

## ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ Si И СВЯЗЬ С ТЕПЛОВЫМ УШИРЕНИЕМ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

Г. Гулямов, Н.Ю. Шарипбаев

*Наманганский инженерно-педагогический институт  
Узбекистан*

Поступила в редакцию 17.04.2012

Исследовано влияние температурного уширения энергетических состояний на температурную зависимость ширины запрещенной зоны полупроводника. Моделированием процесса теплового уширения, численным анализом установлено, что коэффициент температурного изменения ширины запрещенной зоны зависит от энергетической плотности состояний и присутствия дискретных уровней в запрещенной зоне. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

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

Досліджено вплив температурного розширення енергетичних станів на температурну залежність ширини забороненої зони напівпровідника. Моделюванням процесу теплового розширення, числовим аналізом установлено, що коефіцієнт температурного змінювання ширини забороненої зони залежить від енергетичної щільності станів і присутності дискретних рівнів у забороненій зоні. Результати розрахунків добре погоджуються з експериментальними даними.

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

The effect of thermal broadening of energy states in the temperature dependence of the band gap of the semiconductor. Simulation of the thermal broadening, the numerical analysis showed that the rate of temperature change in the band gap depends on the energy density of states and the presence of discrete levels in the forbidden zone. The calculation results are in good agreement with experimental data.

**Keywords:** band gap, the density of surface states, heat generation, energy gap, temperature dependence, the spectroscopy of surface states, discrete states, the numerical simulation.

### ВВЕДЕНИЕ

Изменение ширины запрещенной зоны полупроводника, обусловленное с изменением температуры, связано с изменением свободной энергии Гиббса, в свою очередь, зависящее от изменения энергии электрон-фононной системы [1]. Эта энергия состоит из чисто электронного слагаемого, колебательного слагаемого и слагаемого, отвечающего электрон-фононному взаимодействию. Расчет величины изменения ширины запрещенной зоны, сводится к вычислению изменения этих энергий [1 – 3].

С другой стороны в работах [4 – 6] было установлено, что плотность поверхностных состояний зависит от температуры. Было показано, что с ростом температуры, за счет термического уширения, конечное число дискретных энергетических уровней может, пре-

вращается в сплошной энергетический спектр и, наоборот, с понижением температуры из непрерывной плотности поверхностных состояний можно получить дискретный энергетический спектр. Тем самым изменение энергетического спектра с изменением температуры также должно влиять на ширину энергетической щели полупроводника. В работе [7] рассмотрена температурная зависимость ширины запрещенной зоны полупроводника. Установлено связь между температурной зависимости ширины запрещенной зоны Si и плотностью поверхностных состояний.

Целью работы является исследование температурной зависимости ширины запрещенной зоны полупроводника, обусловленным термическим уширением энергетических состояний зоны проводимости и валентной зоны полупроводника.

**ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ**

Плотность состояний в общем случае, определяется энергетическим спектром образца и зависит от температуры и химического потенциала системы [8]. Температурная зависимость плотности поверхностных состояний на границе раздела  $SiO_2-Si$  – может быть исследована с помощью разложения плотности поверхностных состояний в ряд по  $GN(E_p, E, T)$  – производной вероятности опустошения поверхностных состояний по энергии [4 - 6]. Применим этот метод разложения для исследования плотности объемных состояний. Как и в теории некристаллических полупроводников [8, 9] для определения разрешенных и запрещенных энергетических зон, будем пользоваться понятием плотности состояний.

Для исследования температурной зависимости ширины запрещенной зоны рассмотрим простую модель. Плотность состояний в зоне проводимости равно  $N_c$ , в валентной зоне  $N_v$  и в запрещенной зоне равна нулю.

Плотность состояний при конечной температуре  $N_s(E, T)$  согласно [6] разложим в ряд по  $GN(E_p, E, T)$ -функциям.

