

ЭНЕРГИЯ УРБАХА И ХВОСТЫ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Зайнобидинов С., *Икрамов¹ Р.Г., Жалалов¹ Р.М.

Андижанский Государственный Университет,

¹Наманганский Государственный Университет,

716019, ул. Уйчинская 316, Наманган, Узбекистан,

E-mail: rgikramov@mail.ru

Аннотация: Получены выражения, устанавливающие зависимость энергии Урбаха и параметров определяющих наклон экспоненциальных хвостов валентной зоны и зоны проводимости аморфных полупроводников. Показано, что значение энергии Урбаха остается постоянным, несмотря на варьирования в большом интервале одного из параметров определяющих наклон экспоненциальных хвостов валентной зоны или зоны проводимости.

Ключевые слова: Аморфные полупроводники, распределения плотности электронных состояний, формула Кубо-Гринвуда, метод приближения Дэвиса-Мотта, типы оптических электронных переходов, **спектр поглощения**, энергия Урбаха.

ВВЕДЕНИЕ: Как известно, спектр поглощения аморфных полупроводников имеет область, где выполняется правило Урбаха [1-4]:

$$\alpha(\hbar\omega) = \alpha_0 \exp\left(\frac{\hbar\omega}{E_U}\right). \quad (1)$$

Появление этой области предписывают на экспоненциальное распределение плотности локализованных состояний хвостов разрешенных зон [3]. Но в работе [2] приведены, сомнения достоверности этого предположения, поскольку значения энергии Урбаха, получаемые из эксперимента, являются приблизительно равными для многих некристаллических полупроводников. Из этого следует, что распределения электронных состояний хвостов разрешенных зон во всех некристаллических полупроводниках, должны иметь сходный вид. В самом деле, такой вывод недостоверен.

В настоящей работе, для выяснения этого разногласия проанализированы зависимости энергии Урбаха от параметров определяющих распределения электронных состояний в экспоненциальных хвостах валентной зоны и зоны проводимости аморфных полупроводников.

РАСЧЕТ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ: Как известно, коэффициент поглощения, образуется суммой значений парциальных спектров поглощения обусловливаемых разнотипными электронными переходами возникающих, при поглощении фотонов с энергией $\hbar\omega$:

$$\alpha(\hbar\omega) = \sum_i \alpha_i(\hbar\omega), \quad (2)$$

поэтому, их можно рассматривать и по отдельности [5].

В области **спектра поглощения**, где выполняется правило Урбаха $\hbar\omega < E_g$, если не учитывать оптические переходы, где участвуют электронные состояния, расположенные в дефектах (оборванных связях, легирующих примесях и т.д.). Эти фотоны могут, совершить следующие электронные переходы:

1. От хвоста валентной зоны в зону проводимости- $\alpha_1(\hbar\omega)$.
2. От хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости- $\alpha_2(\hbar\omega)$.
3. От валентной зоны в хвост зоны проводимости- $\alpha_3(\hbar\omega)$ [6, 7].

Поэтому:

$$\alpha(\hbar\omega) = \alpha_1(\hbar\omega) + \alpha_2(\hbar\omega) + \alpha_3(\hbar\omega). \quad (3)$$

Спектральную характеристику коэффициента оптического поглощения будем вычислять по «формуле Кубо-Гринвуда» [2] которую можно выразить в виде, когда $\hbar\omega \gg kT$:

$$\alpha(\hbar\omega) = C \int_{\varepsilon_0 - \hbar\omega}^{\varepsilon_0} g(\varepsilon) g(\varepsilon + \hbar\omega) |D|^2 \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} \quad (4)$$

где C -коэффициент пропорциональности независимый от частоты поглощенного фотона, ε_0 - энергетическое положение пересечения хвостов валентной зоны и зоны проводимости, $|D|^2$ -дисперсия матричного элемента электронных переходов. $g(\varepsilon)$ - и $g(\varepsilon + \hbar\omega)$ - значения распределения плотности состояний соответствующие начальным и конечным состояниям электронов участвующих в оптических переходах при поглощении фотона с энергией $\hbar\omega$.

