

РАСЧЕТ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ДЕФЕКТАХ АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

Р.Г.Икрамов, М.А.Нуриддинова, О.Т.Холмирзаев, Б.К.Султонов, У.П.Рашидов¹

Наманганский инженерно-технологический институт,

¹Наманганский государственный университет

e-mail: rgikramov@mail.ru

Аннотация. В настоящей работе предлагается, новый метод определения плотности дефектных состояний аморфных полупроводников. Показано, что, если имеется экспериментальные данные кривая спектра оптического поглощения аморфного полупроводника, используя, этого спектра можно определит распределения плотности электронных состояний дефектов. Из формулы Кубо-Гринвуда написанного для дефектного поглощения и экспериментального парциального спектра дефектного поглощения определены плотность электронных состояний в дефектах аморфных полупроводников.

Ключевые слова. Аморфные полупроводники, оптические переходы электронов с участием дефектов, парциальные спектры дефектного поглощения, плотность электронных состояний в дефектах.

AMORF YARIMO'TKAZGICHLARNI NUQSONLARDAGI ELEKTRON HOLATLARINING ZICHLIGINI HXISOBLASH.

Annotasiya. Ushbu ish amorf yarimo'tkazgichlarning nuqsonlardagi elektron holatlari zichligini aniqlashning yangi usulini taklif qiladi. Agar amorf yarimo'tkazgichning optik yutilish spektri egri chizig'i bo'yicha eksperimental ma'lumotlar mavjud bo'lsa, bu spektrdan foydalanib, nuqsonlarning elektron holatlari zichligining taqsimotini aniqlash mumkinligi ko'rsatilgan. Kubo-Grinvudning nuqsonlarda yutilish koeffisienti uchun yozilgan formulasidan va nuqsonlarda yutilish koeffisientining tajriba spektrlaridan foydalanib amorf yarimo'tkazgichlarni nuqsonlaridagi elektron holatlarining zichligi aniqlanadi.

Kalit so'zlar. Amorf yarimo'tkazgichlar, nuqsonlar ishtirok etgandagi elektronlarning optik o'tishlari, nuqsonlarni parsial yutish spektrlari, nuqsonlardagi elektron holatlarning zichligi.

CALCULATION OF THE DENSITY OF ELECTRON STATES IN DEFECTS OF AMORPHOUS SEMICONDUCTORS

Annotation. This work proposes a new method for determining the density of defect states of amorphous semiconductors. It is shown that if there is experimental data on the optical absorption spectrum curve of an amorphous semiconductor, using this spectrum it is possible to determine the distribution of the density of electronic states of defects. From the Kubo-Greenwood formula written for defect absorption and the experimental partial spectrum of defect absorption, the density of electronic states in defects of amorphous semiconductors is determined.

Keywords. Amorphous semiconductors, optical transitions of electrons involving defects, partial defect absorption spectra, density of electronic states in defects

Известно, что основные дефекты в гидрогенизированном аморфном кремнии (α -Si:H) разделяются на три типа. D^0 -нейтральный дефект, имеющий один электрон и одну дырку, D^- -дефект с отрицательным зарядом имеющий два электрона и D^+ - дефект с положительным зарядом имеющий две дырки.

В [1, 2] для энергетических положений и концентраций этих дефектов в $\alpha\text{-Si:H}$, полученного в тлеющем газовом разряде, приведены следующие результаты $\varepsilon_D^0 - \varepsilon_V \approx 0,78$ эВ, $\varepsilon_D^- - \varepsilon_V \approx 0,5$ эВ, $\varepsilon_D^+ - \varepsilon_V \approx 1,28$ эВ и $N_D^0 = 4.5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $N_D^- = 3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $N_D^+ = 3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

В работе [3] показано, что вне зависимости от зарядового состояния дефекты участвуют во всех оптических переходах электронов.

Поскольку, в $\alpha\text{-Si:H}$ спектры дефектного поглощения начинаются, когда энергия поглощенных фотонов соответствует пределу $1,4 \text{ эВ} \leq \hbar\omega$. В таких энергиях в общем случае, учитывая число дефектных состояний в $\alpha\text{-Si:H}$, одновременно могут происходить восемнадцать оптических переходов с участием дефектных состояний. А также оптический переход от хвоста валентной зоны на хвост зоны проводимости (экспоненциальное поглощение). Расчет экспоненциального спектра поглощения приведен в работе [4].

