

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА ШИРИНУ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ ПОЛУПРОВОДНИКА

Г. Гулямов<sup>1</sup>, Н.Ю. Шарибаев<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Наманганский инженерно-педагогический институт

<sup>2</sup>Наманганский инженерно-экономический институт  
Узбекистан

Поступила в редакцию 07.02.2011

Рассмотрена температурная зависимость ширины запрещенной зоны полупроводника. Численным моделированием процессов тепловой генерации с дискретных уровней установлено, что ширина запрещенной зоны уменьшается с ростом температуры. Полученные результаты совпадают с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** ширина запрещенной зоны, плотность поверхностных состояний, тепловая генерация, запрещенной зоны, температурная зависимость, спектроскопия поверхностных уровней, дискретные состояния, численное моделирование.

Розглянуто температурну залежність ширини забороненої зони напівпровідника. Чисельним моделюванням процесів теплової генерації з дискретних рівнів установлено, що ширина забороненої зони зменшується з ростом температури. Отримані результати збігаються з експериментальними даними.

**Ключові слова:** ширина забороненої зони, щільність поверхневих станів, теплова генерація, забороненої зони, температурна залежність, спектроскопія поверхневих рівнів, дискретні стани, чисельне моделювання.

Temperature dependence of width of the forbidden zone of the semiconductor is considered. By numerical modeling of processes of thermal generation from discrete levels it is established, that the width of the forbidden zone decreases with temperature growth. The received results coincide with experimental data.

**Keywords:** width of the forbidden zone, density of superficial conditions, the thermal generation, the forbidden zone, temperature dependence, spectroscopy of superficial levels, discrete conditions, numerical modeling.

### ВВЕДЕНИЕ

Температурная зависимость ширины запрещенной зоны полупроводника является важной характеристикой материала. Повышение температуры решетки деформирует энергетический спектр, как фононов, так и электронов. В работах [1, 2] температурное изменение энергетической щели в полупроводнике связывают с влиянием колебаний решетки, стимулирующим различные эффекты, в частности, тепловое расширение, сглаживание периодического потенциала, характеризующее фактором Дебая-Уоллера, взаимным отталкиванием внутрizonных электронных состояний из-за увеличения электрон-фононной связи, появлением слагаемых Фена для междоузельной связи. В этих работах эффект объясняется изменением частоты фононов. При этом считается, что генерация электрон-

но-дырочных пар сдвигает частоты колебаний решетки. В работах [3, 4] предлагаются конкретные механизмы изменения ширины запрещенной зоны. Однако в этих работах не обсуждалось влияние теплового уширения энергетических уровней на изменение ширины энергетической щели.

В работах [5 – 7] с помощью численных экспериментов исследовано влияние температуры на форму плотности поверхностных состояний (ППС). Установлено, что энергетический спектр ППС сильно зависит от температуры. Показано, что разложение ППС в ряд по  $GN$ -функциям, где  $GN$ -функция – это производная по энергии от вероятности опустошения дискретного уровня с энергией  $E$ , позволяет исследовать температурную зависимость плотности поверхностных состояний. Было показано, что увеличение температуры

приведет переход дискретного энергетического спектра в непрерывный спектр и, наоборот, с понижением температуры непрерывный спектр переходит в дискретный. В этих работах, однако, влияние энергетических состояний зоны проводимости и валентной зоны на весь энергетический спектр поверхности полупроводника и, в частности, для исследования температурной зависимости ширины запрещенной зоны (ШЗЗ) на границе раздела SiO<sub>2</sub>-Si не исследовался. Целью работы является исследование влияния температуры на ШЗЗ в полупроводниках с помощью разложения ППС в ряд по GN-функциям зоны проводимости и валентной зоны.

### ТЕРМИЧЕСКАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ПОЛУПРОВОДНИКА

Плотность состояний (ПС) в разрешенных зонах  $N_{ss}$ , как и в [5 – 7], разложим в ряд по GN( $E_p, E, T$ )-функциям

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

$$N_{ss}(E) = \begin{cases} N_c & \text{при } E > E_c \\ 0 & \text{при } E_c > E > E_v \\ N_v & \text{при } E < E_v \end{cases} \quad \text{где } GN(E_i, E, T) = \frac{1}{kT} \exp\left(\frac{1}{kT}(E - E_i) - \exp\left(\frac{1}{kT}(E - E_i)\right)\right). \quad (2)$$

Здесь  $N_{ss}(E_i)$  является плотностью состояний при  $T \rightarrow 0$ . Показано, что GN( $E_p, E, T$ )-функция при  $T \rightarrow 0$  стремится к дельта функции Дирака [7].