Как известно, плотности электронных состояний расположенные в разрешенных зонах имеют степенную зависимость от энергии [2, 3]. Используя результаты работы [7, 8] их будем выбирать в следующих видах: для валентной зоны

$$g(\varepsilon) = N_v \left(\frac{\varepsilon_c - \varepsilon}{E_g} \right)^n \quad \text{при } \varepsilon \leq \varepsilon_v, \quad (5)$$

а для зоны проводимости

$$g(\epsilon) = N(\epsilon_C) \left(\frac{\epsilon - \epsilon_V}{E_g} \right)^n \text{ при } \epsilon_C \leq \epsilon, \quad (6)$$

где ϵ_V - край валентной зоны, ϵ_C - край зоны проводимости, $N(\epsilon_V)$ - и $N(\epsilon_C)$ - эффективные значения плотности состояний в валентной зоне и в зоне проводимости, степень n - может принимать значение 0, $\frac{1}{2}$ и 1.

Распределение плотности локализованных состояний в хвостах валентной зоны и зоны проводимости имеют экспоненциальную зависимость от энергии в виде:

$$g(\epsilon) = N(\epsilon_V) \exp(\beta_1(\epsilon - \epsilon_V)), \text{ при } \epsilon_V < \epsilon < \epsilon_0, \quad (7)$$

$$g(\epsilon) = N(\epsilon_C) \exp(\beta_2(\epsilon - \epsilon_C)), \text{ при } \epsilon_0 < \epsilon < \epsilon_C, \quad (8)$$

где β_1 - и β_2 - параметры, определяющие наклоны экспоненциальных хвостов валентной зоны и зоны проводимости [6, 7, 9].

Теперь переходим непосредственно, к расчетам спектров коэффициента поглощения по формуле (4). Чтобы получить аналитические решения будем использовать метод приближения Дэвиса-Мотта. Как известно, настоящий метод основан на том, что дисперсия матричного элемента электронных переходов являются постоянными для электронных переходов одного типа [2, 9]. Имея в виду это и используя результаты [6, 7], формулу (4) расчленим на три компоненты, соответствующие парциальным коэффициентам поглощения, определяемые выше приведенными электронными переходами:

$$\alpha(\hbar\omega) = \alpha_1(\hbar\omega) + \alpha_2(\hbar\omega) + \alpha_3(\hbar\omega) = B_1 \int_{\epsilon_C - \hbar\omega}^{\epsilon_0} g(\epsilon)g(\epsilon + \hbar\omega) \frac{d\epsilon}{\hbar\omega} + \\ + B_2 \int_{\epsilon_V}^{\epsilon_C - \hbar\omega} g(\epsilon)g(\epsilon + \hbar\omega) \frac{d\epsilon}{\hbar\omega} + B_3 \int_{\epsilon_0 - \hbar\omega}^{\epsilon_V} g(\epsilon)g(\epsilon + \hbar\omega) \frac{d\epsilon}{\hbar\omega}, \quad (9)$$

где $B_1 = C \cdot |D_1|^2$, $B_2 = C \cdot |D_2|^2$, $B_3 = C \cdot |D_3|^2$ и $|D_1|^2$ -, $|D_2|^2$ -, $|D_3|^2$ - дисперсии матричных элементов выше приведенных электронных переходов.

Учитывая типы электронных переходов и соответствующие им распределения плотности электронных состояний по формуле (9) получим следующие выражения: для постоянных разрешенных зон, т.е. когда $n=0$:

$$\alpha_1(\hbar\omega) = \frac{A_1}{\hbar\omega\beta_1} \exp(\beta_1(\hbar\omega - E_g)) \exp(\beta_1(\epsilon_0 - \epsilon_V)), \quad (10)$$

$$\alpha_2(\hbar\omega) = \frac{A_2}{\hbar\omega(\beta_2 - \beta_1)} \exp(\beta_1(\hbar\omega - E_g)) - \exp(\beta_2(\epsilon_C - \beta_1(\hbar\omega - E_g))), \quad (11)$$

$$\alpha_3(\hbar\omega) = \frac{A_3}{\hbar\omega\beta_2} \exp\left\{\beta_2(\hbar\omega - E_g)\right\} \exp\left\{\beta_2(\epsilon_c - \epsilon_0)\right\}. \quad (12)$$

где $A_1=B_1N(\epsilon_v)N(\epsilon_c)$, $A_2=B_2N(\epsilon_v)N(\epsilon_c)$ и $A_3=B_3N(\epsilon_v)N(\epsilon_c)$.

