

Sultonov Bobur Qobuljon o'g'li
Namangan muxandislik-texnologiya instituti tayanch doktoranti
Email: b.sultonov2021@mail.ru

KUBO-GRINVUD FORMULASIDAGI ANIQMAS INTEGRALNI ANIQ INTEGRAL KO'RINISHGA KELTIRISH

Annotatsiya: Zonalararo yutilish spektri uchun Devis-Mott yaqinlashish usuliga ko'ra yozilgan Kubo-Grinvud formulasidagi aniqmas integralni aniq integralga keltirishning yangi usuli taklif qilingan. Shu usulga ko'ra elektron holatlari zichligining taqsimotlari darajali bo'lganda zonalararo yutilish spektrlarini analitik ko'rinishi aniqlagan. Bu zonalararo yutilish spektrlari tajribalardan aniqlangan spektrlarni tushuntira olishi ko'rsatilgan.

Kalit so'zlar: Kubo-Grinvud formulasi, Devis-Mott yaqinlashish usuli, ruxsat etilgan zonalar, elektron holatlari zichligining taqsimoti, zonalararo yutilish spektrlari.

Султонов Бобур Қобулжон ўғли
Наманганский инженерно-технологический институт докторант PhD

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ НЕОПРЕДЕЛЁННОГО ИНТЕГРАЛА В ОПРЕДЕЛЁННЫЙ В ФОРМУЛЕ КУБО-ГРИНВУДА.

Аннотация: Предложен новый метод преобразования неопределенного интеграла в формуле Кубо-Гринвуда, записанной по методу аппроксимации Дэвиса-Мотта для спектра межзонного поглощения, в точный интеграл. С помощью этого метода определялся аналитический вид спектров межзонного поглощения при градуировке распределений плотности электронных состояний. Показано, что эти спектры межзонного поглощения могут объяснить экспериментально определенные спектры.

Ключевые слова: Формула Кубо-Гринвуда, приближение Дэвиса-Мотта, разрешенные зоны, распределение плотности электронных состояний, спектры межзонного поглощения.

Sultonov Bobur Qobuljon o'g'li
Namangan Engineering and Technological Institute PhD, student

TRANSFORMATION OF AN INDEFINITE INTEGRAL INTO A DEFINITE ONE IN THE KUBO-GREENWOOD FORMULA.

Annotation: *A new method for transforming the indefinite integral in the Kubo-Greenwood formula, written using the Davis-Mott approximation method for the interband absorption spectrum, into an exact integral is proposed. Using this method, the analytical form of the interband absorption spectra was determined when calibrating the distributions of the density of electron states. It is shown that these interband absorption spectra can explain the experimentally determined spectra.*

Key words: *Kubo-Greenwood formula, Davis-Mott approximation, allowed bands, distribution of the density of electron states, interband absorption spectra.*

Kubo-Grinvud formulasini Devis-Mott yaqinlashish usuliga ko‘ra zonalararo yutilish koeffisiyenti uchun quyidagi ko‘rinishda yoziladi [1]:

$$\alpha(\hbar\omega) = C \int \frac{C_1(\varepsilon_B - \varepsilon)^p C_2(\varepsilon - \varepsilon_A + \hbar\omega)^s}{\hbar\omega} d\varepsilon. \quad (1)$$

(1) formuladagi integral aniqmas bo‘lganligi uchun, uni xususiy yechimini olish mumkin emas. Shu ishni o‘zida bu integralni aniq integral ko‘rinishida ifodalash uchun quyidagi almashtirishdan foydalanilgan:

$$y = \frac{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon}{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon_B}, \quad 0 \leq y \leq 1, \quad (2)$$

bu yerda ε_A -o‘tkazuvchanlik zonasining quyi chegarasi va ε_B valent zonaning yuqori chegarasiga to‘g‘ri kelganligi uchun $\varepsilon_A = \varepsilon_C$, $\varepsilon_B = \varepsilon_V$, $\varepsilon_A - \varepsilon_B = E_g$. Bu yerda E_g harakatchanlik tirqishining energetik kengligi.