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

Здесь  $N_s(E_i)$  – плотность состояний при  $T \rightarrow 0$ ,  $GN(E_p, E, T)$  – производная по энергии от вероятности опустошения состояния с энергией  $E$ . В [6] показано, что  $GN(E_p, E, T)$  – функция при  $T \rightarrow 0$  стремится к дельта функции Дирака.

Для  $N_s(E_i)$  выберем в следующее распределение

$$\begin{aligned} N_s(E_i) &= N_c \text{ при } E > E_c \\ N_s(E_i) &= 0 \text{ при } E_c > E > E_v \\ N_s(E_i) &= N_v \text{ при } E > E_v. \end{aligned} \quad (2)$$

В выражение (1) подставляем  $GN(E_p, E, T)$  в следующем виде [5 - 7]

$$\begin{aligned} GN(E_i, E, T) &= \frac{1}{kT} \left( \exp \frac{1}{kT} (E - E_i) - \right. \\ &\left. - \exp \left( \frac{1}{kT} (E - E_i) \right) \right). \end{aligned} \quad (3)$$

Подставляя (2) и (3) в (1) получим график плотности состояний при различных темпе-

ратурах. На рис. 1 показан графики плотности состояний при температурах  $T = 10$  К, 300 К, 500 К.

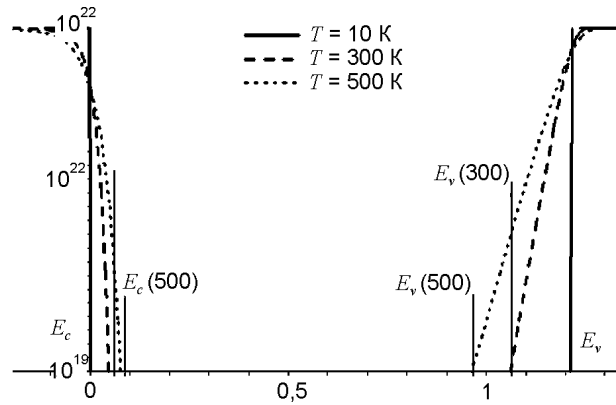


Рис. 1.

Из этих графиков хорошо видно, как с ростом температур уменьшается ширина запрещенной зоны. Такое уменьшение ширины запрещенной зоны появляется с температурным уширением энергетических уровней запрещенной зоны и валентной зоны [4 - 6].

Графики ПС при температурах  $T = 300$  К, 500 К по своей форме напоминает ПС неупорядоченных полупроводников [8, 9]. 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 подвижности” при энергиях в хвостах зон. Эти края подвижности совпадают с введенными ранее Моттом критическими энергиями, отделяющими локализованные состояния от нелокализованных. Разность между энергиями краев подвижности в зоне проводимости и валентной зоне называют “запрещенной зоной по подвижности” [9].

Здесь, при математическом моделировании процесса температурной изменения ширины запрещенной зоны, мы воспользуемся понятием ширины запрещенная зона. Значение плотности состояний, соответствующей энергии краев запрещенной зоны  $E_c$  и  $E_v$ , обозначим через  $N_k$ . Тогда энергетическое положение краев запрещенной зоны определяется решением следующего трансцендентного уравнения

$$N_s(E_i) = N_k \quad (4)$$

или

$$\sum_{i=1}^n N_{si}(E_i)GN(E_i, E, T) = N_k. \quad (5)$$

Решение уравнения (5) при заданной  $N_{ss}(E_i)$  определяет значения границы запрещенной зоны  $E_i(T)$  и  $E_v(T)$ , как функции температуры  $T$  при заданной  $N_k$ . Тогда ширины запрещенной зоны при заданной температуре  $E_g(T)$  определяется как разница значений  $E_c(T)$  и  $E_v(T)$

$$E_g(T) = E_c(T) - E_v(T). \quad (6)$$

Изменение ширины запрещенной зоны возникает за счет изменений краев запрещенной зоны и определяется следующим выражением

$$\delta E_g(T) = \delta E_c(T) - \delta E_v(T). \quad (7)$$

Проведем численный анализ модели процесса изменения ширины запрещенной зоны. На рис. 2 (пунктирная линия) показана температурная зависимость изменения ширины запрещенной зоны от температуры в интервале температур 10 К – 500 К.

