

9 сарсан
2021



O'zbekiston
Fanlar akademiyasi

**O'zbekiston Respublikasi
Fanlar akademiyasining
MA'Ruzaları**

**ДОКЛАДЫ
Академии наук
Республики Узбекистан**

2-2021



Академик АН РУз С.Зайнабидинов¹, Р.М.Жалалов², Ж.Т.Каландаров², Р.Г.Икрамов²,
Х.А.Муминов²

СПЕКТР КОЭФФИЦИЕНТА МЕЖЗОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ И ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЕ АМОРФНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

В настоящее время в физике аморфных полупроводников имеется несколько моделей распределения плотности электронных энергетических состояний. Обычно, используя эти модели, теоретически устанавливают спектры коэффициента оптического поглощения фотонов [1]. Но, используя экспериментальные результаты конкретно для одного образца из группы аморфных полупроводников, определение распределения плотности электронных энергетических состояний является весьма трудной задачей. Поэтому в настоящей работе представлен метод определения распределения плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне на основе экспериментальных данных, полученных для спектра коэффициента межзонного поглощения фотонов.

В работе [2] выражение для спектральной характеристики коэффициента межзонного поглощения фотонов в случае аморфных полупроводников записывается по формуле Кубо-Гринвуда для приближения Дэвиса-Мотта следующим образом:

$$\alpha(\hbar\omega) = B \int_{\varepsilon_C - \hbar\omega}^{\varepsilon_V} g_1(\varepsilon)g_2(\varepsilon + \hbar\omega) \frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}, \quad (1)$$

где $g_1(\varepsilon)$ – плотность электронных энергетических состояний в валентной зоне, а $g_2(\varepsilon + \hbar\omega)$ – в зоне проводимости, коэффициент пропорциональности $B = \frac{8\pi^4 e^2 \hbar^2 a}{nc(m^*)^2}$, a – среднее расстояние между атомами полупроводника, n – показатель преломления полупроводника, c – скорость света в вакууме, m^* – эффективная масса электрона в полупроводнике, \hbar – постоянная Планка, ω – частота поглощенных фотонов, ε_V – верхняя граница валентной зоны, ε_C – нижняя граница зоны проводимости.

Для случая параболических разрешенных зон [2] из формулы (1) получено следующее выражение:

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

где $A = N(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)B$, $N(\varepsilon_V) = N(\varepsilon_C) = 10^{22}$ эВ⁻¹см⁻³ – эффективные значения плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне и в зоне проводимости, соответственно [3]. Для определения параметров A и E_g на основе этой формулы необходимо сопоставить результаты расчета, полученные по формуле (2) и экспериментальные данные, рассматривая коэффициент пропорциональности и энергетическую ширину щели подвижности электронов (щель в которой подвижность электронов равна нулю – E_g) в качестве подгоночного параметра.

В работе [4] представлены экспериментальные результаты спектра коэффициента межзонного поглощения фотонов для случая аморфного углерода ($a = C$), полученного методом «магнетронного напыления» (рис. 1). Результаты расчетов, полученные по формуле

(2), также показаны на рис. 1 (непрерывная кривая). Экспериментальные результаты, полученные для $a - C$, и результаты расчетов показали, что они соответствуют друг другу при $A = 6.19 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$ и энергетической ширине щели подвижности электронов $E_x = 1.235 \text{ эВ}$.

Из уравнения (1) видно, что спектр коэффициента межзонного поглощения фотонов сильно зависит от плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне и зоне проводимости. Поэтому предполагаем, что по этой формуле можно рассчитать распределение плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне.