Пусть плотность состояний в зоне проводимости (ЗП) и в валентной зоне (ВЗ) является постоянной величиной. Между зоной проводимости и валентной зоной плотность состояний равна нулю.

$$, \quad (3)$$

здесь  $E_c$  – энергия дна ЗП и  $E_v$  – энергия потолка ВЗ.

В этом случае, для различных значений температур можно получить графики плотности состояний  $N_{ss}(E, T)$  по всему рассма-

триваемому интервалу энергий. На рис. 1 показаны графики  $N_{ss}(E, T)$  для трех различных температур.

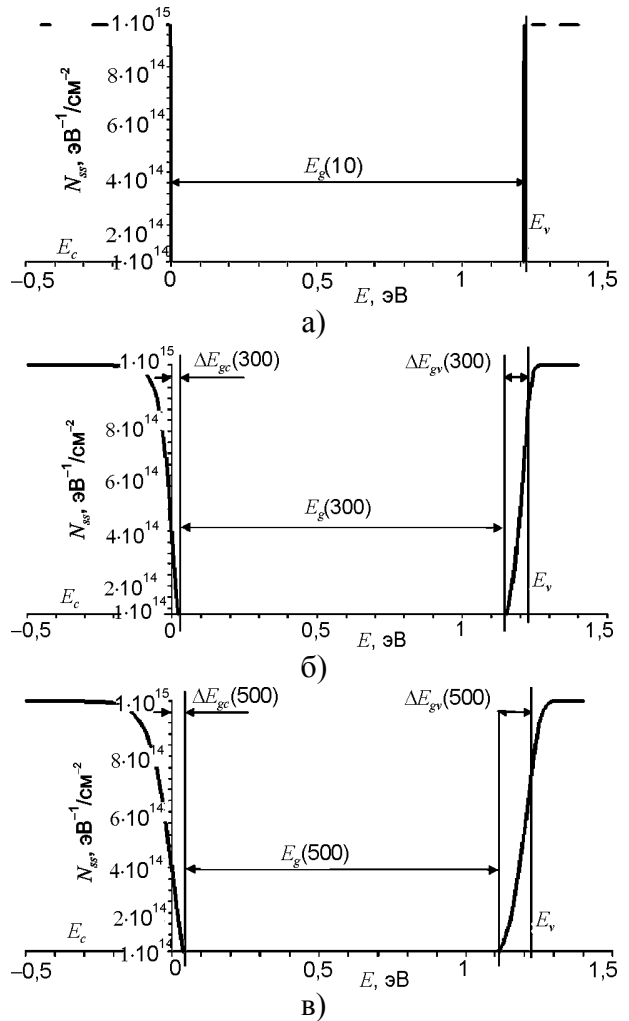


Рис. 1. Спектр плотности поверхностных состояний при различных температурах: а) –  $T = 10$  К; б) –  $T = 300$  К; в) –  $T = 500$  К.

Из рис. 1а видно, что при низкой температуре  $T = 10$  К график  $N_{ss}(E, T)$  имеет четкую прямоугольную форму. Граница между разрешенной и запрещенной зоной строго определена. На краю зоны проводимости значение  $N_{ss}(E, T)$  резко падает от  $N_c$  до нуля. У потолка валентной зоны величина  $N_{ss}(E, T)$  резко поднимается от нуля до  $N_v$ . В этом случае края запрещенной зоной резкие и значение ширины запрещенной зоны равняется  $E_g(T) = E_c(T) - E_v(T)$ . С ростом температуры границы между запрещенной зоной и разрешенными зонами начинают размываться. На рис.1б показан график плотности состояний при температуре  $T = 300$  К. Из этого рисунка видно, что границы зон проводимости и валентной зоны начинают заметно

