаларни ўнг томонидаги ифодалар. Бу шартларни текшириш натижалари 1-а ва б - расмларда келтирилган. Улардан

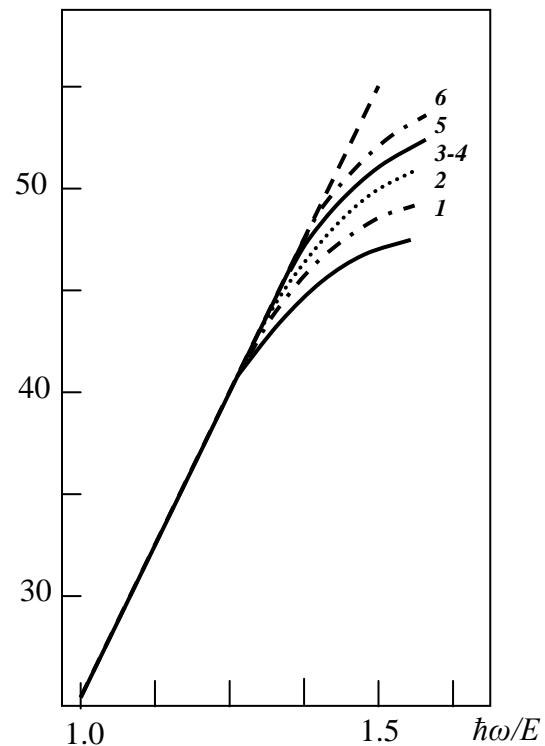
$$(\alpha\hbar\omega)^{1/2}, (\text{см}^{-1}\text{эВ})^{1/2}$$

$$(\alpha\hbar\omega)^{1/3}, (\text{см}^{-1}\text{эВ})^{1/3}$$



(18) формулага 1- (12), 2-(13), 3- (14), 4- (15), 5- (16), 6- (17) формулаларни қўйиб ҳисоблашлардан олинган натижалар.

1-а расм. Электронларни рухсат этилган нотўғри оптик ўтиш шартларини бажарилиши.



(19) формулага 1- (12), 2-(13), 3- (14), 4- (15), 5- (16), 6- (17) формулаларни қўйиб ҳисоблашлардан олинган натижалар.

1- б расм. Электронларни рухсат этилмаган нотўғри оптик ўтиш шартларини бажарилиши.

электронларни зоналараро оптик ўтишлари учун ушбу ишда келтириб чиқарилган формулаларни ҳаммаси рухсат этилган ва рухсат этилмаган нотўғри ўтиш шартларини қаноатлантиришини кўриш мумкин.

(12)-(17) формулаларни (10) ва (11) лардан фойдаланиб мос равишда:

$$(\alpha\hbar\omega)^2 \sim f(\hbar\omega)^2 \quad (20)$$

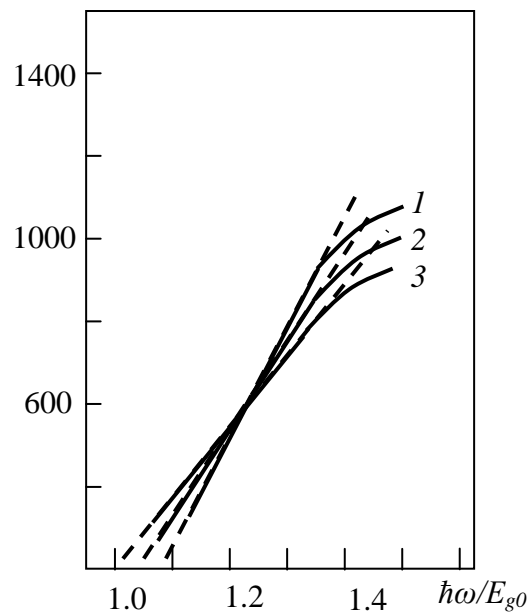
$$(\alpha\hbar\omega)^{3/2} \sim f(\hbar\omega)^{3/2} \quad (21)$$

кўринишларда ёзиб, юқоридаги формулалар учун электронларни рухсат этилмаган ва рухсат этилган тўғри ўтиш шартларини бажарилишини текшириб чиқилган.

Электронларни рухсат этилмаган тўғри ўтиш шартини текшириш натижалари 2-расмда келтирилган. Бу расмда графиклар алоҳида кўриниши учун фақат рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлигининг тақсимотлари ўзгармас, параболик ва чизиқли бўлган ҳолларгина келтирилган. Бу натижалардан электронларни зоналараро оптик ўтишлари учун ушбу ишда келтириб чиқарилган формулалар рухсат этилмаган тўғри ўтиш шартларини қаноатлантирар экан деб ҳисоблаш мумкин. Аммо электронларни бу ўтишларидан аниқланадиган ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлигини тақсимоти функциясини кўринишига боғлиқ бўлар экан ва уларни йиғиндисининг қиймати катталашиб борган сари ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги ҳам ортиб борар экан.

Худди шу усулда рухсат этилган тўғри ўтиш шартлари текширилди. Бу ифодалардан олинган ҳисоблаш натижалари рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлигини тақсимоти даражали бўлса, зоналардаги ютилиш коэффиценти спектрал характеристикалари учун рухсат этилган тўғри ўтишларни шарти бажарилмаслигини кўрсатди. Буларни ҳисобга олиб ўрганиладиган аморф яримўтказгичларнинг рухсат этилган зоналарни чегараларида максимумлар бор деб фараз қилиб ва зоналараро электрон ўтишлари учун ютилиш коэффиценти спектрал характеристикасини ҳисобланганда

$(\alpha\hbar\omega)^{2/3}, (\text{см}^{-1}\text{эВ})^{2/3}$



1- чизиқли, 2- параболик ва 3- ўзгармас бўлган ҳоллар учун (21) формулада олинган ҳисоблаш натижалари.

2-расм. Рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлигининг тақсимотлари

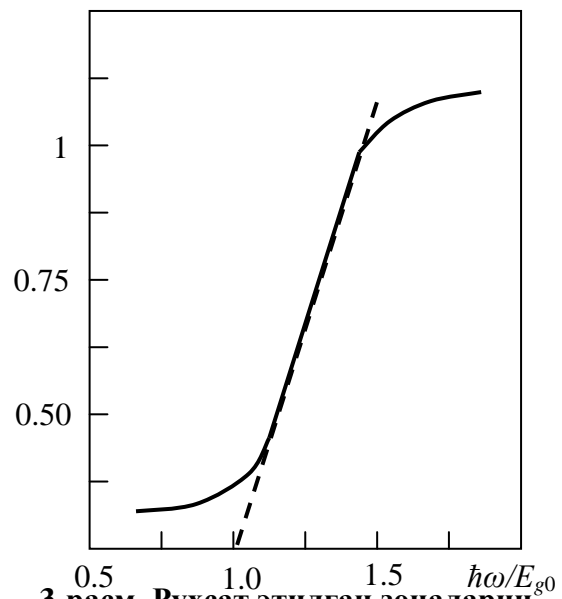
$$\alpha = A \frac{\ln \left[\frac{1 + ch(bE_g)}{1 + ch(b(2\hbar\omega - E_g))} \right]}{b\hbar\omega sh(b(E_g - \hbar\omega))} \quad (22)$$

ифода олинган. Ҳисоблашлар (22) спектрнинг максимумини энергетик ўрни $\hbar\omega = \varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g$ га тўғри келишини кўрсатди. Бу формула учун рухсат этилган тўғри ўтиш шартини

$$(\alpha\hbar\omega)^2 \sim \left[\frac{1}{b\hbar\omega sh(b(E_g - \hbar\omega))} \ln \left(\frac{1 + ch(bE_g)}{1 + ch(b(2\hbar\omega - E_g))} \right) \right]^2 \quad (23)$$

кўринишда ёзилганда, олинган ҳисоблаш натижалари 3-расмдагидек бўлди. Кўришиб турибдики рухсат этилган тўғри ўтиш шарт тўла бажарилар экан. Рухсат этилган зоналардан биридаги электрон ҳолатлари зичлиги тақсимоти даражали иккинчиси эса максимумга эга бўлган ҳоллар учун ҳам Кубо-Гринвуд формуласини тақрибий ҳисоблашларни бажарилган. Олинган натижалардан бу ҳолларда ҳам рухсат этилган тўғри ўтиш шартлари бажарилмаслиги аниқланган. Булардан қуйидаги хулосани чиқариш мумкин. Рухсат этилган тўғри ўтиш шартлари фақат спектрларда аниқ максимум бўлгандагина бажарилади.

$(\alpha\hbar\omega)^2$, нис. бир.



3-расм. Рухсат этилган зоналарни чегараларида максимумлар бўлган ҳол учун электронларни рухсат этилган тўғри оптик ўтиш шартларини бажарилиши.

Диссертациянинг “Энергияси ҳаракатчанлик тирқиши кенглигидан кичик энергияли фотонларни ютилиши спектрлари учун Урбах қоида-си” деб номланган учинчи бобда аморф гидрогенизациялаган кремний мисолида аморф яримўтказгичларнинг спектрал характеристикасининг экспоненциал ютилиш соҳасидан фойдаланиб Урбах энергиясини тадқиқ қилинган ва Урбах энергияси учун янги формула келтириб чиқарилган.

Маълумки, Урбах қоидасини умумий ҳолда қуйидаги кўринишда ёзиш мумкин

$$\alpha(\hbar\omega) = const \cdot \exp \left(\frac{\hbar\omega}{E_U} \right). \quad (24)$$

Бу ерда E_U -Урбах энергияси бўлиб, аморф яримўтказгичлар учун у 30-100 мэВ қийматларга тенг бўлиши мумкин. Маълумки, тажрибалардан фойдаланиб Урбах энергиясини ютилган фотонларни энергияси учун $\varepsilon_F - \varepsilon_V < \hbar\omega < \varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g$, шарт бажариладиган соҳадан аниқланади. Бу соҳада электронлари оптик ўтиш турлари уч хил бўлади. Шунинг учун ютилиш коэффициенти учта парциал ютилиш коэффициентларининг йиғиндиси билан аниқланади:

$$\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3.$$

Бу ерда α_1 - электронли фотоўтказувчанлик ҳосил қилувчи, яъни валент зона думидан ўтказувчанлик зонасига электронларни оптик ўтишларини, α_2 - электронли фотоўтказувчанлик ҳосил қилмайдиган, яъни валент зона думидан ўтказувчанлик зонаси думига электронларни оптик ўтишларини, α_3 - эса ковакли фотоўтказувчанлик ҳосил қилувчи, яъни валент зонадан ўтказувчанлик зонаси думига электронларнинг оптик ўтишлари спектрлари.

Шунинг учун рухсат этилган зоналарни экспоненциал думларидаги локаллашган электрон ҳолатлари иштирок этувчи оптик ўтишлар спектрининг барча соҳаларида Урбах энергиясини ҳисоблашни қараб чиқилган. (24) формуладан E_U ни аниқлаймиз. Ундан фотонларни энергияси $\hbar\omega$ бўйича ҳосила олсак

$$\frac{d(\alpha(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} = \frac{1}{E_U} \text{const} \cdot \exp\left(\frac{\hbar\omega}{E_U}\right), \quad (25)$$

ёки

$$\frac{d(\alpha(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} = \frac{\alpha(\hbar\omega)}{E_U}, \quad (26)$$

кўринишдаги ифодани оламиз. Бундан Урбах энергияси учун

$$E_U = \alpha(\hbar\omega) / \frac{d(\alpha(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} \quad (27)$$

тенгликни ёзиш мумкин. $\varepsilon_F - \varepsilon_V < \hbar\omega < \varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g$ соҳа учун бу формулани

$$E_U = (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) \left(\frac{d\alpha_1}{d(\hbar\omega)} + \frac{d\alpha_2}{d(\hbar\omega)} + \frac{d\alpha_3}{d(\hbar\omega)} \right)^{-1} \quad (28)$$

кўринишда ёзамиз.

Урбах энергиясини ҳисоблаш усули қараб чиқилиб Кубо-Гринвуд формуласидан Девис-Мотт яқинлашиш усулига кўра юқорида келтирилган, электронларни оптик ўтиш турларини барчаси учун оптик ютилиш коэффициенти спектрал характеристикаларини ҳисобланган. Рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатларининг тақсимооти даражали бўлганда, бу ҳолатлари иштирок этувчи ўтишлар билан аниқланадиган ютилиш коэффициенти спектрларининг қийматлари бир-биридан деярли фарқ қилмаслигини кўрсатилган. Шунинг учун битта ҳолати локаллашган иккинчи ҳолати эса локаллашмаган электрон ҳолатлари иштирок этувчи спектрларни кўринишини соддалаштириш учун локаллашмаган электрон ҳолатлари ўзгармас бўладиган ҳолни қараб чиқамиз. Бу спектрлар учун қуйидаги натижалар олинган:

$$\alpha_1 = \frac{A}{\beta_1 \hbar\omega} \exp(-\beta_1(E_g - \hbar\omega)) [1 - \exp(\beta_1(\varepsilon_C - \varepsilon_0 - \hbar\omega))], \quad (29)$$

$$\alpha_2 = \frac{A}{(\beta_2 - \beta_1)\hbar\omega} \exp(\beta_1(\hbar\omega - E_g)) [1 - \exp((\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega - E_g))], \quad (30)$$

$$\alpha_3 = \frac{A}{\beta_2\hbar\omega} \exp(\beta_2(\hbar\omega - E_g)) [1 - \exp(\beta_2(\varepsilon_0 - \varepsilon_V - \hbar\omega))]. \quad (31)$$

Бу ерда β_1 - ва β_2 - лар мос равишда валент ва ўтказувчанлик зоналари думларини эгрилигини аниқловчи параметрлар.

Бу формулалардан фотонларни энергияси бўйича ҳосилаларни олсак

$$\frac{d\alpha_1}{d(\hbar\omega)} = \frac{A}{\beta_1(\hbar\omega)^2} \exp(\beta_1(\hbar\omega - E_g)) [\beta_1\hbar\omega - 1 + \exp(\beta_1((\varepsilon_C - \varepsilon_0) - \hbar\omega))], \quad (32)$$

$$\frac{d\alpha_2}{d(\hbar\omega)} = \frac{A}{(\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega)^2} ((\beta_1\hbar\omega - 1)\exp(\beta_1(\hbar\omega - E_g)) - (\beta_2\hbar\omega - 1)\exp(\beta_2(\hbar\omega - E_g))) \quad (33)$$

$$\frac{d\alpha_3}{d(\hbar\omega)} = \frac{A}{\beta_2(\hbar\omega)^2} \exp(\beta_2(\hbar\omega - E_g)) [\beta_2\hbar\omega - 1 + \exp(\beta_2((\varepsilon_0 - \varepsilon_V) - \hbar\omega))] \quad (34)$$

ифодаларни оламиз. Бу ифодаларга рухсат этилган зоналарнинг экспоненциал думларининг кесишиш нуқтаси учун олинган

$$\varepsilon_C - \varepsilon_0 = \beta_1 E_g / (\beta_1 + \beta_2), \quad (35)$$

$$\varepsilon_0 - \varepsilon_V = \beta_2 E_g / (\beta_1 + \beta_2). \quad (36)$$

боғланишларни қўйиб Урбах энергиясини аниқловчи формулаларни ҳосил қиламиз. Кўриниб турибдики, бу формулалар ёрдамида Урбах энергиясини β_1, β_2 ва E_g параметрларни қийматларига боғланишларини аниқлаш мумкин.