В работе [5] приведено следующее выражение для дифференцирования интеграла функции двух переменных по одной переменной:

$$\frac{d}{dy} \int f(x, y) dx = \int_{\alpha(y)}^{\beta(y)} \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} dx + \frac{\partial \beta(y)}{\partial y} f(\beta(y), y) - \frac{\partial \alpha(y)}{\partial y} f(\alpha(y), y) \quad (3)$$

Используя эту формулу, и дифференцируя выражение (1) по энергии поглощенных фотонов ($\hbar\omega$), получим следующее выражение:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} &= \frac{\partial}{\partial \hbar\omega} B \left(\int_{\epsilon_c - \hbar\omega}^{\epsilon_c} \frac{(g_1(\epsilon) g_2(\epsilon + \hbar\omega))}{\hbar\omega} d\epsilon \right) = \\ &= \frac{B}{\hbar\omega} \int_{\epsilon_c - \hbar\omega}^{\epsilon_c} \frac{\partial}{\partial \hbar\omega} g_1(\epsilon) g_2(\epsilon + \hbar\omega) d\epsilon - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} + \frac{B}{\hbar\omega} g_1(\epsilon_c - \hbar\omega) g_2(\epsilon_c). \end{aligned} \quad (4)$$

В работе [6] выражения для распределений плотности электронных энергетических состояний для случая двух параболических разрешенных зон выбраны следующим образом:

- для валентной зоны:

$$g_1(\epsilon) = N(\epsilon_c) \left(\frac{\epsilon_c - \epsilon}{E_x} \right)^{1/2}, \quad \text{здесь } \epsilon \leq \epsilon_v. \quad (5)$$

- для зоны проводимости:

$$g_2(\epsilon) = N(\epsilon_c) \left(\frac{\epsilon - \epsilon_v}{E_x} \right)^{1/2}, \quad \text{здесь } \epsilon_c \leq \epsilon. \quad (6)$$

Подставляя (5) и (6) в формулу (4), получаем следующее выражение:

$$\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} = \frac{A(\hbar\omega - E_x)}{2E_x \hbar\omega} \operatorname{arctg} \left(\frac{\hbar\omega - E_x}{2\sqrt{E_x \hbar\omega}} \right) - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} + \frac{A}{\hbar\omega N(\epsilon_c)} N(\epsilon_c) \left(\frac{\hbar\omega}{E_x} \right)^{1/2}. \quad (7)$$

В выражении (7) вводим следующее обозначение:

$$g_1(\epsilon) = N(\epsilon_c) \left(\frac{\hbar\omega}{E_x} \right)^{1/2} = N(\epsilon_c) \left(\frac{\epsilon_c - \epsilon}{E_x} \right)^{1/2}. \quad (8)$$

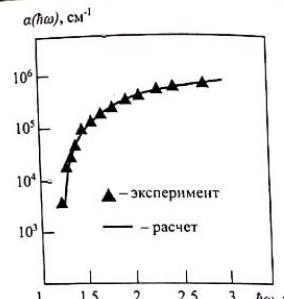


Рис. 1. Спектры межзонного поглощения фотонов, определение из эксперимента [4], и расчетные данные, полученные по формуле (2).

Затем применив (8), вычислим, какое электронное энергетическое состояние соответствует энергии фотона $\hbar\omega$:

$$\hbar\omega = \epsilon_c - \epsilon; \quad \epsilon = \epsilon_c - \hbar\omega = \epsilon_c - \epsilon_v + \epsilon_v - \hbar\omega = \epsilon_v + (E_x - \hbar\omega).$$

Поскольку в этом выражении $E_x - \hbar\omega < 0$ и $\epsilon \leq \epsilon_v$, то ϵ определяет расположение электронных энергетических состояний в валентной зоне. Следовательно, из уравнения (7) для распределения плотности электронных энергетических состояний валентной зоны, получаем следующее выражение:

$$\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} = \frac{A(\hbar\omega - E_x)}{2E_x \hbar\omega} \operatorname{arctg} \left(\frac{\hbar\omega - E_x}{2\sqrt{E_x \hbar\omega}} \right) - \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} + \frac{A}{\hbar\omega N(\epsilon_c)} g_1(\epsilon),$$

$$\text{где } g_1(\epsilon) = \frac{\hbar\omega N(\epsilon_c) \left(\frac{\partial \alpha(\hbar\omega)}{\partial \hbar\omega} + \frac{\alpha(\hbar\omega)}{\hbar\omega} \right) - A(\hbar\omega - E_x) \operatorname{arctg} \left(\frac{\hbar\omega - E_x}{2\sqrt{E_x \hbar\omega}} \right)}{A}. \quad (9)$$

