

С.Зайнобидинов, Р.Г.Икрамов, М.А.Нуритдинова, Б.Т.Абдулазизов, А.А.Ёкуббаев
S. Zainobidinov, RG Ikramov, MA Nuritdinova, B.T. Abdulazizov, A.A. Yekubbaev

ПЛОТНОСТЬ НЕЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ И ОПТИЧЕСКАЯ ШИРИНА ЩЕЛИ ПОДВИЖНОСТИ АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В настоящей работе, исследованы спектральные характеристики коэффициента поглощения для вертикальных (прямых) и невертикальных (непрямых) оптических электронных переходов в аморфных полупроводниках. Показано, что значение оптической ширины щели подвижности для невертикальных переходов не зависят от энергетической зависимости плотности электронных состояний находящихся в разрешенных зонах, когда эта зависимость является степенной. Определено, что оптическая ширина щели подвижности для запрещенных вертикальных переходов зависят от вида распределения плотности электронных состояний. Показано, что если функция распределения плотности электронных состояний в разрешенных зонах имеет степенную зависимость от энергии, тогда по мере увеличения суммы этих степеней увеличивается и оптическая ширина щели подвижности. Показано также, что условия разрешенных вертикальных переходов выполняется только тогда, когда на краях разрешенных зон имеется явные максимумы.

Ключевые слова: аморфные полупроводники, оптические электронные переходы, спектр, электрон, волновой вектор.

DENSITY OF NONLOCALIZED ELECTRONIC STATES AND THE OPTICAL WIDTH OF THE SLIT OF THE MOBILITY OF AMORPHOUS SEMICONDUCTORS

In this paper, the spectral characteristics of the absorption coefficient for vertical (direct) and non-vertical (indirect) optical electronic transitions in amorphous semiconductors are investigated. It is shown that the value of the optical width of the mobility slit for non-vertical transitions does not depend on the energy dependence of the density of electronic states in the allowed bands, when this dependence is power law. It is determined that the optical width of the mobility slit for forbidden vertical transitions depends on the form of the distribution of the density of electronic states. It is shown that if the distribution function of the density of electronic states in allowed bands has a power dependence on energy, then as the sum of these degrees increases, the optical width of the mobility gap also increases. It is also shown that the conditions for allowed vertical transitions are satisfied only when there are explicit maxima at the edges of the allowed bands.

Key words: amorphous semiconductors, optical electronic transitions, spectrum, electron, wave vector.

Как известно, оптическая ширина щели подвижности (запрещенная зона) аморфных полупроводников может иметь разные значения в зависимости от вида оптического перехода электронов [1]. Переход называется вертикальным, (или прямым) если волновой вектор электрона в начальном и конечном состоянии намного больше волнового вектора поглощенного фотона. Оптические переходы электронов называются невертикальными (или непрямыми), если волновой вектор начального состояния равен сумме волнового вектора конечного состояния и фотона, образующегося за счет взаимодействия фотона со структурной сеткой. Спектры таких оптических переходов определяются также и со значениями вероятностью перехода. Поэтому их разделяют на разрешенные и запрещенные [1, 2]. Спектральная характеристика коэффициента поглощения вертикальных разрешенных и запрещенных переходов для параболических разрешенных зон выражается, соответственно следующими условиями:

(1)

$$\alpha \hbar \omega \sim (\hbar \omega - E_g)^{1/2}, \quad (2)$$

где E_g - оптическая ширина щели подвижности, α - коэффициент поглощения. Спектры коэффициента поглощения неперпендикулярных переходов полученные, для параболических разрешенных зон могут, быть определены следующими условиями [1]; для разрешенных переходов

$$\alpha \hbar \omega \sim (\hbar \omega - E_g)^2, \quad (3)$$

а для запрещенных переходов

$$\alpha \hbar \omega \sim (\hbar \omega - E_g)^3. \quad (4)$$

Ряд экспериментальных данных полученных для разных аморфных полупроводников, не согласуются с условиями (1)-(4) [1].

Поэтому настоящей работе, исследованы межзонные оптические электронные переходы и выполнения условия (1)-(4), в аморфных полупроводниках. Получены результаты, показывающие зависимость значения оптической ширины щели подвижности от вида распределения плотности нелокализованных электронных состояний.