Чтобы определить значения дисперсии матричных элементов этих электронных переходов, произведены сравнения парциальных спектров коэффициента поглощения, полученные из (10)-(12) и экспериментальных результатов приведенных в работах [2, 10] для аморфного селена (рис.1). Расчеты показали, что соответствия этих результатов выполняются только тогда, когда $A_1 \approx A_2 \approx A_3 \approx 2,5 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$. Из этого следует что, $|D_1|^2 \approx |D_2|^2 \approx |D_3|^2$.

Рис.1

На рис. 2 показаны парциальные спектры коэффициента поглощения, полученные из (10)-(12). Оказывается, значения коэффициента поглощения ($\alpha(\hbar\omega)$), в основном определяет компонента коэффициента поглощения устанавливаемая электронными переходами между локализованными состояниями хвостов валентной зоны и зоны проводимости ($\alpha_2(\hbar\omega)$).

Рис.2

Когда распределения плотности электронных состояний в разрешенных зонах имеют, линейную ($n=1$) и параболическую ($n=1/2$) зависимость от энергии, $\alpha_2(\hbar\omega)$ имеет одинаковый вид с (11). Потому, что в этих оптических переходах не участвуют электронные состояния в валентной зоне и в зоне проводимости. Для остальных компонентов коэффициента поглощения, когда $n=1$ получены следующие выражения:

$$\alpha_1(\hbar\omega) = \frac{A_1}{E_g \hbar\omega \beta_1} \left[\left(E_g + \frac{1}{\beta_1} \right) \exp\left\{\beta_1(\hbar\omega - \epsilon_c - \epsilon_0)\right\} \exp\left\{\beta_1(\epsilon_0 - \epsilon_v + \frac{1}{\beta_1} + \hbar\omega)\right\} \right]^* \quad (13)$$

$$* \exp\left\{\beta_1(\epsilon_0 - \epsilon_v)\right\}$$

$$\alpha_3(\hbar\omega) = \frac{A_3}{E_g \hbar\omega \beta_2} \left[\left(E_g + \frac{1}{\beta_2} \right) \exp\left\{\beta_2(\hbar\omega - \epsilon_0 - \epsilon_v)\right\} \exp\left\{\beta_2(\epsilon_c - \epsilon_0 + \frac{1}{\beta_2} + \hbar\omega)\right\} \right]^* \quad (14)$$

$$* \exp\left\{\beta_2(\epsilon_c - \epsilon_0)\right\}$$

Если разрешенные зоны параболические ($n=1/2$) то не возможно получить аналитические решения парциальных спектров коэффициента поглощения оптических переходов. Поэтому, эти спектры поглощения получены путем численных методов. Расчеты этих спектров показали, что они имеют одинаковый вид со спектрами (13) и (14). Это показывает, что распределения плотности электронных состояний расположенных в разрешенных зонах имеют степенную зависимость, независимо от значений этих степеней спектров поглощения в основном обуславливается компонентой, определяемые электронными переходами между хвостами валентной зоны и зоны проводимости, когда

$\hbar\omega < E_g$. Поэтому аналитическое выражение зависимости E_U от β_1 и β_2 можно написать следующим образом

$$E_U = \alpha_2(\hbar\omega) \left(\frac{d(\alpha_2(\hbar\omega))}{d(\hbar\omega)} \right)^{-1}. \quad (15)$$

Дифференцируя $\alpha_2(\hbar\omega)$ по $\hbar\omega$ получим

$$\frac{d\alpha_2}{d(\hbar\omega)} = \frac{A_2}{\beta_2 - \beta_1} \exp\left\{ \beta_1(\hbar\omega - E_g) \right\} \left[\beta_1 \hbar\omega - 1 \right] - \beta_2 \hbar\omega - 1 \exp\left\{ \beta_2 - \beta_1(\hbar\omega - E_g) \right\}. \quad (16)$$