Ҳисоблашларнинг кўрсатишича бу спектрлардан экспоненциал ютилиш соҳасида локаллашган ҳолатлараро ютилиш коэффициентининг қийматларини аниқлашда асосий ролни фотоўтказувчанлик ҳосил қилмайдиган оптик ўтишларни спектрлари ўйнайди. Шунинг учун Урбах энергиясини қуйидаги кўринишда ёзамиз:

$$E_U = \alpha_2(\hbar\omega) \left(\frac{d(\alpha_2(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} \right)^{-1} \quad (37)$$

(30) ва (33) формулалардан фойдаланиб Урбах энергиясини аниқлайдиган ифодани келтириб чиқариш мумкин. Бу ифодани соддалаштириш мақсадида $\hbar\omega < E_g$ ва $\exp((\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega - E_g)) \ll 1$ эканлигини ҳисобга олиб, Урбах энергияси учун қуйидаги ифодаларни оламиз: валент зонанинг думини эгрилигини аниқлайдиган параметрнинг қиймати катта бўлганда

$$E_U \approx \frac{1}{\beta_1 - \beta_2 \exp((\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega - E_g)) - 1/\hbar\omega} > \frac{1}{\beta_1}, \quad (38)$$

ўтказувчанлик зонасининг думини эгрилигини аниқлайдиган параметрнинг қиймати катта бўлганда, эса

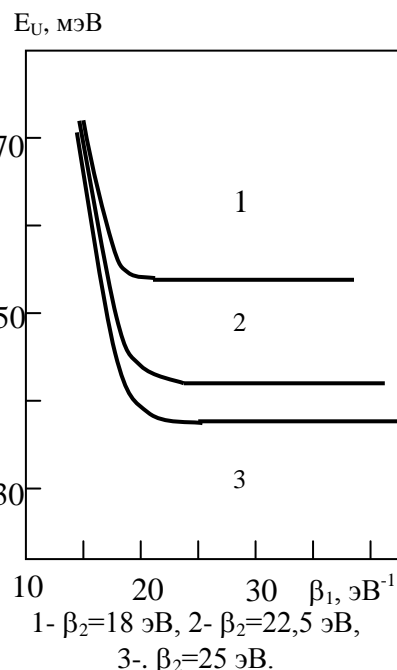
$$E_U \approx \frac{1}{\beta_2 - \beta_1 \exp((\beta_1 - \beta_2)(\hbar\omega - E_g)) - 1/\hbar\omega} > \frac{1}{\beta_2}. \quad (39)$$

кўринишда бўлади.

У ҳолда Урбах энергияси аморф яримўтказгич намунасининг ҳаракатчанлик тирқишининг энергетик кенглиги ва рухсат этилган зоналарнинг экспоненциал думларини эгрилигини аниқловчи параметрларгагина боғлиқ бўлиб қолади. Агар аморф яримўтказгич намунаси ва уни тайёрлаш технологияси бир хил бўлса, ҳаракатчанлик тирқиши ўзгармас бўлади деб ҳисоблаш мумкин. Бундай намуналар учун (38) ва (39) формулалардан фақат рухсат этилган зоналарнинг думларини эгрилигини аниқловчи параметрга боғлиқ бўлади. Шунинг учун бу формуладан Урбах энергияси ва рухсат этилган зоналарни эгрилигини аниқловчи параметр орасидаги боғланишни ўрганиш мумкин бўлади. 4-расмда Урбах энергиясини валент зона думини (β_1) ва ўтказувчанлик зонаси думини эгриликларига (β_2) боғланишлари келтирилган. Расмдан кўринадики $\beta=1/E_U$ ни қиймати доимо β_1 ва β_2 ларни қийматларидан кичик бўлар экан.

Бу натижалардан қуйидаги хулосаларни чиқариш мумкин. β_1 ва β_2 параметрлардан қайси бири кичик бўлса Урбах энергиясига тесқари бўлган β параметрнинг қиймати ундан катта бўлиши мумкин эмас, иккинчидан β_1 ёки β_2 лардан биттаси ўзгармас бўлганда, β нинг қиймати шу параметрни қийматидан доимо кичик бўлади, β_1 ва β_2 ларни қийматлари жуда катта интервалда ўзгарганда ҳам Урбах энергиясининг қийматлари ўзгармай қолиши мумкин. Бу натижалар Мотт томонидан ютилиш коэффиенти спектрал характеристикасида Урбах қоидаси бажариладиган соҳани ҳосил бўлиш сабабини зоналарнинг думларини энергияга боғланиши экспоненциал эканлиги билан тушунтирилишига қарши билдирилган мулоҳазасини тўғри эмаслигини кўрсатади.

Гидрогенизацияланган аморф яримўтказгич пардаларида Урбах энергиясини температурага боғланишини аниқловчи тажриба натижаларидан бу боғланишлар чизиқли эканлигини ва бу чизиқларни бурчак коэффиенти ҳаракатчанлик тирқишининг энергетик кенглигини температурага боғланишини бурчак коэффиентига яқин бўлиши кўрсатилган. Маълумки, гидрогенизацияланган аморф кремнийда Урбах энергияси валент зонанинг экспоненциал думи эгрилигини аниқловчи параметрнинг қиймати билан аниқланади. Рухсат этилган зоналарнинг думларидаги электрон ҳолатларининг зичлигини қиймати $T < 550$ К температураларда ўзгармас бўлади. Шунинг учун бу параграфда Урбах энергияси ва температура орасидаги боғланишни ўрганиш бўйича олиб борилган назарий ҳисоблашлардан олинган натижалар келтирилган.



4-расм. Урбах энергиясини рухсат этилган зоналарнинг экспоненциал думларининг эгрилигини аниқловчи параметрларга боғланиши.

Олдинги параграфда Урбах энергиясини аниқловчи муносабатлар келтирилган. (38) ва (39) ифодаларда фақат битта температурага боғлиқ бўлган параметр E_g қолади. Маълумки, бу катталикини температурага боғланиши

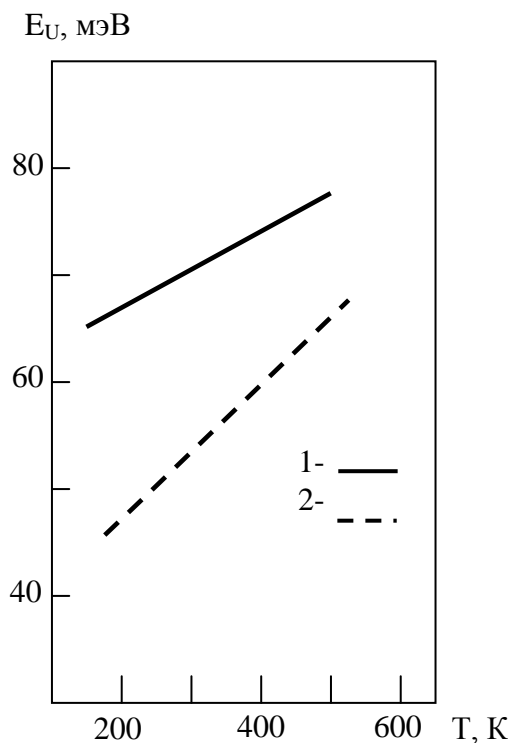
$$E_g(T) = E_g(0) - \gamma T \quad (40)$$

кўринишда ёзилади. Гидрогенизацияланган аморф яримўтказгичлар учун $\gamma \approx (4 \cdot 10^{-5} - 10^{-4} \text{ эВ К}^{-1})$ эканлигини ҳисобга олиб (40) ни (38) ифодаларга қўйиб бажарилган ҳисоблашдан олинган натижалар қуйидаги 5 - расмда келтирилган. Ҳисоблашларни гидрогенизацияланган аморф кремний ($E_g = 1,8 \text{ эВ}$) учун бажарилди. Бу материалда ўтказувчанлик зонаси думидан валент зонанинг думи каттароқ бўлади. Шунинг учун ҳисоблашларни бажаришда ўтказувчанлик ва валент зоналарнинг экспоненциал думларининг эгрилигини аниқловчи параметрлар учун $\beta_1 = 14 \text{ эВ}^{-1}$ ва $\beta_2 = 25 \text{ эВ}^{-1}$ 1-чизиқ, $\beta_1 = 19 \text{ эВ}^{-1}$ ва $\beta_2 = 25 \text{ эВ}^{-1}$ 2-чизиқ катталиклар танланди. Расмдан кўринадиги (38) формуладан ҳисобланган Урбах энергиясининг температурага боғланиши чизиқли бўлиб, тажриба натижаларини тушунтира олар экан.

Диссертациянинг “Нуксонларда ютилиш спектрлари” деб номланган тўртинчи бобида аморф гидрогенизацияланган кремний мисолида, аморф яримўтказгичларга хос бўлган нуксонларда ютилиш спектрларининг аналитик ечимлари, нуксонлар ва нуксонларда ютилиш спектрлари тадқиқ қилинган.

Гидрогенизацияланган аморф яримўтказгичлар қатламларидаги D^+ , D^0 ва D^- зарядли нуксонларни энергетик ўринлари учун адабиётларда келтирилган натижалар бир-биридан бир оз фарқ қилади. Ушбу ишда уларни қийматларини ўртачалаштириб $\varepsilon_C - \varepsilon_{D^0} \approx (0,9 - 1,0) \text{ эВ}$, $\varepsilon_C - \varepsilon_{D^-} \approx 0,6 \text{ эВ}$, $\varepsilon_C - \varepsilon_{D^+} \approx (0,25 - 0,2) \text{ эВ}$, $\varepsilon_{DB} - \varepsilon_V \approx (0,4 - 0,35) \text{ эВ}$ ва $\varepsilon_C - \varepsilon_{DA} \approx (0,35 - 0,3) \text{ эВ}$ ҳисоблашлар бажарилган.

Катта энергияли фотонлар ютилганда аморф яримўтказгичлардаги нуксонларда ютилиш коэффициенти спектрал характеристикаларини ҳисоблашни қараб чиқилган. Бу ҳолда электронлар бир вақтни ўзида рухсат этилган зоналар, уларни думларидаги электрон ҳолатлари ҳамда нуксонлар



Ҳисоблашларни 1- $\beta_1 = 14 \text{ эВ}^{-1}$ ва $\beta_2 = 25 \text{ эВ}^{-1}$, 2- $\beta_1 = 19 \text{ эВ}^{-1}$ $\beta_2 = 25 \text{ эВ}^{-1}$, $E_g = 1,8 \text{ эВ}$ қийматлар учун бажарилган.

5-расм. Гидрогенизацияланган аморф кремний пардаларида Урбах энергиясини температурага боғланиши.

орасидаги оптик ўтишларда иштирок этади. Рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари иштирокидаги оптик ўтишлар учун оптик ютилиш коэффициенти спектрал характеристикалари, бу зоналардаги ҳолатларни даражасига боғлиқ бўлмаслиги ва нуқсонларда ютилиш спектрларининг қийматларини асосан рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари тақсимоти аниқлаши кўрсатилган. Шунинг учун биз фақат валент (α_1) ва ўтказувчанлик (α_2) зоналари чегарасидаги электрон ҳолатлари тақсимоти ўзгармас бўлганда спектрларни аналитик ечимларини келтирамиз: улар мос равишда қуйидагича бўлиши аниқланган

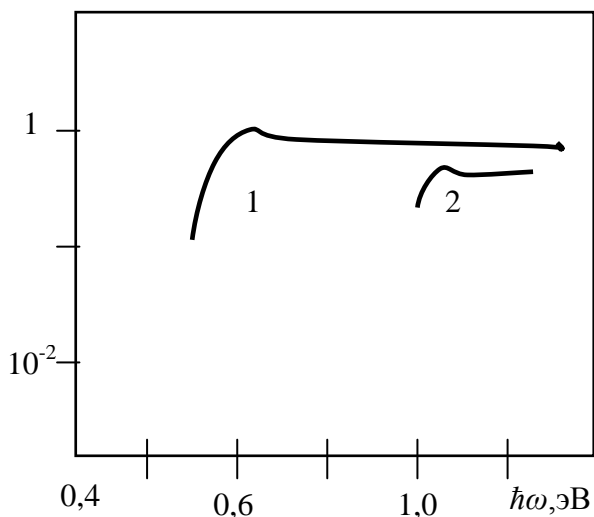
$$\alpha_1 = \frac{2 \cdot A \cdot \text{arctg} \left[\frac{\exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar\omega)) - \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D))}{1 + \exp(b(2(\varepsilon_V - \varepsilon_D) + \hbar\omega))} \right]}{b \cdot \hbar\omega}, \quad (41)$$

$$\alpha_2 = \frac{2 \cdot A \cdot \text{arctg} \left[\frac{\exp(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D)) - \exp(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D - \hbar\omega))}{1 + \exp(b(2(\varepsilon_C - \varepsilon_D) - \hbar\omega))} \right]}{b \cdot \hbar\omega}. \quad (42)$$

6 - расмда бу ютилиш коэффициенти спектрал характеристикалари келтирилган. Ҳисоблашлар нуқсонларни максимумининг энергетик ўрни (ε_D) қайси рухсат этилган зонага яқин жойлашган бўлса, шу зонадаги электрон ҳолатлари иштирок этувчи оптик ўтишлар билан аниқланадиган ютилиш коэффициенти кийматлари катта бўлишини ва рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлиги тақсимоти даражали бўлганда ютилган фотонларни энергиялари $\hbar\omega = \varepsilon_C - \varepsilon_D$ ва $\hbar\omega = \varepsilon_D - \varepsilon_V$ ларга тенг бўлганда нуқсонларда ютилиш спектрлари кучсиз максимумга эга бўлади.

Аммо тажрибалардан аниқланган спектрларни кўриниши турли намуналар учун (айниқса уларни ўстириш технологияси ўзгарганда) 6- расмдагидан анча фарқ қилишини кўрсатади. Мисол сифатида, 7-расмда Гидрогенизацияланган аморф яримўтказгичлар намуналари учун нуқсонларда ютилиш коэффициенти спектрал характеристикалари келтирилган. Бу намуналарнинг барчаси бир хил технологияда (силан газини милтиллама разрядда парчалашдан псевдолегирлаш усули билан) ўстирилганлиги учун уларни барчасидаги нуқсонларни аниқловчи параметрларни (концентрацияси, энергетик ўрни ва бошқалар) ўзгариши ютилиш коэффициенти қийматини ўзгартирса ҳам спектрал характеристикасини кўринишини ўзгартирмаслиги керак эди. Бунга жавобни рухсат этилган зоналардаги

α , нис.

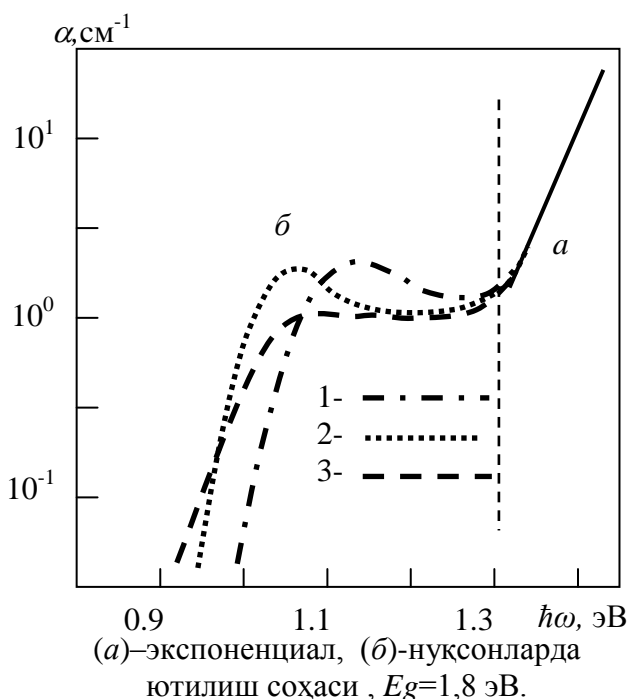


1- нуқсондан ўтказувчанлик зонасига, 2 – валент зонадан нуқсонга оптик ўтиш спектрлари $E_g = 1,8$ эВ, $\varepsilon_C - \varepsilon_D = 0,6$ эВ.

6. расм. Рухсат этилган зоналар ва нуқсонлардаги электрон ҳолатлари орасидаги оптик ўтишларнинг спектрлари

локаллашмаган электрон ҳолатлари зичликларининг тақсимооти билан тушунтириш мумкин экан. 7-расмдаги тажрибалардан аниқланган нуқсонларда ютилиш коэффициенти спектрал характеристикаларидан баъзилари, аниқ максимум ва минимумларга эгаллигини кўриш мумкин.