Как показано в работах [1,4] функции плотностей нелокализованных электронных состояний находящихся в разрешенных зонах можно выразить степенной зависимостью, в следующих видах.

Для валентной зоны ($\varepsilon < \varepsilon_V$)

$$g(\varepsilon) \sim \left(\frac{\varepsilon_C - \varepsilon}{E_g} \right)^{n_1}, \quad (5)$$

а для зоны проводимости ($\varepsilon_C < \varepsilon$)

$$g(\varepsilon) \sim \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_V}{E_g} \right)^{n_2}, \quad (6)$$

где степени n_1 и n_2 могут, иметь значения 0, $1/2$ и 1.

Спектральную характеристику коэффициента межзонного поглощения можно определить с помощью «формулы Кубо-Гринвуда» по методу приближение Дэвиса-Мотта, которого можно написать в виде

$$\alpha \sim \int_{\varepsilon_C - \hbar \omega}^{\varepsilon_V} g(\varepsilon) g(\varepsilon + \hbar \omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar \omega}. \quad (7)$$

где $g(\varepsilon)$ - и $g(\varepsilon + \hbar \omega)$ - плотности начального и конечного состояния переходящего электрона за счет поглощения фотона, соответственно [1, 4].

Расчеты формулы (7), для межзонных электронных переходов, показали, что замена значения n_1 и n_2 между собой, не изменяют вид аналитических решений. Имея в виду это, мы предлагаем следующие выражения спектров коэффициента межзонного поглощения, полученные по формуле (7) для разных комбинаций n_1 и n_2 .

$$1) \quad ; \quad (8)$$

$$2) \quad , \quad \text{или} \quad , \quad ; \quad (9)$$

$$3) \quad , \quad ;$$

$$\alpha_2(\hbar\omega) \sim \frac{1}{4\hbar\omega E_g} \left(2(\hbar\omega - E_g) \sqrt{E_g \hbar\omega} - (E_g + \hbar\omega)^2 \operatorname{arctg} \left(\frac{E_g - \hbar\omega}{2\sqrt{E_g \hbar\omega}} \right) \right) \quad (10)$$

$$4) \quad n_1 = 1, n_2 = 0 \quad \text{или} \quad n_1 = 0, n_2 = 1; \quad \alpha_2(\hbar\omega) \sim \frac{1}{2\hbar\omega E_g} \left((\hbar\omega)^2 - E_g^2 \right) \quad (11)$$

$$5) \quad n_1 = 1, n_2 = \frac{1}{2} \quad \text{или} \quad n_1 = \frac{1}{2}, n_2 = 1$$

$$\alpha_2(\hbar\omega) \sim \frac{2}{15\hbar\omega \sqrt{E_g^3}} \left(5(E_g + \hbar\omega) \left(\sqrt{(\hbar\omega)^3} - \sqrt{E_g^3} \right) - 3 \left(\sqrt{(\hbar\omega)^5} - \sqrt{E_g^5} \right) \right) \quad (12)$$

$$6) \quad n_1 = 1, n_2 = 1; \quad \alpha_2(\hbar\omega) \sim \frac{1}{6\hbar\omega E_g^2} (\hbar\omega - E_g) (E_g^2 + 4\hbar\omega E_g + \hbar^2\omega^2) \quad (13)$$

Видно, что вид спектральной характеристики коэффициента поглощения меняется в зависимости от энергетического распределения плотности электронных состояний находящихся в разрешенных зонах.

На рис. 1 показаны результаты расчетов условия (3) и (4) т.е. разрешенных (рис. 1 а) и запрещенных (рис. 1 б) невертикальных электронных переходов, полученные с помощью выражений (8-13). Из рисунка можно сказать, что для всех значений n_1 и n_2 , выполняется условия, определяющие невертикальные электронные переходы. Видно, что оптическая ширина щели подвижности, получаемая из этих условий, имеет одно и тоже значение. Это говорит о том, что оптическая ширина щели подвижности аморфных полупроводников для невертикальных электронных переходов не зависит от функции распределения плотности состояния находящегося в разрешенных зонах.

