

ТЕПЛОВОЕ УШИРЕНИЕ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ И ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ Ge

Г. Гулямов, Н.Ю. Шарипбаев, У.И. Эркабоев
Наманганский инженерно-педагогический институт
Узбекистан

Поступила в редакцию 27.09.2012

Моделированием процесса термического уширения плотности состояний полупроводника, исследована температурная зависимость ширины запрещенной зоны Ge. Численным анализом установлено, что нелинейная зависимость ширины запрещенной зоны Ge при низких температурах обусловлена наличием энергетических уровней, в запрещенной зоне вблизи разрешенных зон. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: плотность состояний, тепловое уширение энергетических состояний, численное моделирование, ширина запрещенной зоны.

Моделюванням процесу термічного розширення щільності станів напівпровідника, досліджена температурна залежність ширини забороненої зони Ge. Чисельним аналізом встановлено, що нелінійна залежність ширини забороненої зони Ge при низьких температурах зумовлена наявністю енергетичних рівнів, у забороненій зоні поблизу дозволених зон. Результати розрахунків добре погоджуються з експериментальними даними.

Ключові слова: щільність станів, теплове розширення енергетичних станів, чисельне моделювання, ширина забороненої зони.

Modeling of a thermal broadening of the density of states of the semiconductor temperature dependence of the band gap of Ge. The numerical analysis showed that the nonlinear dependence of the band gap Ge at low temperatures due to the presence of energy levels in the forbidden zone near the allowed bands. Results are in good agreement with the experimental data.

Keywords: density of states, thermal broadening of the energy states, numerical simulation, the band gap.

ВВЕДЕНИЕ

Данные экспериментов – как электрических, так и оптических измерений - указывают на то, что ширина запрещенной полосы полупроводников зависит от температуры. Эту зависимость, в некоторых пределах близкую линейной, связывают, в первую очередь с температурным изменением размеров элементарной ячейки. Привлекая представление теории о возникновении зон разрешенной энергии из атомных уровней при сближении атомов, удается качественно объяснить сужение запрещенной полосы при возрастании температуры, характерное для Ge [1].

Изменение ширины запрещенной зоны полупроводника, обусловленное с изменением температуры, связано с изменением энергии электрон – фононной системы [2]. Эта энергия состоит из чисто электронного слагаемого, колебательного слагаемого и слагаемого, отвечающего электрон – фононному взаимодействию.

С другой стороны в работах [3, 4] были исследованы зависимости плотности поверхностных состояний и энергетического спектра от температуры, т.е. изменение за счет термического уширения энергетических уровней. Установлено влияние термического уширения энергетических состояний на ширину энергетической щели полупроводника [4].

Целью работы является исследование температурной зависимости ширины запрещенной зоны Ge, обусловленной температурной зависимости плотности энергетических состояний полупроводника.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Плотность состояний в общем случае, определяется энергетическим спектром образца и зависит от температуры и химического потенциала системы [5]. Температурная зависимость плотности поверхностных состояний на границе раздела полупроводник – диэлект-

рик может быть исследована с помощью разложения плотности поверхностных состояний в ряд по $GN(E_p, E, T)$ – производной вероятности ионизации поверхностных состояний по энергии [3]. Разложение имеет следующий вид:

$$N_{ss}(E, T) = \sum_{i=1}^n N_{ssi}(E_i) GN(E_i, E, T). \quad (1)$$

Которое получено в свою очередь из интегрального выражения [3]:

$$N(E_0) = \int_{E_v}^{E_c} N_{ss}(E) \rho(E_0, E, T) dE, \quad (2)$$

где $N(E_0)$ – число электронов, генерированных с поверхностных состояний энергией меньше E_0 , при непрерывном распределении уровней по энергиям [3]. Применим этот метод разложения для исследования плотности состояний

$$N(E) = N_{n0} \sqrt{E - E_c}, \quad N_{n0} = 4\pi (2m_n^* / h^2)^{3/2}. \quad (3)$$

Аналогично для валентной зоны [6]:

$$N(E) = N_{p0} \sqrt{E_p - E}, \quad N_{p0} = 4\pi (2m_p^* / h^2)^{3/2}. \quad (4)$$

Как и в теории некристаллических полупроводников [5] для определения разрешенных и запрещенных энергетических зон, будем пользоваться понятием плотности состояний. В (2) $\rho(E_0, E, T)$ является ступенчатой функцией [3]. Подстановкой в (2) вместо $N_{ss}(E)$ полученные (3) и (4), получим модель которая описывает плотность энергетических состояний.