При выполнении условия $1 - \varepsilon_{D1} - \varepsilon_V > \hbar\omega$ для энергии поглощенных фотонов электроны переходят только от хвоста валентной зоны в дефект, а при выполнении условия $2 - \varepsilon_{D1} - \varepsilon_V < \hbar\omega$ электроны, одновременно переходят от валентной зоны и от её хвоста на дефект. Здесь ε_{D1} — энергетическое положение точки пересечения распределения электронных состояний, хвоста валентной зоны и дефекта (рис. 1.), ε_V — верхняя граница валентной зоны.

При выполнении условия $3 - \varepsilon_C - \varepsilon_{D2} > \hbar\omega$ электроны переходят только от дефектов в хвост зоны проводимости, а при выполнении условия $4 - \varepsilon_C - \varepsilon_{D2} < \hbar\omega$ оптические переходы электронов одновременно, происходят от дефектных состояний в хвост зоны проводимости, а также в зону проводимости. Здесь ε_{D2} — энергетическое положение точки пересечения распределения, электронных состояний хвоста зоны проводимости и дефектных состояний (рис. 1.), ε_C — нижняя граница зоны проводимости.

Экспериментальные спектры дефектного поглощения определяется суммой парциальных спектров соответствующие вышеуказанным оптическим переходам электронов. Поэтому теоретический расчет дефектного поглощения $\alpha\text{-Si:H}$, является, очень сложной задачей в физике аморфных полупроводников.

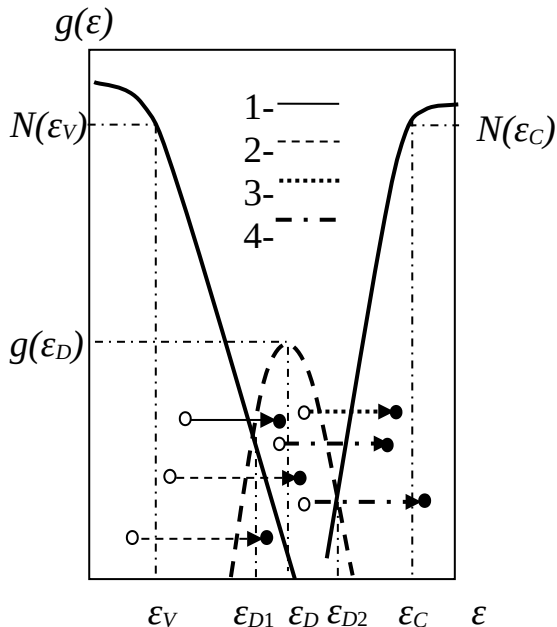


Рис. 1. Типы оптических электронных переходов с участием дефектных состояний происходящих в аморфных полупроводниках при энергии поглощенных фотонов. 1 - $\varepsilon_{D1} - \varepsilon_V < \hbar\omega$ и 2 - $\varepsilon_{D1} - \varepsilon_V > \hbar\omega$, 3 - $\varepsilon_C - \varepsilon_{D2} > \hbar\omega$ и 4 - $\varepsilon_C - \varepsilon_{D2} < \hbar\omega$.

В работе [5] рассчитаны все парциальные спектры определяемые, этими оптическими переходами электронов. Так как, эксперимент даёт сумму парциальных спектров соответствующим вышеуказанным оптическим переходам с участием дефектов. Показано, что спектра дефектного поглощения определяет в основном оптические переходы электронов между дефектными состояниями и разрешенными зонами, и для этих оптических переходов формулы Кубо-Гринвуда в приближения Дэвиса-Мотта для оптических переходов электрона от валентной зоны на дефект написаны следующим образом, когда, $\varepsilon_{D1} - \varepsilon_V < \hbar\omega$ [6]:

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

или

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

где A — коэффициент пропорциональности, не зависящий от энергии ($\hbar\omega$) поглощенных фотонов, $g_V(\varepsilon)$, $g_V(\varepsilon - \hbar\omega)$ и $g_D(\varepsilon - \hbar\omega)$, $g_D(\varepsilon + \hbar\omega)$, $g_D(\varepsilon)$ — плотности начальных и конечных электронных

состояний участвующие в оптических переходах электронов, соответственно, $g_D(\epsilon)$ - плотность электронных состояний в дефектах, $g_V(\epsilon)$ - плотности электронных состояний в валентной зоне. Из этих формул видно, что, значения коэффициента поглощения сильно зависят от распределения плотности электронных состояний, участвующих в оптических переходах. Формулу (1) используют, когда начальные электронные состояния, участвующие в оптических переходах, играют основную роль. А когда основную роль играет конечное электронное состояние, используют формулу (2).