Буни ҳисобга олган ҳолда, рухсат этилган зоналарнинг чегараларидаги локаллашмаган электрон ҳолатлари Гаусс ёки гиперболиксеканс тақсимоотига бўйсинувчи ҳолатлар ҳосил қилади деб фараз қилиб электронларни нуқсонлардан ўтказувчанлик зонасига оптик ўтишлари ютилиш коэффициенти спектри учун ифодаларни олинди.



7-расм. Псевдодегирланган намуналар учун тажрибалардан аниқланган нуқсонларда ютилиш коэффициенти спектрал характеристикалари

$$\alpha = \frac{A}{b\hbar\omega} \frac{1}{\text{sh}(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D - \hbar\omega))} \ln \left[\frac{1 + \left(\frac{g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)}\right)^2 + 2\left(\frac{g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)}\right) \text{ch}(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D))}{1 + \left(\frac{g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)}\right)^2 + 2\left(\frac{g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)}\right) \text{ch}(b(2\hbar\omega - \varepsilon_C - \varepsilon_D))} \right], \quad (43)$$

валент зонадан нуқсонлардаги ҳолатларга оптик ўтишлар учун эса,

$$\alpha = \frac{A}{b\hbar\omega} \frac{1}{\text{sh}(b(\varepsilon_D - \varepsilon_V - \hbar\omega))} \ln \left[\frac{1 + \left(\frac{N(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)^2 + 2\left(\frac{N(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right) \text{ch}(b(\varepsilon_D - \varepsilon_V))}{1 + \left(\frac{N(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)^2 + 2\left(\frac{N(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right) \text{ch}(b(2\hbar\omega - \varepsilon_D - \varepsilon_V))} \right] \quad (44)$$

Бу спектрларни ҳисоблаш натижалари 8-расмда келтирилган (6-расм билан солиштириб кўриш мумкин). Расмдан кўринадики, ютилиш коэффициенти спектрал характеристикаси аниқ максимумга эга бўлар экан.

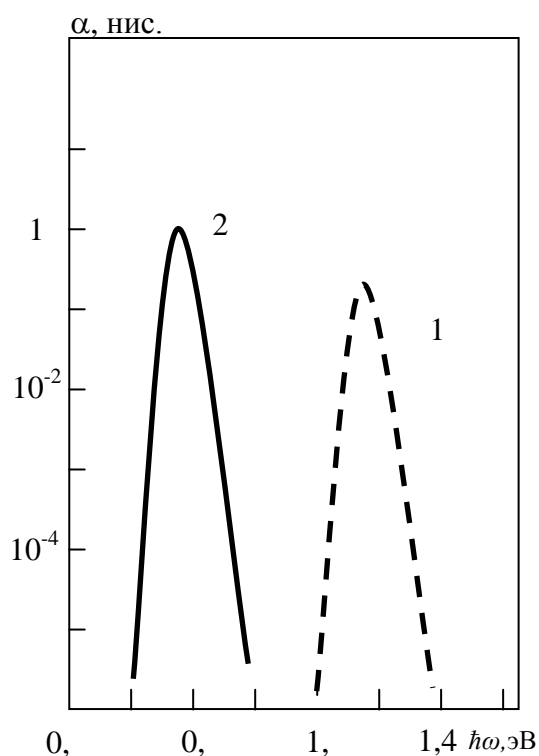
Нуқсонларда ютилиш спектрлари ва нуқсонларни энергетик ўрни тадқиқ қилишда, валент зона думидаги ҳамда нуқсонлардаги электрон ҳолатлари тақсимот функцияларини кўйиб α_1 учун

$$\alpha_1 = \frac{A}{b\hbar\omega} \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar\omega)) \left[2b(\varepsilon_{01} - \varepsilon_V) - \ln \left[\frac{1 + \exp(2b(\varepsilon_{01} - \varepsilon_D + \hbar\omega))}{1 + \exp(2b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar\omega))} \right] \right] \quad (45)$$

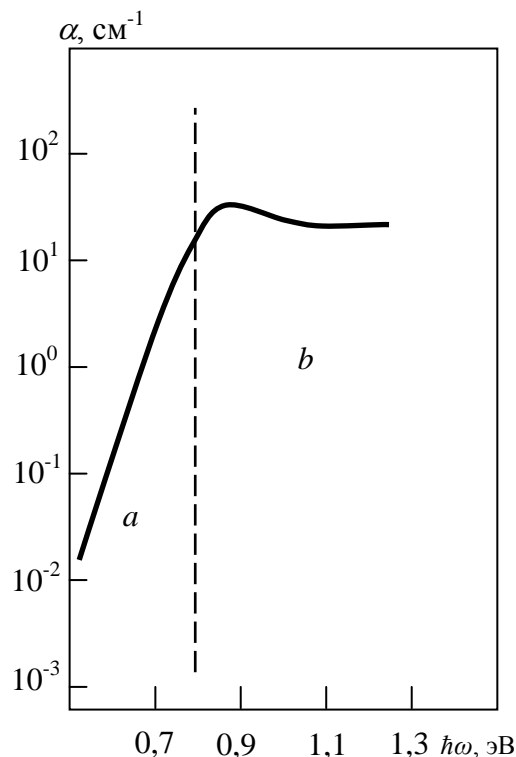
ифодани оламиз. Нуқсонлардан ўтказувчанлик зонаси думига электронларни оптик ўтишларининг спектрларини аниқлаймиз

$$\alpha_2 = \frac{A}{b\hbar\omega} \exp(b(\varepsilon_D - \varepsilon_C + \hbar\omega)) \left[2b(\varepsilon_C - \varepsilon_{02}) - \ln \left[\frac{1 + \exp(-2b(\varepsilon_C - \varepsilon_D - \hbar\omega))}{1 + \exp(-2b(\varepsilon_{02} - \varepsilon_D - \hbar\omega))} \right] \right] \quad (46)$$

9 - расмда юқоридаги (42) ва (46) формулалардан электронларни нуқсондан ўтказувчанлик зонасига ва шу зонанинг думига оптик ўтишлари билан аниқ-



8-расм. Гидрогенизацияланган аморф яримўтказгичларнинг рухсат этилган зоналарининг чегарасида максимумлар бўлган ҳол учун нуқсонларда ютилиш коэффициенти спектрлари.



9- расм. ютилиш коэффициенти спектрал характеристикалари.

ланувчи ютилиш коэффициенти спектрлари келтирилган. Кўриниб турибдики, бу спектрлар максимумларга эга бўлмас экан. Ҳисоблашлардан нуқсонлардаги электрон ҳолатлари максимумларининг энергетик ўрнини (ε_D) ўзгариши ҳам, фақат ютилиш коэффициентини қийматларини ўзгаришига олиб келиши аниқланди. Нуқсонларни энергетик ўрни рухсат этилган зоналардан узоқлашганда ютилиш коэффициентининг максимум қиймати кичраийиб бориши акс ҳолда эса ортиб боришлигини кўрсатди.

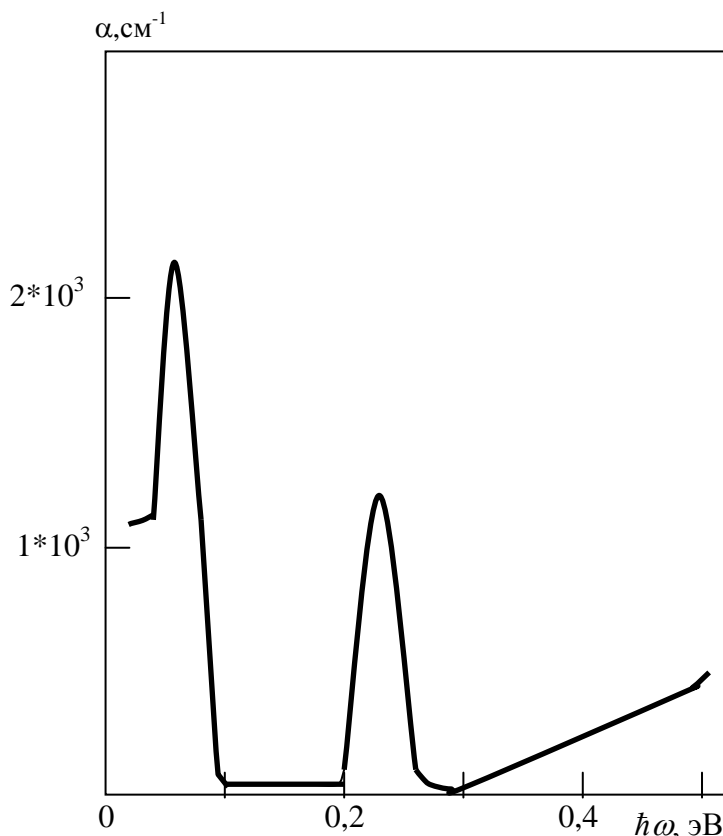
Шу параграфда олинган натижалардан қуйидаги хулосани чиқариш мумкин:

-нуқсонларда ютилиш коэффициенти спектрал характеристикасида аниқ максимумлар фақат валент ёки ўтказувчанлик зоналарининг чегараларидаги электрон ҳолатлари тақсимоотида максимумлар бўлгандагина тажрибалардан олинган натижаларга мос келувчи аниқ максимумлар ҳосил бўлади, бу максимумларни энергетик ўрни $\hbar\omega = \varepsilon_C - \varepsilon_D$ ёки $\hbar\omega = \varepsilon_D - \varepsilon_V$ ҳолатларда ётади.

Булардан $a\text{-Si:H}$ нуқсонларда ютилиш спектрларидан фойдаланиб нуқсонларни энергетик ўрнини аниқлаш мумкин эканлиги келиб чиқади. $a\text{-Si:H}$ намуналаридаги асосий нуқсонларни (D^0 , D^- , D^+) энергетик ўринларини юқорида кўриб ўтдик. Буни ҳисобга олиб 6 - расмдаги нуқсонларда ютилиш спектрларидан кўриш мумкинки, бу намуналардаги асосий нуқсонларни барчаси D^0 нуқсон бўлиб, уларни энергетик ўрни $\varepsilon_C - \varepsilon_{D^-} = 0,65 - 0,75$ эВ оралиқда ётар экан.

10 - расмда милтиллама разрядда ўстириш орқали олинган аморф

германийнинг инфрақизил ютилиш спектри келтирилган. Бу расмдан кўринадики ҳақиқатдан ҳам ютилган фотонларни энергияси кичик бўлганда кучли ютилиш соҳалари ҳосил бўлар экан. Муаллифлар бу ютилиш соҳаларини албатта нуқсонлар ва рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари орасидаги ўтишларга боғлиқ бўлишини кўрсатиб ўтишган. Шу тажриба натижаларини (45) ва (46) формулалар ёрдамида олинган ҳисоблаш натижаларига мос келиш шартларини аниқлашга ҳаракат қилдик. Бу формуладан нуқсонларда ютилиш спектрларида 10-расмдаги каби



10-расм. Аморф германийнинг инфрақизил ютилиш спектри.

максимумларини ҳосил бўлишини тушунтириш мумкин экан. Аммо ҳисоблашлардан кучли ютилиш соҳасини ҳосил бўлмаслиги аниқланди. Ҳақиқатдан ҳам нуқсонлардаги электрон ҳолатлари зичлигини қиймати $10^{-3} - 10^{-2} \text{ см}^{-1}$ оралиқда, максимал қийматлари эса $10^{16} - 10^{17} \text{ эВ}^{-1} \text{ см}^{-3}$ оралиқда ётади. Буни ҳисобга оладиган бўлсак инфрақизил ютилиш спектрларидаги максимумни бўлиши келиб чиқади. Кичик энергияли фотонлар учун электрон ўтишлари ичида асосий ролни нуқсонлар ва рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари орасидаги электрон ўтишлари ўйнашини кўрсатиб ўтилди. Шунинг учун биз ҳам аморф яримўтказгичларнинг структура тўридаги радиацион нуқсонлар ҳамда чуқур сатхлардаги электрон ҳолатлари ва рухсат этилган зоналар орасидаги электрон ўтишларини аниқловчи формулаларни инфрақизил ютилиш спектрлари учун қўлладик.

Рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлигининг тақсимоти даражали бўлади деб олинганда бажарилган ҳисоблашлар

инфрақизил ютилиш спектрларида аниқ ажралиб турувчи кучли ютилиш соҳалари ҳосил бўлмаслигини кўрсатди. (45) ва (46) формулалардан олинган ҳисоблаш натижалари 11-расмда келтирилган. Бу формулалардан олинган ҳисоблаш ва тажриба натижалари мос келиши учун b нинг қиймати 60-80 эВ⁻¹ оралиқда ётиши кераклиги аниқланди. Булар олдинги параграфларда нуқсонлардаги электрон ҳолатлари зичлигининг тақсимоти учун келтирилган b нинг қийматларидан анча катта эканлиги кўриниб турибди.

Маълумки инфрақизил ютилиш спектрлари кичик энергияли фотонлар соҳасида ҳосил бўлади. Шунинг учун бу соҳадаги ютилиш коэффициенти спектрал характеристикаларини ҳисоблашда Кубо-Гринвуд формуласининг умумий кўринишидан фойдаланиш керак.

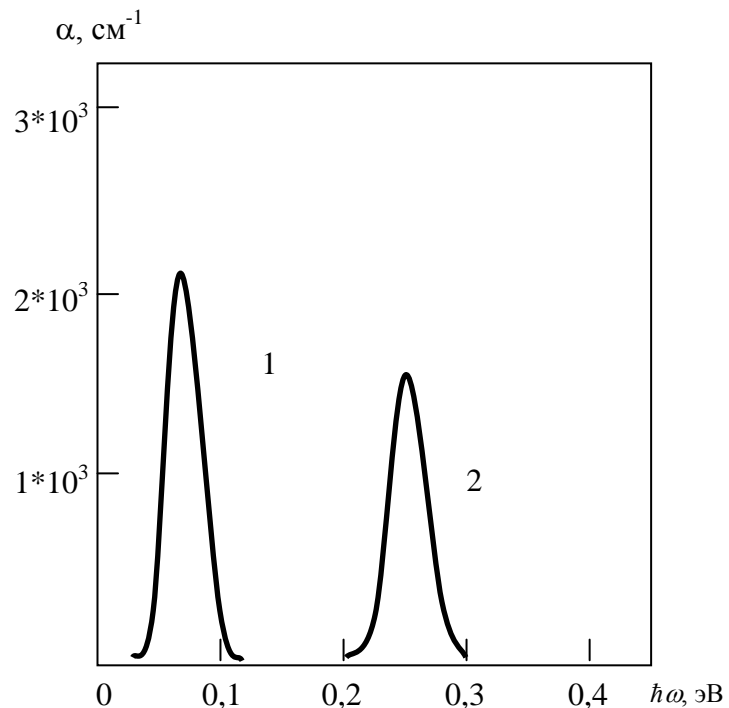
Тушунишни осонлаштириш мақсадида рухсат этилган зоналар ва нуқсонлардаги электрон ҳолатларини айнамаган деб ҳисоблаймиз ва Ферми-Дирак тақсимоти ўрнига Больцман тақсимотини ёзамиз

$$1/(1+\exp((\varepsilon-\varepsilon_F)/kT))\approx\exp(-(\varepsilon-\varepsilon_F)/kT), \quad (47)$$

$$1/(1+\exp((\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega)/kT))\approx\exp(-(\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega)/kT). \quad (48)$$

Кубо-Гринвуд формуласини валент зонадан нуқсонларга ва нуқсонлардан ўтказувчанлик зонасига оптик ўтишлар учун қуйидаги кўринишларда ёзилади

$$\alpha = BN(\varepsilon_V)g(\varepsilon_D) \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{\exp(-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT})}{ch(b(\varepsilon-\varepsilon_V))ch(b(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} - \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{\exp(-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega}{kT})}{ch(b(\varepsilon-\varepsilon_V))ch(b(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (49)$$



1- $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V=0,07$ эВ, 2. $\varepsilon_{D2}-\varepsilon_V=2,4$ эВ. **11-**

расм. Инфрақизил ютилиш спектрлари.

$$\alpha = BN(\varepsilon_C)g(\varepsilon_D) \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{\exp(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT})}{ch(b(\varepsilon - \varepsilon_D))ch(b(\varepsilon - \varepsilon_C + \hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} - \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{\exp(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_F + \hbar\omega}{kT})}{ch(b(\varepsilon - \varepsilon_D))ch(b(\varepsilon - \varepsilon_C + \hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} \quad (50)$$

(49) формуладаги биринчи интегрални

$$\frac{4Bg(\varepsilon_D)N(\varepsilon_V)}{\hbar\omega} \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{1}{(\exp((b + \frac{1}{kT})\varepsilon - \frac{\varepsilon_F}{kT} - b\varepsilon_V) + \exp(-(b + \frac{1}{kT})\varepsilon - \frac{\varepsilon_F}{kT} - b\varepsilon_V))} \times \frac{d\varepsilon}{ch(b(\varepsilon - \varepsilon_D + \hbar\omega))} \quad (51)$$

кўринишда ёзсак. Интеграл остида $b+1/kT$ ифода ҳосил бўлади. b ни қийматларини ҳисобга олиб хона температурасида $b+1/kT=(55-75)$ эВ⁻¹ га тенг бўлишини кўрсатиш мумкин. Бундан b ни қийматларни танлаш орқали (49) ва (50) формулалар ёрдамида инфрақизил ютилиш спектрларидаги ҳосил бўладиган кучли ютилиш соҳаларини тушунтириш мумкин экан. Бундан ташқари Кубо-Гринвуд формуласини умумий кўринишда

$$\alpha = BN(\varepsilon_V)g(\varepsilon_D) \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon) - f(\varepsilon + \hbar\omega)}{ch(b(\varepsilon - \varepsilon_V))ch(b(\varepsilon - \varepsilon_D + \hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (52)$$

$$\alpha = BN(\varepsilon_C)g(\varepsilon_D) \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon) - f(\varepsilon + \hbar\omega)}{ch(b(\varepsilon - \varepsilon_D))ch(b(\varepsilon - \varepsilon_C + \hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}. \quad (53)$$

ёзиб бажарилган тақрибий ҳисоблашлар мос равишда (50) ва (51) формулаларнинг ечимларидан катта фарқ қилмаслигини кўрсатди. Бу ерда $f(\varepsilon)$ -Ферми-Дирак тақсимоти. Булардан инфрақизил ютилиш спектрларида кучли ютилиш соҳалари асосан рухсат этилган зоналарнинг чегараларида максимумлар бўлгандагина ҳосил бўлиши келиб чиқади.

