**УДК 537.311.322**

ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СВЕТА НА ДЕФЕКТЫ ПСЕВДОЛЕГИРОВАННОГО АМОРФНОГО ГИДРОГЕНИЗИРОВАННОГО КРЕМНИЯ

**Икрамов Р.Ғ** профессор кафедры «Физика» Наманганского инженерно-технологического института. г.Наманган, Республика Узбекистан.

**Нуриддинова М.А** старший преподаватель кафедры «Физика» Наманганского инженерно-технологического института. г.Наманган, Республика Узбекистан.

**Муминов Х.А** ассистент кафедры «Физика» Наманганского инженерно-технологического института. г.Наманган, Республика Узбекистан.

***Аннотация:*** *В настоящей работе теоретически исследовано взаимодействия света на дефекты псевдолегированного аморфного гидрогенизированного кремния, используя метод приближения Дэвиса-Мотта по формуле Кубо-Гринвуда. Показано, что вид спектров коэффициента дефектного поглощения определяется распределением плотностью состояний в разрешенных зонах. Определено, что спектры дефектного поглощения имеют максимумы, где расположены максимумы распределение энергетического положения дефектных состояний. Показано, что из экспериментальных данных, полученных для спектров дефектного поглощения можно определить энергетическое положения дефектов.*

***Ключевые слова:*** *аморфный гидрогенизированный кремний, распределение плотности состояний дефектов, распределение плотности состояний в разрешенных зонах, формула Кубо-Гринвуда, приближения Девиса-Мотта, оптические переходы между дефектами и разрешенными зонами, спектры дефектного поглощения, энергетическая положения дефектов.*

**Введение.** Как известно, псевдолегированний аморфный гидрогенизированный кремний (*а-Si:H*) не имеет легирующих примесей. В этом материале уровень Ферми сдвигается за счет изменения технологических условий выращивания. Поэтому, именно в *а-Si:H* принадлежит термин спектры дефектного поглощения. В работе [1] показано, что энергетическое положение основных дефектов (*D*0 – нейтральный дефект, *D*- -отрицательно заряжений дефект, *D*+ - положительно заряженный дефект) образцов *a-Si:H* размещается в интервале *εC-εDо*=0,95-1,05 эВ, *εC-εD*-=0,65-0,75 эВ, *εC-εD*+=0,35-0,45 эВ. Потому, что энергетические положения дефектов также зависят то технологических условий выращивание. Экспериментальные результаты спектральных характеристик коэффициента дефектного поглощения в пленках *а-Si:H*, показано на рисунке 1. Видно, что некоторые спектры имеют явные максимумы, а некоторые нет. В настоящей работе теоретически исследуется, взаимодействия света на дефекты псевдолегированного *а-Si:H* с помощью спектральной характеристики дефектного поглощения. Предлагается метод определения энергетических положений дефектов и условия появление максимумов в спектре дефектного поглощения. Как известно, оптические переходы электронов, участием дефектных состояний, бывают трех типов: между дефектами, между дефектами и хвостами разрешенных зон, между дефектами и разрешенными зонами. В работе [1] показано, что основную роль из этих оптических переходов, играют, переходи между дефектами и разрешенными зонами. Спектральные характеристики коэффициента дефектного поглощения зависят от энергетического положения дефектов и от распределения плотности состояний в дефектах и разрешенных зонах. Спектральные характеристики коэффициента дефектного поглощения аморфных полупроводников вычисляются по методу приближения Девис-Мотта из формулы Кубо-Гринвуда следующим образом [2].

. (1)

*ħω,* eV

0.9

1.1

1.3

101

*α ,*cm-1

100

10-1

*b*

*a*

Рисунок 1. Экспериментальные результаты спектральных характеристик a - область дефектного поглощения образцов с псевдодопированным a-Si: H, b - область экспоненциального поглощения.

где *ε0* - самая высокая энергетическая положения электронов, участвующих в оптических переходах, *g(ε)* - и *g(ε+ћω)* - начальная и конечная плотности электронных состояний, участвующих в оптических переходах. В работах [3, 4] показано, что при расчете спектров коэффициента дефектного поглощения в аморфных полупроводниках плотностью состояний в дефектах можно выбрать в виде распределений Гаусса или гиперболического секанса, а для распределений плотности состояний на границах разрешенных зон в виде степенного или гиперболического секанса [4].

Энергетическая зависимость плотностей дефектных состояний по распределению Гаусса выглядит следующим образом

. (2)

где *g(εD)*– максимальное значение распределения плотности электронных состояний в дефектах и *εD* - энергетическое положение этого максимума, *а* - параметр, который определяет эффективную полуширину распределение Гаусса.