Запишем уравнения (8) и (9), используя средние значения коэффициента межзонного поглощения и энергии поглощенных фотонов для экспериментальных результатов [4] в следующем виде:

$$g_1(\epsilon) = N(\epsilon_c) \left(\frac{\hbar\omega_{v1} + \hbar\omega_{v2}}{2E_x} \right)^{1/2} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} g_1(\epsilon) &= \frac{1}{A} \left(N(\epsilon_c) \left(\frac{\hbar\omega_i + \hbar\omega_{v1}}{2} \right) \left(\frac{\alpha_{v1}(\hbar\omega) - \alpha_i(\hbar\omega)}{\hbar\omega_{v1} - \hbar\omega_i} + \frac{\alpha_{v1}(\hbar\omega) + \alpha_i(\hbar\omega)}{\hbar\omega_i + \hbar\omega_{v1}} \right) - \right. \\ &\quad \left. \frac{A(E_x - \frac{\hbar\omega_i + \hbar\omega_{v1}}{2})}{E_x(\hbar\omega_i + \hbar\omega_{v1})} \operatorname{arctg} \left(\frac{E_x - \frac{\hbar\omega_i + \hbar\omega_{v1}}{2}}{2\sqrt{E_x(\hbar\omega_i + \hbar\omega_{v1})}} \right) \right) \end{aligned} \quad (11)$$

где $\alpha(\hbar\omega)$ и $\hbar\omega_i$ – экспериментальные значения коэффициента межзонного поглощения и энергии поглощенных фотонов, соответственно.

Из уравнения (11) следует, что если известна экспериментальная спектральная характеристика коэффициента межзонного поглощения фотонов, то с ее помощью можно определить распределение плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне.

На рис. 2 показано распределение плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне, определенное по формуле (11) (1 – сплошная линия) с использованием экспериментальных спектральных характеристик коэффициента межзонного поглощения фотонов, приведенного на рис. 1. На этом же рис. 2 также показаны результаты расчета, полученные по формуле (10) (2 – пунктирная линия). Видно, что эти две кривые отличаются незначительно.

Таким образом, в данной работе исследован аналитический вид спектра коэффициента межзонного поглощения фотонов, полученного для случая параболических разрешенных зон аморфных полупроводников.

С использованием спектра коэффициента межзонного поглощения фотонов, определенного по этой формуле, и экспериментальных результатов показана возможность определения плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне аморфных полупроводников. Определено распределение плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне, путем сравнения расчетных и экспериментальных результатов, полученных для спектра межзонного поглощения фотонов.

Поскольку межзонное поглощение фотонов характерно для всех типов полупроводников, результаты, полученные в этом исследовании, также могут быть использованы для кристаллических, поликристаллических и нанокристаллических полупроводников.

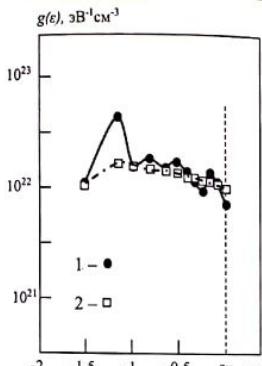


Рис. 2. Расчетные данные плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне аморфного углерода ($a - C$), полученные по формуле (11) (1 – сплошная линия) и на основе формулы (10) (2 – пунктирная линия).