ХУЛОСА

Гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг спектрал характеристикаларининг шаклланиш хусусиятларини аниқлаш асосида қуйидаги хулосалар қилинди:

1. Фундаментал ютилиш соҳасида тўғри ва нотўғри оптик ўтишлар учун ҳаракатчанлик тирқишининг оптик кенглиги билан рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлиги функциялари орасидаги ўзаро боғлиқлик ўрнатилган.

2. Аморф яримўтказгичларни оптик ютилиш коэффиенти спектрал характеристикаларида Урбах қоидасининг бажарилиш шартлари аниқланган.

3. Урбах энергиясининг рухсат этилган зоналарда экспоненциал думларининг эгрилигини аниқловчи параметрга боғлиқлиги кўрсатилган.

4. Аморф яримўтказгичларни структура тўридаги узилган боғланишлардаги электрон ҳолатлар иштирокидаги оптик ўтишларнинг спектрларидан нуқсонларни энергетик ўрнини аниқлаш мумкин эканлиги аниқланган.

5. Спектрларнинг нуқсонларда ютилиш формулаларидан инфрақизил ютилиш соҳаси таҳлил қилинган ва кучли ютилиш соҳаларининг ҳосил бўлиш шартлари аниқланган.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.30.08.2018.FM/Т.01.12 ПО
ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ НАУЧНО-
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОМ ИНСТИТУТЕ ФИЗИКИ
ПОЛУПРОВОДНИКОВ И МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ
ПРИ НАЦИОНАЛЬНОМ УНИВЕРСИТЕТЕ УЗБЕКИСТАНА**

НАМАНГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ЖАЛАЛОВ РАВШАНБЕК МАХМУДХАНОВИЧ

**ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ
ХАРАКТЕРИСТИК ГИДРОГЕНИЗИРОВАННОГО
АМОРФНОГО КРЕМНИЯ**

01.04.10 – Физика полупроводников

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)
ПО ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИМ НАУКАМ**

Ташкент–2019

Тема диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2019.2.PhD/FM260.

Диссертация выполнена в Кокандском государственном педагогическом институте.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (ispm.uz) и на Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» (www.ziynet.uz).

Научный руководитель: **Зайнобидинов Сирожидин Зайнобидинович,**
доктор физико-математических наук, академик

Официальные оппоненты: **Исмаилов Канатбай Абдреймович,**
доктор физико-математических наук, профессор

Отажанов Салим Мадрахимович,
доктор физико-математических наук

Ведущая организация: **Ташкентский государственный технический университет**

Защита диссертации состоится «__» _____ 2019 года в __ часов на заседании Научного совета PhD.30.08.2018.FM/T.01.12 при Научно-исследовательском институте физики полупроводников и микроэлектроники Национального университета. (Адрес: 100057, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Янги Алмазар, дом 20. Тел: (+99871) 248–79–94, факс (+99871) 248–79–92, e-mail: info@ispm.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Отделе внедрения информационных технологий института (зарегистрирована за № ____). Адрес: 100057, Узбекистан, г. Ташкент, ул. Янги Алмазар, дом 20. Тел: (+99871) 248–79–59.

Автореферат диссертации разослан «__» _____ 2019 года (реестр протокола рассылки № __ от «__» _____ 2019 г.).

Ш.Б. Утамурадова,
председатель Научного совета по присуждению
ученых степеней, д.ф-м.н., профессор

С.С. Насриддинов,
ученый секретарь Научного совета по
присуждению ученых степеней,
д.т.н., доцент

А.Т. Мамадалимов,
председатель научного семинара при Научном
совете по присуждению ученых степеней,
д.ф-м.н., профессор, академик

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В мире на сегодня в бурно развивающейся области фотоэнергетики одним из перспективных направлений является изучение процессов фотоэлектрического преобразования в гидрогенизированном аморфном кремнии, которые направлены на повышение эффективности преобразования солнечного излучения. В этом аспекте изучение поглощательной способности гидрогенизированного аморфного кремния позволяет получить ценные сведения по выбору оптимальных параметров материала для преобразователей солнечного излучения в электрическую энергию, что является одной из важных задач.

На сегодняшний день в мире большое внимание уделяется изучению фотоэлектрических характеристик гидрогенизированного аморфного кремния во взаимосвязи с фундаментальными параметрами в заданном спектральном диапазоне. В этом аспекте проведение целевых исследований, в частности реализация приведенных ниже направлений, считается одной из важных задач: установление связи между функциями плотности электронных состояний разрешенных зон с оптической шириной щели подвижности для прямых и непрямых оптических переходов электрона в фундаментальной области поглощения в аморфном кремнии; определение энергии Урбаха из спектральной зависимости коэффициента экспоненциального поглощения аморфных полупроводников; определение энергетического положения дефектов из спектров коэффициента дефектного поглощения; оценка области инфракрасного поглощения во взаимосвязи с параметрами кристаллической решетки полупроводника.

В республике значительное внимание уделяется работам по фотопреобразователям, в частности, определены оптимальные рабочие режимы функционирования солнечных модулей на основе монокристаллического кремния, установлены предельные рабочие температуры и выработаны рекомендации по поддержанию рабочего состояния в условиях жаркого климата.

В Стратегии¹ действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан на 2017-2021 годы определены цели стимулирования научно-исследовательской и инновационной деятельности, внедрения энергосберегающих технологий в производство и использования возобновляемых источников энергии. В связи с этим важно производство эффективных солнечных элементов на основе недорогих полупроводниковых материалов. № П-4947 «О Стратегии действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан на 2017–2021 годы» «О мерах по организации, управлению и финансированию деятельности Академии наук и совершенствованию научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля

¹ Указ Президента Республики Узбекистан от 7 февраля 2017 года № Р-4947 «О начале дальнейшего развития Республики Узбекистан».

2017 года № ПП-2789 Это диссертационное исследование способствует реализации целей, изложенных в законодательстве и других нормативных актах, связанных с этой деятельностью.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан. Данная исследовательская работа выполнена в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики Узбекистан – Ф2. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение».

Степень изученности проблемы. Ученым из США Дэвидом Дрэболдом¹ с коллегами установлены причины образования дефектов в солнечных элементах на основе гидrogenизированного кремния.

Российскими учеными разработаны методы вычислений распределений плотности электронных состояний в хвостах разрешенных зон, которые получены с помощью экспериментальных результатов спектральных характеристик структур аморфного кремния, а также О.В. Константиновым² с сотрудниками предложено феноменологическое выражение для плотности состояний, содержащее подгоночный параметр-энергию Урбаха, описывающее хвосты плотности локализованных состояний (Физико-технический институт им. Иоффе, Санкт-Петербург).

Учеными Узбекистана Р.А. Муминовым, А.Т.Мамадалимовым, М.К. Бахадирхановым, С.З. Зайнобидиновым, Э.З. Имамовым, Қ.П.Абдурахмоновым, Р.Я. Расуловым, Р.Г. Икрамовым показано, что распределение плотности электронных состояний на границах разрешенных зон имеет линейную или параболическую зависимость для аморфных полупроводников. Использование этих распределений по формуле Кубо–Гринвуда позволило определить спектральные характеристики коэффициента поглощения, когда энергия поглощенных фотонов больше энергетической ширины щели подвижности.

Однако до сих пор не получены аналитические решения для спектров коэффициента дефектного поглощения, а также не определены энергетические положения дефектов и легирующих примесей в аморфном полупроводнике.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего образовательного учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационное исследование выполнено в рамках проектов научных исследований Андиганского государственного университета и Наманганского государственного университета по темам ОТ-Ф2-002 «Стимулированные внешним воздействием (термическим, оптичес-

⁵ https://zn.ua/article/print/SCIENCE/solnechnye_batarei_dostoinstva_i_nedostatki.html

Солнечные батареи: достоинства и недостатки.

⁶ Якобсон М.А., Нельсон Д.К., Константинов О.В., Матвеевцев А.В. Хвост локализованных состояний в запрещенной зоне квантовой ямы в системе $\text{In}_0.2\text{Ga}_0.8\text{N}/\text{GaN}$ и его влияние на спектр фотolumинесценции при лазерном возбуждении // Физика и техника полупроводников, 2005, том 39, вып. 12. С. 1459–1463.

ким и радиационным) процессы переноса неравновесных носителей заряда в поликристаллических, аморфных и нанокристаллических кремниевых структурах» (2007–2011 гг.); ОТ-Ф2-28 «Квантомерные эффекты на поверхности и в объеме легированного кремния и их воздействие на фотогенерационные и рекомбинационные процессы носителей заряда в *p-n*-структурах» (2012–2016 гг.).

Целью исследования является изучение особенностей формирования спектральной характеристики гидрогенизированного аморфного кремния.

Задачи исследования:

установление связи между функциями плотности электронных состояний разрешенных зон с оптической шириной щели подвижности для прямых и непрямых оптических переходов электрона в фундаментальной области поглощения;

определение области выполнения правил Урбаха в спектральной зависимости коэффициента оптического поглощения аморфных полупроводников;

установление зависимости энергии Урбаха от параметра, определяющего кривизну экспоненциальных хвостов разрешенных зон;

определение энергетического положения дефектов из спектров коэффициента дефектного поглощения;

оценка области инфракрасного поглощения с помощью формулы дефектного поглощения и определение условий формирования сильного поглощения.

Объектом исследования является гидрогенизированный аморфный кремний.

Предметом исследования являются механизмы формирования спектральной зависимости коэффициента оптического поглощения гидрогенизированного аморфного кремния.

Методы исследований. В процессе исследования применены методы вычисления правил Тауца, формула Кубо–Гринвуда по приближению Девиса–Мотта, метод приближительного расчёта и компьютерной графики (Maple7).

Научная новизна исследования заключается в следующем:

показано, что оптическая ширина щели подвижности неразрешенных прямых переходов электрона зависит от вида функции плотности нелокализованных электронных состояний на границах зон;

выявлено, что оптическая ширина щели подвижности разрешенных и неразрешенных непрямых переходов электрона не зависит от распределения плотности нелокализованных электронных состояний на границах зон;

установлена взаимосвязь энергии Урбаха от параметра, который определяется распределением плотности локализованных электронных состояний из одних экспоненциальных хвостов разрешенных зон;

установлено, что энергетическое положение дефектов можно определить из спектров для электронных переходов, где участвуют электронные состояния оборванных связей в структурной сетке образцов аморфных полупроводников;

определены условия формирования области сильного поглощения в спектрах инфракрасного поглощения.

Практические результаты исследования спектральной зависимости коэффициента поглощения гидрогенизированного аморфного кремния, определение значений коэффициента поглощения заключаются в возможности выбора оптимальной толщины поглощающего слоя применительно к солнечному элементу.

Достоверность результатов исследований обосновывается применением математически статистических методов и совпадением результатов расчёта спектров поглощения с экспериментальными данными.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научная значимость результатов исследования заключается в том, что они способствуют расширению физических представлений о прямых и непрямых оптических переходах электрона, свойственных аморфному кремнию, энергии Урбаха, и спектрах дефектного поглощения.

Практическая значимость результатов исследования заключается в том, что предложенный метод определения энергетической ширины щели подвижности прямых и непрямых оптических переходов электрона, свойственных аморфному кремнию, могут быть использованы при разработке оптоэлектронных приборов с улучшенными оптическими свойствами.

Внедрение результатов исследования. На основе изучения особенностей формирования спектральной характеристики гидрогенизированного аморфного кремния:

установленные зависимости значения энергии Урбаха от параметра, который определяется распределением плотности локализованных электронных состояний из одних хвостов разрешенных зон аморфных полупроводников, возможность определения энергетического положения дефектов из спектров для электронных переходов, где участвуют электронные состояния оборванных связей в структурной сетке образцов аморфных полупроводников, и выведенные условия формирования области сильного поглощения в спектрах инфракрасного поглощения были использованы Акционерным обществом «FOTON» при изготовлении полупроводниковых электронных приборов (Справка № 04-4/857 Акционерной компании «Узэлтехсаноат» от 4 июля 2019 года). Использование научных результатов позволило улучшить электрофизические параметры электронных опытных образцов.

Метод расчета оптической ширины щели подвижности неразрешенных прямых переходов электрона от зависимости функции плотности нелокализованных электронных состояний на границах зон использован при выполнении научного проекта на тему Ф2-ОТ-О-15494 «На основе исследования явления переноса и экситонов, поляронов, биполяронов в наноструктурах и гетероквантовых точках улучшение эффективности излучателей, фотоэлементов и других оптоэлектронных приборов» (2012–2016 гг.) (Справка № 89-03-2787 от 16.07.2019 года Министерства высшего и

среднего специального образования Республики Узбекистан). Использование результатов исследования позволило определить ширину запрещенной зоны для сильно легированных полупроводников.

Апробация результатов исследования. Основные результаты диссертации обсуждались на 5 международных и 5 республиканских научно-практических конференциях.

Публикации результатов исследования. По теме диссертации опубликовано 16 научных трудов, из них 6 статей в реферируемых зарубежных и республиканских журналах, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией для публикации основных результатов диссертаций, остальные – в трудах международных и республиканских конференций.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованной литературы. Текст диссертации изложен на 110 страницах.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснованы актуальность и востребованность темы диссертации, определена связь исследования с основными приоритетными направлениями развития науки и технологий в Республике Узбекистан, приведены обзор научных работ по теме диссертации, степень изученности проблемы и методы исследования, изложена научная новизна исследования, обоснована достоверность полученных результатов, раскрыта теоретическая и практическая значимость, приведены краткие сведения о внедрении результатов и апробации работы, а также об объеме и структуре диссертации.

В первой главе «Оптические переходы электронов» приведен обзор литературных данных по состоянию проблемы. Проанализированы результаты при проведении исследований спектральных характеристик коэффициента поглощения аморфных полупроводников.