Плотность состояний при конечной температуре $N_s(E, T)$ согласно [3] и учитывая вышесказанное, разложим в ряд по $GN(E_p, E, T)$ – функциям, в следующем виде: для зоны проводимости:

$$N_{sn}(E, T) = \sum_{i=1}^n N_{n0} \sqrt{E_i - E_c} GN(E_i, E, T) \Delta E$$

при $E > E_c$ (5)
для валентной зоны:

$$N_{sp}(E, T) = \sum_{i=1}^n N_{p0} \sqrt{E_p - E_i} GN(E_i, E, T) \Delta E$$

при $E < E_v$ (6)

для запрещенной зоны: $N_{sn}(E) = 0$ при

$$E_c > E > E_v, \quad (7)$$

где $\Delta E = 1/n$.

Посмотрим плотность состояний в виде функции:

$$N_s(E) = N_{sn}(E) + N_{sv}(E) + N_{sp}(E). \quad (8)$$

Подставляя (7) и (8) в (10) учитывая (9) и,

что в Ge $m_p^* = 0.35m_0$, $m_n^* = 0.56m_0$, где m_0 – масса электрона, $Eg(0) = 0.74$ эВ при $T = 0$ построим график плотности состояний при различных температурах для Ge. На рис. 1 приведена зависимость плотности состояний от энергии при температурах $T = 10$ К, 300 К и 500 К, как видно, что с ростом температуры уменьшается ширина запрещенной зоны Ge. Такое уменьшение ширины запрещенной зоны появляется с температурным уширением энергетических уровней зоны проводимости и валентной зоны [4].

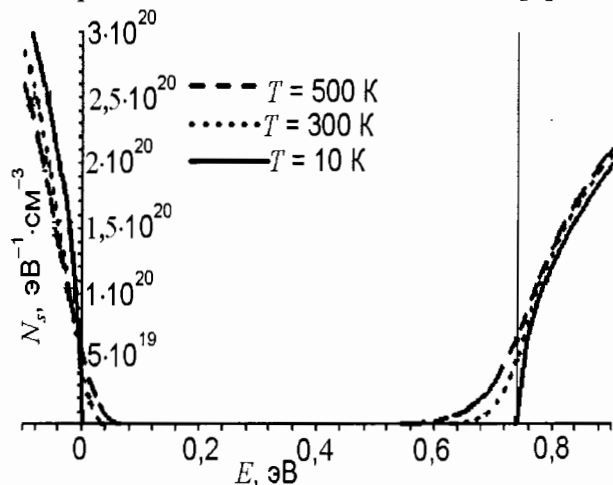


Рис. 1. Графики плотности состояний при температурах $T = 10$ К, 300 К, 500 К.

Графики плотности состояний при температурах $T = 500$ К и 300 К по своей форме напоминает плотность состояний неупорядоченных полупроводников [5, 7]. Концепция плотности электронных состояний для некристаллических материалов остается справедливой в той же мере, что и для кристаллических. Особенно важным является вопрос о состояниях в запрещенной зоне. В этой модели было введено понятие “краев подвиж-

ности” при энергиях в хвостах зон. Эти края подвижности совпадают с введенными ранее Моттом критическими энергиями, отделяющими локализованные состояния от нелокализованных состояний. Разность между энергиями краев подвижности в зоне проводимости и валентной зоне называют “запрещенной зоной по подвижности” [7].

Здесь, при математическом моделировании процесса изменения ширины запрещенной зоны с температурой, мы воспользуемся понятием ширины запрещенной зоны [7]. Значения плотности состояний, соответствующие энергии краев запрещенной зоны E_c и E_v , обозначим через N_k . Тогда энергетическое положение краев запрещенной зоны определяются решением следующих трансцендентных уравнений:

$$\sum_{i=1}^n N_{sn}(E_i)GN(E_i, E, T)\Delta E = N_k,$$

$$\sum_{i=1}^n N_{sp}(E_i)GN(E_i, E, T)\Delta E = N_k, \quad (9)$$

где $\Delta E = 1/n$.

Решение уравнения (9) при заданной N_k определяет значение границы запрещенной зоны $E_c(T)$ и $E_v(T)$, как функции температуры T . Тогда ширина запрещенной зоны $Eg(T)$ при заданной температуре определяется как разность значений $E_c(T)$ и $E_v(T)$

$$Eg(T) = E_c(T) - E_v(T). \quad (10)$$

Значение N_k определяется используя экспериментальные данные. Значения $Eg(T)$ для двух температур $T = 0$ К и $T = 300$ К равны $Eg(0) = 0.74$ эВ и $Eg(300) = 0.66$ эВ, соответственно [8]. Представим положения энергетических состояний так, что при $E < 0$ валентная зона, при $E > Eg(0)$ зона проводимости, где наблюдаются плотное распределение энергетических состояний и при $0 < E < Eg(0)$ запрещенная зона, в котором отсутствуют энергетические уровни. Далее определяется значение N_k , удовлетворяющее соотношению (10) при $Eg(300) = 0.66$ эВ.