Распределение плотности состояний в виде гиперболического секанса записывается так:

. (3)

где *b* - параметр, определяющий эффективную полуширину.

В работах [3, 5] показано, что в случае, когда распределения плотности электронных состояний на границах валентной зоны и зоны проводимости имеет степенную зависимость их можно записать следующим образом:

, когда *ε≤εV*(4)

, когда *εС≤ε*  (5)

где *N(εV)* и *N(εC)*-эффективные значения плотности состояний в валентной зоне и в зоне проводимости, *εV* – высшая граница валентной зоны и *εC* - нижняя граница зоны проводимости. *Eg* – энергетическая ширина щели подвижности (запрещенной зоны). Учитывая, что распределения плотности состояний на границах разрешённых зон могут быт параболической или линейной [2, 6], то есть *n*1=*n*2= ½ и *n*1=*n*2= 1. Когда плотности электронных состояний разрешенных зонах соответствуют, гауссовскому распределению, их можно написать следующим образом [1, 6]: для валентной зоны

, (6)

для зоны проводимости

, (7)

Как известно, интеграл гауссовского распределения не иметь аналитического решения, поэтому для получения аналитических решений спектров дефектного поглощения можно применят распределения в виде гиперболического секанса: для валентных зон

, (8)

для зоны проводимости

, (9)

Как показано в работе [6], распределение плотности состояний в хвостах разрешённых зон является экспоненциальным и описывается следующими выражениями: для хвоста валентной зоны

 когда *εV<ε*; (10)

и для хвоста зоны проводимости

 когда *ε<εC*; (11)

где *β*1- и *β*2 - параметры, которые определяют наклон хвостов валентной зоны и зоны проводимости,

**Расчет и обсуждения.** Когда энергия поглощенных фотонов *ε01-εV<ћω* и *εC-ε02<ћω*, где *ε01*- и *ε02* – энергетическая положения точки пересечений хвостов разращенных зон и дефектов (смотрите рисунок 2), тогда формируется оптические переходы между дефектами и разращенными зонами.

Рис.2. Типы оптических переходов в аморфных полупроводниках с дефектными состояниями: 1 - из валентной зоны в дефект, 2 - из дефектных состояний в зону проводимости, 3 - из хвостов валентной зоны в дефект, 4 - из дефектного состояния к хвостам зоны проводимости.

2

1

*g(ε)*

*εV*

*ε01*

*εC*

*ε02*

*εD*

3

4

В случае, когда распределение плотности состояний в разрешённых зонах является параболической (*n*1=*n*2=1/2), спектры коэффициента дефектного поглощения пишутся в следующих видах: для оптических переходов от дефекта в зону проводимости

 (14)

от валентной зоны в дефект

. (15)

где *B=* [3, 6].

Как известно, эти интегралы не имеют аналитического решения. Поэтому эти спектры получены с использованием численных методов. Результаты расчетов показаны на рисунке 3-*а*.

Если распределение плотности в разрешенных зонах имеет линейную (*n*1=*n*2=1) зависимость:

. (16)

, (17)

Чтобы получить аналитическое решение этих интегралов, их нужно разделить на два составляющие: для распределения гиперболического секанса, и гауссовского. В случае такой замены погрешность ошибки не превышает от ошибок эксперимента [4].

. (18)

, (19)

где *A=BN(εC)N(εV)*, когда *a=b2/π* соотношения выполняется, концентрации дефектов, определяемые по распределению гиперболического секанса и гаусса, будет равными[4]. Аналитические решения этих интегралов записываются следующим образом:

. (20)

 (21)

Результаты, полученные из расчета формул (20) и (21), показаны на рисунке 3*b*. Видно, что эти кривые на рисунках 3*а* и 3*b*  одинаковы. Эти результаты показывают, что спектры коэффициента дефектного поглощения, не зависит от степени распределения плотности состояний в разрешенных зонах. В этих спектрах слабые максимумы находятся в энергетическом положении, где энергия поглощенного фотона равно на *ħω=εC-εD* и *ħω=εD-εV.*.

10-2

10-2

*a*

*b*

*α*, arbit.unit.

1

1

0.4

0.6

1.0

*ħω*, эВ

1-

2-

Рис. 3. Спектры оптических переходов между расширенными зонами и дефектными состояниями 1 - от дефекта к зоне проводимости, 2 - от валентной зоны к дефекту a- n1 = n2 = 1/2, b- n1 = n2 = 1. Расчеты проводились для Eg = 1,8 эВ, *εС-εD*= 0,6 эВ

Определено из расчетов, что изменение максимума (*εD*) состояний электронов в дефектах будет изменять только значении коэффициента поглощения.