Представлены аналитические виды условий прямых разрешенных и неразрешенных, а также не прямых разрешенных и неразрешенных оптических переходов электронов, которые определены с помощью спектров области фундаментального поглощения фотонов. Рассмотрены результаты экспериментов для изучения этих условий для спектра области фундаментальных поглощений.

Приведены экспериментальные результаты для экспоненциального участка спектральной характеристики коэффициента поглощения, в котором выполняется правило Урбаха. Изучены экспериментальные результаты для энергии Урбаха, используя спектральную характеристику коэффициента оптического поглощения аморфных полупроводников.

Проанализированы результаты эксперимента для дефектного участка спектральной характеристики коэффициента поглощения, для энергетического положения дефектов и для дефектов, свойственных гидrogenизированным аморфным полупроводникам. По итогам проведенного анализа дано обоснование постановки задачи исследований, выполненных в диссертационной работе.

Во второй главе «Межзонные оптические переходы, выполнение условий прямых и непрямых оптических переходов» изучены спектры фундаментального поглощения, когда распределение плотности электронных состояний разрешённых зон аморфных полупроводников имеет степенную зависимость. Исследовано выполнение условий прямых и непрямых переходов для этой области поглощения. Показано выполнение условий прямых неразрешенных переходов, непрямых разрешенных и неразрешенных переходов, когда распределение плотности электронных состояний на границах разрешённых зон имеет степенную зависимость. Определено, что условие прямых разрешенных переходов выполняется только в случае, когда распределение плотности электронных состояний на границах разрешённых зон имеет максимумы.

В аморфных полупроводниках когда энергия поглощенных фотонов больше энергетической ширины щели, подвижности оптических переходов электронов делятся на три вида. Поэтому при вычислении спектра коэффициента поглощения формулу Кубо–Гринвуда по приближению Девиса–Мотта надо разделить на три компонента

$$\alpha = A \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon)g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = A \int_{\varepsilon_C - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon)g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A \int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_C - \hbar\omega} g(\varepsilon)g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_V} g(\varepsilon)g(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3, \quad (1)$$

где $g(\varepsilon)$ и $g(\varepsilon + \hbar\omega)$ – плотности электронных состояний валентной зоны и зоны проводимости, начальное конечное состояния электронов, участвующих в оптических переходах, ε_0 – энергетическое положение точки, где пересекаются хвосты валентной зоны и зоны проводимости. Первый член формулы (1) характеризует оптические переходы от хвоста валентной зоны в зону проводимости, второй член – межзонные переходы и третий член – от валентной зоны в хвост зоны проводимости.

Как было сказано выше, распределение плотности электронных состояний в разрешенных зонах имеет степенную зависимость, а хвосты этих зон – экспоненциальную зависимость. Поэтому их можно написать в следующем виде: для валентной зоны

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_V) \left(\frac{\varepsilon_C - \varepsilon}{E_g} \right)^s, \text{ когда } \varepsilon < \varepsilon_V, \quad (2)$$

для зоны проводимости

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_C) \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_V}{E_g} \right)^p, \text{ когда } \varepsilon_C < \varepsilon, \quad (3)$$

для хвоста валентной зоны

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_V) \exp(-\beta_1(\varepsilon - \varepsilon_V)), \text{ когда } \varepsilon_V < \varepsilon < \varepsilon_0, \quad (4)$$

для хвоста зоны проводимости

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_C) \exp(\beta_2(\varepsilon - \varepsilon_C)), \text{ когда } \varepsilon_0 < \varepsilon < \varepsilon_C, \quad (5)$$

где $N(\varepsilon_V)$ и $N(\varepsilon_C)$ – соответственно эффективные значения плотности электронных состояний на границах валентной зоны и зоны проводимости.

В случае когда распределение плотности электронных состояний между разрешенными зонами и дефектами имеет максимумы, они подчиняются распределению Гаусса:

$$g(\varepsilon) = N(\varepsilon_D) \exp(-a(\varepsilon - \varepsilon_D)^2) \quad (6)$$

или распределению в виде гиперболического секанса:

$$g(\varepsilon) = \frac{2N(\varepsilon_D)}{\exp(b(\varepsilon - \varepsilon_B)) + \exp(-b(\varepsilon - \varepsilon_D))}. \quad (7)$$

Видно, что поставив эти распределения в формулу (1), можно получить выражение, которое определяет спектры оптического поглощения.

Для аморфных полупроводников выведено выражение для коэффициента оптического поглощения межзонного оптического перехода, когда распределения плотности электронных состояний имели параболическую зависимость. Для прямых переходов электрона

$$\alpha \cdot \hbar\omega \sim (\hbar\omega - E_{g_0})^{n_1}, \quad (8)$$

здесь значение степени равно $n_1=1/2$, если оптические переходы разрешенные, и когда переходы неразрешенные, то $n_1=3/2$. E_{g_0} – оптическая ширина щели подвижности (запрещенной зоны) для прямых переходов электрона.

Эта зависимость для непрямых оптических переходов, основываясь на результатах эксперимента, когда частота фононов меньше ($\omega_{\text{фон}} \ll \omega$) и ($kT \ll \hbar\omega$) частоты поглощенных фотонов, написана в следующем виде:

$$\alpha \hbar\omega \sim (\hbar\omega - E_g)^{n_2}, \quad (9)$$

где E_g – оптическая ширина щели подвижности (запрещенной зоны) для непрямых переходов электрона. Для разрешенных оптических переходов $n_2=2$, а для неразрешенных оптических переходов $n_2=3$.

Видно, что выражениями (8) и (9) можно определить оптическую ширину запрещенной зоны из спектров прямых и непрямых переходов электрона:

$$\sqrt[n_1]{\alpha \cdot \hbar\omega} \sim \hbar\omega - E_{g_0} \quad (10)$$

$$\sqrt[n_2]{\alpha \cdot \hbar\omega} \sim \hbar\omega - E_g. \quad (11)$$

Для межзонных оптических переходов электрона, когда плотности электронных состояний от энергии имели постоянную, линейную и параболическую зависимость, получены следующие аналитические выражения: когда распределения плотности электронных состояний были постоянными

$$\alpha \hbar\omega = A(\hbar\omega - E_g), \quad (12)$$

когда они были параболическими

$$\alpha\hbar\omega = \frac{A}{4E_g} \left(2(\hbar\omega - E_g) \sqrt{E_g \hbar\omega} - (E_g + \hbar\omega)^2 \operatorname{arctg} \left(\frac{E_g - \hbar\omega}{\sqrt{4E_g \hbar\omega}} \right) \right), \quad (13)$$

когда имели линейную зависимость

$$\alpha\hbar\omega = \frac{A}{E_g^2} \frac{\hbar\omega - E_g}{6} (E_g^2 + 4\hbar\omega E_g + \hbar^2 \omega^2). \quad (14)$$

Спектры межзонного поглощения для различных комбинаций состояний, когда плотности нелокализованных электронных состояний зависят от энергии, отличны друг от друга:

1) когда в одной разрешенной зоне плотности электронных состояний постоянные, а в другой параболические

$$\alpha\hbar\omega = \frac{2A}{3} \frac{(\sqrt{\hbar\omega^3} - \sqrt{E_g^3})}{\sqrt{E_g}}, \quad (15)$$

2) когда в одной разрешенной зоне они постоянные, а в другой линейные

$$\alpha\hbar\omega = \frac{A}{2} \frac{\hbar\omega^2 - E_g^2}{E_g}, \quad (16)$$

3) когда в одной разрешенной зоне они параболические, а в другой линейные

$$\alpha\hbar\omega = \frac{2A}{15\sqrt{E_g^3}} \left(5(E_g + \hbar\omega) (\sqrt{\hbar\omega^3} - \sqrt{E_g^3}) - 3(\sqrt{\hbar\omega^5} - \sqrt{E_g^5}) \right), \quad (17)$$

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

Как известно, условия прямого и непрямого перехода написаны для межзонных переходов. Поэтому эти условия проверены для спектральных характеристик коэффициента межзонного поглощения.

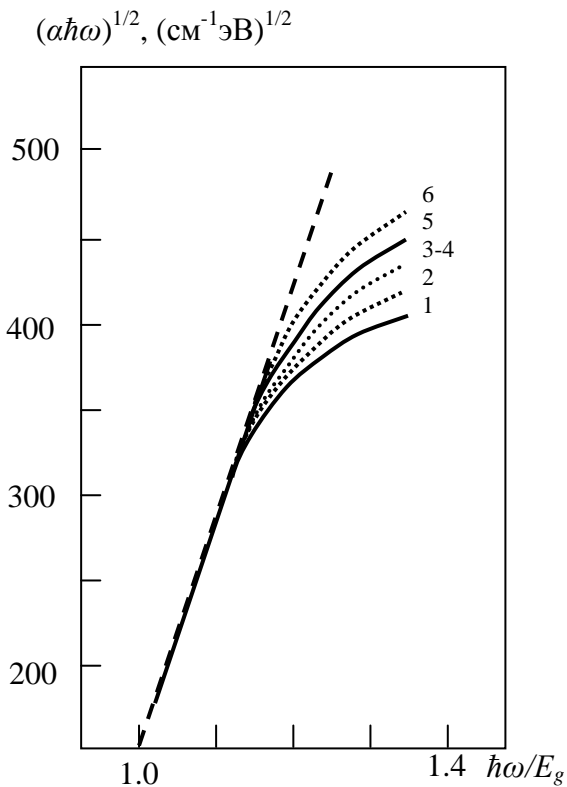
Спектры (12)–(17) и из выражения (10) и (11) при постоянной температуре условия разрешенного и неразрешенного непрямого оптического перехода электронов написаны соответственно в следующем виде:

$$(\alpha\hbar\omega)^{1/2} \sim \sqrt{f(\hbar\omega)}, \quad (18)$$

$$(\alpha\hbar\omega)^{1/3} \sim \sqrt[3]{f(\hbar\omega)}. \quad (19)$$

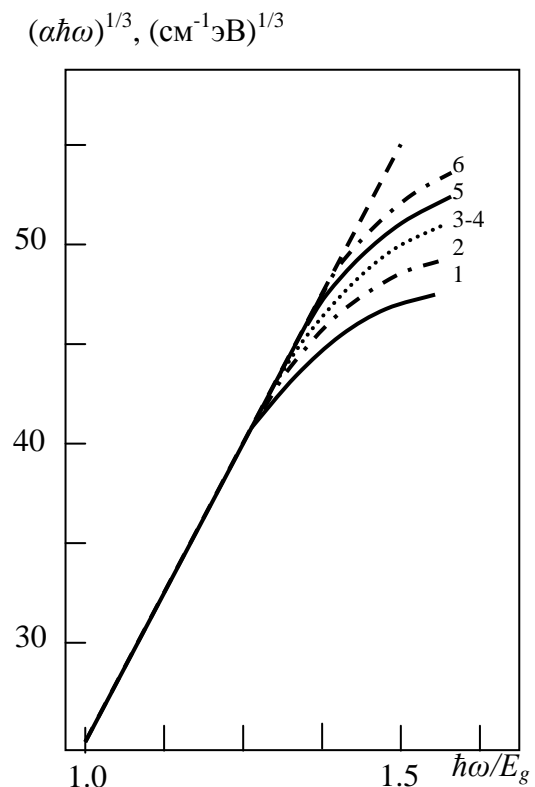
здесь $f(\hbar\omega)$ – выражения в правой стороне формулы (12)–(17). Результаты исследований этих условий приведены на рис. 1, а и б. Из них видно, что все

выведенные в данной работе формулы для межзонного оптического перехода электронов удовлетворяют условиям разрешенного и неразрешен-



Результаты расчета, полученные при подставлении в формулу (18) формулы 1 – (12), 2 – (13), 3 – (14), 4 – (15), 5 – (16), 6 – (17)

Рис. 1, а. Результаты расчета для выполнения условий не прямых разрешенных переходов электрона.



Результаты расчета, полученные при подставлении в формулу (19) формулы 1 – (12), 2 – (13), 3 – (14), 4 – (15), 5 – (16), 6 – (17)

Рис. 1, б. Результаты расчета для выполнения условий не прямых неразрешенных переходов электрона.

ного не прямых переходов

На основе вышеприведенных формул (12)–(17), пользуясь выражениями (10)–(11) выведенные формулы обеспечивающие выполнение условий разрешенного и неразрешенного прямых переходов. написаны соответственно в следующем виде:

$$(\alpha\hbar\omega)^2 \sim f(\hbar\omega)^2, \quad (20)$$

$$(\alpha\hbar\omega)^{3/2} \sim f(\hbar\omega)^{3/2}. \quad (21)$$

Результаты исследования условий прямых неразрешенных переходов электрона приведены на рис. 2

На этом рисунке приведены только спектры линейного, постоянного и параболического распределения плотности электронных состояний. Из этих результатов можно сделать вывод о том, что выведенные в данной

работе формулы удовлетворяют условие неразрешенных прямых переходов. Однако оптическая ширина щели подвижности, которая определяется этими переходами электронов, зависит от вида функции распределения плотности электронных состояний, и с увеличением значения суммы степеней распределений также увеличивается оптическая ширина щели подвижности.

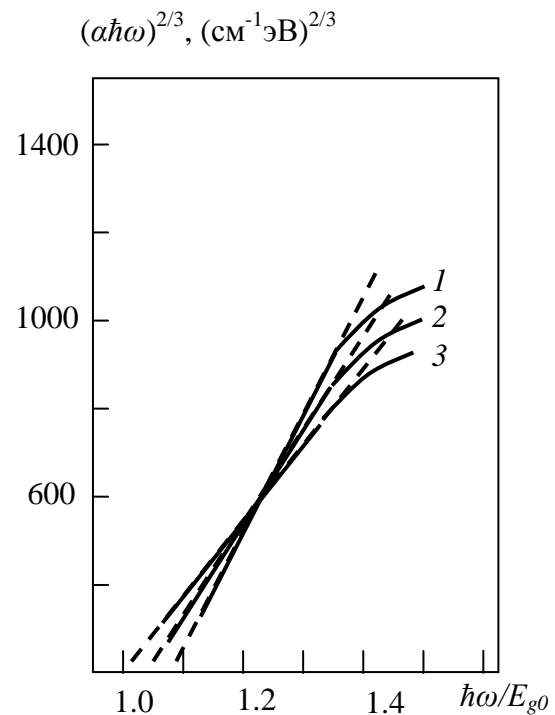
Аналогично исследованы условия прямых разрешенных переходов. Результаты расчета этих выражений показали, что если распределение плотности электронных состояний имеет степень зависимости, то для спектральных характеристик коэффициента межзонных поглощений не выполняется условие прямых разрешенных переходов. Основываясь на предположениях о том, что существуют максимумы на границах разрешенных зон для аморфных полупроводников, получено следующее выражение при расчете спектральных характеристик коэффициента поглощения для межзонного перехода электронов:

$$\alpha = A \frac{\ln \left[\frac{1 + ch(bE_g)}{1 + ch(b(2\hbar\omega - E_g))} \right]}{b\hbar\omega sh(b(E_g - \hbar\omega))}. \quad (22)$$

Расчеты этой формулы показали, что энергетическое положение максимумов соответствует $\hbar\omega = \varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g$. Результаты расчета, полученные по формуле

$$(\alpha\hbar\omega)^2 \sim \left[\frac{1}{b\hbar\omega sh(b(E_g - \hbar\omega))} \ln \left(\frac{1 + ch(bE_g)}{1 + ch(b(2\hbar\omega - E_g))} \right) \right]^2 \quad (23)$$

для условий прямых разрешенных переходов, приведены на рис. 3. Из расчёта видно, что условие прямых разрешенных переходов выполняется. Выполнены численные вычисления формулы Кубо–Гринвуда для случаев,



1 – линейная, 2 – параболическая, 3 – постоянная

Рис. 2. Результаты расчета, полученные по формуле (21) для распределения плотности электронных состояний на разрешенных зонах

когда распределения плотности электронных состояний в одной разрешенной зоне степенные, а в другой имели максимум. Из полученных результатов определено, что условие прямых разрешенных переходов не выполнено и в этих случаях. Из сказанного выше можно сделать следующий вывод. Условие прямых разрешенных переходов выполняется только тогда, когда в спектрах имеются явные максимумы.