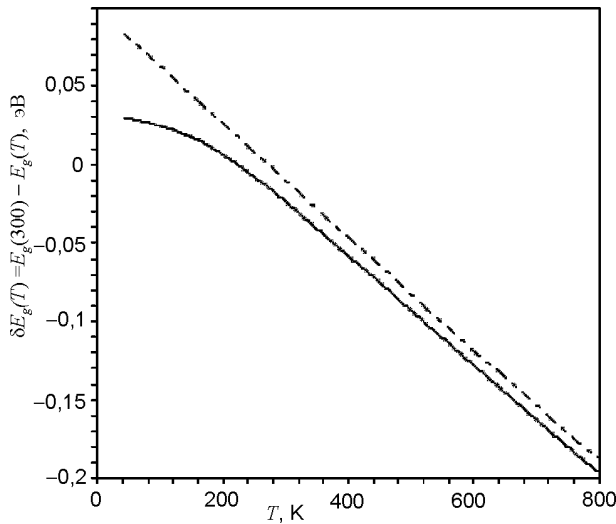


Рис. 2.

Из рис. 2 хорошо видно, что ширина запрещенной зоны линейно уменьшается с ростом температуры образца. Коэффициент температурного изменения ширины запрещенной зоны  $\beta = \delta E_g(T)/\delta T$ , определенный из этих графиков, как функция температуры приведен на рис. 3 (пунктирная линия).

Из рис. 3 видно, что когда  $N_{ss}(E_i)$  имеет прямоугольную форму (2) и в запрещенной зоне нет дискретных уровней,  $\beta$  почти не зависит от температуры.

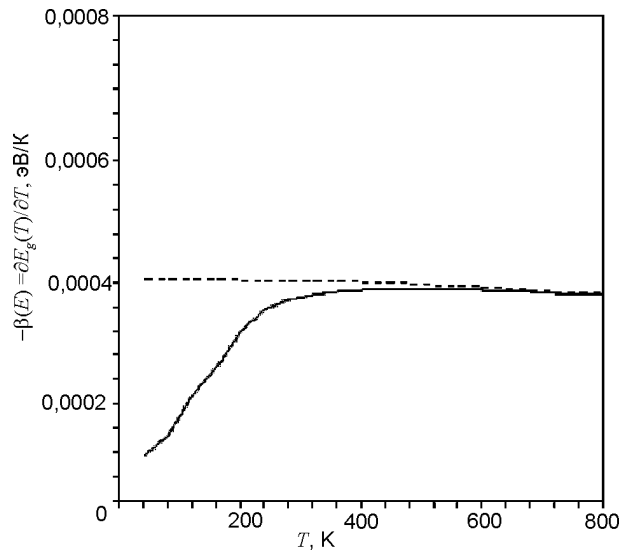


Рис. 3.

На рис. 4 приведена экспериментальная температурная зависимость изменения ширины запрещенной зоны, взятая из работы [3]. Как видно из этого рисунка, теоретические расчеты температурного изменения ширины запрещенной зоны удовлетворительно описывают экспериментальные результаты изменения ширины запрещенной зоны, определенные оптическими измерениями. Отклонение результатов эксперимента и численного моделирования процесса термического изменения ширина запрещенной зоны может быть обусловлено многими причинами. Ясно, что существует возможность одновременного действия еще других нескольких механизмов температурного изменения ширины запрещенной зоны [1, 2]. Однако, для упрощения задачи, другими механизмами будем