проникать в глубь запрещенной зоны полупроводника. Это приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны образца. Дальнейшее повышение температуры еще сильнее размазывает прямоугольную форму плотности состояний. На рис. 1в показана энергетическая зона при  $T = 500$  К. В этом случае проникновение электронных состояний из зоны проводимости и из валентной зоны в запрещенную зону сильно возрастает. Вследствие этого ширина энергетической щели значительно сузилась. Построение графиков ПС для различных значений температур позволяет исследовать влияние температуры на значения ширины ЗЗ полупроводника. В частности, используя графики рис. 1а, б, в можно оценить порядок значений  $\beta$  температурного коэффициента изменения ширины запрещенной зоны. Оценку  $\beta$  проведем по формуле:

$$\beta = \frac{E_g(T_1) - E_g(T_2)}{T_2 - T_1} \quad (4)$$

Подставим значения  $E_g$  для соответствующих температур и получим численные значения  $\beta$  порядка  $10^{-4}$  эВ/К.

### СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ОЦЕНОК С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Значения  $\beta$  для различных материалов, полученных различными методами, приведены в табл. 1 [8 – 17]. Как видно из табл. 1, численные значения  $\beta$ , по порядку величины, близки между собой. Это свидетельствует, о том что механизм теплового изменения ширины запрещенной зоны у приведенных полупроводников одинаков. Он основан на том, что тепловое уширение энергетических уровней является статистическим эффектом, который проявляется независимо от материала и энергетического спектра электронной и фононной системы. Сравнение теоретических значений  $\beta$ , оцененных из графиков рис. 1а, б, в, и  $\beta$  из табл. 1 показывает, что для большинства материалов эти величины близки к экспериментальным. Однако при сравнении  $\beta$  для некоторых материалов из табл. 1 согласие оказывается не таким хорошим. Это может быть объяснено существованием возможности одновременных воздействий нескольких дру-

гих механизмов изменения ШЗЗ [18]. Таким образом, результирующее изменение ширины запрещенной зоны должно учитывать, помимо известных механизмов изменения ширины энергетической щели [1 – 4], также тепловое уширение энергетических уровней [5 – 7] разрешенных зон.

Таблица 1

Коэффициент термической зависимости ширины энергетической щели для различных полупроводников [8 – 18]

Материал	$\beta$ , $10^{-4}$ эВ/К	Материал	$\beta$ , $10^{-4}$ эВ/К
Si	-4,00	As <sub>2</sub> Se <sub>3</sub>	-10,00
Ge	-4,00	AsSe <sub>2</sub> Te	-9,80
B	-3,50	As <sub>2</sub> SeTe <sub>2</sub>	-10,06
C (алмаз)	-1,20	InSb	-2,8
P (черный)	-2,30	InAs	-2,8
As (серый)	-5,00	InP	-4,80
Se	-9,0	GaSb	-3,5
Te	-1,90	GaAs	-5,00
Cd <sub>3</sub> As <sub>2</sub>	-5,80	GaP	-5,5
CdSb	-5,60	AlSb	-3,5