В третьей главе диссертации **«Правило Урбаха для спектров поглощения фотонов, энергия которых меньше энергии щели подвижности»** на примере аморфного гидрогенизированного кремния исследована энергия Урбаха с использованием области экспоненциального поглощения спектральной характеристики.

Ниже приведены результаты исследования правила Урбаха для спектров оптических переходов и выведена новая формула для энергии Урбаха. Известно, что правило Урбаха в общем случае можно записать в следующем виде:

$$\alpha(\hbar\omega) = \text{const} \cdot \exp\left(\frac{\hbar\omega}{E_U}\right), \quad (24)$$

где E_U – энергия Урбаха, которая для аморфных полупроводников может быть равна 30–100 мэВ. Известно, что (где оптические переходы бывают в трёх видах энергии) энергия Урбаха определяется с использованием опытных данных для поглощённых фотонов, область энергии которых удовлетворяет условию $\varepsilon_F - \varepsilon_V < \hbar\omega < \varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g$. Поэтому коэффициент поглощения определяется суммой парциальных коэффициентов поглощения:

$$\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3,$$

где α_1 – образующая электронную фотопроводимость, т.е. оптические переходы электронов из хвоста валентной зоны в зону проводимости, α_2 – не образующая электронную фотопроводимость, т.е. оптические переходы электронов из хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости, α_3 – образующая дырочную фотопроводимость, т.е. оптические переходы электронов из валентной зоны в хвост зоны проводимости.

$(\alpha\hbar\omega)^2$, отн. един.

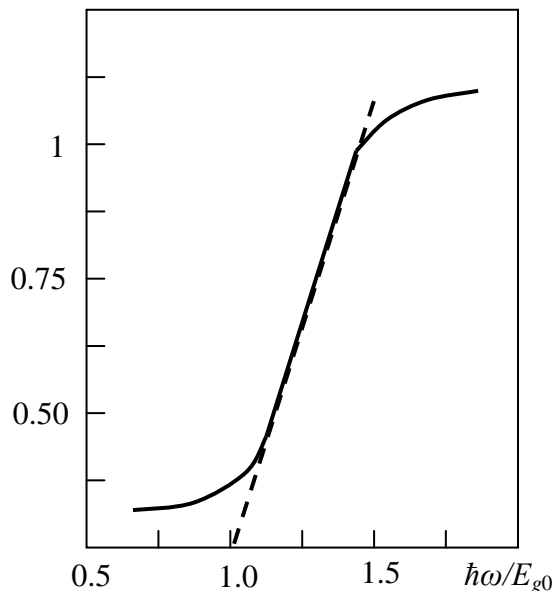


Рис. 3. Выполнение условий прямых разрешенных оптических переходов электрона при наличии максимумов на границах разрешенных зон

Поэтому рассмотрен расчет энергии Урбаха во всех областях спектра оптических переходов участвующих локализованных электронных состояний на экспоненциальных хвостах разрешённых зон. Из формулы (24) определяем E_U . Отсюда получаем производную по энергиям фотонов $\hbar\omega$ в следующем выражении

$$\frac{d(\alpha(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} = \frac{1}{E_U} \text{const} \cdot \exp\left(\frac{\hbar\omega}{E_U}\right) \quad (25)$$

или

$$\frac{d(\alpha(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} = \frac{\alpha(\hbar\omega)}{E_U} \quad (26)$$

Из него для энергии Урбаха можно записать равенство

$$E_U = \alpha(\hbar\omega) / \frac{d(\alpha(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} \quad (27)$$

Эту формулу для области $\varepsilon_F - \varepsilon_V < \hbar\omega < \varepsilon_C - \varepsilon_V = E_g$ запишем в виде

$$E_U = (\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3) \left(\frac{d\alpha_1}{d(\hbar\omega)} + \frac{d\alpha_2}{d(\hbar\omega)} + \frac{d\alpha_3}{d(\hbar\omega)} \right)^{-1} \quad (28)$$

На основе рассмотрения метода расчёта энергии Урбаха из формулы Кубо–Гринвуда по методу приближения Девиса–Мотта для всех видов оптических переходов электронов, приведённых выше, рассчитаны спектральные характеристики коэффициентов оптического поглощения.

При степенном распределении электронных состояний в разрешённых зонах показано, что значения спектров коэффициента поглощения, определяемые с участием этих состояний, не отличаются друг от друга. Поэтому для упрощения вида спектров участвующих электронных состояний, одно состояние которых локализовано, а второе нелокализовано, рассмотрим случай при постоянном локализованном электронном состоянии. Для этих спектров получены следующие результаты:

$$\alpha_1 = \frac{A}{\beta_1 \hbar\omega} \exp(-\beta_1(E_g - \hbar\omega)) [1 - \exp(\beta_1(\varepsilon_C - \varepsilon_0 - \hbar\omega))], \quad (29)$$

$$\alpha_2 = \frac{A}{(\beta_2 - \beta_1) \hbar\omega} \exp(\beta_1(\hbar\omega - E_g)) [1 - \exp((\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega - E_g))], \quad (30)$$

$$\alpha_3 = \frac{A}{\beta_2 \hbar\omega} \exp(\beta_2(\hbar\omega - E_g)) [1 - \exp(\beta_2(\varepsilon_0 - \varepsilon_V - \hbar\omega))], \quad (31)$$

где β_1 и β_2 – соответственно параметры, определяющие кривизну хвостов валентной зоны и зоны проводимости.

Если из этих формул получим производные по энергиям фотонов, получим следующие выражения:

$$\frac{d\alpha_1}{d(\hbar\omega)} = \frac{A}{\beta_1 (\hbar\omega)^2} \exp(\beta_1(\hbar\omega - E_g)) [\beta_1 \hbar\omega - 1 + \exp(\beta_1((\varepsilon_C - \varepsilon_0) - \hbar\omega))], \quad (32)$$

$$\frac{d\alpha_2}{d(\hbar\omega)} = \frac{A}{(\beta_2 - \beta_1) (\hbar\omega)^2} \left((\beta_1 \hbar\omega - 1) \exp(\beta_1(\hbar\omega - E_g)) - (\beta_2 \hbar\omega - 1) \exp(\beta_2(\hbar\omega - E_g)) \right) \quad (33)$$

$$\frac{d\alpha_3}{d(\hbar\omega)} = \frac{A}{\beta_2(\hbar\omega)^2} \exp(\beta_2(\hbar\omega - E_g)) [\beta_2\hbar\omega - 1 + \exp(\beta_2((\varepsilon_0 - \varepsilon_V) - \hbar\omega))] \quad (34)$$

Из этих выражений, поставляя зависимость, полученную для точек пересечения экспоненциальных хвостов разрешённых зон, создаём формулы, определяющие энергию Урбаха

$$\varepsilon_C - \varepsilon_0 = \beta_1 E_g / (\beta_1 + \beta_2), \quad (35)$$

$$\varepsilon_0 - \varepsilon_V = \beta_2 E_g / (\beta_1 + \beta_2). \quad (36)$$

Видно, что при помощи этих формул можно определять зависимости энергии Урбаха от значений параметров β_1 , β_2 и E_g .

Как показывают расчёты, из этих спектров при определении значений коэффициентов поглощения между локализованными состояниями в области экспоненциального поглощения основную роль играют спектры оптических переходов, не образующие фотопроводимость. Поэтому энергию Урбаха запишем в виде

$$E_U = \alpha_2(\hbar\omega) \left(\frac{d(\alpha_2(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} \right)^{-1} \quad (37)$$

Используя формулы (30) и (33), можно вывести выражение, определяющее энергию Урбаха. Для упрощения этого выражения, учитывая $\hbar\omega < E_g$ и $\exp((\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega - E_g)) \ll 1$, для энергии Урбаха получим следующие выражения:

при большом значении параметра, определяющего кривизну хвоста валентной зоны

$$E_U \approx \frac{1}{\beta_1 - \beta_2 \exp((\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega - E_g)) - 1/\hbar\omega} > \frac{1}{\beta_1}, \quad (38)$$

а при большом значении параметра, определяющего кривизну хвоста зоны проводимости

$$E_U \approx \frac{1}{\beta_2 - \beta_1 \exp((\beta_1 - \beta_2)(\hbar\omega - E_g)) - 1/\hbar\omega} > \frac{1}{\beta_2}. \quad (39)$$

В этом случае энергия Урбаха становится зависимой только от параметров, определяющих энергетическую ширину щели подвижности полупроводникового образца и от параметров, определяющих кривизну экспоненциальных хвостов разрешённых зон. Если одинаковы полупроводниковый образец и технология его приготовления, то можно считать постоянным щель подвижности. Для таких образцов из формул (38) и (39) вытекает, что энергия Урбаха зависит только от параметра, определяющего кривизну экспоненциальных хвостов разрешённых зон. Поэтому по этой формуле можно изучать зависимость между энергией Урбаха и параметрами, определяющими кривизну хвостов разрешённых зон. На рис. 4 приведена зависимости энергии Урбаха от кривизны хвоста валентной зоны (β_1) и зоны проводимости (β_2). Из рисунка видно, что значение $\beta = 1/E_U$ всегда будет меньше значений β_1 и β_2 .

Из этих результатов можно сделать следующие выводы. У меньшего из параметров β_1 и β_2 значение параметра β (обратное значение энергии Урбаха) не может быть больше, во-вторых, у одного из β_1 или β_2 значение β всегда будет меньше от значения этого параметра, даже при изменении значений β_1 и β_2 в больших интервалах значения энергии Урбаха могут оставаться неизменными. Эти результаты показывают неправильность соображения Мотта при объяснении причины появления области в спектральной характеристике коэффициента поглощения, в которой выполняется правило Урбаха, объяснявшего это экспоненциальной зависимостью хвостов зон от энергии.

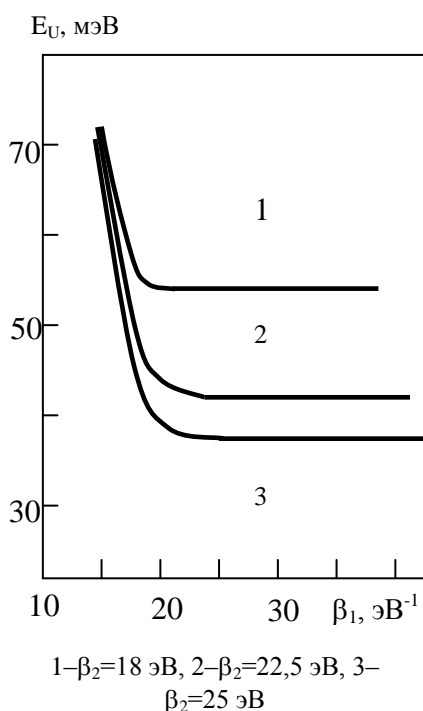


Рис. 4. Зависимость энергии Урбаха от значений параметров, определяющих кривизну хвостов разрешённых зон

На пленках гидрогенизированного аморфного полупроводника по экспериментальным результатам зависимости энергии Урбаха от температуры показано, что эта зависимость является линейной и угловым коэффициентом этих линий близок к угловому коэффициенту линии зависимости ширины щели подвижности от температуры.

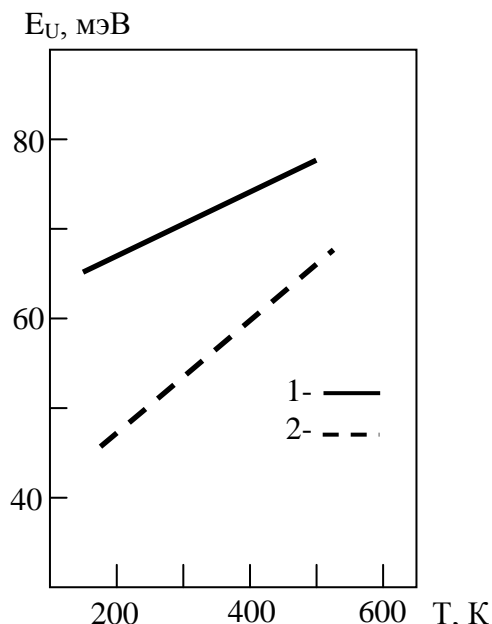
Как известно, в аморфном гидрогенизированном кремнии энергия Урбаха определяется от значения параметра, который определяет кривизну экспоненциального хвоста валентной зоны. Значение плотности электронных состояний на хвостах разрешенных зон будет постоянным при температуре $T < 550$ К. Поэтому в данном параграфе приведены полученные результаты теоретических расчётов по изучению зависимости между температурой и энергией Урбаха.

В предыдущем параграфе приведены выражения, определяющие энергии Урбаха. В формулах (38) и (39) только один E_g параметр зависит от температуры.

Как известно, эта зависимость пишется следующим образом:

$$E_g(T) = E_g(0) - \gamma T. \quad (40)$$

Имея в виду значения температурного коэффициента для гидрогенизированных аморфных полупроводников $\gamma = 10^{-5} - 10^{-4}$ эВК⁻¹ и подставляя (40) в (38), получаем расчётные результаты, показанные на рис. 5.



Расчеты выполнены для значения 1 – $\beta_1 = 14$ эВ⁻¹ и $\beta_2 = 25$ эВ⁻¹; 2 – $\beta_1 = 19$ эВ⁻¹ $\beta_2 = 25$ эВ⁻¹, $E_g = 1,8$ эВ

Рис. 5. Зависимость энергии Урбаха от температуры в пленках гидрогенизированного аморфного кремния.

Расчёты выполнены для гидрогенизированного аморфного кремния, где $E_g=1,8$ эВ. В данном материале хвост валентной зоны больше, чем хвост зоны проводимости. Поэтому при выполнении расчетов для параметров, определяющих кривизну экспоненциального хвоста валентной зоны и зоны проводимости, выбраны величины $\beta_1=14$ эВ⁻¹ и $\beta_2=25$ эВ⁻¹ – 1-я линия, $\beta_1=19$ эВ⁻¹ и $\beta_2=25$ эВ⁻¹ – 2-я линия. Из рисунка видно, что вычисленная по формуле температурная зависимость энергии Урбаха является линейной и хорошо согласуется с экспериментальными результатами.

В четвертой главе диссертации «Спектры поглощения в дефектах» освещены исследования аналитического решения спектров поглощения в дефектах в примерах в гидрогенизированных кремниях, подобных аморфным полупроводникам.

Результаты, приведенные в литературе для энергетических состояний заряженных дефектов D^+ , D^0 и D^- на слоях гидрогенизированных аморфных полупроводников, немного отличаются друг от друга. В этой работе среднее их значения $\varepsilon_C-\varepsilon_{D0}\approx(0,9-1,0)$ эВ, $\varepsilon_C-\varepsilon_{D^-}\approx 0,6$ эВ, $\varepsilon_C-\varepsilon_{D^+}\approx(0,25-0,2)$ эВ, $\varepsilon_{DB}-\varepsilon_V\approx(0,4-0,35)$ эВ и $\varepsilon_C-\varepsilon_{DA}\approx(0,35-0,3)$ эВ выполнено вычислением.