Поэтому, можно аналитически исследовать распределению плотности электронных состояний в дефектах, когда оптические электронные переходы от валентной зоны на дефект отдельно. Учитывая это, в настоящей работе предлагается новый метод

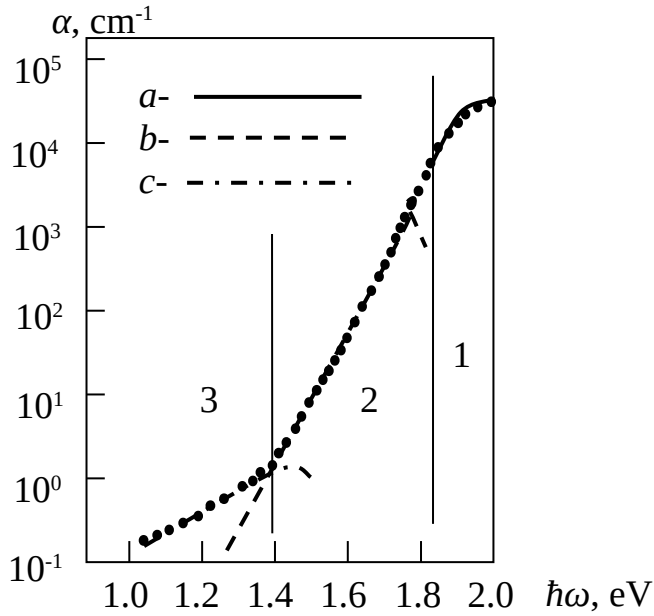


Рис. 2. Экспериментальный спектр α -Si:H. 1 – участки межзонного, 2 – экспоненциального, 3 – дефектного поглощения. Рассчитанные спектры оптического поглощения α -Si:H а–межзонное поглощения, б–экспоненциального поглощения, с–дефектного поглощения.

показанного на рис. 2. Дальнейшие расчеты показали, что только в значениях $N_D^+ = 6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, $b = 10 \text{ эВ}^{-1}$ спектр дефектного поглощения для электронных переходов от валентной зоны в дефект, соответствовало к экспериментальным результатам (рис. 3). Это означает, в этом α -Si:H (рис.2) значения спектра дефектного поглощения определяется в основном с оптическими переходами электронов от валентной зоны в D^+ дефект. Для этих электронных переходов, интеграла в определенной форме в формулах (1) и (2) написано следующим образом [5]:

$$\alpha(\hbar\omega) = A \int_{\epsilon_D - \hbar\omega}^{\epsilon_V} g_V(\epsilon) g_D(\epsilon + \hbar\omega) \frac{d\epsilon}{\hbar\omega}, \quad (3)$$

$$\alpha(\hbar\omega) = A \int_{\epsilon_{D1}}^{\epsilon_V + \hbar\omega} g_V(\epsilon - \hbar\omega) g_D(\epsilon) \frac{d\epsilon}{\hbar\omega}. \quad (4)$$

определения распределение плотности электронных состояний в дефектах из формулы Кубо-Гринвуда (2).

В [7] показано, что для получения собственных решений спектров коэффициента оптического поглощения из формулы Кубо-Гринвуда неопределённый интеграл в этой формуле необходимо записать в определенной форме.

В работе [8] представлены экспериментальные результаты спектра оптического поглощения α -Si:H (рис.2).

В работе [5] вычислены парциальные спектры для всех оптических переходов электрона с участием дефектных состояний. Но выше указанным значениям энергетического положения и концентрации дефектных состояний, суммарное значение парциальных спектров дефектного поглощения, не соответствовало экспериментального спектра дефектного поглощения,

Аналитические парциальные спектры дефектного поглощения получение по этим формулам дали одну и тоже решению. Поэтому для определения парциального спектра дефектного поглощения можно использовать формулы (3) и (4). Так как нужно определит распределению плотности электронных состояний в D^+ дефекта, воспользуемся формулой (4).