ЛИТЕРАТУРА

1. Taus J. // The optical properties of solid (ed F.Abeles), North-Holland, Amsterdam, 1970.
2. Зайнабидинов С., Икрамов Р.Г., Жалалов Р.М., Нуридинова М.А. Распределение плотности электронных состояний в разрешенных зонах и межзонные поглощения в аморфных полупроводниках. //Оптика и спектроскопия. 2011. Т. 110, № 5. с. 813–818.
3. Cody G.D., in Hydrogenated Amorphous Silicon, vol. 21B of Semiconductors and Semimetals, edited by J.I. Pankove (Academic, New York, 1984), pp. 11–82, 1984.
4. Пронкин А.А., Костановский А.В. Поглощение и ширина оптической щели пленок а-С, полученных магнетронным распылением. Теплофизика высоких температур. 2015, том 53, № 2, с. 312–314.
5. Бронштейн И.Н., Семенджев К.А. Справочник по математике для инженеров и учащихся вузов. М. Наука, Гл. Ред. Физ.-мат. Лит. 1986.
6. Зайнабидинов С., Икрамов Р.Г., Жалалов Р.М. Энергия Урбаха и хвосты плотности состояний аморфных полупроводников. Журнал прикладной спектроскопии. 2011, Т. 78, № 2, с. 243–247.

ЎзРФА академиги С.Зайнабидинов¹, Р.М.Жалалов², Ж.Т.Каландаров²,
Р.Г.Икрамов², Х.А.Муминов²

Аморф яримўтказгичларда зоналараро ютилиш коэффициенти спектри ва валент зонадаги электрон холатлари зичлиги

Аморф яримўтказгичларда параболик рухсат этилган зоналар учун зоналараро фотонларни ютилиш коэффициенти спектрларинг аналитик кўринишидаги пропорционаллик коэффициенти ва характеристикалар тиражининг энергетик кенглигини (электронларни харакатчилани нулга тенг бўлган тиркиши) тажрибалардан олинган зоналараро ютилиш спектрларига мослаштириш орқали аникланган. Фотонларни зоналараро ютилиш спектрларинг аналитик инфодасидан фойдаланиб, валент зонадаги электронларни энергетик холатлари зичлиги таксимотини аниқловчи янги формула келтириб чиқарилган. Шу формула ва тажрибадан аникланган фотонларни зоналараро ютилиш коэффициенти спектрларидан фойдаланиб аморф яримўтказгичларда валент зонадаги электронларни энергетик холатлари зичлиги таксимотини аниқлаш мумкин эканлигини кўрсаттила.

Академик АН РУз С.Зайнабидинов¹, Р.М.Жалалов², Ж.Т.Каландаров²,
Р.Г.Икрамов², Х.А.Муминов²

Спектр коэффициента межзонного поглощения и плотность электронных состояний в валентной зоне аморфных полупроводников

Определены коэффициент пропорциональности и энергетическая ширина щели подвижности (щель, в которой подвижность электронов равна нулю), в аналитическом виде спектра коэффициента межзонного поглощения фотонов, сравнивая расчетные и экспериментальные результаты, полученные для параболических разрешенных зон в случае аморфных полупроводников. При использовании аналитического выражения спектра межзонного поглощения фотонов получена формула, описывающая распределение плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне. При сопоставлении спектра коэффициента межзонного поглощения фотонов, определенного по этой формуле, и экспериментальных данных показана возможность определения плотности электронных энергетических состояний в валентной зоне аморфных полупроводников.

Uz AS academician S.Zaynabidinov¹, R.M.Zhalalov², Zh.T.Kalandarov²,
R.G.Ikramov², Kh.A.Muminov²

Spectrum of the interband absorption coefficient and the density of electronic states in the valence band of amorphous semiconductors

The proportionality coefficient and the energy width of the mobility gap (the gap in which the electron mobility is zero) are determined in the analytical form of the spectrum of the photon interband absorption coefficient obtained for the parabolic allowed bands, comparing the calculated and experimental results for amorphous semiconductors. Using of the analytical expression for the

photon interband absorption spectrum, a new formula is obtained that determines the distribution of the density of electronic energetic states in the valence band. Comparing the spectrum of the photon interband absorption coefficient determined by this formula and experiment, the possibility of determining the density of electronic energetic states in the amorphous semiconductors valence band is shown.