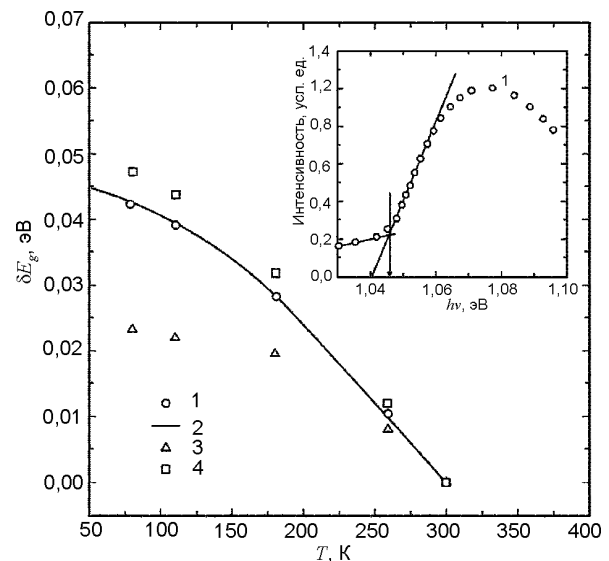


Рис. 4.

пренебрегать и рассмотрим только температурное уширение энергетических уровней.

### ВЛИЯНИЕ ДИСКРЕТНЫХ УРОВНЕЙ НА ТЕМПЕРАТУРНУЮ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ

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  $E_1, E_2, E_3$  расположены вблизи дна зоны проводимости и три дискретных энергетических уровня с энергиями  $E_4, E_5, E_6$  вблизи потолка валентной зоны. Распределение состояний в разрешенных зонах, как в первом случае, будем определять выражением (2). Зависимость изменения ширины запрещенной зоны от температуры в этом случае определяется так же, как в предыдущем случае, решением системы уравнений (1) – (5). Точно таким же образом, ширина запрещенной зоны при заданной температуре  $E_g(T)$  определяется выражением (6), а ее изменение  $\delta E_g(T)$  выражением (7).

На рис. 3 (непрерывная линия) приведен график зависимости  $\delta E_g(T)$  от температуры. Как видно из рис. 3, при низких температурах график температурной зависимости  $\delta E_g(T)$  отклоняется от линейности. Это отклонение появляется после того, как мы введем в запрещенную зону дополнительные дискретные энергетические уровни. Отсюда следует вывод, что изгиб прямой  $\delta E_g(T)$  при низких температурах в сторону малых значений, обусловлен присутствием дополнительных уровней вблизи краев запрещенной зоны полупроводника. На рис. 2 (не прерывная линия) приведен график зависимости  $\beta = \partial E_g(T)/\partial T$  от температуры  $T$ . Как видно из рис. 2, при низких температурах  $\beta$  начинает постепенно уменьшаться. Это уменьшение также обусловлено дискретными энергетическими уровнями у краев запрещенной зоны полупроводника.

### СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

На рис. 4 и рис. 5 приведены графики температурной зависимости ширины запрещенной зоны для полупроводника, полученные

при оптических измерениях [3]. Как отмечено в этой работе, полученные экспериментальные значения  $E_g(T)$  зависят от методики ее определения. Если учесть, что ширина запрещенной зоны, определенная по температурной зависимости электропроводности и по измерениям спектральных зависимостей поглощения света может различаться, то при сравнении теории и эксперимента необходимо учитывать это обстоятельство.

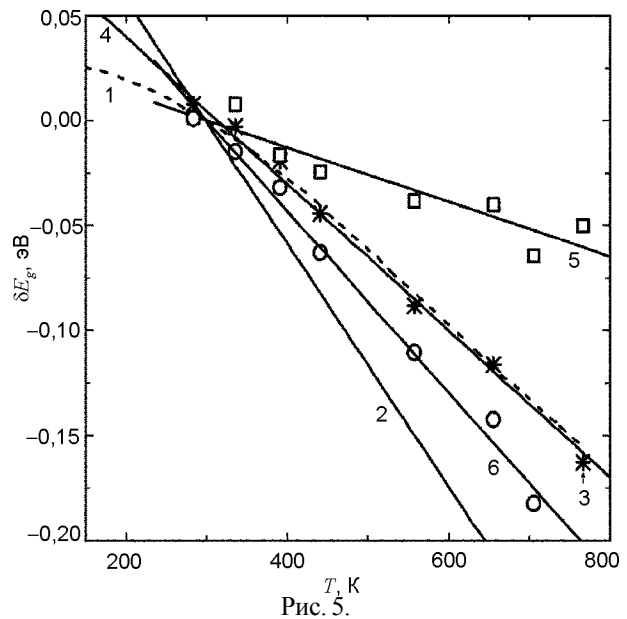


Рис. 5.