Видно, что из (15) имея ввиду (11) и (16) можно получить формулу для энергии Урбаха (E_U), зависящую только от наклона хвостов плотности состояний (β_1 и β_2) и ширины щели подвижности (E_g). Как известно, в некристаллических полупроводниках значения плотности состояний хвоста валентной зоны намного больше плотности состояний хвоста зоны проводимости, т.е. $\beta_1 < \beta_2$ [4, 9]. Учитывая, что $\hbar\omega < E_g$ и $\exp((\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega - E_g)) \ll 1$ для предельного значения энергии Урбаха получаем зависимость в следующем виде:

$$E_U \approx \frac{1}{\beta_1 - \beta_2 \exp((\beta_2 - \beta_1)(\hbar\omega - E_g)) - 1/\hbar\omega} > \frac{1}{\beta_1}, \quad (17)$$

если $\beta_1 > \beta_2$ тогда из формулы (15) получим

$$E_U \approx \frac{1}{\beta_2 - \beta_1 \exp((\beta_1 - \beta_2)(\hbar\omega - E_g)) - 1/\hbar\omega} > \frac{1}{\beta_2}. \quad (18)$$

Рис.3

В работе [11] показано, что если параметры, определяющие наклоны экспоненциальных хвостов разрешенных зон представлены в виде $E_1 = 1/\beta_1$ и $E_2 = 1/\beta_2$, тогда зависимость энергии Урбаха от этих параметров имеет более прозрачный физический смысл. Имея в виду это в выражениях (17) и (18) произведены эти замены и получены расчетные данные, зависимости энергии Урбаха от параметров определяющих наклоны экспоненциальных хвостов валентной зоны и зоны проводимости, когда $E_g = 1.8$ эВ = const и $\hbar\omega = 1.6$ эВ. Эти расчеты показали, что когда выполняется одно из условий $E_1 \gg E_2$ или $E_1 \ll E_2$ происходит насыщение энергии Урбаха (рис.3, участок А). Поэтому, энергия Урбаха в большом интервале значений E_1 или E_2 остается почти постоянным.

Эти результаты показывают, что энергию Урбаха определяет хвост разрешенной зоны, имеющий плавный наклон. Для энергии Урбаха всегда выполняется одно из условий $E_U < E_1$ или $E_U < E_2$. Из этого следуют, что некристаллические полупроводники с разными локализованными состояниями расположенные в хвостах валентной зоны и зоны проводимости могут иметь приблизительно равные энергии Урбаха.

ВЫВОДЫ: В настоящей работе получено выражение зависимости энергии Урбаха от параметров, определяющих наклоны экспоненциальных локализованных состояний расположенные в хвостах валентной зоны и зоны проводимости аморфных полупроводников.

Показано, что энергия Урбаха может оставаться постоянным при варьировании в большом интервале значений параметров определяющих наклоны локализованных состояний. Показано также, что энергию Урбаха определяет локализованные электронные состояния, расположенные в хвостах валентной зоны и зоны проводимости наклон, которых является наиболее плавным.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. **F. Urbach.** Phys. Rev., **92**, (1953) 1324-1333.
2. **Н. Мотт, Э. Дэвис.** Электронные процессы в некристаллических веществах, T1 (М. Мир, 1982) 368 с.
3. *Аморфные полупроводники* под ред. **М. Бродски** (М., Мир, 1982) 419 с.
4. **S. Yamasaki, O. Hidetoshi, A. Matsuda.** Jap. J. Appl. Physic., **21** N9, (1982) L539-L542.
5. **П.С. Киреев.** Физика полупроводников, М., Высшая Школа, (1969) 590 с.
6. **S. Zainobidinov, R.G. Ikramov, M.A. Nuritdinova, R.M. Zhalalov.** Ukr. J. Phis., **53**, N12 (2008) 1178-1182.
7. **Zainobidinov S., Ikramov R.G., Nuritdinova M.A., Zhalalov R.M.** Ukr. J. Phis., **53**, N8 (2008) 791-794.
8. **А. А. Андреев, М. С. Шлимак.** В книге *Фотоприемники и фотопреобразователи. Сборник научных трудов АН СССР ФТИ им. А.Ф. Иоффе* (Ленинград, Наука, 1986) 222 с.
9. **M. Vanesek, A. Abraham, O. Stika, J. Stuchlik and J. Kochka.** Phys. Stat. Sol (A). **83**, (1984) 617-621.
10. **J. L. Hartke, P.J. Regensburger.** Phys. Rev. **139**, (1965) A970-A975.
11. **Кононенко В.К.** ЖПС, **41**, N1 (1984) 106–110