Рассмотрены расчеты спектральной характеристики коэффициента поглощения дефекта в аморфных полупроводниках при поглощении фотонов большой энергии. В этом случае электроны одновременно участвуют в оптических переходах от электронных состояний дефектов к разрешенным зонам и хвостам этих зон. Показаны определение распределения электронных состояний в разрешенных зонах, значение спектра поглощения в дефектах и независимость от степени состояния в зонах, коэффициент спектральных характеристик оптических поглощений для оптических переходов с участием электронных состояний в разрешенных зонах. Поэтому мы будем приводить аналитические решения спектров при постоянном распределении электронных состояний только на границе валентной (α_1) зоны и зоны проводимости (α_2): определено, что они выглядят соответственно в следующем виде:

$$\alpha_1 = \frac{2 \cdot A \cdot \operatorname{arctg} \left[\frac{\exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar\omega)) - \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D))}{1 + \exp(b(2(\varepsilon_V - \varepsilon_D)) + \hbar\omega)} \right]}{b \cdot \hbar\omega}, \quad (41)$$

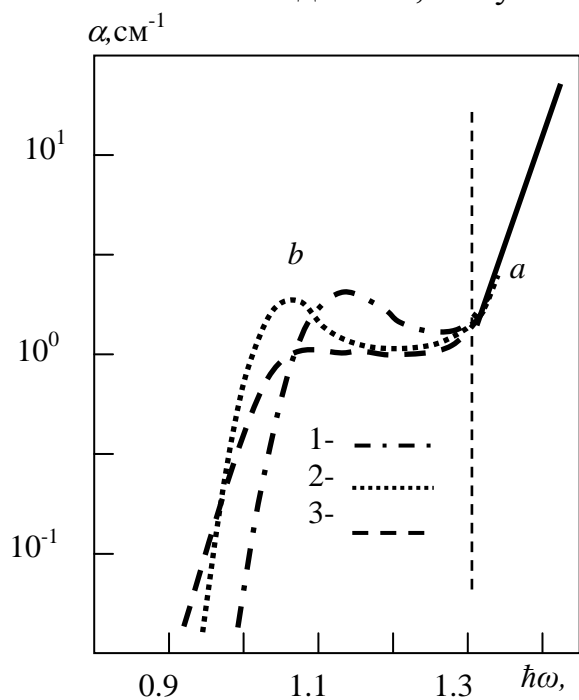
$$\alpha_2 = \frac{2 \cdot A \cdot \operatorname{arctg} \left[\frac{\exp(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D)) - \exp(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D - \hbar\omega))}{1 + \exp(b(2(\varepsilon_C - \varepsilon_D)) - \hbar\omega)} \right]}{b \cdot \hbar\omega}. \quad (42)$$

На рис. 6 приведены спектральные характеристики этих коэффициентов поглощений; расчеты показывают, что когда энергетическое положение максимума дефектов (ε_D) будет находиться близко к какой-то разрешенной зоне, в той зоне значение коэффициента поглощения, определяемое оптическими переходами участвующих электронных состояний, будет больше и при энергии поглощаемых фотонов будет равно $\hbar\omega=\varepsilon_C-\varepsilon_D$ и $\hbar\omega=\varepsilon_D-\varepsilon_V$, спектры дефектного поглощения имеют слабый максимум при степенном распределении плотности состояний электронов в разрешенных зонах. Однако спектры, полученные в опытах в различных образцах (особенно при различной технологии выращивания), существенно

отличаются от данных рис. 6. Например, на рис. 7 приведены спектральные характеристики коэффициента поглощения в дефектах для образца гидрогенизированных аморфных полупроводников.

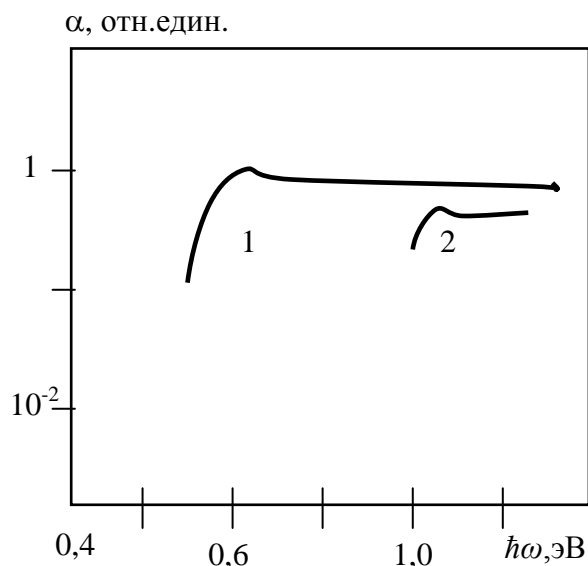
Поскольку все эти образцы были выращены в одиноковых технологических условиях (методом псевдолегирования, разрыванием газа силана в тлеющем разряде), изменение всех их параметров (концентрация, энергетические уровни и др.), определяющих дефекты, может изменить значение коэффициента поглощения, но не должно изменять вид их спектральных характеристик. Это можно объяснить распределением плотности нелокализованных электронных состояний в разрешенных зонах. Из рис. 7 можно увидеть, что некоторые спектральные характеристики коэффициента поглощения в дефектах, которые определены в опытах, имеют точные максимумы и минимумы.

Учитывая эти данные, получены выражения для спектра коэффициента



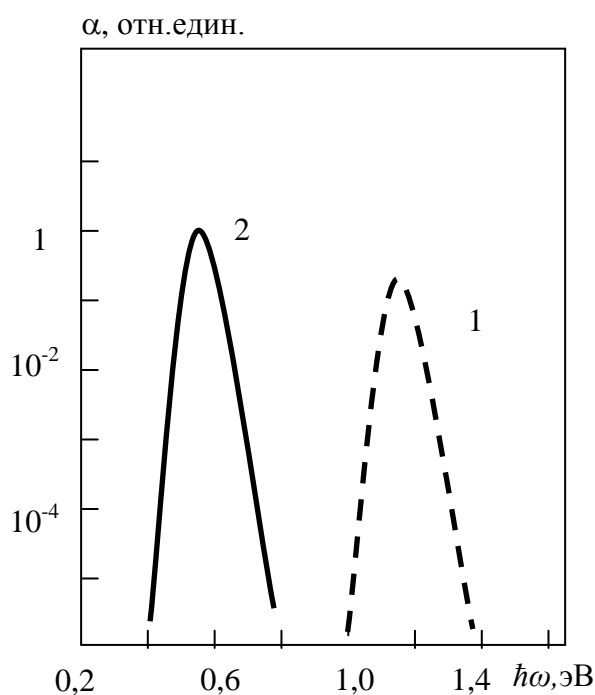
(a)-экспоненциальной, (b)-дефектный поглощений, $E_g=1,8$ эВ **Рис. 7.**

Спектральные характеристики коэффициента поглощения для псевдолегированных образцов, полученные в опытах, область



1 – от дефекта к зоне проводимости. 2 – от валентной зоны к состоянию дефекта

Рис. 6. Спектры оптических переходов электронов в разрешенных $E_g=1,8$ эВ зонах от $\epsilon_C-\epsilon_D=0,6$ эВх. электронных состояний дефектов:



1 – $\epsilon_C-\epsilon_{D1}=0,6$ эВ, 2 – $\epsilon_C-\epsilon_{D2}=1,2$ эВ **Рис. 8. Спектры коэффициента поглощений в дефектах в гидрогенизированных аморфных полупроводниках, при наличии максимумов на границе разрешенных зон $E_v=1,8$ эВ**

поглощения оптических переходов электронов от дефекта к зоне проводимости, предполагая, что нелокализованные электронные состояния у границы разрешенных зона создают состояние, подчиняющееся распределению Гаусса или гиперболиксеканса. Результаты этих расчетов приведены на рис. 8 (можно сопоставить с рис. 6).

$$\alpha = \frac{A}{b\hbar\omega} \frac{1}{sh(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D - \hbar\omega))} \ln \left[\frac{1 + \left(\frac{g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)}\right)^2 + 2\left(\frac{g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)}\right)ch(b(\varepsilon_C - \varepsilon_D))}{1 + \left(\frac{g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)}\right)^2 + 2\left(\frac{g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)}\right)ch(b(2\hbar\omega - \varepsilon_C - \varepsilon_D))} \right], \quad (43)$$

для оптических переходов от валентной зоны к состоянием дефектов

$$\alpha = \frac{A}{b\hbar\omega} \frac{1}{sh(b(\varepsilon_D - \varepsilon_V - \hbar\omega))} \ln \left[\frac{1 + \left(\frac{N(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)^2 + 2\left(\frac{N(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)ch(b(\varepsilon_D - \varepsilon_V))}{1 + \left(\frac{N(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)^2 + 2\left(\frac{N(\varepsilon_V)}{g(\varepsilon_D)}\right)ch(b(2\hbar\omega - \varepsilon_D - \varepsilon_V))} \right] \quad (44)$$

Из рисунка видно, что спектральные характеристики коэффициента поглощения имеют точный максимум.

Для определения спектров поглощения и образуемых энергетических уровней в дефектах подставляя функцию распределения электронных состояний в дефектах, а также в хвостах валентной зоны, для α_1 получим следующее выражение:

$$\alpha_1 = \frac{A}{b\hbar\omega} \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar\omega)) \left[2b(\varepsilon_{01} - \varepsilon_V) - \ln \left[\frac{1 + \exp(2b(\varepsilon_{01} - \varepsilon_D + \hbar\omega))}{1 + \exp(2b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar\omega))} \right] \right] \quad (45)$$

Определяем спектры оптических переходов электронов от дефектов к хвостам зоны проводимости:

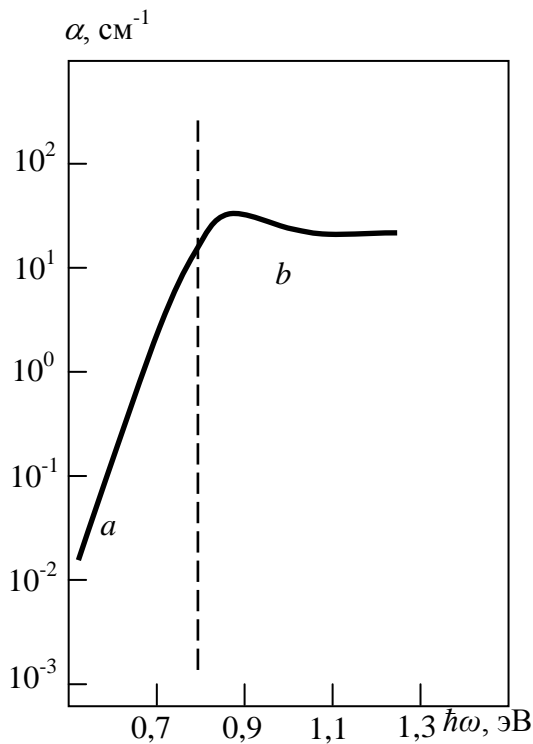
$$\alpha_2 = \frac{A}{b\hbar\omega} \exp(b(\varepsilon_D - \varepsilon_C + \hbar\omega)) \left[2b(\varepsilon_C - \varepsilon_{02}) - \ln \left[\frac{1 + \exp(-2b(\varepsilon_C - \varepsilon_D - \hbar\omega))}{1 + \exp(-2b(\varepsilon_{02} - \varepsilon_D - \hbar\omega))} \right] \right] \quad (46)$$

На рис. 9 показаны расчеты из формул (42) и (46) спектров коэффициента поглощения, определяемые оптическими переходами электронов от дефектов к зоне проводимости и к хвостам этой зоны. Из этого видно, что эти спектры не имеют максимума. Расчетами определено, что изменение максимума энергетического уровня дефекта (ε_D) приводит только к изменению значения коэффициента поглощения. Когда энергетическое состояние дефекта удаляется от разрешенных зон, значение максимума коэффициента поглощения уменьшается, напротив, при приближении наблюдается повышение.

Из полученных результатов этого параграфа можно сделать следующие выводы.

На спектральных характеристиках коэффициента поглощений на дефектах точные максимумы будут только в том случае, когда на распределении электронных состояний на границе зоны проводимости и валентной зоны будут максимумы и они соответствуют экспериментальным максимумам, имеющих энергетическое значение $\hbar\omega = \varepsilon_C - \varepsilon_D$ ёки $\hbar\omega = \varepsilon_D - \varepsilon_V$. Из этого выходит, что используя спектры поглощения в дефектах *a-Si:H*,

можно определить энергетическое состояние дефекта. Выше рассматривали энергетические состояния основных дефектов (D^0 , D^- , D^+) в образцах a -Si:H.



определяющиеся оптическими переходами электронов от дефекта к зоне проводимости (а-область) и от дефекта к хвосту в зоне проводимости (b-область). Здесь $E_g=1,8$ эВ, $\epsilon_C-\epsilon_D=0,8$ эВ

Рис. 9. Спектральные характеристики коэффициента поглощения.

Учитывая это, из рис. 6 можно увидеть, что в этих образцах основным дефектом является дефект D^0 и его энергетическое состояние лежит в пределах $\epsilon_C-\epsilon_D=0,65-0,75$ эВ.

На рис. 10 приведено инфракрасное поглощение аморфного германия, полученного методом выращивания мерцающего разряда. Из рисунка видно, что действительно получается область сильного поглощения, когда энергия фотона будет невелика. Авторы работы показали, что эти области поглощения связаны переходами электронов с разницей электронных состояний дефектов и разрешенных зонах. Попытались определить условие соответствия экспериментальных результатов с полученными нами расчетными данными из выражений (45) и (46). Из этих выражений можно объяснить получение максимумов спектра поглощения в дефектах подобно показанному на рис. 10. Однако в расчетах определена невозможность получения области сильного

поглощения. Действительно, максимальное значение плотности электронных состояний в дефектах лежит в пределах $10^{16}-10^{17}$ эВ $^{-1}$ см $^{-3}$. Если учитываем это значение, то значение максима инфракрасного спектра поглощения будет в пределах $10^{-3}-10^{-2}$ см $^{-1}$. Показано, что для фотонов слабой энергии среди электронных переходов основную роль играют электронные переходы между дефектами и электронные состояния в разрешенных зонах. Поэтому мы применяли определяющие формулы для инфракрасного спектра поглощения электронных переходов между разрешенными зонами и глубокими энергетическими уровнями, а также радиационные дефекты в сетке структуры аморфных полупроводников.

Расчеты, проведенные для определения степенного распределения плотности электронных состояний в разрешенных зонах, показали, что в инфракрасных спектрах поглощения не наблюдается сильно выделяющейся области поглощения. Результаты, полученные из формул (45) и (46), приведены на рис. 11.

Определено, что для соответствия результаты, полученные из формул (45) и (46), и экспериментальные данные значения b должны быть в пределах 60–80

эВ^{-1} . Это значение b значительно больше, чем приведенные в прошлом параграфе для распределения плотности электронных состояний в дефектах. Как известно, инфракрасные спектры поглощения получаются в фотонах меньшей энергии. Поэтому для вычисления коэффициента спектральной характеристики поглощения в этой области надо использовать общий вид формулы Кубо–Гринвуда.

Для упрощения понятия электронные состояния в разрешенных зонах и дефектах считаем невырожденными и вместо распределения Ферми–Дирака записываем распределение Больцмана:

$$1/(1+\exp((\varepsilon-\varepsilon_F)/kT)) \approx \exp(-(\varepsilon-\varepsilon_F)/kT), \quad (47)$$

$$1/(1+\exp((\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega)/kT)) \approx \exp(-(\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega)/kT). \quad (48)$$

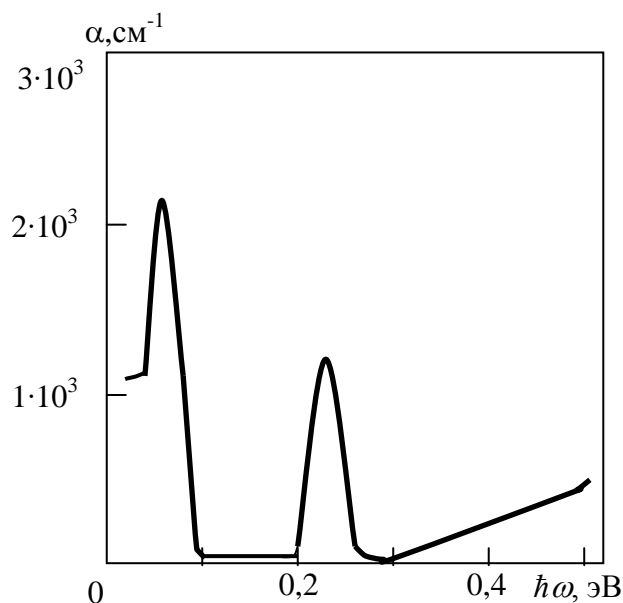
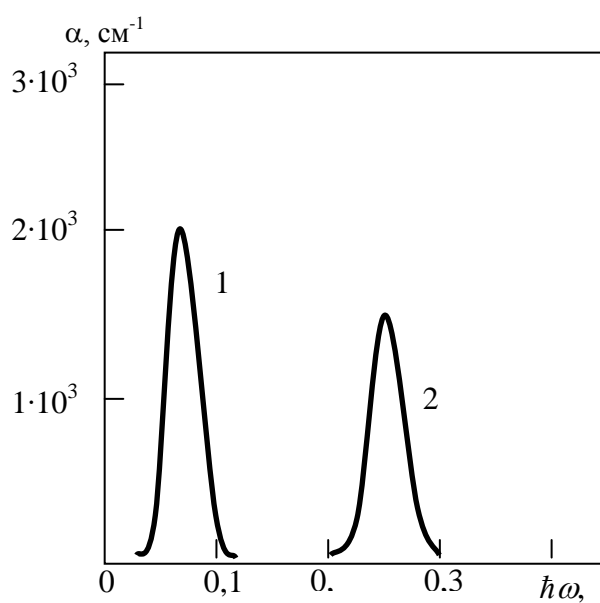


Рис. 10. Инфракрасный спектр поглощения аморфного германия



1- $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V=0,07 \text{ эВ}$, 2. $\varepsilon_{D2}-\varepsilon_V=2,4 \text{ эВ}$
Рис. 11. Инфракрасный спектр поглощения.