¹⁾ Андижанский государственный университет

²⁾ Наманганский государственный университет

Дата поступления 15.02.2021,
в итоговом варианте 15.03.2021

МУНДАРИЖА

<i>B.I.Abdullaev, S.A.Imomkulov, R.A.Sharipov</i>	
L_{loc}^p va $L_{loc}^{1,p}$ fazolarga qarashli kuchli M — subgarmonik funksiyalarning chetlatiladigan maxsusliklari	3
<i>A.A.Джалилов, С.Х.Абдухакимов</i>	
Унимодал акслантиришлар оиласи учун тасодифий силжишлар	9
<i>K.K.Кулдошев, Н.Х.Нарзиппаев</i>	
ψ -плюрисубгармоник ўлчов	15
<i>C.I.Курбонбоев</i>	
Аналитик тўпламларда M — субгармоник функциялар	21
<i>D.Ya.Xusainov, J.X.Xusanov, J.I.Buranov</i>	
Kechikmasdan chiziqli tizimostilardan tashkil topgan muayyan o'zgarishlarga ega dinamik tizimlarning barqarorligi haqida	26
<i>C.Дэсуманов, Ш.Р.Маликов, Ш.С.Дэсуманов</i>	
Юкори хароратли ўта ўтказгич купратларнинг металл ўтказувчан назарияси	32
ЎзР ФА академиги С.Зайнабидинов, А.С.Саидов, Х.М.Мадаминов, Ш.Н.Усмонов, А.Ш.Икромов	
p-Si-n-Si _{1-x} Sn _x -гетероўтишларнинг баъзи электрофизик хусусиятлари	39
ЎзР ФА академиги С.Зайнабидинов, Р.М.Жалалов, Ж.Т.Каландаров, Р.Г.Икромов, Х.А.Муминов	
Аморф яримўтказгичларда зоналаро ютилиши коэффициенти спектри ва валент зонадаги электрон холатлари зичлиги	45
<i>A.A.Мирсагатова, С.К.Мухтарова, И.И.Садиков, Г.К.Салимова, Ф.А.Ташимова, Т.М.Усманов, Б.Х.Ярматов</i>	
Ўта тоза индийнинг радиокимёвий нейтрон-активацион тахлили	51
<i>M.B.Кремков</i>	
Инновацион кластерлар модели асосида фармацевтик саноат самарадорлигини ошириш ва янги маҳаллий доривор препаратларни яратиш масалалари	57
ЎзР ФА академиги Т.М.Муминов, Ф.Р.Ахмеджанов, А.Ф.Болтабаев, У.Ш.Абдирахмонов	
Алюминий котишмаларида панжара параметрга нейтрон нурланишининг таъсири	65
<i>K.K.Пирниязов, С.Ш.Рашидов</i>	
Bombyx mori наноаскорбат хитозани синтези ва биологик фаол хоссалари	71
<i>Д.К.Хандамова, Ш.П.Нуруллаев</i>	
Триметил - ва триэтиламмонийли адсорбентларни дифференциал термик тахлили	77
<i>Б.К.Алимназаров, Ж.М.Ашуров, А.Б.Ибрагимов, И.Ж.Менгноров, В.Х.Сабиров, Х.У.Ходжаниязов</i>	
Тетра(2,4-Д)кадмий(II) этилендиамин моногидратининг Хирш菲尔д юзаси тахлили	82
<i>Г.М.Артықбаева, И.Р.Ялалова, М.Мустафақулов, А.Мамаджанов, УзР ФА академиги Т.С.Саатов</i>	
Каламуш мия тукимаси антиоксидант системаси курсаткичларига АТУОнинг таъсири	87
<i>C.C.Раджабов</i>	
Белгиларнинг ўзаро боғликларининг афзал кўрилган моделларидан фойдаланишга асосланган таниб олиш алгоритмлари	90
<i>С.Ф.Амирев, М.С.Якубов, И.А.Каримов</i>	
Қайта тикланадиган энергия манбали контакт тармогини узлуксиз масофавий диагностикалаш системаси	95
<i>N.R.Mullabaev, I.M.Mirabdullaev</i>	
Chuchuk suv meduza Tuyabuguz suv omborida (Toshkent viloyat, Uzbekiston)	101