(2) almashtirishdan foydalanib quyidagi ifoda olingan:

$$\alpha(\hbar\omega) = C \frac{(\hbar\omega - E_g)^{p+s+1}}{\hbar\omega} \int (1-y)^p y^s dy. \quad (3)$$

Bizningcha (1) formuladagi integralni (2) ifodadan foydalanib aniq integral ko‘rinishda ifodalash mumkin.

Buning uchun (2) ifodadan $y=0$ ga teng bo‘lganda (1) formuladagi integralni quyi chegarasi uchun

$$0 = \frac{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon}{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon_B}, \quad \varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon = 0, \quad \varepsilon = \varepsilon_A - \hbar\omega, \quad (4)$$

ifodani olishimiz mumkin. Shu integralni yuqori chegarasi uchun esa, $y=1$ ga teng deb (2) dan

$$1 = \frac{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon}{\varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon_B}, \quad \varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon = \varepsilon_A - \hbar\omega - \varepsilon_B, \quad \varepsilon = \varepsilon_B, \quad (5)$$

ifodani olamiz.

Bulardan foydalanib (1) formulani quyidagi ko'rinishda yozamiz:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{C}{\hbar\omega} \int_{\varepsilon_A - \hbar\omega}^{\varepsilon_B} (\varepsilon_B - \varepsilon)^p (\varepsilon - \varepsilon_A + \hbar\omega)^s d\varepsilon. \quad (6)$$

(3) formuladagi integral bilan (6) formuladagi integrallar teng kuchli bo'lganligi uchun, agar p va s lar ma'lum bo'lsa, (6) zonalararo yutilish spektrining analitik yechimini olish mumkin.

1. $p = 1/2$ va $s = 1/2$ bo'lganda, [2] dan foydalanib quyidagi ifodani olish mumkin:

$$\begin{aligned} \alpha(\hbar\omega) &= C \int_{\varepsilon_A - \hbar\omega}^{\varepsilon_B} \frac{(\varepsilon_B - \varepsilon)^{1/2} (\varepsilon - \varepsilon_A + \hbar\omega)^{1/2}}{\hbar\omega} d\varepsilon = \\ &= \frac{C}{4\hbar\omega} (2(\hbar\omega - E_g) \sqrt{E_g \hbar\omega} + (E_g + \hbar\omega)^2 \arctg(\frac{E_g - \hbar\omega}{\sqrt{4E_g \hbar\omega}})) \end{aligned} \quad (7)$$

2. $p = 1/2$ va $s = 1$, bo'lganda, [3] dan foydalanib:

$$\begin{aligned} \alpha(\hbar\omega) &= \frac{C}{\hbar\omega} \int_{\varepsilon_A - \hbar\omega}^{\varepsilon_B} (\varepsilon_B - \varepsilon)^{1/2} (\varepsilon - \varepsilon_A + \hbar\omega)^1 d\varepsilon = \\ &= \frac{2C}{15\hbar\omega} (5(\hbar\omega + E_g)(\sqrt{(\hbar\omega)^3} - \sqrt{E_g^3}) - 3(\sqrt{(\hbar\omega)^5} - \sqrt{E_g^5})) \end{aligned} \quad (8)$$

3. $p = 1$ va $s = 1/2$ bo'lganda:

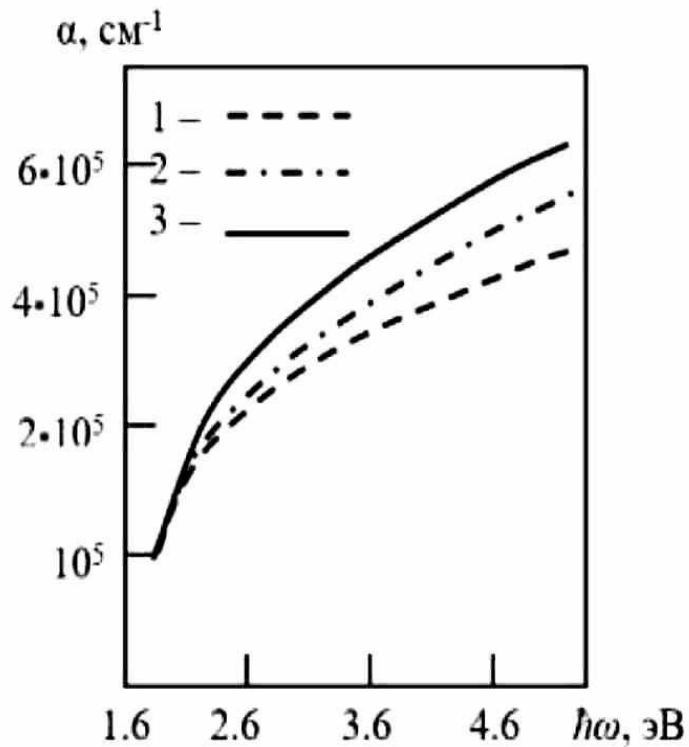
$$\begin{aligned} \alpha(\hbar\omega) &= \frac{C}{\hbar\omega} \int_{\varepsilon_A - \hbar\omega}^{\varepsilon_B} (\varepsilon_B - \varepsilon)^1 (\varepsilon - \varepsilon_A + \hbar\omega)^{1/2} d\varepsilon = \\ &= \frac{2C}{15\hbar\omega} (5(\hbar\omega + E_g)(\sqrt{(\hbar\omega)^3} - \sqrt{E_g^3}) - 3(\sqrt{(\hbar\omega)^5} - \sqrt{E_g^5})) \end{aligned} \quad (9)$$

(8) va (9) ifodalardan ko'rinadiki, ruxsat etilgan zonalaridagi elektron holatlari zichligi taqsimotlari darajali bo'lganda, bu darajalarni o'rni almashishi zonalararo yutilish spektrining analitik ifodasiga ta'sir qilmas ekan.

4. $p=1$ va $s=1$ bo'lganda esa:

$$\begin{aligned}\alpha(\hbar\omega) &= \frac{C}{\hbar\omega} \int_{\varepsilon_A - \hbar\omega}^{\varepsilon_B} (\varepsilon_B - \varepsilon)^1 (\varepsilon - \varepsilon_A + \hbar\omega)^1 d\varepsilon = \\ &= \frac{C}{6\hbar\omega} (\hbar\omega - E_g)(E_g^2 + 4\hbar\omega E_g + (\hbar\omega)^2)\end{aligned}\quad (10)$$

Amorf gidrogenizatsiyalangan kremiy ($a\text{-Si:H}$) uchun hisoblangan (7), (8) va (10) zonalararo yutilish spektrlarining grafiklari 1- rasmda keltirilgan. Bu hisoblashlarni bajarishda [4] ishda olingan natijalarga asoslanib $E_g=1.8$ eV va $C=2.5\cdot 10^5 \text{ sm}^{-1}$ teng bo'ladi deb olindi. Hisoblashlarni bajarishda reper nuqta sifatida, yutilgan fotonlarni energiyasi $\hbar\omega=E_g=1.8$ eV ga teng bo'lganda, $\alpha(\hbar\omega)=5\cdot 10^5 \text{ sm}^{-1}$ ga teng bo'ladi deb olindi. Rasmdan ko'rish mumkinki, bu spektrlarni barchasi qavariq bo'lib, tajriba natijalariga mos keladi. Bundan tashqari, ruxsat etilgan zonalaridagi elektron holatlari zichligi taqsimotning darajasi kattalashib borgan sari zonalararo yutilish koeffitsiyentining qiymatlari ham kattalashib borar ekan. Bundan ko'rinadiki, Kubo-Grinvud formulasidan zonalararo optik yutilish koeffitsiyenti spektrini hisoblashda, bu formuladagi integral aniq integral bo'lishi kerak ekan.