Для оптических переходов от валентной зоны к дефектам и от дефекта к зоне проводимости формула Куба–Гринвуда записывается в следующем виде:

$$\alpha = BN(\varepsilon_V)g(\varepsilon_D) \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{\exp(-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT})}{\text{ch}(b(\varepsilon-\varepsilon_V))\text{ch}(b(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} - \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{\exp(-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega}{kT})}{\text{ch}(b(\varepsilon-\varepsilon_V))\text{ch}(b(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (49)$$

$$\alpha = BN(\varepsilon_C)g(\varepsilon_D) \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{\exp(-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F}{kT})}{\text{ch}(b(\varepsilon-\varepsilon_D))\text{ch}(b(\varepsilon-\varepsilon_C+\hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} - \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{\exp(-\frac{\varepsilon-\varepsilon_F+\hbar\omega}{kT})}{\text{ch}(b(\varepsilon-\varepsilon_D))\text{ch}(b(\varepsilon-\varepsilon_C+\hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}. \quad (50)$$

Первый интеграл (49) будем записывать в виде

$$\frac{4Bg(\varepsilon_D)N(\varepsilon_V)}{\hbar\omega} \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{1}{\left(\exp\left(\left(b+\frac{1}{kT}\right)\varepsilon-\frac{\varepsilon_F}{kT}-b\varepsilon_V\right)+\exp\left(-\left(b+\frac{1}{kT}\right)\varepsilon-\frac{\varepsilon_F}{kT}-b\varepsilon_V\right)\right)} \times$$

$$\times \frac{d\varepsilon}{ch(b(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega))} \quad (51)$$

Под интегралом получается выражение $b+1/kT$. Учитывая значение b при комнатной температуре, можно показать, что $b+1/kT=(55-75) \text{ эВ}^{-1}$. Из этого, выбирая значения b с помощью выражений (49) и (50), можно объяснить поглощения, создающие сильные области поглощения инфракрасного спектра. Кроме этого, записывая уравнение Кубо–Гринвуда

$$\alpha = BN(\varepsilon_V)g(\varepsilon_D) \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\hbar\omega)}{ch(b(\varepsilon-\varepsilon_V))ch(b(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (52)$$

$$\alpha = BN(\varepsilon_C)g(\varepsilon_D) \int_{\varepsilon_0-\hbar\omega}^{\varepsilon_0} \frac{f(\varepsilon)-f(\varepsilon+\hbar\omega)}{ch(b(\varepsilon-\varepsilon_D))ch(b(\varepsilon-\varepsilon_C+\hbar\omega))} \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (53)$$

в общем виде выполненные приближительные расчеты показали, что они не сильно отличаются от решений формулы соответственно (50) и (51). Здесь $f(\varepsilon)$ – распределение Ферми–Дирака. Из этого выходит, что область сильного поглощения в инфракрасном спектре поглощения в основном наблюдается при наличии максимумов на границе незапрещенных зон.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе изучения особенностей формирования спектральной характеристики гидрогенизированного аморфного кремния сделаны следующие выводы:

1. Установлена взаимосвязь между функциями плотности электронных состояний разрешенных зон с оптической шириной щели подвижности для прямых и непрямых оптических переходов электрона в фундаментальной области поглощения.

2. Определены условия выполнения правил Урбаха в спектральной зависимости коэффициента оптического поглощения аморфных полупроводников.

3. Установлены зависимости энергии Урбаха от параметра, который определяет кривизну экспоненциальных хвостов разрешенных зон.

4. Выявлено, что энергетическое положение дефектов можно определить из спектров для электронных переходов, где участвуют электронные состояния оборванных связей в структурной сетке образцов аморфных полупроводников.

5. Проведена оценка области инфракрасного поглощения с помощью формулы дефектного поглощения и определены условия формирования сильного поглощения.

**SCIENTIFIC COUNCIL No.PhD.30.08.2018.FM/T. 01.12 ON
AWARD OF THE DEGREE OF DOCTOR OF PHILOSOPHY AT THE
SCIENTIFIC RESEARCH INSTITUTE OF SEMICONDUCTORS
PHYSICS AND MICROELECTRONICS UNDER
THE NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN**

NAMANGAN STATE UNIVERSITY

JALALOV RAVSHANBEK MAHMUDHANOVICH

**FEATURES OF THE FORMATION OF SPECTRAL CHARACTERISTICS
OF HYDROGENIZED AMORPHOUS SILICON**

01.04.10 – Physics of semiconductors

**DISSERTATION ABSTRACT OF THE DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD)
ON PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

Tashkent – 2019

The theme of the doctoral (PhD) dissertation was registered by the Supreme Attestation Commission of the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under No.B2019.2.PhD/FM260.

The doctoral (PhD) dissertation was carried out at Namangan State University.

The abstract of the dissertation was posted in three (Uzbek, Russian, English (resume)) languages on the website of the Scientific Council at www.ispm.uz and on the website of “ZiyoNet” Information and Educational Portal at www.ziynet.uz.

Scientific supervisor:

Zaynobidinov Sirojiddin Zaynobidinovich

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, academician

Official opponents:

Ismaylov Kanatbay Abdurayimovich

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor

Otajanov Salim Madraximovich

Doctor of Physical and Mathematical Sciences

Leading organization:

Tashkent State Technical University

The defense of the doctoral dissertation will be held on “___” _____ 2019, at _____ at the meeting of the Scientific Council No. PhD.30.08.2018.FM/T.01.12 at the Scientific Research Institute of Physics of Semiconductors and Microelectronics under the National University of Uzbekistan (Address: 20 Yangi Olmazor str., 100057 Tashkent city, Uzbekistan. Tel. (+99871) 248-79-94, fax: (+99871) 248-79-92, e-mail: info@ispm.uz, Conference Hall of the SRIPSM under the NUU).

The doctoral dissertation can be looked through in the ICT Implementation Unit (registered under No.____). Address: 20 Yangi Olmazor str., 100057 Tashkent city, Uzbekistan. Tel.: (+99871) 248-79-59, e-mail: info@ispm.uz.

The abstract of the dissertation was distributed on “___” _____ 2019.
(Registry record No. _____ dated “___” _____ 2019)

Sh.B. Utamuradova

Chairman of the Scientific Council
on Award of Scientific Degrees,
Doctor of Physical and Mathematical
Sciences, Professor

S.S. Nasriddinov

Scientific Secretary of the Scientific Council
on Award of Scientific Degrees, Doctor of
Technical Sciences, Assistant Professor

A.T. Mamadalimov

Chairman of the Scientific Seminar of the
Scientific Council on Award of Scientific
Degrees, Doctor of Physical and Mathematical
Sciences, Academician

INTRODUCTION (abstract of the PhD dissertation)

The purpose of the research work: Determining the appearance features of spectral characteristics of the hydrogenated amorphous silicon(a-Si:H).

The object of the research work: Hydrogenated amorphous silicon.

The Scientific novelty of the research is as follows: It is shown that the optical width of the mobility gap of unresolved direct electron transitions depends on the form of the density function of non-localized electronic states at the boundaries of the bands;

Implementation of the research results. Based on the study of the formation characteristics of the spectral characteristics of hydrogenated amorphous silicon:

the established dependences of the Urbach energy on a parameter, which is determined by the density distribution of localized electronic states from one tails of the allowed zones of amorphous semiconductors, the possibility of determining the energy position of defects from the spectra for electronic transitions, which involves electronic states of dangling bonds in the structural grid of amorphous semiconductors samples and derived formation conditions areas of strong absorption in the infrared absorption spectra were used And stock company of "FOTON" in the manufacture of semiconductor electronic devices (Reference number 04-4 / 857 Joint Stock Company "Uzeltechsanoat" on July 4, 2019). The use of scientific results has improved the electrophysical parameters of electronic prototypes.

The method of calculating the width of the optical gap mobility of unresolved direct electronic transitions according to the dependence of the density function of non-localized electronic states at the zone boundaries was used in the implementation of a research project on the topic F2-OT-O-15494 heteroquantum points that increase the efficiency of emitters, photovoltaic cells and other optoelectronic devices (2012 -2016) (Ministry of Higher and Secondary Special Education of the Republic of Uzbekistan) Ref. No. 89-03-2787 from 16.07.2019). By using of research results it is possible to determine the band gap for high-alloy semiconductors.

Publication of the research results. On the theme of the thesis, 16 manuscripts were published, which 6 articles in foreign and the republican journals, and the rest of them are printed in the international and republican conferences.

The structure and volume of the dissertation. The dissertation consists of introduction, four chapters, conclusion and list of used literature. The text of the dissertation is set out on 110 pages.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (Часть I; Part I)

1. С. Зайнобидинов, Р.Г. Икромов, О.О. Маматкаримов, М.А. Нуриддинова, Р.М. Жалалов. Край фундаментального поглощения и плотность электронных состояний в аморфных полупроводниках. *Uzbek J. Phys.*, 2016, Vol.18(№5) PP.311-315. (01.00.00. №5).

2. R.G. Ikramov, M.A. Nuriddinova, R.M. Jalalov. Density of defect states and spectra of defect absorption in a-Si:H. *Ukr. J. Phys.* 2019. Vol. 64, No. 4. pp 315-321. (№3, *Scopus*, *IF*=0.51; <https://www.scopus.com/sourceid/12000154541>). (01.00.00. №51).

3. Zaynobidinov S. , Ikramov R.G. , Nuriddinova M.A. , Jalalov R.M. Spectra of Inter-Band Absorption and Optical Gap of Amorphous Semiconductors. *Journal of Scientific and Engineering Research*, 2019, 6(1):34-39 (№40, https://www.researchgate.net/journal/2394-2630_The_Journal_of_Scientific_and_Engineering_Research, *IF*=0.42).

4. Зайнобидинов С., Икромов Р.Г., Нуриддинова М.А., Жалалов Р.М. Инфракрасные спектры поглощения в аморфных полупроводниках // *Узбекский физический журнал*, 2019, Vol. 15, № 2, с. 88–92 (01.00.00. №5).

5. Икромов Р.Г, Жалалов Р.М., Исманова О.Т., Турдалиев У. Кристал бўлмаган яримўтказгичларнинг рухсат этилган зоналари чегарасидаги электрон ҳолатлари зичлиги тақсимооти ва оптик ютилиш спектрлари. *БухДУ илмий ахбороти*, 2019, N 2, с. 14-17. (01.00.00. №3).

II бўлим (Часть II; partii)

6. Ikramov R.G., Jalalov R.M., Abdulazizov B.T., Holmirzayev O.T., Ortiqova M. Amorf yarim o'tkazgichlarda nuqsonlarni energetik o'rnini va optik yutilish koeffitsienti spektrlari. “Яримўтказгичлар физикаси ва қурилмалари ҳамда уларни ўқитишнинг муаммолари” худудий илмий анжумани материаллари. Наманган, 2013, 71-72 б.

7. Зайнобидинов С., Икромов Р.Г., Нуриддинова М.А., Жалалов Р.М. Метод определения плотности электронных состояний в валентной зоне от спектров дефектного поглощения / Международное конференция по «Оптическим и фотоэлектрическим явлениям в полупроводниковых микро- и наноструктурах». – Фергана, 14-15.11.2014 г. С. 282-283.

8. Зайнобидинов С., Икромов Р.Г., Нуриддинова М.А., Жалалов Р.М. Метод определения плотности электронных состояний в валентной зоне от спектров дефектного поглощения. Профессор А. Т. Тешабоевнинг 90 йиллигига бағишланган “Яримўтказгичлар физикасининг долзарб

муаммолари” Республика илмий-амалий семинари материаллари. ЎзМУ, Тошкент, 2014 й. (39-41 бет).

9. Зайнобидинов С., Икрамов Р.Г., Маматкаримов О.О., Нуриддинова М.А., Ражапов И.Т., Жалалов Р.М. Гидрогенизацияланган аморф кремнийнинг оптик ютилиш спектрларидан ўтказувчанлик зонасидаги электрон ҳолатлари тақсимотини ҳисоблаш усули. Профессор А. Т. Тешабоевнинг 90 йиллигига бағишланган “Яримўтказгичлар физикасининг долзарб муаммолари” Республика илмий-амалий семинари материаллари. ЎзМУ, Тошкент, 2014 й. (11-14 бет)

10. Зайнобидинов С., Икрамов Р.Г., Нуриддинова М.А., Жалалов Р.М. Край фундаментального поглощения в некристаллических полупроводниках. “Физика фанининг ривожиди истеъдодли ёшларнинг ўрни” Ўзбекистон Республикаси олий ва ўрта махсус таълим вазирлиги Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон миллий университети Ўзбекистон Республикаси фанлар академияси ядро физикаси институти. Илмий –амалий конференция мақолалар тўплами 124-126б. Тошкент 2015 йил. 24-25 апрел.

11. Зайнобидинов С., Икрамов Р.Г., Нуриддинова М.А., Жалалов Р.М. Край фундаментального поглощения в аморфных полупроводниках. “Конденсатланган мухитлар физикаси ва физика ўқитишнинг долзарб муаммолари” Республика илмий - амалий семинари. Наманган-2015. 13 июнь. 8-11 с.

12. Зайнобидинов С., Икрамов Р.Г., Маткаримов О.О., Нуриддинова М. А., Жалалов Р.М. Спектры межзонного поглощения и оптическая щель аморфных полупроводников / Сборник тезисов докладов международной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы физики». 5-6 ноября. 2015 г. Академия наук Республики Узбекистан НПО «Физика-Солнце» с. 382–385.

13. Икрамов Р.Г., Нуриддинова М.А., Жалалов Р.М.// Спектры инфракрасного поглощения в некристаллических полупроводниках. V международная конференция. – Самарканд, 22–24 сентября 2016 года // Актуальные проблемы молекулярной спектроскопии конденсированных сред. С. 75-76.

14. Ikramov R.G’., Jalalov R.M.// Amorf yarimo’tkazgich asosli QElari fotovolt-Amper xarakteristikasini xaroratga bog’lanishi// “Конденсатланган мухитлар физикаси ва физика-ўқитишнинг долзарб муаммолари” Халқаро иштирокчилар билан республика илмий-амалий анжумани.// Наманган 2016 й. 126-127б.

15. Икрамов Р.Г., Нуриддинова М.А., Жалалов Р.М., Абдукаримов А.А. Инфракрасные спектры аморфных полупроводников / Материалы международной конференции «Оптические и фотоэлектрические явления в полупроводниковых микро- и наноструктурах». – Фергана, 25-26 мая 2018. С. 302–305.

Автореферат «Тил ва адабиёт таълими» журнали таҳририятида таҳрирдан ўтказилиб, ўзбек ва рус тилларидаги матнлар ўзаро мувофиқлаштирилди.(07.08.2019 йил).

Босишга рухсат этилди 08.08.2019. Ҳажми 3,25 босма табок.
Бичими 60x84 1/16. Адади 70 нусха. Буюртма 162.
М.Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий Университети
босмахонасида чоп этилди.