Проведем численный анализ моделью процесса изменения ширины запрещенной зоны. На рис. 2 показана зависимость изменения ширины запрещенной зоны от температуры

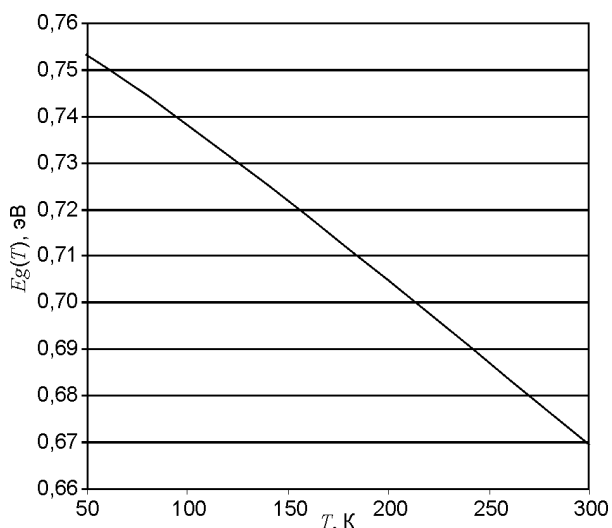


Рис. 2. График $Eg(T)$ – температурной зависимости ширины запрещенной зоны.

в интервале температур 10 К – 300 К. Из этого рисунка следует, что теоретические расчеты температурного изменения ширины запрещенной зоны при высоких температурах удовлетворительно описывают экспериментальные результаты изменения ширины запрещенной зоны, полученные оптическими измерениями [8]. Отклонение результатов эксперимента от теории может быть обусловлено разными причинами. Также существует возможность одновременного действия еще других нескольких механизмов температурного изменения ширины запрещенной зоны [2]. Мы для упрощения задачи, другие механизмы будем пренебрегать и рассмотрим только температурное уширение энергетических уровней.

ВЛИЯНИЕ ДИСКРЕТНЫХ УРОВНЕЙ НА ТЕМПЕРАТУРНУЮ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ, СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Рассмотрим вопрос о том, как будет влиять присутствие дискретных уровней в запрещенной зоне на температурную зависимость ширины запрещенной зоны. Будем исследовать простой случай, когда в запрещенной зоне три дискретных энергетических уровня с энергиями E_1, E_2, E_3 , расположенные вблизи дна зоны проводимости и три дискретных энергетических уровня с энергиями E_4, E_5, E_6 вблизи потолка валентной зоны (рис. 3). Распределение состояний в разрешенных зонах, как в первом случае, будем определять выра-

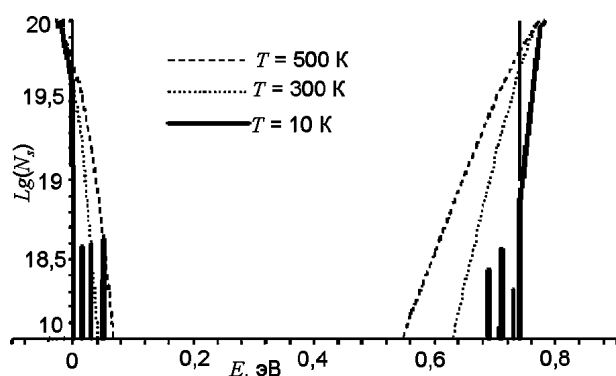


Рис. 3. Графики плотности состояний при температурах $T = 10$ К, 300 К, 500 К. в логарифмическом масштабе. При низкой температуре видно по 3 дискретных уровней по краям запрещенной зоны.

жением (9). Зависимость изменения ширины запрещенной зоны от температуры в этом случае определяется так же, как в предыдущем случае. Также, ширина запрещенной зоны при заданной температуре определяется выражением (10). На рис. 4 приведен график зависимости ширины запрещенной зоны от температуры $E_g(T)$ для теоретических расчетов (сплошная линия) и экспериментальных данных (пунктирная линия) [8]. При низких температурах график температурной зависимости отклоняется от линейности. В теоретических расчетах это отклонение появляется после того, как мы вводили в запрещенную зону дополнительные дискретные энергетические уровни.