В работе [9] для производной по одной переменной от интеграла двух переменных написана следующая формула:

$$\frac{d}{dy} \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} f(x, y) dx = \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} dx + \frac{\partial \beta(y)}{\partial y} f(\beta(y), y) - \frac{\partial \alpha(y)}{\partial y} f(\alpha(y), y). \quad (5)$$

Эту формулу применяем в формулу (4) и получаем для распределений энергетических состояний D^+ дефекта:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha}{\partial \hbar \omega} &= A \frac{\partial}{\partial \hbar \omega} \int_{\varepsilon_{D1}}^{\varepsilon_V + \hbar \omega} g_V(\varepsilon - \hbar \omega) g_D(\varepsilon) \frac{d\varepsilon}{\hbar \omega} = \\ &= A \int_{\varepsilon_{D1}}^{\varepsilon_V + \hbar \omega} g_D(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \hbar \omega} \frac{g_V(\varepsilon - \hbar \omega)}{\hbar \omega} d\varepsilon + g_D(\varepsilon_V + \hbar \omega) g_V(\varepsilon_V) = \\ &= A \int_{\varepsilon_{D1}}^{\varepsilon_V + \hbar \omega} g_D(\varepsilon) \frac{\hbar \omega \frac{\partial}{\partial \hbar \omega} g_V(\varepsilon - \hbar \omega) - g_V(\varepsilon - \hbar \omega)}{\hbar \omega^2} d\varepsilon + g_D(\varepsilon_V + \hbar \omega) g_V(\varepsilon_V) = \\ &= A \int_{\varepsilon_{D1}}^{\varepsilon_V + \hbar \omega} g_D(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \hbar \omega} g_V(\varepsilon - \hbar \omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar \omega} - \frac{\alpha}{\hbar \omega} + g_D(\varepsilon_V + \hbar \omega) g_V(\varepsilon_V) \end{aligned} \quad (6)$$

В эту формулу поставляем, распределения электронных состояний в валентной зоне и D^+ дефекте используя модель распределений плотности электронных состояний предложенный в работе [5]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha}{\partial \hbar \omega} &= A \int_{\varepsilon_{D1}}^{\varepsilon_V + \hbar \omega} \frac{g(\varepsilon_D)}{\text{ch}(b(\varepsilon - \varepsilon_D))} \frac{\partial}{\partial \hbar \omega} (N(\varepsilon_V) \left(\frac{\varepsilon_C - \varepsilon - \hbar \omega}{E_g \hbar \omega} \right)) d\varepsilon - \frac{\alpha}{\hbar \omega} + \frac{A}{\hbar \omega} N(\varepsilon_V) \left(\frac{\varepsilon_C - \varepsilon_V}{E_g} \right) + \\ &+ \frac{g(\varepsilon_D)}{\text{ch}(b(\varepsilon_V + \hbar \omega - \varepsilon_D))} = \frac{Ag(\varepsilon_D)N(\varepsilon_V)}{E_g \hbar \omega} \int_{\varepsilon_{D1}}^{\varepsilon_V + \hbar \omega} \frac{d\varepsilon}{\text{ch}(b(\varepsilon - \varepsilon_D))} - \frac{\alpha}{\hbar \omega} + \frac{Ag(\varepsilon_D)N(\varepsilon_V)}{\hbar \omega} \frac{1}{\text{ch}(b(\varepsilon_V + \hbar \omega - \varepsilon_D))} \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha}{\partial \hbar \omega} &= \frac{2Bg(\varepsilon_D)}{bN(\varepsilon_C)\hbar \omega E_g} [\text{arctg} \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar \omega)) - \text{arctg} \exp(b(\varepsilon_{D1} - \varepsilon_D))] - \\ &- \frac{\alpha}{\hbar \omega} + \frac{B}{N(\varepsilon_C)\hbar \omega} g_D(\varepsilon_V + \hbar \omega - \varepsilon_D) \end{aligned} \quad (8)$$

Способ определения $g(\varepsilon_D)$ также представлено в работе [5].