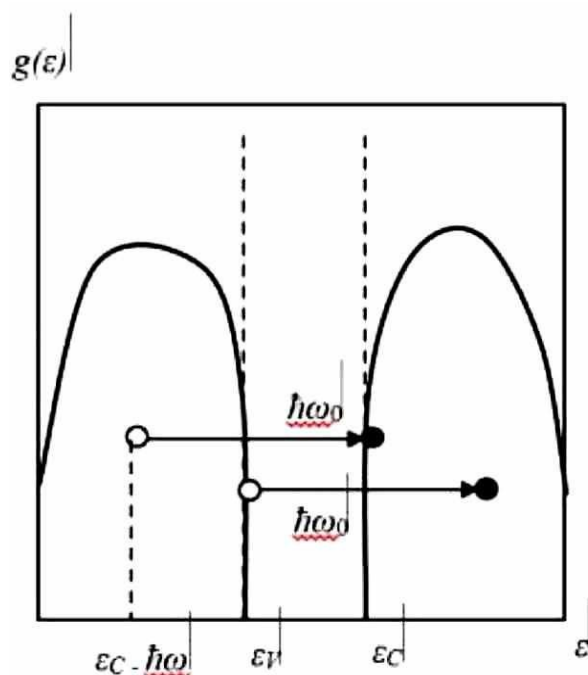


1 - rasm. Amorf gidrogenizatsiyalangan kremiy (a-Si:H) uchun (7), (8) va (10) formulalardan hisoblangan zonalararo yutilish spektrlari.

Endi Kubo-Grinvud formulasidagi aniq integralni chegarasi qanday aniqlanishini qarab chiqamiz. Buning uchun elektron holatlari zichligi taqsimotini Tausning empirik modeli [5] ko‘rinishida tanlaymiz. Bu modelga ko‘ra, amorf yarimo‘tkazgichlarni ruxsat etilgan zonalarini dumlari hisobga olinmaydi.

$$g_V(\varepsilon) = C_1 \begin{cases} 0, & \varepsilon < \varepsilon_V \\ \exp\left(-\frac{\varepsilon - \varepsilon_V}{\Delta}\right), & \varepsilon > \varepsilon_V \end{cases}$$

Shuning uchun elektronlarni faqat valent zonadan o‘tkazuvchanlik zonasiga optik o‘tishlari sodir bo‘ladi. Ma’lumki, buning uchun yutilgan fotonlarni energiyasi harakatchanlik tirqishining energetik kengligidan kichik bo‘lmasligi kerak ($\hbar\omega_0 \geq E_g$). Bu optik o‘tishda ishtirok etuvchi eng katta energetik holatdagi elektron valent zonani yuqori chegarasida joylashgan bo‘ladi. $\hbar\omega_0$ energiyali fotonlar yutilganda eng kichik energetik holatdagi elektron esa, o‘tkazuvchanlik zonasining quyi chegarasidagi energetik holatga ($\varepsilon_C - \hbar\omega_0$) o‘tadi (2-rasm).



2-rasm. Taus modeliga ko'ra $\hbar\omega_0$ energiyali fotonlar yutilganda mumkin bo'lgan elektronlarni optik o'tishlari.

Shuning uchun, Kubo – Grinvud formulasidan zonalararo yutilish koeffitsiyentini hisoblashda, bu formuladagi aniq integralni yuqori chegarasi valent zonaning yuqori chegarasiga (ε_V) , quyi chegarasi esa $\varepsilon_C - \hbar\omega_0$ energetik holatga mos keladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

[1]. Ikramov R.G, Mamaxanov A.A, Nuriddinova M.A, Jalolov R.M, Mo'minov H.A, Sultonov B.Q. Calculation of the interband absorption spectra of amorphous semiconductors using Kubo-Greenwood Formula // *Journal of Applied Science and Engineering*. 2021 Vol. 25, Iss.5, pp.769.

[2]. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и авиастроителей. М. наук, гл. Эд. Физ. МЭТТ. Лит. 544 г. (1986).

[3]. Ikramov R.G, Nuriddinova M.A, Muminov Kh.A, Sultonov B.Q, Holmirzaev O.T. Kubo-greenwood formulafor the exponential absorption region of amorphous semiconductors and distribution of the density of electronic states in the tail of the conduction band // *Journal of Applied Science and Engineering*. 2022 Vol.26, Iss.5, pp.1172.

[4]. Zaynobidinov S., Ikramov R.G., Jalalov R.M., Nuritdinova M.A. //Optika i spektroskopiya. T. 110, № 5. b. 813. (2011).

[5]. Taus J. The optical properties of solid (ed F. Abeles). North-Holland, Amsterdam. 1026 p. (1972).