Подписи к рисункам статьи авторов Зайнобидинова С., Икрамова Р.Г., Жалалова Р.М. на тему «Энергия Урбаха и хвосты плотности состояний аморфных полупроводников»

Рис. 1. Парциальные спектральные характеристики коэффициента поглощения аморфного селена, полученные из эксперимента [2, 10] определяемые оптическими переходами 1-хвост-хвост, 2-хвост-разрешенная зона.

Рис. 2. Парциальные спектральные характеристики коэффициента поглощения аморфных полупроводников полученные по формулам (11), (12) и (13). Когда $\beta_1=16 \text{ эВ}^{-1}$, $\beta_2=25 \text{ эВ}^{-1}$ $\varepsilon_C-\varepsilon_0=0,7 \text{ эВ}$, $\varepsilon_0-\varepsilon_V=1,1 \text{ эВ}$, $E_g=1,8 \text{ эВ}$. 1- от хвоста валентной зоны в зону проводимости ($\alpha_1(\hbar\omega)$). 2-от хвоста валентной зоны в хвост зоны проводимости ($\alpha_2(\hbar\omega)$). 3- от валентной зоны в хвост зоны проводимости ($\alpha_3(\hbar\omega)$).

Рис. 3. Зависимость значений энергии Урбаха от параметра определяющий наклон экспоненциального хвоста валентной зоны (E_1) когда $E_g=1.8 \text{ эВ}=\text{const}$ и $\hbar\omega=1.6 \text{ эВ}$. 1 - $E_2=50 \text{ мэВ}$, 2 - $E_2=40 \text{ мэВ}$, 3 - $E_2=31.25 \text{ мэВ}$. A – участок насыщения.

Рис.1 статьи авторов Зайнобидинова С., Икрамова Р.Г., Жалалова Р.М. на тему «Энергия Урбаха и хвосты плотности состояний аморфных полупроводников»

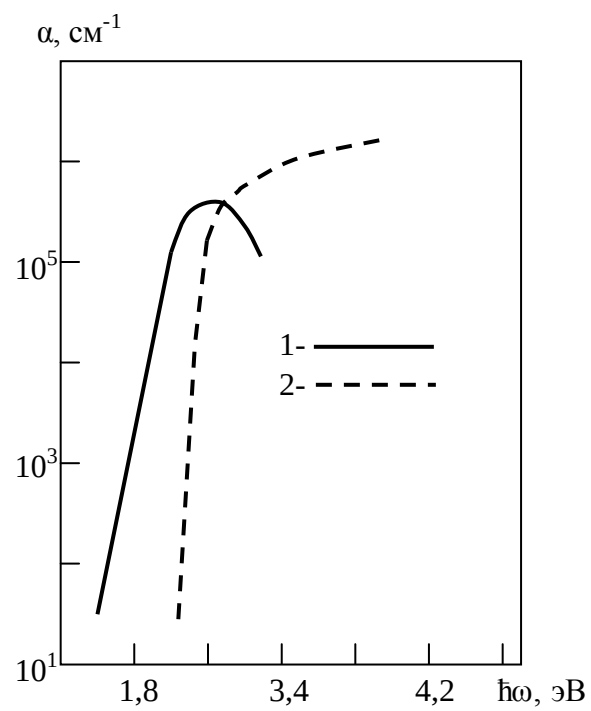


Рис.2 статьи авторов Зайнобидинова С., Икрамова Р.Г., Жалалова Р.М. на тему «Энергия Урбаха и хвосты плотности состояний аморфных полупроводников»