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Температурная зависимость плотности поверхностных энергетических состояний может быть исследована с помощью метода разложения энергетического спектра в ряд по  $GN(E_p, E, T)$ -функциям. Применение этого метода разложения для исследования температурной зависимости ширины запрещенной зоны показало, что за счет термического уширения энергетических состояний энергетическая щель между разрешенными состояниями уменьшается. Численное моделирование температурной зависимости ширины запрещенной зоны с помощью этого метода показывает, что значение коэффициента термического уширения ширины энергетической щели по порядку величин совпадает с экспериментальными данными большинства полупроводниковых материалов. На основе проведенного анализа можно сделать вывод о том, что при исследовании влияния температуры на ширину запрещенной зоны необходимо учитывать тепловое уширение энергетических состояний разрешенных зон образца.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. – М.: Мир, 1986. – 304 с.
2. Heine V., Van Vechten//J. Phys. Rev. B. – 1976. – Vol. 13. – P. 1622.
3. Емельянов А.М.//Письма в ЖТФ. – 2009. – Т. 35, Вып. 6. – С. 9-16.
4. Фридкин В.М. Сегнетоэлектрики-полупроводники. – М.: Наука, 1976. – 408 с.
5. Гулямов Г., Шарибаев Н.//Физическая Инженерия Поверхности. – 2010. – Т.8, № 1. – С. 53-68.
6. Гулямов Г., Каримов И.Н., Шарибаев Н.Ю., Эркабоев У.//Узбекский физиический журнал. – 2010. – Т. 12, № 3. – С. 143-146.
7. Гулямов Г., Шарибаев Н.Ю.//ФТП. – 2011. – Т. 45, № 2. – С. 178-182.
8. Рода М. Полупроводниковые материалы/Пер. с фр. – М.: Металлургия, 1971.
9. Drabble G.//Proc. Phys. Soc. – 1956. – Vol. B69. – P. 1101, 1958, Vol. B72. – P. 380.
10. Мосс Т.С. Оптические свойства полупроводников/Пер. с англ. – М.: Изд-во иностр. лит., 1961.
11. Жузе В.П. Полупроводниковые материалы. Вып. 17. Ленинград: Изд-во Ленингр. дома науч.-тех. пропаганды. Л., 1957.
12. Коломиец Б.Т. и др.//ФТТ. – 1965. – Т. 7. – С. 25-34.
13. Смит Р. Полупроводники/Пер. с англ. – М.: Изд-во иностр. лит., 1962.
14. Угай Я.А., Зюбина Т.А.//Неоорганические материалы. – 1965. – Т. 1. – С. 790.
15. Материалы, используемые в полупроводниковых приборах/Под ред. К Хогарта. Пер. с англ. – М.: Мир. 1968.
16. Edmond J.T., Br.J.//Appl. Phys.– 1966.– Vol. 17. – С. 979.
17. Баранский П., Клочков В., Потыкевич И., Полупроводниковая электроника справочник. – К.: Наукова думка, 1975. –704 с.
18. Мотт Н., Девис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. Т 1. – М.: Мир, 1982. – 272 с.

## LITERATURA

1. Ridli B. Kvantovyye protsessy v poluprovodnikakh. – М.: Mir, 1986. – 304 с.
2. Heine V., Van Vechten//J. Phys. Rev. B. – 1976. – Vol. 13. – P. 1622.
3. Emelyanov A.M.//Pisma v ZhTF.– 2009. – Т. 35, Вып. 6. – С. 9-16.
4. Fridkin V.M. Segnetoelektriki-poluprovodniki. – М.: Nauka, 1976. – 408 s.
5. Gulyamov G., Sharibayev N.//Fizicheskaya Inzheneriya Poverkhnosti. – 2010. – Т.8, № 1. – С. 53-68.
6. Gulyamov G., Karimov I.N., Sharibayev N.Yu., Erkaboyev U.//Uzbekskiy fiziicheskiy zhurnal. – 2010. – Т. 12, № 3. – С. 143-146.
7. Gulyamov G., Sharibayev N.Yu.//FTP. – 2011. – Т. 45, № 2. – С. 178-182.
8. Roda M. Poluprovodnikovyye materialy/Per. s frants. – М.: Metallurgiya, 1971.
9. Drabble G.//Proc. Phys. Soc. – 1956. – Vol. B69. – P. 1101, 1958, Vol. B72. – P. 380.
10. Moss T.S. Opticheskiye svoystva poluprovodnikov/Per. s angl. – М.: Izd-vo inostr. lit., 1961.
11. Zhuze V.P. Poluprovodnikovyye materialy. Vyp. 17. – Leningrad: Izd-vo Leningr. doma nauch.-tekh. propagandy. L., 1957.
12. Kolomiyets B.T. i dr.//FTT. – 1965. – Т. 7. – С. 25-34.
13. Smit R. Poluprovodniki/Per. s angl.– М.: Izd-vo inostr. lit., 1962.
14. Ugay Ya.A., Zyubina T.A.//Neorgan. materialy. – 1965. – Т. 1. – С. 790.
15. Materialy, ispolzuyemyye v poluprovodnikovykh priborakh/Pod red. K Khogarta. Per. s angl. – М.: Mir. 1968.
16. Edmond J.T., Br.J.//Appl. Phys.– 1966.– Vol. 17. – С. 979.
17. Baranskiy P., Klochkov V., Potykevich I., Poluprovodnikovaya elektronika spravochnik. – К.: Naukova dumka, 1975. –704 s.
18. Mott N., Devis E. Elektronnyye protsessy v nekrystallicheskih veshchestvakh. Т 1. – М.: Mir, 1982. – 272 s.