Как видно из рис. 5 между экспериментальными и теоретическими результатами имеется хорошее согласие. Сравнение теории с экспериментами других работ [3] также дают положительные результаты. При сравнении теории и эксперимента следует обратить особое внимание на низкотемпературный участок зависимости ширины запрещенной зоны от температуры. В нашем случае низкотемпературный изгиб  $E_g(T)$  обусловлен присутствием дополнительных уровней в запрещенной зоне. В общем случае величина и форма изгиба  $E_g(T)$  зависит от формы вида плотности состояний,  $N_s(E_i)$  как в разрешенных зонах, так и в запрещенной зоне. Ясно, что причиной отступления, экспериментальной зависимости изменения ширины запрещенной зоны от теоретической является то, что истинная плотность состояний отличается от плотности состояний модели.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрено влияние температурного уширения энергетических уровней полупровод-

ника на распределение энергетической плотности состояний. Разложения плотности состояний в ряд, по  $GN(E_p, E, T)$ -производной вероятности опустошения дискретных уровней по энергии, позволила исследовать влияние температуры на ширину запрещенной зоны полупроводника. 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. Когда плотность состояний в зоне проводимости и валентной зоны постоянная, а в запрещенной зоне равна нулю, ширина запрещенной зоны уменьшается линейно с увеличением температуры. 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 в сторону малых отклонений. Результаты расчетов изменения ширины запрещенной зоны по порядку величины совпадают с экспериментальными данными. На основе вышеизложенного 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.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. – М.: Мир, 1986. – 408 с.
2. Heyne 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.
4. Гулямов Г., Шарибоев Н.Ю.//Физическая инженерия поверхности. – 2010. – Т. 8, № 1. – С. 53-56.
5. Гулямов Г., Шарибоев Н.Ю.//Узбек. Физ. Жур. – 2010. – Вып. 12. – С. 143-146.
6. Гулямов Г., Шарибоев Н.Ю.//ФТП. – 2011. – № 2. – С. 53-58.
7. Гулямов Г., Шарибоев Н.Ю.//Физическая Инженерия Поверхности. – 2011. – Т. 9, № 1. – С. 4-7.
8. Бонч-Бруевич В.Б. и др. Электронная теория некристаллических полупроводников. – М.: Наука, 1981. – 384 с.
9. Мотт Н., Девис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах. Т. 1. – М.: Мир, 1982. – 664 с.

#### LITERATURA

1. Ridli B. Kvantovye processy v poluprovodnikah. – М.: Mir, 1986. – 408 s.
2. Heyne 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.
4. Gulyamov G., Shariboev N.Yu.//Fizicheskaya inzheneriya poverhnosti. – 2010. – Т. 8, № 1. – С. 53-56.
5. Gulyamov G., Shariboev N.Yu.//Uzbek. Fiz. Zhur. – 2010. – Вып. 12. – С. 143-146.
6. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu.//FTP. – 2011. – № 2. – С. 53-58.
7. Gulyamov G., Sharibaev N.Yu.//Fizicheskaya Inzheneriya Poverhnosti. – 2011. – Т. 9, № 1. – С. 4-7.
8. Bonch-Bruevich V.B. i dr. ‘Elektronnaya teoriya nekrystallicheskih poluprovodnikov. – М.: Nauka, 1981. – 384 s.
9. Mott N., Devis E. Elektronnyye processy v nekrystallicheskih veschestvah. Т. 1. – М.: Mir, 1982. – 664 s.