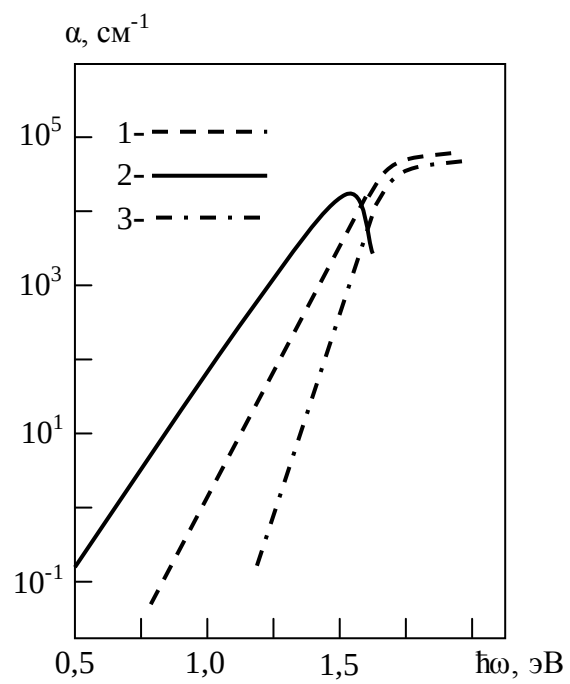
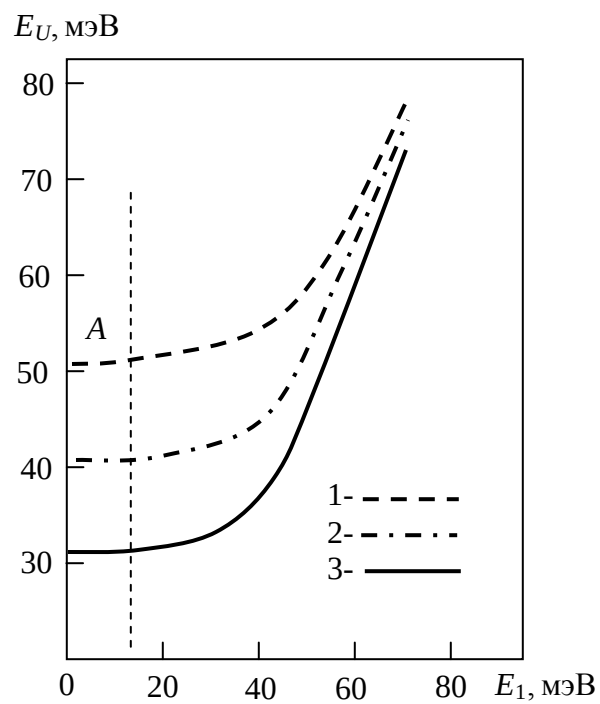


Рис.3 статьи авторов Зайнобидинова С., Икрамова Р.Г., Жалалова Р.М. на тему «Энергия Урбаха и хвосты плотности состояний аморфных полупроводников»



Приложение

Зайнобидинов С.-д.ф.-м.н., профессор, Андижанский Государственный Университет,
710020, ул. Университетская 129 г. Андижан, Узбекистан.
Тел. (8-374)-250-03-30, +998742256130

Икрамов Р.Г. –к.ф.-м.н., доцент, Наманганский Государственный Университет,
716019, ул. Уйчинская 316, Наманган, Узбекистан.
Тел. +998902181430

Жалалов Р.М-аспирант, Наманганский Государственный Университет,
716019, ул. Уйчинская 316, Наманган, Узбекистан.
Тел. +998697001533

URBACH ENERGY AND TAILS OF THE DENSITY OF STATES OF AMORPHOUS SEMICONDUCTORS

Zaynobidinov S., *Ikramov¹ R.G., Jalalov¹ R.M.

Andijan state university,

¹Namangan state university,

716019, Uychi st. 316, Namangan, Uzbekistan

E-mail: rgikramov@mail.ru

Abstract: The new formulas establishing dependence of Urbach energy and parameters determining inclination exponential tails of a valence and conduction bands of amorphous semiconductors are received. Is shown, that the meaning of Urbach energy remains constant, despite of variations in the large interval of one of parameters determining of an inclination exponential tails of a valence and conduction bands.

Key words: Amorphous semiconductors, distributions of density of electronic states, formula Kubo-Greenwood, method of Davis-Mott approximation, types of electronic optical transitions, spectral characteristics, Urbach energy.