Теперь будем, определять энергетические положения этих состояний.

$$g_D(\varepsilon - \varepsilon_D) = g_D(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar \omega) = g_D(\varepsilon), \quad \varepsilon = \varepsilon_V + \hbar \omega. \quad (9)$$

Из этого следует, что энергетическое положение D^+ дефекта расположено высшее $\hbar \omega$ от верхней энергетической точки валентной зоны:

$$g_D(\varepsilon) = \frac{g(\varepsilon_D)}{\text{ch}(b(\varepsilon - \varepsilon_D))} = \frac{g(\varepsilon_D)}{\text{ch}(b(\varepsilon_V + \hbar \omega - \varepsilon_D))}. \quad (10)$$

Поставляя эти формулы на (9) получаем:

$$\begin{aligned} g_D(\varepsilon) &= \frac{N(\varepsilon_C)\hbar \omega}{B} \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \hbar \omega} + \frac{\alpha}{\hbar \omega} - \frac{2Bg(\varepsilon_D)}{bN(\varepsilon_C)\hbar \omega E_g} \times \right. \\ &\times [\text{arctg} \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + \hbar \omega)) - \text{arctg} \exp(b(\varepsilon_{D1} - \varepsilon_D))] \left. \right) \end{aligned} \quad (11)$$

Формулу (11) напомним следующим образом:

$$g_{Di}(\varepsilon) = \frac{N(\varepsilon_C)(\hbar\omega_{i+1} + \hbar\omega_i)}{2B} \left(\frac{\alpha_{i+1} - \alpha_i}{\hbar\omega_{i+1} - \hbar\omega_i} + \frac{\alpha_{i+1} + \alpha_i}{\hbar\omega_{i+1} + \hbar\omega_i} \right) \times [\arctg \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D + (\hbar\omega_{i+1} + \hbar\omega_i)/2)) - \arctg \exp(b(\varepsilon_V - \varepsilon_D - (\hbar\omega_{i+1} + \hbar\omega_i)/2))] \quad (12)$$

Формулу (10) напомним следующим образом:

$$g_{Di}(\varepsilon) = \frac{g(\varepsilon_D)}{\operatorname{ch}(b(\varepsilon_i - \varepsilon_D))} = \frac{g(\varepsilon_D)}{\operatorname{ch}(b(\varepsilon_V + \frac{\hbar\omega_{i+1} + \hbar\omega_i}{2} - \varepsilon_D))}, \quad (13)$$

где α_i , α_{i+1} , $\hbar\omega_i$, $\hbar\omega_{i+1}$ экспериментальные значения дефектного поглощения и энергии поглощенных фотонов, полученных для оптических переходов электрона от валентной зоны на D^+ дефект (рис. 3.).

На формулы (12) и (13) подставим значение, полученные в парциального спектра показанные на рис. 3. Рассчитанные плотности электронных состояний в дефекте D^+ показании на рисунке 4.

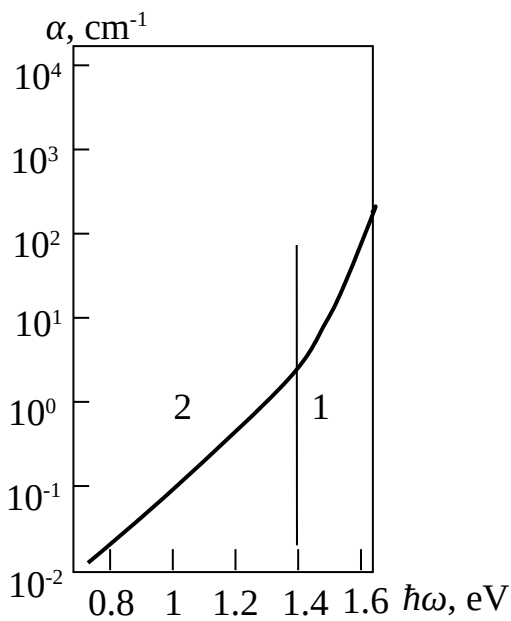


Рис. 3. Рассчитанные спектры 1 – экспоненциального поглощения и 2 – дефектного поглощения соответствующие переходам электрона от валентной зоны в D^+ дефект.