Эксперименты показывают, что вид спектров могут варьироваться для разных образцов при изменении технологии их выращивания. Например, на рисунке 1 показаны спектральные характеристики коэффициентов дефектного поглощения, все эти образцы были выращены по одной и той же технологии (по методу разложения силана при газовом разряде). Видно, что некоторые спектральные характеристики имеет явные максимумы и минимумы.

Известно, что энергетическая зависимость плотности состояний в валентной зоны и зоны проводимости очень сложна и может иметь несколько максимумы и минимумы [2]. Учитывая это, мы предполагаем, что плотность нелокализованных электронных состояний на границах разрешенных зон подчиняется распределению гаусса или гиперболическую секанса, т.е. граница зоны проводимости

, (22)

а граница валентной зоны,

 (23)

Если *b*1 и *b*2 имеет разные значения, невозможно получит аналитического вида спектров дефектного поглощения. Метод численных расчетов показывают, что если значения *b*1 и *b2* в формулах (24) и (25) не сильно отличаются друг от друга, то вместо их можно использовать выражения b=(b1+b2)/2, тогда допускаемая ошибка не превышает от 9%. Учитывая это, можно написать их следующим образом

, (24)

. (25)

Отсюда получаем следующий результат для спектров дефектного поглощения: для оптических переходов от дефекта в зону проводимость:

. (26)

А для оптических переходов от валентной зоны к дефектам:

. (27)

Результаты расчетов, полученные из этих формул, показаны на рисунке 4 (его можно сравнить с рисунком 1). Как видно из рисунка, спектры дефектного поглощения имеет явные максимумы и энергетические положение этих максимумов находится в *ħω=εC-εD* или *ħω=εD-εV.*.

Эти результаты показывают, что спектры дефектного поглощения может сильно отличатся друг от друга, из-за разности распределение плотности состояний в разрешенных зонах.

**Заключение.** Из полученных результатов, в этом исследовании могут быть сделаны следующие выводы:

- вид спектральных характеристик коэффициентов дефектного поглощения определяется распределением плотности состояний в разрешенных зонах.

10-2

10-4

1

2

α, arbit.unit.

1

0.6

1.0

1.4

*ħω, эВ*

0.2

Рис.4. Спектры коэффициента поглощения дефектов, когда граница разрешенных полос имеет четкие максимумы. Расчеты получены для.*Eg=*1.8 эВ, 1-εС-εD1=0.6 эВ, 2-εС-εD2=1.2 эВ.

- спектры дефектного поглощения имеет слабые максимумы, когда распределение плотности состояний, на границах разрешенных зон имеет степенную зависимость от энергии в точках, где энергия фотонов равна *ħω=εC-εD* и *ħω=εD-εV*.

- явные максимумы в спектральных характеристиках коэффициента дефектного поглощения соответствующего экспериментальным результатам формируется, когда распределения плотности состояний на границах разрешенных зон имеет явные максимумы. Эти максимумы расположены в энергетическом положении *ħω=εC-εD* или *ħω=εD-εV .*

Это говорит о том, что с помощью спектров дефектного поглощения в *a-Si:H* можно выявить энергетическое положение дефектов.

ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Tanaka K., Okushi H. Defect states and carrier process in a-Si:H., J. Non-Cryst. Solids. 1984, 66**,** N1&2, pp 205-208.
2. Н. Мотт, Э. Дэвис, Электронные процессы в некристаллических веществах. Т 1, (Москва, Мир, 1982).
3. Зайнобидинов С., Икрамов Р.Г., Жалалов Р.М., Нуритдинова М.А. Распределения плотности электронных состояний в разрешенных зонах и межзонные поглощения в аморфных полупроводниках. // Оптика и спектроскопия. –Санкт-Петербург, 2011, Т.110, № **5**. с.813-818.
4. Р.Г. Икрамов. Функция распределения электронных состояний оборванных связей в аморфных полупроводниках. Естественные и технические науки, **6**, 2007, с.58-63.
5. Бродски М. Аморфные полупроводники. (Москва: Мир, 1982).
6. S.Zaynobidinov, R.G. Ikramov, R.M. Jalalov Urbach enegy and the tails of the density of states in amorphous semiconductors. Journal of Applied Spectroscopy,  2011, Vol. 78, No. **2**., pp. 223-227.
7. Зайнобидинов С., Икрамов Р.Г., Нуритдинова М.А., Жалалов Р.М. Функция распределения дефектных состояний и спектры коэффициента поглощения аморфных полупроводников. Uzbek Journal of Physics, 2009, Vol.11 (N 1), pp. 52-57.

***(****Икрамов Р.Ғ , Нуриддинова М.А , Муминов Х.А* ***2019).***