Как видно из рис. 4, что теоретические результаты $E_g(T)$ дают хорошие согласия с экс-

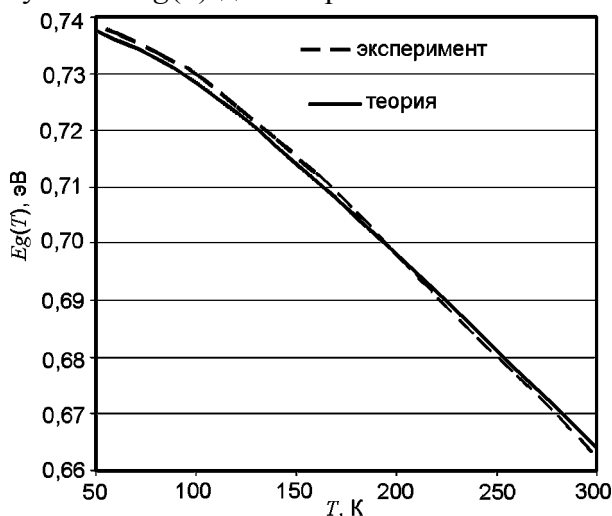


Рис. 4. График $E_g(T)$ – температурной зависимости ширины запрещенной зоны при наличии энергетических уровней в запрещенной зоне вблизи краев разрешенных зон. - - - - эксперимент из работы [8]. — теоретические расчеты.

периментом. Отсюда следует вывод, что изгиб прямой $E_g(T)$ при низких температурах в сторону малых значений, обусловлен присутствием дополнительных уровней вблизи краев запрещенной зоны полупроводника.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено влияние температурного уширения энергетических уровней полупроводника на распределение энергетической плотности состояний. Разложения плотности состояний в ряд, по $GN(E_i, E, T)$ - производной вероятности ионизации дискретных уровней по энергии, позволила исследовать влияние температуры на ширину запрещенной зоны Ge. Численное моделирование процесса уменьшения ширины запрещенной зоны с ростом температуры показало, что температурная зависимость ширины запрещенной зоны зависит от распределения энергетических уровней в зонах образца. Присутствие дополнительных дискретных уровней в запрещенной зоне вблизи краев разрешенных зон приводит к отклонению температурной зависимости ширины запрещенной зоны от линейности. При низких температурах происходит изгиб линии изменения ширины запрещенной зоны Ge в сторону малых отклонений. Результаты расчетов изменения ширины запрещенной зоны полупроводника, по порядку величины совпадают с экспериментальными данными. Следовательно, можно сделать вывод о том, что температурное уширение энергетических состояний запрещенной зоны и валентной зоны может существенно изменить ширину запрещенной зоны, и вместе с другими известными механизмами объяснить температурную зависимость ширины запрещенной зоны полупроводника.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вавилов В.С. Действие излучений на полупроводники. – М.: Физматиз, 1963. – 25 с.
2. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. – М.: Мир, 1986. – 45 с.
3. Гулямов Г., Шарибаев Н.Ю.//ФТП. – 2011. – № 2. – С. 53-58.
4. Гулямов Г., Шарибаев Н.Ю.//Физическая Инженерия Поверхности. – 2011. – Т. 9, № 1. – С. 40-43.

5. Бонч-Бруевич В.Б., и др. Электронная теория некристаллических полупроводников. – М.: Наука, 1981. – 384 с.
6. Шалимова К.В. Физика полупроводников. - М.: Энергоатомиздат, 1985. – 392 с.
7. Мотт Н., Девис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. Т. 1. – М.: Мир, 1982. – 664 с.
8. Mac Farlane G., Mac Lean T., Quarrington J. and Poberts V.//J. Phys. Chem. Solids. – 1959. – Vol. 8. - P. 388.
3. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu.//FTP. – 2011. – № 2. – S. 53-58.
4. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu.//Fizicheskaya Inzheneriya Poverhnosti. – 2011. – Т. 9, № 1. – S. 40-43.
5. Bonch-Bruevich V.B., i dr. Elektronnaya teoriya nekrystallicheskih poluprovodnikov. – М.: Nauka, 1981. – 384 s.
6. Shalimova K.V. Fizika poluprovodnikov. - М.: Energoatomizdat, 1985. – 392 s.
7. Mott N., Devis E. Elektronnye processy v nekrystallicheskih veschestvah. Т. 1. – М.: Mir, 1982. – 664 s.
8. Mac Farlane G., Mac Lean T., Quarrington J. and Poberts V.//J. Phys. Chem. Solids. – 1959. – Vol. 8. – P. 388.

LITERATURA

1. Vavilov V.S. Dejstvie izluchenij na poluprovodniki. – М.: Fizmatiz, 1963. – 25 s.
2. Ridli B. Kvantovye processy v poluprovodnikah. – М.: Mir, 1986. – 45 s.