На рис. 2 показаны расчетные данные условий (2) полученные по формуле (8,10,13)

для запрещенных вертикальных переходов. Видно, что значение оптической ширины щели подвижности изменяется в зависимости от вида плотности электронных состояний находящихся в разрешенных зонах. При этом оптическая ширина щели увеличивается по мере увеличения суммы степеней (n_1+n_2) в энергетической зависимости плотности нелокализованных состояний находящихся в разрешенных зонах.

Расчеты, произведенные для разрешенных вертикальных переходов, показали что, они не выполняются. С другой стороны, в литературе тоже мало экспериментальных данных полученных в аморфных полупроводниках удовлетворяющих условию (1). Но спектральная характеристика коэффициента поглощения кристаллических полупроводников хорошо согласуется с этим условием [6]. На наш взгляд это следствие анизотропности структурной сетки кристаллических полупроводников (как известно структурная сетка аморфных полупроводников изотропна). Из-за этого можно предполагать, что каждое направления структурной сетки кристаллов, т.е. разные зоны Бриллюэна образует, отдельные электронные состояния и поэтому в разрешенных зонах появляются соответствующие максимумы.

Предполагаем что, аморфный полупроводник в разрешенных зонах тоже имеет максимумы, энергетическая зависимость которых, подчиняются распределению Гаусса [4]. Как известно, проинтегрировав распределение Гаусса, невозможно получит аналитического решения. Поэтому в настоящей работе мы предлагаем распределение в виде гиперболического секанса. Численные расчеты интегрирования распределения Гаусса и гиперболического секанса показали, что ошибка, образующая при замене этих распределений не превышает 6.3% это значение не больше чем допустимые в экспериментах. На основании этого мы можем написать максимумы плотности электронных состояний находящихся на краях разрешенных зон в видах:

для валентной зоны

$$g(\varepsilon) \sim \frac{1}{ch(b(\varepsilon - \varepsilon_v))}, \quad (14)$$

и для зоны проводимости

$$g(\varepsilon) \sim \frac{1}{ch(b(\varepsilon - \varepsilon_c))}. \quad (15)$$

Используя это выражение, для спектральной характеристики коэффициента межзонного поглощения из (7) когда эффективные значение плотности электронных состояний равны (т.е. $N(\varepsilon_v)=N(\varepsilon_c)$), получаем

$$\alpha(\hbar\omega) \sim \frac{1}{b \cdot \hbar\omega \cdot Sh(b(E_g - \hbar\omega))} \ln \left[\frac{1 + ch(bE_g)}{1 + ch(b(2\hbar\omega - E_g))} \right]. \quad (16)$$

Расчеты полученные, для проверки условия разрешенных вертикальных переходов по этой формуле приведены в рис. 3.

Видно, что они прекрасно выполняется. Мы также рассматривали тот факт, когда только одна разрешенная зона имеет максимум, но расчеты показали, что и в этом случае условия разрешенных вертикальных переходов не выполняется. Из этого следует, что условия, разрешенные вертикальные переходов выполняется только в том случае, когда в валентной зоне и в зоне проводимости одновременно находятся максимумы.

Таким образом, в настоящей работе исследованы оптическая ширина щели подвижности из спектральной характеристики коэффициента поглощения. Показано, что значение оптической ширины щели подвижности для не вертикальных переходов не зависят от энергетической зависимости плотности электронных состояний находящихся в разрешенных зонах. Определено,

что эти значения для запрещенных вертикальных переходов зависят от вида распределения плотности электронных состояний. Если функция распределения плотности электронных состояний в разрешенных зонах имеет степенную зависимость от энергии, тогда по мере увеличения суммы этих степеней увеличивается и оптическая ширина щели подвижности.

Показано также, что условия разрешенных вертикальных переходов выполняется только тогда, когда в разрешенных зонах имеется максимумы одновременно.

Литература:

1. Мотт Н., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах (М., Мир, 1982) ч.1, 368 с.
2. Киреев П.С. Физика полупроводников (М., Высшая школа, 1969) 592 с.
3. Бонч-Буревич В.Л. УФН, 140 (4), 583 (1983).
4. Yamasaki S., Oheda H., Matsuda A. et al. // Jpn. J. Appl. Phys., 21 (19), L539 (1982).
5. Фистуль В.И. Введение в физику полупроводников (М., Высшая школа, 1984) 352 с.
6. Вавилов В.С. Действие излучений на полупроводники (М., Гос.изд. физ.-мат.лит., 1963) 264 с.