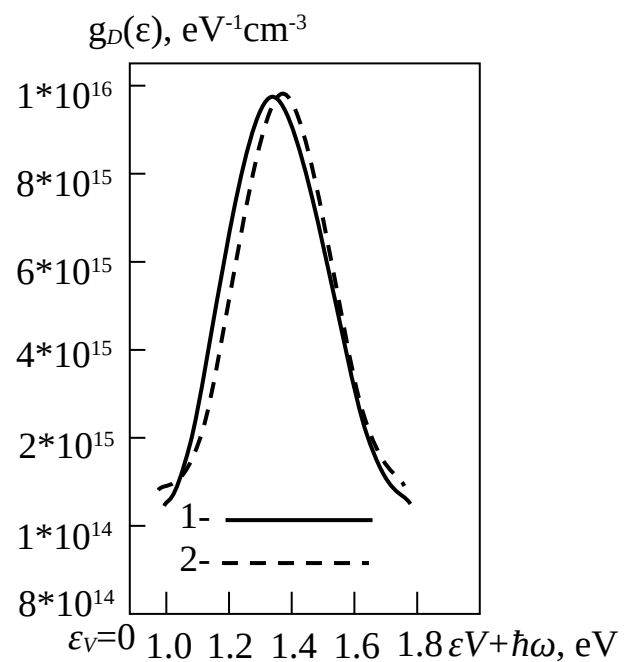


Рис. 4. Рассчитанные распределения плотности электронных состояний D^+ дефекта 1 - по формуле (12), 2 - по формуле (13).

Таким образом, в настоящей работе предложен новый метод определения плотности электронных состояний в дефектах из спектра дефектного поглощения. Показано, что именно, для образца α -Si:H полученного в работе [8] при определении спектра дефектного поглощения основную роль играет, электронные переходы от валентной зоны в D^+ дефект.

Показано, что спектры, полученные экспериментальным путём и рассчитанные по формуле (4) соответствуют только, тогда, когда концентрация этого дефекта будет равным на $N_{D^+} = 6 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Показано, что, если измерена экспериментальная кривая спектра оптического поглощения аморфного полупроводника, используя, этого спектра и формулы (12), (13) можно определит распределения плотности электронных состояний, расположенных в дефектах.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. М.С. Аблова, Г.С. Куликов, С.К. Першеев. Метастабильные состояния нелегированного аморфного гидрогенизированного, создаваемые γ – облучением. ФТП, 2002, том 36, вып. 8, с.1001-1003.
2. M. Gunes and Ch. R. Wronski. Differences in densities of charged defect states and kinetics of Staebler – Wronski effect in undoped (nontrinsic) hydrogenated amorphous silicon thin films. AIP, V 81, N 8, pp. 3526-3536.
3. В. И. Фистуль. Введение в физику полупроводников. М.: Высш. шк., 1984. 352 с.
4. Зайнобидинов С., Икрамов Р.Г., Жалалов Р.М. // Журнал прикладной спектроскопии. 2011. Т. 78. № 2. с. 243.
5. R.G. Ikramov, Kh.A. Muminov, M.A. Nuritdinova, B.Q. Suttonov, O.T. Kholmirezayev, A.A. Mamakhanov “Dangerous bonds individual of hydrogenated amorphous silicon and defect absorption spectra”// *East European Journal of Physics*. **4**. 244-250 (2023)
6. Davis E.A., Mott N.F. Electronic Processes in Non Crystalline Materials. // Clarendon Press, Oxford, 1979.
7. R.G.Ikramov, A.A.Mamaxanov, M.A. Nuriddinova, R.M. Jalolov, Kh.M. Muminov, and B.Q. Sultonov. Calculation of the interband absorption spectra of amorphous semiconductors using the Kubo-Greenwood formula. *Jornal of Applied and Engineering*, Vol. 25, No 5, p.767-772
8. F. Orapunt, S.K. O’ Leary. A quantitative characterization of the optical absorption spectrum associated with hydrogenated amorphous silicon. *Mater Electron*. (2009), V 20, pp. 1033-1038.
9. Бронштейн И.Н., Семендяев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. М. Наука, Гл. Ред. Физ. Мат. Лит. 1986.С. 544.